HAL open science

Modélisation détaillée du fonctionnement de la future filière complète de biofiltration de la station de traitement des eaux usées Seine Aval

Jialu Zhu

To cite this version:

Jialu Zhu. Modélisation détaillée du fonctionnement de la future filière complète de biofiltration de la station de traitement des eaux usées Seine Aval. Génie des procédés. Université de Technologie de Compiègne, 2020. Français. NNT : 2020COMP2574 . tel-03347031

HAL Id: tel-03347031

https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-03347031

Submitted on 16 Sep 2021

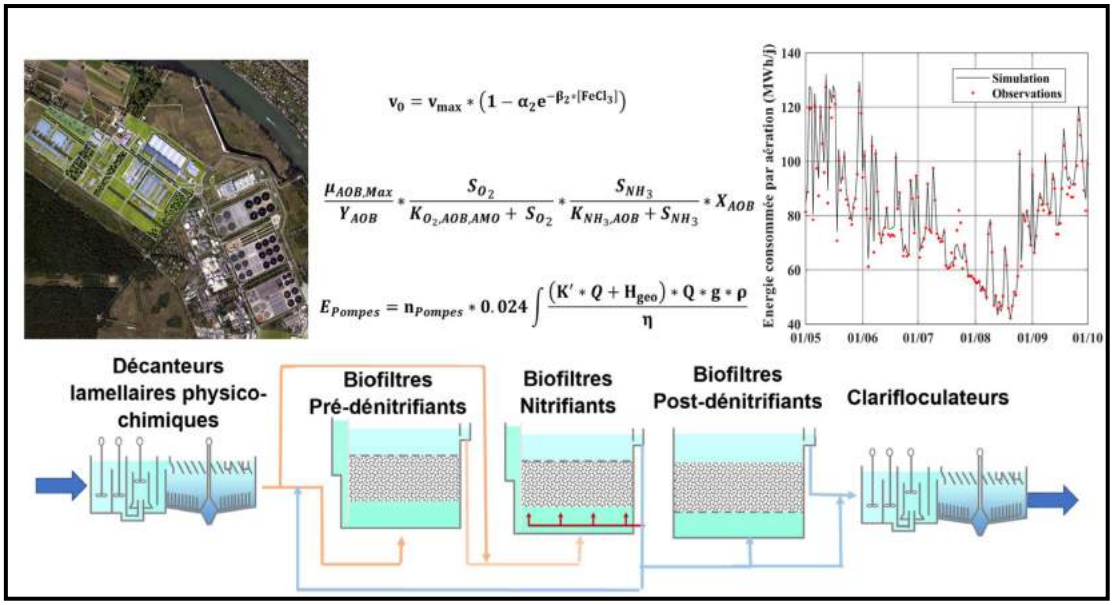
HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Par **Jialu ZHU**

Modélisation détaillée du fonctionnement de la future filière complète de biofiltration de la station de traitement des eaux usées Seine Aval

Thèse présentée pour l'obtention du grade de Docteur de l'UTC



Soutenue le 9 décembre 2020
Spécialité : Génie des Procédés : Transformations intégrées de la matière renouvelable (EA-4297)

D2574

Thèse
présentée pour l'obtention du grade de Docteur de
L'Université de Technologie de Compiègne, Sorbonne Université
Par
Jialu ZHU

Modélisation détaillée du fonctionnement de la future filière complète de biofiltration de la station de traitement des eaux usées Seine Aval

Spécialité : Génie des procédés

Thèse dirigée par : André PAUSS et Peter VANROLLEGHEM

Devant la commission d'examen formée de :

Denis DOCHAIN, Professeur, Université Catholique de Louvain (Rapporteur)

Mathieu SPERANDIO, Professeur, INSA de Toulouse (Rapporteur)

Christophe PROUST, Professeur, Université de Technologie de Compiègne (Examinateur)

Sophie LARUELLE, Maître de conférences, Université Paris-Est Créteil (Examinatrice)

André PAUSS, Professeur, Université de Technologie de Compiègne (Directeur de thèse)

Peter VANROLLEGHEM, Professeur, Université Laval (Directeur de Thèse)

Vincent ROCHER, Directeur de la Direction Innovation du SIAAP (Membre invité)

Date de soutenance : le 9 Décembre 2020

Table des matières

Table des matières *1*

致谢 *3*

Remerciement *4*

Résumé *5*

Abstract *6*

Chapitre 1 Introduction *7*

1.1. Contexte 7
1.2. Problématique 10
1.3. Objectifs 13
Références 15

Chapitre 2 Synthèse bibliographique *16*

2.1. Traitement des eaux usées urbaines 16
2.2. Modélisation des procédés de traitement des eaux usées 58
Références 84

Chapitre 3 Fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval et stratégie de modélisation adaptée *92*

3.1. Fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval 92
3.2. Stratégie de modélisation de la filière biofiltration par rapport aux phases de la refonte de la station Seine Aval 105
Références 112

Chapitre 4 Modélisation des procédés de biofiltration *113*

4.1. Étapes principales de modélisation des procédés de biofiltration 113
4.2. Description du modèle utilisé 116
4.3. Modélisation de la nitrification par biofiltration 141
4.4. Modélisation de la post-dénitrification par biofiltration 173
4.5. Modélisation de la pré-dénitrification par biofiltration 211
4.6. Conclusion générale sur la modélisation de traitement par biofiltration et perspectives 239
Références 241

Chapitre 5 Modélisation de la décantation primaire et de la clarification tertiaire *245*

5.1. Étapes principales de modélisation 245
5.2. Description du modèle utilisé 247
5.3. Modélisation de la décantation primaire de la station Seine Centre 262
5.4. Modélisation de la clarification tertiaire de la station Seine Amont 286
5.5. Conclusion générale et perspectives 299
Références 300

Chapitre 6 Construction du modèle de la filière biofiltration de la station Seine Aval ***303***

6.1. Construction du modèle filière et intégration des commandes en fonction des configurations de traitement de la station prévues en 2022 304
6.2. Intégration de l'évaluation des coûts et des impacts environnementaux de traitement dans le modèle filière 332
6.3. Sommaire 343
Références 344

Chapitre 7 Application du modèle filière comme outil d'optimisation pour la station Seine Aval ***346***

7.1. Génération du scénario d'affluent 347
7.2. Détermination des valeurs pour les paramètres de commande et évaluation de la performance de prédiction du modèle filière 356
7.3. Analyses de scénarios d'exploitation 381
7.4. Conclusion et perspectives 392
Références 394

Chapitre 8 Conclusion et perspectives ***396***

8.1. Conclusion 396
8.2. Perspectives 403
Références 407

Liste des Figures ***408***

Liste des Tableaux ***417***

Annexe 1 Informations techniques en détails des ouvrages ***421***

Annexe 2 Informations supplémentaires de Chapitre 4 ..... ***424***

Annexe 3 Informations supplémentaires de Chapitre 5 ..... ***483***

Annexe 4 Informations supplémentaires de Chapitre 7 ..... ***485***

Supporting information for article ***489***

致谢

2016 年，我做出了人生中两个重要决定，第一个是攻读过程工程博士，第二个是借助这次读博的机会将自己的专业方向从生物工程转为污水处理。读博和转专业并不是一件容易的事，这也是我为什么要将我博士论文的文件夹以电影《遥远的桥》命名。今天，我想在此感谢那些在读博过程中帮助我抵达大桥的人。

首先我要诚挚地感谢我的两位博士导师：加拿大拉瓦尔大学的 Peter Vanrolleghem 教授和法国贡比涅技术大学的 André Pauss 教授。Vanrolleghem 教授，我的硬盘里记录了 60 多次的会议 PPT，感谢您每次克服加拿大和法国时差的限制。您的建议和提问能让我思考并优化我的模型。您传递给我宝贵的建模经验，让我成为一个优秀的建模师。Pauss 教授，感谢您在我每次遇到困难时为我提供建议和帮助，特别是在疫情期间为我组织了博士答辩。我同样也感谢答辩委员会成员 Denis Dochain 先生，Mathieu Spérandio 先生，Sophie Laruelle 女士 和 Christophe Proust 先生能百忙之中抽出时间对我博士期间的工作进行评估并对我的论文提出宝贵的建议。我知道我的论文很长也很啰嗦。

我同样想诚挚地感谢巴黎大区省际净水联合会(SIAAP)研发部建模所负责人，Jean Bernier 先生。感谢您向我分享 SimDec 和 SimBio 模型的研发经验，让我的工作有了坚实的基础。您是我论文的第一位读者！感谢研发部总监 Vincent Rocher 先生给予我实现博士课题的机会，改变了我的人生。

我想感谢研发部的各位同事：Queralt Plana, Rémy Coclès, Cécile Cornut, Julien Pouillaude, Sofia Housni, Sabrina Guérin, Anne-Sophie Permal, Elise Alibert, Erwan Gonzalez, Robin Richoux, Carlyne Lacroix, Claudia Paijens, Romain Mailler, Perrine Meche, Marie Ponce De Leon, Céline Briand, Camille Faure, Melissa Lopez-Viveros, Sébastien Pichon, Véronique Bremont, Jennifer Mas, Sam Azimi, Géraldine Izambart 和 Pauline Souchal。谢谢您们对我工作和生活上的帮助和支持。感谢 Seine Aval、Seine Centre、Seine Grésillons 和 Seine Amont 处理厂的工作人员为我提供数据，讲解工艺流程。感谢 DHI 公司的 Enrico Remigi 先生在 WEST 软件使用上提供的指导。

我同样想感谢在读博期间与我分享科研生活的 MOCOPEE 项目和 modelEAU 实验室的博士生们：Justine Fiat, Angélique Goffin, Kashif Nadeem, Marcos Oliveira, Paul Dupain, Marcello Serrao, Maxime Dechesne, Feiyi Li, Bernard Patry 和 Sovanna Tik。

最后我想感谢我的父母，阿猫以及所有家庭成员，在我读博 4 年时间里对我的支持和鼓励。

Remerciement

En 2016, j'ai pris deux décisions importantes dans ma vie. La première décision est de faire une thèse de doctorat, tandis que celle de deuxième est de changer ma spécialité du génie biologique au traitement des eaux usées. Ces décisions et changements ne sont pas faciles et ce pourquoi j'ai nommé le dossier de ma thèse avec le nom du film *Un pont trop loin*. Aujourd'hui, je voudrais remercie les gens qui m'aident à arriver au pont de succès.

Tout d'abord, je voudrais remercier sincèrement mes directeurs de thèse : professeur Peter Vanrolleghem (Université Laval) et professeur André Pauss (Université de Technologie de Compiègne). Professeur Vanrolleghem, j'ai 60 présentations nommées Réunion Peter dans mon disque dur ! Je vous remercie pour surmonter les limites du décalage horaire entre le Canada et la France pour faire les réunions de discussion. Je voudrais vous remercier aussi pour toutes vos questions posées dans les réunions, ce qui me faire réfléchir et aident à améliorer mon modèle. Les expériences de modélisation que vous m'avez transmises me permet de devenir un modélisateur excellent. Professeur Pauss, je voudrais vous remercie pour vos conseils et aides chaque fois lorsque je rencontre des difficultés, surtout pour l'organisation de la soutenance pendant l'époque difficile avec le Covid. Je voudrais remercier également les membres du jury : Monsieur Denis Dochain, Monsieur Mathieu Spérandio, Madame Sophie Laruelle et Monsieur Christophe Proust pour prendre le temps d'évaluer mon travail de recherche et de lire ma thèse qui est très longue et un peu bavarde.

Je voudrais remercier très chaleureusement Monsieur Jean Bernier, responsable du Service Modélisation Opérationnelle de la Direction de l'Innovation du SIAAP, pour me partager les expériences sur le développement du modèle SimBio et SimDec, ce qui me permet d'avoir une base solide pour développer le modèle de la filière biofiltration de la station Seine Aval. Vous êtes le premier lecteur de ma thèse ! Je voudrais remercier aussi Monsieur Vincent Rocher, Directeur de la Direction de l'Innovation du SIAAP pour me donner l'opportunité de réaliser cette thèse qui change ma vie.

Je voudrais remercier les collègues de la Direction de l'Innovation du SIAAP : Queralt Plana, Rémy Coclès, Cécile Cornut, Julien Pouillaude, Sofia Housni, Sabrina Guérin, Anne-Sophie Permal, Elise Alibert, Erwan Gonzalez, Robin Richoux, Carlyne Lacroix, Claudia Paijens, Romain Mailler, Perrine Meche, Marie Ponce De Leon, Céline Briand, Camille Faure, Melissa Lopez-Viveros, Sébastien Pichon, Véronique Bremont, Jennifer Mas, Sam Azimi, Géraldine Izambart et Pauline Souchal pour vos aides pour mon travail et ma vie en France.

Ensuite, Je voudrais remercier les agents des stations du SIAAP qui me fournissent les données et m'aident à comprendre les procédés. J'aimerais remercier aussi Monsieur Enrico Remigi de l'entreprise DHI pour votre guide sur l'utilisation du logiciel WEST.

Je voudrais remercier également les doctorants du programme MOCOPEE et de modelEAU, qui me partager leurs histoires de recherche : Justine Fiat, Angélique Goffin, Kashif Nadeem, Marcos Oliveira, Paul Dupain, Marcello Serrao, Maxime Dechesne, Feiyi Li, Bernard Patry et Sovanna Tik.

Enfin, je voudrais remercier mes parents, mon chaton et tous les autres membres de ma famille pour vos supports et encouragements pendant ces quatre ans.

Résumé

En 2013, le SIAAP (Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne) a lancé un programme pour moderniser la station Seine Aval (SAV), la plus grande station d'épuration d'Europe. Ce programme de modernisation, qui est prévu d'être finalisé en 2022, vise à adapter la station à l'urbanisation de la région parisienne et aux exigences règlementaires. Après la modernisation, le traitement des eaux usées de la station sera réalisé par deux filières en parallèle : la filière biofiltration et la filière bioréacteurs à membrane (BRM). La configuration du traitement après la modernisation de la station sera complexe, et fournit plusieurs leviers et choix d'exploitation locaux et globaux pour réaliser les traitements des eaux usées. Pour évaluer les impacts économiques et environnementaux des choix d'exploitation et identifier les meilleurs choix en fonction des besoins de traitement, les outils de support, comme, par exemple, les modèles simulant le fonctionnement des procédés de traitement sont demandés.

Cette thèse présente le travail de modélisation du fonctionnement de la filière biofiltration de la station Seine Aval après sa modernisation en 2022. La filière modélisée est composée d'un procédé de décantation primaire, de trois étages de biofiltration et d'un procédé de clarification tertiaire. Considérant l'état d'avancement des travaux de refonte, une stratégie de modélisation de la filière biofiltration est d'abord proposée. Cette stratégie définit l'ordre de modélisation des procédés individuels de la filière et les règles de commandes à intégrer dans le modèle filière. Ensuite, les modèles SimBio et SimDec, qui simulent respectivement le fonctionnement de la biofiltration et de la décantation lamellaire physico-chimique sont modifiés et améliorés afin de construire les modèles de procédés individuels pour chaque étape de traitement de la filière biofiltration. Ces modèles de procédés individuels sont calibrés et validés avec les données issues des stations du SIAAP. Après la calibration-validation, les modèles sont assemblés afin de construire le modèle de la filière biofiltration. Les règles de commandes et les évaluations des coûts et des impacts environnementaux de traitement sont intégrées dans le modèle filière. Enfin, pour évaluer le potentiel d'application du modèle filière comme un outil d'optimisation, des scénarios d'exploitation sont testés et analysés.

Selon les résultats obtenus, la performance de chaque étape de traitement modélisée peut être bien prédite par les modèles de procédés individuels. Le modèle de la filière biofiltration construit est capable d'indiquer les avantages et les inconvénients des scénarios d'exploitation et d'aider à identifier le choix d'exploitation optimum. Il a donc le potentiel d'être utilisé comme un outil pour aider à optimiser la filière de biofiltration de la station Seine Aval.

Abstract

In 2013, SIAAP (the interdepartmental association for sewage disposal for the Paris conurbation) launched a program to upgrade the Seine Aval (SAV) plant, the largest wastewater treatment plant in Europe. This upgrade program, which is scheduled to be finalized in 2022, aims to adapt the plant to the urbanization of the Paris region and to regulatory requirements. After the upgrade, the wastewater treatment will be realized by two parallel treatment lines: (i) the biofiltration line and (ii) the membrane bioreactor line (MBR). The configuration of the treatment after the upgrade of the station will be complex, which provides several local and global operation choices to realize the wastewater treatment. To evaluate the economic and environmental impacts of these operation choices and identify the best choices based on treatment needs, support tools such as models simulating the performance of treatment processes are required.

This thesis presents the modelling work for the biofiltration line of the Seine Aval plant after its upgrade in 2022. The modelled line is composed of a primary settling process, three stages of biofiltration and a tertiary clarification process. Considering the progress of the upgrade program, a modelling strategy for the biofiltration line is first proposed. This strategy defines the order of modelling for the treatment steps of the biofiltration line and the control rules to be integrated in the biofiltration line model. Then, the SimBio model and SimDec model, which respectively simulate the treatment performance of biofiltration and physico-chemical settling process, are modified and improved in order to build process models for each treatment step of the biofiltration line. The process models are calibrated and validated with data from the plants of SIAAP. After calibration and validation, the models are connected in order to build the model for the biofiltration line. Control rules and evaluations of treatment costs and environmental impacts are integrated in the biofiltration line model. Finally, to evaluate the potential for using the biofiltration line model as a tool for treatment optimization, several operation scenarios are tested and analysed.

According to the results obtained, in general, the performance of each treatment step modelled can be well predicted by the process models. The built biofiltration line model is able to indicate the advantages and disadvantages of the operation scenarios and help to identify the optimum operation choice. It therefore has the potential to be used as a tool to help optimize the biofiltration line of the Seine Aval plant.

Chapitre 1 Introduction

1.1. Contexte

Depuis la mise en service de sa première tranche de traitement par boues activées (260 000 m^3/j) en 1940, la station d'épuration (STEP) Seine Aval (SAV) à la ville d'Achères (78) n'a pas cessé d'évoluer. En 1966, quatre ans avant la création du SIAAP (Syndicat Interdépartemental pour l'Assainissement de l'Agglomération Parisienne), la deuxième tranche de traitement par boues activées (320 000 m^3/j) a été construite. Malgré la mise en service de ces deux tranches, seulement 40% des volumes des eaux usées collectés étaient épurés par la voie de l'épandage agricole ou la voie d'un traitement centralisé à la station Seine Aval (580 000 m^3/j) (Rocher et Azimi, 2017). D'ailleurs, à cette époque, la station Seine Aval ne traitait que la pollution carbonée à l'aide de ses procédés par boues activées. A partir de l'année 1970, l'évolution de la station de Seine Aval et la situation d'assainissement de l'agglomération parisienne ont été accélérées sous la pression démographique et l'urbanisation. À la suite de la mise en service de la troisième (900 000 m^3/j, en 1972) et de la quatrième tranche (600 000 m^3/j, en 1978), la capacité de traitement de la station Seine Aval s'est élevée jusqu' à environ 2 100 000 m^3/j. La station était devenue la plus grande en Europe. Entre les années 1980 et 2014, cinq nouvelles stations d'épuration ont été construites dans la région parisienne afin de déconcentrer la capacité de traitement de la station Seine Aval (de 2 100 000 à 1 700 000 m^3/j)(Rocher et Azimi, 2017). En parallèle, pour respecter les règlementations environnementales comme la Directive européenne sur les Eaux Résiduaires Urbaines (DERU) et la Directive Cadre sur l'Eau (DCE, 2000/60/CE), des ouvrages de traitement intensif ont été intégrés dans les stations afin de réaliser l'enlèvement des nutriments tels que l'azote et le phosphore. Au niveau de la station de Seine Aval, en 2002, des décanteurs lamellaires physico-chimiques ont été installés après les 4 tranches de traitement par boues activées pour réaliser une clarification tertiaire (abattement des matières en suspension et du phosphore). En 2007, des biofiltres nitrifiants et post-dénitrifiants ont été intégrés dans la station pour enlever les nutriments azotés de manière biologique. En 2013, un nouveau programme de modernisation pour Seine Aval (voir Figure 1.1) a été lancé afin d'adapter la station à l'urbanisation de la région parisienne et aux exigences règlementaires accrues. Sous ce programme de modernisation, des bioréacteurs à membrane (BRM) et des biofiltres pré-dénitrifiants ont été ajoutés dans la file de traitement, en remplacement des réacteurs à boues activées, qui ont été désassemblés. En 2022, les décanteurs classiques actuels utilisés encore aujourd'hui seront remplacés par de nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques, pour améliorer le traitement primaire et en permettre une meilleure modulation en fonction des besoins de performance de traitement.

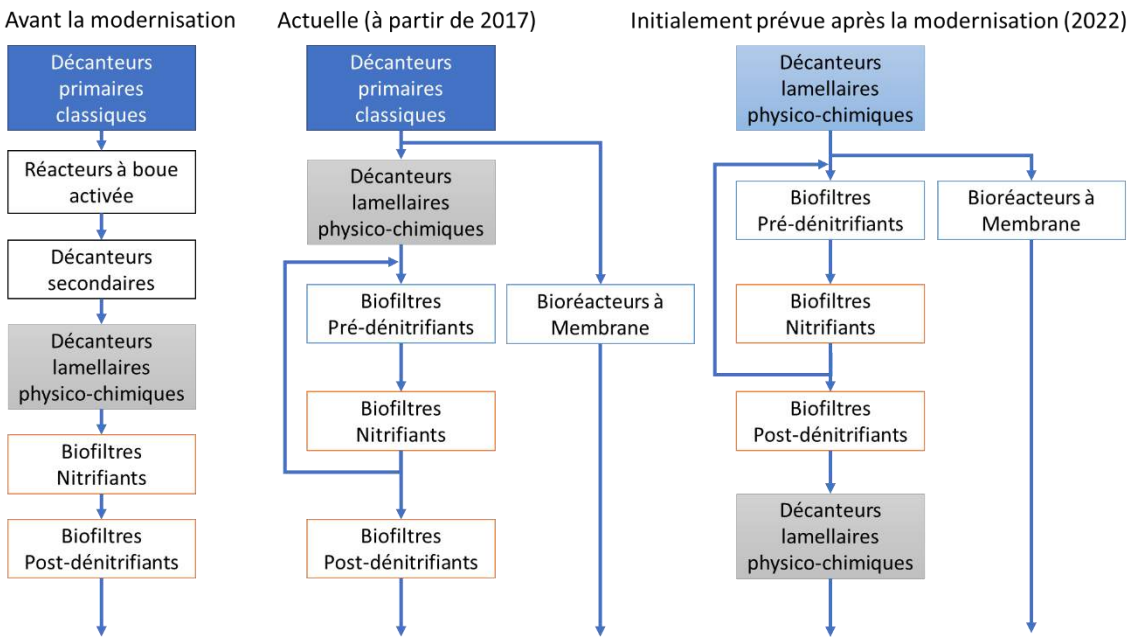


Figure 1.1 Evolution de la configuration de traitement de la station Seine Aval au cours du programme de modernisation.

La configuration du traitement après la modernisation de la station sera complexe et fournit plusieurs leviers et choix d'exploitation locaux et globaux pour réaliser les traitements des eaux usées. Par exemple, l'enlèvement des nitrates peut être réalisé par les biofiltres pré-dénitrifiants, les biofiltres post-dénitrifiants et les bioréacteurs à membrane. Dans ce cas, sans outil de support, il sera difficile à évaluer les impacts économiques et environnementaux des choix d'exploitation afin d'identifier les meilleurs choix en fonction des besoins de traitement. Avec le développement de logiciels de modélisation et l'évolution des connaissances fondamentales et de l'ingénierie du traitement des eaux usées, les modèles mathématiques représentant les procédés d'épuration deviennent des outils utiles et relativement peu coûteux. Ils peuvent aider à prendre des décisions pour commander, évaluer et optimiser les procédés de traitement des eaux usées. Un modèle bien calibré peut être modifié et adapté pour suivre l'état actuel d'une station d'épuration et donc fournir une base raisonnable pour aider à prendre des décisions (Rieger *et al.*, 2012). Dans le même esprit, le programme de recherche MOCOPEE (Modélisation Contrôle et Optimisation des Procédés d'Epuration des Eaux) a lancé le projet NEXTSTEP visant à construire un modèle représentant la totalité des procédés de traitement de la station Seine Aval après sa modernisation. Ce modèle sera utilisé comme outil de support pour (i) évaluer la performance de traitement de la station Seine Aval, (ii) estimer sa consommation énergétique, le coût du traitement et les impacts environnementaux impliqués, (iii) développer les stratégies d'optimisation et (iv) aider à prendre des décisions.

Intégré dans ce projet de modélisation, cette thèse se concentre sur la construction d'un modèle représentant la filière biofiltration de la station Seine Aval, et sur l'utilisation de ce modèle

comme outil de support pour explorer les pistes d'optimisation potentielle des procédés en prévision de la finalisation de la refonte en 2022. Les procédés de traitement compris dans cette filière sont, selon l'ordre de traitement, la décantation primaire, la biofiltration et la clarification tertiaire.

1.2. Problématique

Comme la production d'automobiles incluant différentes étapes impliquées, comme la fabrication des pièces, l'assemblage et les tests de performance, la modélisation d'une filière de traitement doit aussi se diviser en différentes étapes. Tout d'abord, chaque procédé de traitement dans la filière doit être modélisé. Suite à cela, le modèle de la filière de traitement peut être construit, en connectant en première lieu les modèles de procédé en série. Une procédure de calibration et validation peut être suivie pour le modèle de la filière afin d'assurer sa performance de prédiction. Finalement, des tests de scénario peuvent être réalisés avec le modèle de la filière afin d'aider à identifier des pistes d'optimisation des traitements. Considérant la réalité de la refonte de la station Seine Aval et l'objectif général de modélisation, certains problèmes peuvent être rencontrés pour chaque étape de modélisation de la filière biofiltration :

- **Etape 1 : Modélisation de chaque procédé de traitement de la filière biofiltration**

Dans le cadre du programme de recherche MOCOPEE, le modèle SimBio (Bernier *et al.*, 2014a; 2014b) et le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016) ont été développés pour simuler le fonctionnement de la biofiltration et de la décantation lamellaire physico-chimique respectivement. Ces deux modèles procédés ont été appliqués et calibrés avec succès pour certains ouvrages de traitement installés dans les stations du SIAAP. Cependant, mis à part l'unité de biofiltration en nitrification de la station Seine Aval, d'autres procédés de la station jamais fait l'objet d'un travail de modélisation. De plus, certains procédés dans la filière sont encore en attente de construction (cas de la décantation primaire), en réparation (cas de la biofiltration en post-dénitrification) ou en ajustement (cas de la biofiltration en pré-dénitrification). La configuration de traitement utilisée actuellement dans la station ne correspond pas à celle prévue après la modernisation. La disponibilité de données pertinentes pour réaliser la calibration et la validation des modèles devient donc une contrainte pour certains des procédés étudiés. En même temps, pour atteindre l'objectif général présenté dans le contexte, les modèles trouvés dans la littérature doivent être mis à jour afin de les rendre capables de réaliser l'évaluation des impacts économiques et environnementaux du traitement des eaux effectué.

- **Etape 2 : Modélisation de la filière de traitement**

Par rapport aux procédés à boue activée, peu de filières de traitement utilisant la biofiltration ont été modélisées dans le passé (Samie *et al.*, 2010; Zou *et al.*, 2014). A cette étape, le premier problème rencontré est la connexion des modèles procédé entre eux pour former un modèle global. Pour les stations utilisant des procédés de biofiltration comme la station Seine Aval, le

nombre de biofiltres en fonction est variable, selon l'importance de la charge à traiter. La capacité de traitement pour chaque étage de biofiltration est donc variable en fonction du nombre de biofiltres en service. Cependant, les modèles de biofiltration trouvés dans la littérature représentent la performance générale du procédé par un seul biofiltre, car le temps de simulation est relativement important pour les systèmes à biofilm et l'évaluation la performance de traitement se fait au niveau de l'étage entière ou groupes de biofiltres au lieu de chaque biofiltre, Pour faciliter cette simplification, les données de débit moyenné par biofiltre sont utilisées pour alimenter ces modèles. Dans le cas actuel où plusieurs modèles ainsi simplifiés doivent être connectés en série, deux modèles de biofiltration représentant un nombre différent de biofiltres ne peuvent pas être reliés directement, parce que leurs débits par biofiltre sont différents. Une méthode d'adaptation est donc nécessaire.

Le deuxième problème rencontré est que la modélisation d'une filière de traitement doit aussi prendre en compte les règles de commande mises en place dans la station. Sans intégration de ces règles de commande, le modèle filière ne peut pas réagir et s'adapter de lui-même par rapport aux changements de débit et concentration en entrée ou aux variations de consignes de traitement demandées en sortie. Ceci mène à une diminution du potentiel du modèle à être utilisé comme un outil de support. Etant donné que les travaux de modernisation de la station n'étaient pas encore finis au moment du travail de thèse, certaines règles de commande n'étaient pas encore connues. Des hypothèses pour ces règles doivent donc être proposées afin d'établir un modèle de filière le plus proche possible de la réalité de la station après sa modernisation.

- **Etape 3 : Tests de scénarios et utilisation du modèle comme outil d'optimisation**

A cette étape, la première problématique à résoudre est de proposer des scénarios de débits et concentrations en entrée de station à tester. De manière réaliste, les caractéristiques de l'entrée de la station varient en fonction de différents facteurs (saisons, météo, habitudes de la population) (Martin et Vanrolleghem, 2014). Ces variations à différentes échelles de temps sont importantes pour les opérations et les commandes des procédés de traitement (Henze et Comeau, 2008), parce que la station doit réagir à ces variations afin de satisfaire les exigences en sortie de la station. En simulant un scénario d'entrée aussi représentatif que possible, la performance de la station sous différentes conditions peut être évaluée et des stratégies d'optimisation peuvent être proposées de manière réaliste selon les résultats de simulation obtenus.

La seconde problématique à résoudre est de choisir une manière cohérente pour évaluer les scénarios d'optimisation proposés. Premièrement, la station Seine Aval traite plusieurs types de polluants. La gravité de leur impact dans le milieu naturel récepteur (la Seine) dépend non seulement de leurs quantités en sortie de station, mais aussi de la capacité de réception de la

rivière des différents polluants. Par exemple, pour les polluants azotés, selon la Directive Cadre sur l'Eau (DCE, 2000/60/CE), le seuil de bon état de la concentration en nitrate (50 mg/L) pour la Seine est moins strict que celui d'ammonium (0,5 mg/L). Deuxièmement, le coût de traitement et les impacts environnementaux de chaque scénario doivent aussi être intégrés dans l'évaluation. Certaines études de modélisation ont dans le passé déjà proposé des méthodes d'évaluation complète pour les scénarios testés (Nopens *et al.*, 2010; Flores-Alsina *et al.*, 2011). Cependant, les procédés de traitement modélisés par ces études sont principalement des boues activées conventionnelles qui sont fortement différents par rapport à la réalité de la station Seine Aval où des procédés intensifs comme les biofiltres et les bioréacteurs à membrane sont utilisés. D'ailleurs, la condition du milieu naturel récepteur considérée dans ces études n'est pas la Seine.

1.3. Objectifs

Tel que présenté dans les deux parties précédentes, l'objectif général de cette étude est d'établir un modèle de la filière complète de traitement de biofiltration de la station Seine Aval, et de l'utiliser comme un outil d'analyse de scénario, afin d'en explorer le potentiel d'aide à l'exploitation et à la compréhension du fonctionnement de la station. Selon les problématiques présentées pour chaque étape de modélisation, les sous-objectifs de cette étude peuvent être définis comme suit :

- **Objectif 1 : Proposer une stratégie de modélisation d'une station actuellement en phase de construction partielle**

Puisque les travaux de modernisation de la station Seine Aval ne étaient pas finis au moment d'écrire ces lignes, certains procédés de traitement sont encore en phase de construction ou d'ajustement et de rodage. Les données de traitement pour ces procédés ne sont donc soit, pas disponibles, ou peu représentatives par rapport au fonctionnement normal attendu du procédé. Dans ce cas, les modèles pour ces procédés doivent être construits à la base de procédés similaires installés dans d'autres stations du SIAAP. Une stratégie de modélisation qui définit l'ordre de modélisation des procédés dans la filière biofiltration selon l'état actuel de la modernisation de la station Seine Aval, doit être proposée. Cette stratégie doit aussi permettre d'identifier des procédés similaires à modéliser dans les autres stations du SIAAP.

- **Objectif 2 : Concevoir et améliorer des modèles pour chaque procédé de traitement de la filière biofiltration à l'aide du logiciel WEST**

Il s'agit de modéliser la décantation lamellaire physico-chimique primaire, les trois étages de biofiltration en série et la clarification tertiaire en se basant sur des modèles disponibles dans la littérature. Ce faisant, la capacité de ces modèles doit être améliorée afin de satisfaire les besoins d'évaluation des impacts économiques et environnementaux, en leur ajoutant des équations spécifiques en ce sens. D'ailleurs, comme ces modèles ont été construits à partir de données journalières, leur capacité à simuler des dynamiques observées sur des pas de temps plus courts doit aussi être évaluée si possible. Le logiciel choisi pour réaliser la modélisation est WEST (DHI, Hørsholm, Denmark). C'est un logiciel spécialisé pour la modélisation de procédés de traitement des eaux usées. Ce choix de logiciel se base sur les trois raisons suivantes : premièrement, il permet d'intégrer les modèles extérieurs et de reprogrammer les modèles préinstallés. Deuxièmement, il peut répondre aux besoins d'assemblage des modèles de procédés afin d'établir le modèle de la filière de biofiltration. Troisièmement, des fonctions inclues dans le logiciel (analyses de sensibilité globale et tests des scénarios) permettent de faciliter la calibration de modèles.

- **Objectif 3 : Construire le modèle de filière de traitement**

Il s'agit de connecter les modèles procédés préalablement construits entre eux et d'intégrer les règles de distribution et de répartition de l'eau sur la station, ainsi que les stratégies de commande pour chacun des procédés de traitement. Les règles de commande à intégrer doivent être basées sur les règles réellement appliquées à Seine Aval lorsque les informations nécessaires sont disponibles ou sur une combinaison d'hypothèses réalistes et d'adaptation de ce qui est fait ailleurs au SIAAP dans le cas contraire.

- **Objectif 4 : Proposer des scénarios d'entrée et réaliser une première évaluation complète de quelques scénarios d'optimisation potentiels**

Pour utiliser le modèle comme outil d'optimisation, des scénarios d'entrée doivent d'abord être proposés et testés afin de fournir une base de la performance de traitement qui peut être comparé avec les résultats obtenus par les tests de scénarios d'optimisation de l'étape suivante. Pour un même scénario d'entrée, différentes propositions de scénarios d'optimisation doivent être simulés, et leurs résultats doivent être évalués. A cette étape, en se basant sur ce qui a été fait précédemment dans la littérature scientifique, une méthode d'évaluation de la performance de traitement, tant pour l'enlèvement de la pollution que pour les coûts économiques et les impacts environnementaux, doit être proposée et utilisée pour comparer les différents scénarios proposés. Différents indicateurs de performance doivent être utilisés à cette fin.

1.4. Organisation de la thèse

Ce manuscrit de thèse est divisé en 7 chapitres. Le premier chapitre consiste en une étude bibliographique se concentrant sur la compréhension du fonctionnement des procédés à modéliser, des modèles simulant le comportement de ces procédés existants dans la littérature et des modèles globaux pour la station d'épuration et leurs applications. Le deuxième chapitre présente le fonctionnement précis de la station Seine Aval pendant et après sa modernisation et explique la stratégie de modélisation développée par rapport aux phases de modernisation de cette station. Les troisième et quatrième chapitres présentent respectivement le travail de modélisation sur les procédés de biofiltration et de décantation lamellaire physico-chimique respectivement. Le cinquième chapitre est consacré à la construction du modèle global sur la filière biofiltration. Le sixième chapitre présente quelques exemples d'application du modèle filière biofiltration afin d'en illustrer le potentiel en tant qu'outil d'optimisation. Enfin, le dernier chapitre présente les conclusions générales, ainsi que des perspectives sur la suite de ce travail de modélisation.

Références

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Bernier, J., Guérin, S., Azimi, S., Rocher, V., & Lessard, P. (2016). Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 391*, 75-82.

Flores-Alsina, X., Corominas, L., Snip, L., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Including greenhouse gas emissions during benchmarking of wastewater treatment plant control strategies. *Water Research, 45*(16), 4700-4710.

Henze, M. et Comeau, Y. (2008). Wastewater characterization. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design* (pp. 33-52). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Martin, C. et Vanrolleghem, P. A. (2014). Analysing, completing and generating influent data for WWTP modelling: A critical review. *Envrionmental Modelling & Software, 60*, 188-201.

Nopens, I., Benedetti, L., Jeppsson, U., Pons, M.-N., Alex, J., Copp, J. B., Gernaey, K. V., Rosen, C., Steyer, J.-P., & Vanrolleghem, P. A. (2010). Benchmark Simulation Model No 2: Finalisation of plant layout and default control strategy. *Water Science & Technology, 62*(9), 1967-1974.

Rieger, L., Gillot, S., Langergraber, G., Ohtsuki, T., Shaw, A., Takács, I., & Winkler, S. (2012). *Guidelines for Using Activated Sludge Models*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Rocher, V. et Azimi, S. (2017). *Evolution de la Qualité de la Seine en Lien avec les Progrès de l'Assainissement de 1970 à 2015*. Editions Johanet, Paris, France.

Samie, G., Lessard, P., & Rocher, V. (2010). Simulation du comportement d'unités de biofiltration des eaux useés. *Techniques Sciences Méthodes, 11*, 85-106.

Zou, Z., Shi, H., Chen, X., & Xie, X. (2014). Numerical simulation and operation optimization of biological filter (Article en chinois). *Environmental Science, 35*(12), 4627-4635.

Chapitre 2 Synthèse bibliographique

Ce chapitre consiste en une synthèse des principales informations trouvées dans la littérature scientifique concernant les différentes étapes de construction d'un modèle intégré de la filière de traitement de la station Seine Aval. Ces informations sont organisées de la manière suivante : un premier sous-chapitre traite d'abord les principes de fonctionnement des procédés individuels à modéliser, soit dans le cas présent la décantation physico-chimique lamellaire et la biofiltration. Une seconde partie concerne ensuite les modèles trouvés dans la littérature pour ces procédés, puis les stratégies de calibration de ce genre de modèles fait l'objet d'une troisième partie. Enfin, la quatrième partie s'attarde aux différents travaux de construction de modèles globaux pour les stations d'épuration et leurs applications.

2.1. Traitement des eaux usées urbaines

2.1.1. Polluants dans les eaux usées

Le traitement des eaux usées vise à éliminer les polluants présents dans les eaux usées issues d'activités humaines. Il permet de protéger les milieux aquatiques et de maintenir l'utilisation durable des ressources en eau. Bien que la composition des eaux usées urbaines varie significativement en fonction des régions et de l'occupation du territoire desservi par la STEP (Henze et Comeau, 2008), certains composants communs constituant la pollution sont présents dans les eaux usées. Les matières organiques sont les polluants principaux dans les eaux usées qui peuvent causer une diminution d'oxygène dissous dans les milieux récepteurs et donc conduire à une mortalité piscicole. Les matières organiques sont principalement mesurées en DCO (demande chimique en oxygène) et DBO (demande biochimique en oxygène) (Henze et Comeau, 2008). En plus des matières organiques, les nutriments (azote et phosphore) sont aussi des composants typiques présents dans les eaux usées et peuvent être traités par les stations d'épuration urbaines (Metcalf & Eddy, 2014). Les nutriments azotés dans les eaux usées sont composés principalement d'azote ammoniacal, de nitrite, de nitrate et d'azote organique. Parmi ces espèces azotées, l'azote ammoniacal à haute concentration est toxique pour les poissons et les autres organismes aquatiques. Comme les matières organiques précédemment mentionnées, à cause de la nitrification biologique, ce polluant peut également conduire à la diminution d'oxygène dissous du milieu naturel. La présence nitrites dans l'eau potable peut affecter la capacité de transport d'oxygène du sang et cause le « syndrome du bébé bleu » (méthémoglobinémie) pour les nouveau-nés. Les nutriments phosphorés peuvent également être divisés en différentes espèces comme les orthophosphates, les polyphosphates, les composés organophosphorés, etc. Ils ont également des effets nuisibles pour les humaines et l'environnement. Par exemple, certains composés organophosphorés issus de pesticides

peuvent affecter la fonction du système nerveux. De plus, avec les nutriments azotés, les nutriments phosphorés peuvent favoriser la croissance des algues et donc conduire à l'eutrophisation dans le milieu naturel. Le Tableau 2.1 résume les méthodes d'analyse couramment utilisées pour mesurer les nutriments azotés et phosphorés.

Tableau 2.1 Méthodes d'analyse couramment utilisées pour mesurer les nutriments azotés et phosphorés (Lou et al., 2002; Metcalf & Eddy, 2014).

Nutriments	Espèces	Méthodes
Nutriments azotés	Azote ammoniacal	• Colorimétrie (réaction avec réactif de Nessler) • Electrode sélection d'ions
	Nitrite	• Spectrophotométrie (réaction de diazotation)
	Nitrate	• Spectrophotométrie (après réduction en nitrite) • Electrode sélection d'ions • Spectrophotométrie-UV
	Azote organique	• Méthode Kjeldahl
	Azote total	• Spectrophotométrie d'absorption moléculaire en phase gazeuse • Spectrométrie-UV (après digestion en nitrate)
Nutriments phosphorés	Orthophosphates	• Spectrophotométrie (réaction avec molybdate d'ammonium) • Chromatographie à échange d'ions
	Polyphosphoates	• Spectrophotométrie (après hydrolyse en orthophosphates par les acides)
	Composés organophosphorés	• Chromatographie
	Phosphore total	• Spectrophotométrie (après digestion en orthophosphates)

2.1.2. Procédés de traitement des eaux usées

Les termes généraux utilisés pour illustrer les différents degrés de traitement dans une station d'épuration, en ordre croissant de progression, sont : le prétraitement, le traitement primaire, le traitement secondaire et le traitement tertiaire (ou avancé) (Mujeriego et Asano, 1999). Ces traitements sont basés sur les principes physiques, chimiques et biologiques.

2.1.2.1. Prétraitement

L'objectif du prétraitement est d'éliminer les composants (matières solides grossières, sables, huile, etc.) dans les eaux usées brutes qui peuvent causer des effets indésirables sur le fonctionnement des procédés en aval. Par exemple, les matières solides grossières et les sables peuvent provoquer l'usure des machines et leur accumulation dans le digesteur peut nuire à la digestion des boues. D'ailleurs, les huiles dans les eaux usées conduisent au moussage dans les zones aérées. Le dégrillage, le dessablage et le déshuilage sont donc des procédés communément utilisés à cette fin (Water Environment Federation, 2012a).

2.1.2.2. Traitement primaire

Le traitement primaire vise à séparer et éliminer les matières en suspension (MES) et les matières flottables n'ayant pas été enlevées lors du pré-traitement par des procédés physiques et/ou chimiques. Ce traitement permet de diminuer les concentrations de MES, DCO et DBO et donc de réduire les besoins en aération et les quantités de boues biologiques produites par les procédés en aval (Rich, 1961). La décantation est le procédé le plus fréquemment utilisé pour cette étape. Un décanteur primaire consiste en un bassin avec un temps de rétention de typiquement une heure avec soutirage des boues primaires. Dans un décanteur primaire, les solides en suspension sont décantés sous l'effet de la gravité, tandis que les matières flottables peuvent s'élever à la surface de l'eau. Un décanteur conventionnel peut éliminer environ 50% à 65% des MES et 25% à 40% de la DCO et de la DBO (Metcalf & Eddy, 2003). Cependant, pour les procédés de traitement secondaire comme la biofiltration, ces taux de traitement ne sont pas toujours suffisants. En effet, de fortes concentrations en MES et en DCO dans l'affluent peuvent causer un encrassement rapide des biofiltres. En conséquence, la fréquence de lavage nécessaire pour maintenir un taux d'encrassement raisonnable augmente. Lors d'un lavage, l'exploitation de la biofiltration est arrêtée et une partie de l'eau précédemment traitée est utilisée. L'efficacité de traitement par biofiltration est donc diminuée (Rocher *et al.*, 2008).

Différentes méthodes sont développées pour optimiser les performances de traitement de décantation primaire. La décantation physico-chimique (chemically enhanced primary treatment, CEPT) et la décantation lamellaire sont les méthodes couramment appliquées dans les stations d'épuration. La décantation physico-chimique accélère la décantation des particules

par l'ajout de réactifs chimiques (coagulants et floculants). Ces derniers peuvent changer les caractéristiques physico-chimiques des particules dans les eaux usées et faciliter leur décantation (Metcalf & Eddy, 2014). Certains réactifs chimiques ajoutés permettent également de réaliser un certain niveau d'enlèvement du phosphore. La décantation lamellaire renforce l'efficacité de traitement par l'installation de plaques obliques (ou tuyaux) dans les bassins de décantation. Les décanteurs, qui appliquent simultanément ces deux méthodes d'optimisation sont les décanteurs lamellaires physico-chimiques (appelés aussi clarificateurs à grande vitesse ou clari-floculateur). Les principes de la décantation et du fonctionnement des décanteurs lamellaires physico-chimique sont présentés en détails dans la section 2.1.3.

2.1.2.3. Traitement secondaire

Le traitement secondaire vise logiquement à éliminer les polluants comme la DCO soluble, l'azote ammoniacal et les orthophosphates qui restent dans l'effluent du traitement primaire, habituellement par procédés biologiques. Pendant le traitement secondaire, des micro-organismes (principalement des bactéries) présents dans les réacteurs biologiques de traitement des eaux usées peuvent utiliser les matières organiques biodégradables et les nutriments (azote et phosphore) dans les eaux usées comme les substrats de croissance (Comeau, 2008). Selon le mode de culture des micro-organismes dans les réacteurs, les procédés de traitement secondaire peuvent être divisés en deux catégories : les procédés à culture libre (culture en suspension) et ceux à culture fixée.

Les boues activées sont le procédé de culture en suspension le plus utilisé dans le traitement des eaux usées urbaines. Dans un réacteur de boue activée, les bactéries épuratrices croissent sous forme de flocs bactériens en suspension dans les eaux usées à traiter. Après un certain temps de séjour du mélange eau-boue, les matières solides (flocs bactériens et matières organiques solides) sont séparées des eaux par des décanteurs secondaires installés en aval du procédé. En termes d'alternatives à la décantation secondaire, la filtration par membrane a aussi été développée pour réaliser la séparation liquide-solide pour les procédés de traitement par culture en suspension. Par rapport à la décantation secondaire classique, cette technologie permet d'améliorer la qualité des eaux en sortie en retenant plus de particules et de diminuer le volume de procédé nécessaire (Metcalf & Eddy, 2014). Un réacteur qui combine le procédé à boue activée avec un dispositif de filtration à membrane est appelé bioréacteur à membrane (Membrane bioreactor, MBR). Dans tous les cas, après la séparation des boues et de l'eau, une partie des matières solides décantées ou filtrées (boue secondaire) est retournée dans les réacteurs biologiques pour y maintenir une quantité de biomasse suffisante pour réaliser un traitement optimal. Le reste est envoyé vers le traitement des boues de la station.

Les lits bactériens, les biofiltres, les MBBR (Moving bed biofilm reactor) et les contacteurs

biologiques rotatifs sont les réacteurs à culture fixée principaux utilisés en traitement des eaux usées (Metcalf & Eddy, 2014). Ces réacteurs, qui sont appelés aussi réacteurs à biofilm, contiennent des supports fixés ou mobiles, appelés média. En effet, les micro-organismes présents dans les eaux usées peuvent s'attacher et s'accumuler à la surface de ces médias et former des biofilms. Selon la définition de Wilderer et Characklis (1989), un biofilm est une couche de cellules procaryotes et eucaryotes ancrées sur une surface et intégrées dans une matrice organique d'origine biologique. La quantité de biomasse accumulée dans un réacteur à biofilm est en général plus élevée que celle présente dans un procédé de boue activée, ce qui augmente la capacité de traitement. De plus, certains procédés comme la biofiltration réalisent également en partie la filtration des MES pendant le traitement biologique (Rocher *et al.*, 2008). Ils n'ont donc pas besoin de décanteur secondaire, ce qui réduit davantage le volume de réacteur nécessaire de la station. Cependant, la croissance continue du biofilm et l'accumulation des particules retenues dans les réacteurs au cours du traitement peut causer un encrassement excessif des médias (Water Environment Federation, 2010b). Le lavage est donc une étape supplémentaire inévitable pour ces réacteurs à culture fixée pendant le fonctionnement.

Initialement, les réacteurs de traitement secondaire avaient pour but principal d'éliminer les matières organiques par voie aérobie. Sous condition aérée, les bactéries hétérotrophes peuvent oxyder les matières organiques biodégradables en CO_2 afin d'assurer leur croissance (Comeau, 2008), selon l'équation Eq 2.1.

$$Eq\ 2.1 \quad C_{10}H_{19}O_3N + O_2 + autres\ nutriments \rightarrow C_5H_7O_2N + CO_2 + H_2O$$

La formule $C_{10}H_{19}O_3N$ dans l'équation est la formule générale représentant les matières organiques biodégradables dans les eaux usées (Metcalf & Eddy, 2014). De nos jours, le traitement secondaire est régulièrement combiné avec le traitement tertiaire pour réaliser en même temps l'enlèvement des nutriments (azote et phosphore) par voie biologique. Certains types de procédés s'y prêtent toutefois difficilement à cause des conditions d'exploitation requises (concentration en oxygène dissous, âge de boue, pH, etc.) pour réaliser l'enlèvment, et c'est pourquoi dans ces cas il est nécessaire d'inclure une ou plusieurs étapes de traitement supplémentaires, physiquement séparées du traitement secondaire (voir la section suivante).

2.1.2.4. Traitement tertiaire

Le traitement tertiaire vise à traiter les polluants qui ne sont pas éliminés pendant le traitement secondaire (nutriments, micropolluants, métaux, etc.). De manière générale, ils concernent principalement l'azote et le phosphore.

- **Nitrification et dénitrification**

L'enlèvement de l'azote par voie biologique est un traitement tertiaire très répandu dans les

stations d'épuration. En général, cet enlèvement est réalisé lors de deux étapes de traitement biologique : la nitrification et la dénitrification.

- **Nitrification**

La nitrification est réalisée par deux types de bactéries autotrophes : bactéries nitritantes (ammonium-oxidizing bacteria, AOB) et bactéries nitratantes (nitrite-oxidizing bacteria, NOB). Les bactéries nitritantes peuvent réaliser l'oxydation de l'azote ammoniacal en tant que source d'énergie et utiliser le CO_2 comme source de carbone pour assurer leur croissance. Pendant le métabolisme des bactéries nitritantes, l'azote ammoniacal est oxydé en nitrite. Les bactéries nitratantes peuvent utiliser le nitrite produit par les bactéries nitritantes comme source d'énergie en l'oxydant davantage en nitrate, tout en utilisant également le CO_2 en tant que source de carbone (Ekama et Wentzel, 2008a). Les deux réactions de base pour la nitrification sont montrées ci-dessous (voir Eq 2.2 et 2.3)(Ekama et Wentzel, 2008a).

Eq 2.2
$$NH_4^+ + \frac{3}{2}O_2 \rightarrow NO_2^- + H_2O + 2H^+$$

Eq 2.3
$$NO_2^- + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow NO_3^-$$

Les protons produits lors de la nitrification consomment l'alcalinité du milieu. Cette consommation peut à son tour influencer la vitesse de nitrification qui est largement ralentie lorsque le pH du milieu est en-dessous de 7 (Metcalf & Eddy, 2014). En plus du pH, la disponibilité de l'oxygène dissous est aussi un facteur impactant la nitrification. En effet, vu que les bactéries autotrophes nitrifiantes utilisent l'oxygène lors de leur croissance, elles sont en compétition avec les hétérotrophes pour l'oxygène dissous dans les réacteurs biologiques aérobies.

- **Dénitrification**

La dénitrification est réalisée par les bactéries hétérotrophes en milieu anoxique. Une fraction des bactéries hétérotrophes peut oxyder des substrats organiques en réduisant le nitrate et le nitrite formés pendant la nitrification en oxyde nitrique (également appelé monoxyde d'azote, NO), oxyde nitreux (également appelé protoxyde d'azote, N_2O) et finalement en diazote (N_2) (Ekama et Wentzel, 2008a; Kampschreur *et al.*, 2009). Ces réactions peuvent être résumées en une réaction générale (voir Eq 2.4). En plus de l'élimination des nutriments azotés, les réactions de dénitrification permettent aussi de récupérer partiellement l'alcalinité perdue lors de la nitrification.

Eq 2.4
$$C_{10}H_{19}O_3N + 10NO_3^- \rightarrow NH_3 + 10CO_2 + 3H_2O + 5N_2 + 10OH^-$$

Les réacteurs de dénitrification peuvent se situer en amont (avec la recirculation de l'eau

nitrifiée) ou en aval de la nitrification. Pour augmenter et accélérer l'enlèvement des azotes par la dénitrification, une source de carbone exogène comme le méthanol peut être injectée dans les procédés de dénitrification. Premièrement, après le traitement de carbone en aérobie et la nitrification, les substrats organiques (source de carbone endogène) dans les eaux usées sont presque tous consommés. Il faut donc ajouter les substrats exogènes pour satisfaire les besoins de la dénitrification (Metcalf & Eddy, 2014). Deuxièmement, l'hydrolyse des substrats lentement biodégradable est ralentie en anoxie, ce qui limite la vitesse de dénitrification. Dans ce cas-ci, pour accélérer la dénitrification, l'ajout des substrats rapidement biodégradable comme le méthanol est requis (Ekama et Wentzel, 2008a). En plus de la source de carbone, la condition anoxie doit également être maintenue pour avoir de bonnes performances de dénitrification. Les réactions de dénitrification peuvent être inhibées lorsque la concentration en oxygène dissous monte au-dessus 0,2 mgO_2/L (Metcalf & Eddy, 2014).

- **Production et consommation du N_2O lors de la nitrification/dénitrification**

Le traitement des eaux usées est de plus en plus considéré comme un contributeur important d'émission de protoxyde d'azote (N_2O gazeux) (1,3% des émissions totales de toute la planète) (Kampschreur *et al.*, 2009). Le N_2O est un gaz à effet de serre dont le potentiel de réchauffement planétaire est 265 fois plus élevé que le dioxyde de carbone (IPCC, 2019). Il est aussi considéré comme un produit responsable de la diminution de la couche d'ozone (Ravishankara *et al.*, 2009). Des études récentes ont montré que le traitement des nutriments azotés par la nitrification et la dénitrification est la source principale d'émission de N_2O sur une STEP. La Figure 2.1 illustre les principes de la production/consommation du N_2O lors de la nitrification et la dénitrification. Pour les procédés de nitrification, la production du N_2O est liée aux activités des bactéries nitritantes (AOB) (voir Figure 2.1a)(Kampschreur *et al.*, 2009). En effet, pendant la nitritation, l'ammoniac est le vrai substrat utilisé par AOB, qui est d'abord oxydé en hydroxylamine (NH_2OH). Cette oxydation est catalysée par l'enzyme ammoniac monooxygénase (ammonia monooxygenase, AMO). L'hydroxylamine est ensuite oxydée en nitrite, médiatisé par l'enzyme hydroxylamine oxydoréductase (hydroxylamine oxidoreductase, HAO). Lors de l'oxydation, l'hydroxylamine est dans un premier temps oxydé en nitroxyl (NOH), et puis en NO. L'enzyme HAO catalyse aussi l'oxydation du NO formé en NO_2^-. Sauf l'oxydation, le NO peut aussi être réduit en N_2O. Cette réaction est médiatisée par l'enzyme monoxyde d'azote réductase (nitric oxide reductase, NOR)(Pocquet, 2015). Cette voie de production du N_2O s'appelle la voie de la nitrification par les nitritantes (nitrifier nitrification pathway, NN pathway). En plus de cette voie, le NOH formé pendant l'oxydation de l'hydroxylamine n'est pas stable, qui peut également former le N_2O sous l'effet de la décomposition chimique. Cette voie de production du N_2O est ainsi appelée la voie de décomposition chimique (chemical breakdown pathway). Enfin, la troisième voie de production

du N_2O par AOB s'appelle la voie de la dénitrification par les nitritantes (nitrifier denitrification pathway, ND pathway). En effet, bien que l'oxygène soit l'accepteur d'électron principal utilisé par les AOB, à cause de la présence de l'enzyme nitrite réductase (nitrite reductase, NiR), les bactéries nitritantes sont aussi capables d'utiliser le nitrite comme l'accepteur d'électron. Dans ce cas-ci, le NO_2^- peut être réduit en NO et en suite en N_2O (médiatisé par NOR) (Metcalf & Eddy, 2014). La production du N_2O durant la nitrification est principalement liée à la faible disponibilité d'oxygène dissout et au niveau élevée du nitrite présent dans le milieu, qui sont causés par certaines conditions d'opération comme l'aération insuffisante (Kampschreur *et al.*, 2009).

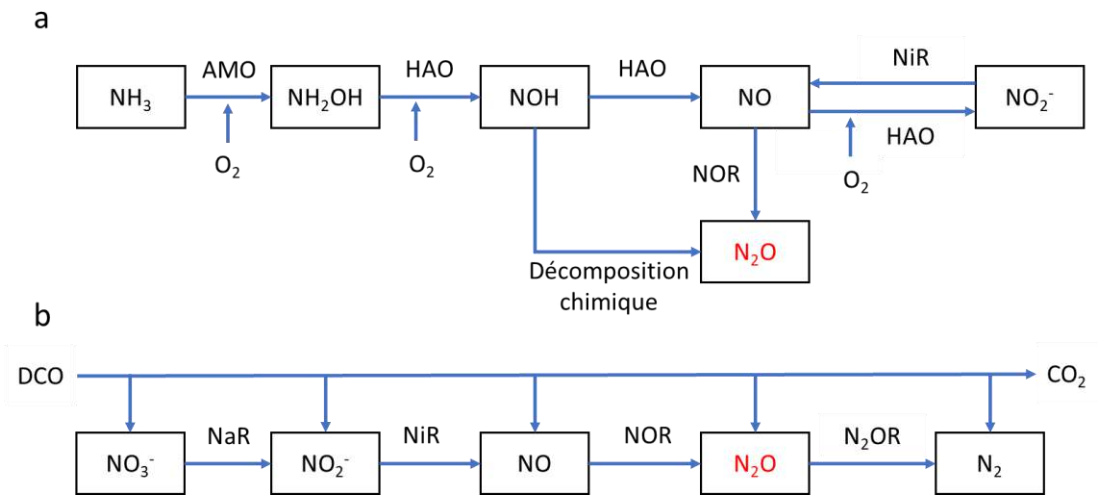


Figure 2.1 Principes de la production/consommation du N_2O lors de la nitrification (a) et la dénitrification (b).

Comme la nitrification, le N_2O peut être formé par la réduction du NO lors de la dénitrification hétérotrophe (voir Figure 2.1b). Cependant, contrairement aux bactéries nitritantes, à cause de la présence du protoxyde d'azote réductase (N_2OR) dans les bactéries hétérotrophes dénitrifiantes, le N_2O formé peut être réduit en N_2. Pour cette raison, la dénitrification est la seule façon qui permet d'éliminer le N_2O issu de la nitrification (Guo et Vanrolleghem, 2014). En fonction des conditions de traitement, la vitesse de production et d'élimination du N_2O peut varier. Les niveaux d'oxygène dissous et de nitrite en entrée de la zone de dénitrification doivent être limités, puisque ces deux composants favorisent la production du N_2O. L'apport de la source de carbone suffisante pour l'enlèvement des nitrates est une des mesures d'opération qui permettent d'accélérer l'élimination du N_2O lors de la dénitrification (Kampschreur *et al.*, 2009; Bollon *et al.*, 2016a).

- **Déphosphatation biologique**

De son côté, le phosphore est un nutriment nécessaire pour la croissance des micro-organismes. Pour les procédés conventionnels de boue activée, environ 1-2 mgP/L de phosphore contenu

dans l'eau usée peut être assimilé par la biomasse présente dans les procédés (Water Environment Federation, 2012c). Pour augmenter le taux d'enlèvement du phosphore, des procédés biologiques visant à renforcer l'élimination du phosphore ont été développés (enhanced biological phosphorus removal process, EBPR). Ces procédés réalisent l'enlèvement du phosphore en profitant des caractéristiques des bactéries PAOs (phosphorus accumulating organisms) (Wentzel *et al.*, 2008). En général, deux bioréacteurs sont nécessaires pour réaliser la déphosphatation biologique. Le premier bioréacteur est un réacteur anaérobie (absence d'oxygène et de nitrate). Sous ces conditions, les PAOs peuvent synthétiser les poly-β-hydroxyalcanoates (PHAs), un produit de réserve, en utilisant les acides gras volatiles ou substrats facilement biodégradables. Lors de la synthèse des PHAs, les polyphosphates présents dans la biomasse sont hydrolysés afin de libérer l'énergie pour la synthèse, ce qui cause un relargage de phosphate de la biomasse vers le milieu externe. Ensuite, les PAOs et la liqueur mixte sont envoyés dans un réacteur aérobie (ou anoxie) où les PHAs précédemment synthétisés et les substrats biodégradables sont oxydés par les PAOs pour leur croissance et la régénération de polyphosphates. Les phosphates présents dans le milieu sont donc absorbés par les PAOs pour former les polyphosphates. La quantité des phosphates absorbés est plus importante que celle larguée dans le réacteur anaérobie. Les phosphates absorbés par PAOs (sous la forme de polyphosphate) sont enlevés avec les boues biologiques. Tel que présenté précédemment, la condition anaérobie est nécessaire pour réaliser l'EBPR. L'oxygène dissous et le nitrate en entrée dans le réacteur anaérobie doivent donc être limités. D'ailleurs, pour maintenir l'efficacité de la déphosphatation, le temps de séjour hydraulique dans les réacteurs d'EBPR et l'âge de boue doivent également être bien contrôlés (Wentzel *et al.*, 2008). Avec ces exigences, cette technique n'est pas facilement applicable dans le cas de certains procédés. Par exemple, bien qu'il existe certaines études qui arrivent à réaliser l'EBPR par biofiltration à l'échelle pilote, les coûts d'installation demandés sont élevés, ce qui empêche donc l'application au niveau industriel (Water Environment Federation, 2010a). En plus de la voie biologique, tel que mentionné précédemment, l'enlèvement du phosphore peut aussi être réalisé par la voie physico-chimique, soit en décantation primaire ou en traitement tertiaire (détaillé à la section 2.1.3.2).

Les principes de fonctionnement de la biofiltration et de la clarification tertiaire sont présentés en détails dans la section 2.1.4 et la section 2.1.5, respectivement.

2.1.3. Principes de la décantation et du fonctionnement des décanteurs lamellaires physico-chimique

2.1.3.1. Principes de la décantation

En général, un décanteur primaire conventionnel est un bassin rectangulaire ou circulaire (Water Environment Federation, 2012b) constitué de quatre parties : injection de l'eau usée, évacuation de l'eau décantée, accumulation et récupération des boues décantées et enlèvement des matières flottables. Au cours du passage de l'eau usée, les particules chutent vers le fond du décanteur. Les particules qui possèdent des vitesses de chute suffisamment élevées peuvent atteindre le plancher situé au fond du décanteur. Le plancher est souvent légèrement incliné pour faciliter le transport des particules décantées vers le point où elles sont enlevées par un système de raclage au fond (Metcalf & Eddy, 2014). Les particules qui chutent plus lentement sont quant à elles entrainées sous l'effet de l'advection de l'eau et sortent avec l'effluent. Les matières flottables qui s'accumulent à la surface de l'eau sont enlevées par les racleurs installés au-dessus de l'eau.

- **Performance d'un décanteur**

La performance d'un décanteur est généralement exprimée par le taux d'enlèvement des MES (Water Environment Federation, 2005b) :

Eq 2.5

$$E_{MES} = \left(1 - \left(\frac{MeS_{out}}{MeS_{in}}\right)\right) * 100\%$$

où
E_{MES} est le taux d'enlèvement des MES (%)
MES_{out} est la concentration de MES en sortie de décanteur (mg/L)
MES_{in} est la concentration de MES en entrée de décanteur (mg/L)

La performance maximale de décantation ($E_{MES,max}$) est atteinte quand la concentration en MES en sortie est égale à celle des MES non-décantables en entrée (MES_{non}) (Water Environment Federation, 2005b). Les MES non-décantables sont les particules restantes dans un échantillon après une certaine période de sédimentation, et qui sont donc considérées comme étant peu probables de décanter sur des systèmes à taille réelle (Peric *et al.*, 2008). L'APHA (American Public Health Association) propose une méthode standard (2540 F) qui fixe le temps de sédimentation à 60 minutes (APHA *et al.*, 1998). Cette méthode exige aussi le volume d'échantillon (≥ 1 L) et la taille de colonne de décantation (diamètre ≥ 9 cm et hauteur ≥ 20 cm). La performance d'un décanteur primaire peut aussi être exprimée par le taux d'enlèvement de la DCO ou de la DBO en remplaçant les concentrations en MES dans l'équation Eq 2.5.

- **Taux de débordement**

Selon les études de Hazen (1904) et Camp (1936), le taux de débordement (surface overflow rate, SOR) est identifié comme le facteur le plus important pour la conception et l'opération des décanteurs (Water Environment Federation, 2005b). Le taux de débordement est calculé en divisant le débit d'affluent (Q_{In}) par la surface de décantation (A_D). Selon la théorie du décanteur idéal illustrée par Camp (1953) (voir Figure 2.2), l'écoulement de l'eau dans un décanteur idéal est toujours purement horizontal, tandis que les particules chutent verticalement. Lorsqu'une particule atteint le plancher du décanteur, elle est considérée être décantée. Pour un temps de séjour hydraulique t_D, il est possible de trouver une vitesse v_0 qui représente la vitesse minimale pour les particules qui peuvent être décantées à partir de la position la plus haute (H_D, hauteur de décanteur). C'est-à-dire, les particules qui possèdent des vitesses de chute supérieures ou égales à v_0 peuvent être décantées dans le décanteur idéal, tandis que pour les particules qui ont des vitesses inférieures à v_0, leur taux d'enlèvement diminue en fonction de leur vitesse de chute.

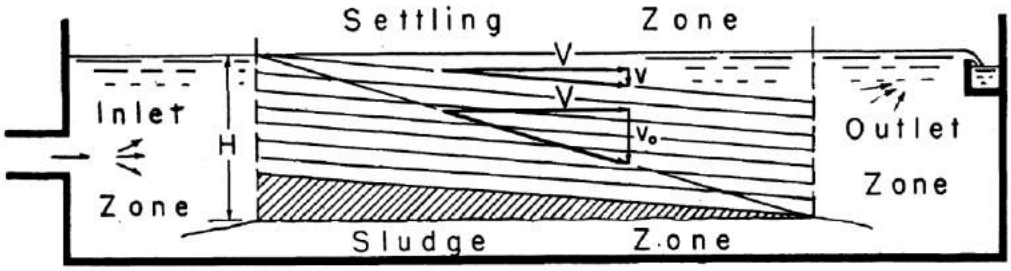


Figure 2.2 Décanteur idéal illustré par Camp (1953).

La v_0 peut être calculée par l'équation suivante :

Eq 2.6

$$v_0 = {}^{H_D}/_{t_D}$$

où
v_0 est la vitesse minimale de chute pour la décantation (m/j)
H_D est la hauteur du décanteur (m)
t_D est le temps de séjour hydraulique dans le décanteur (j)

La vitesse v_0 peut aussi être exprimée par le taux de débordement en transférant l'équation Eq 2.7 de la manière suivante (Water Environment Federation, 2005b) :

Eq 2.7

$$v_0 = {}^{H_D}/_{t_D} = {}^{H_D}/_{(V_D/Q_{In})} = {}^{Q_{In}}/_{A_D}$$

où
V_D est le volume du décanteur (m)
A_D est la surface du décanteur (m²)
Q_{In} est le débit de l'affluent (m/j)

En connaissant le taux de débordement, le taux d'enlèvement des MES d'un décanteur peut être

estimée par l'équation Eq 2.8 (Tebbutt et Christoulas, 1975; Water Environment Federation, 2005b):

Eq 2.8
$$E_{MES} = E_{MES,max}\left(1 - e^{-\frac{\lambda}{SOR}}\right)$$

où
$E_{MES,max}$ est le taux d'enlèvement maximal pour MES (%)
SOR est le taux de débordement du décanteur (m/j)
λ est la constante de décantation (m/j)

Pour un décanteur qui a déjà été construit, la valeur de λ et la concentration en MES non-décantable peuvent être estimées par régression statistique à partir des concentrations en MES en entrée mesurées et des taux d'enlèvement observés en pratique (Water Environment Federation, 2005b). Pour la conception d'un nouveau décanteur, en fixant la valeur de λ et la fraction de MES non-décantables en entrée par les mesures expérimentales, la surface de décanteur peut être décidée en fonction du débit d'affluent prévu et du taux d'enlèvement souhaité (Water Environment Federation, 2005b).

Il est à noter que le décanteur idéal considéré par Camp (1936) et Hazen (1904) est un décanteur avec une très grande surface de décantation et une hauteur très faible. Cependant, en réalité, un décanteur doit avoir une hauteur suffisante pour les équipements de stockage et d'enlèvement des boues et pour éviter la remise en suspension des particules décantées (Water Environment Federation, 2012b).

- **Vitesse de chute des particules**

Pour bien estimer la surface du décanteur nécessaire et s'assurer d'atteindre la performance de traitement visée, il est important de connaitre les caractéristiques de décantation des particules de l'affluent. Le comportement des particules lors de la décantation dépend de leur concentration et de leur tendance plus ou moins forte de cohésion entre elles (Torfs *et al.*, 2016). En général, il existe quatre régimes de sédimentation dans le domaine du traitement des eaux usées (voir Figure 2.3) : le régime discret (discrete particle settling), le régime floculant (flocculent settling), le régime freiné (hindered settling) et le régime en compression (compression settling).

Le régime discret (Type I) apparaît lorsque la concentration en particules dans une zone du décanteur est faible, comme, par exemple, à une concentration en MES inférieure à 200 mg/L. Dans ce régime, il n'y a pas d'effets d'interactions entre particules. Dans ce cas-ci, chaque particule chute de manière indépendante (Metcalf & Eddy, 2014).

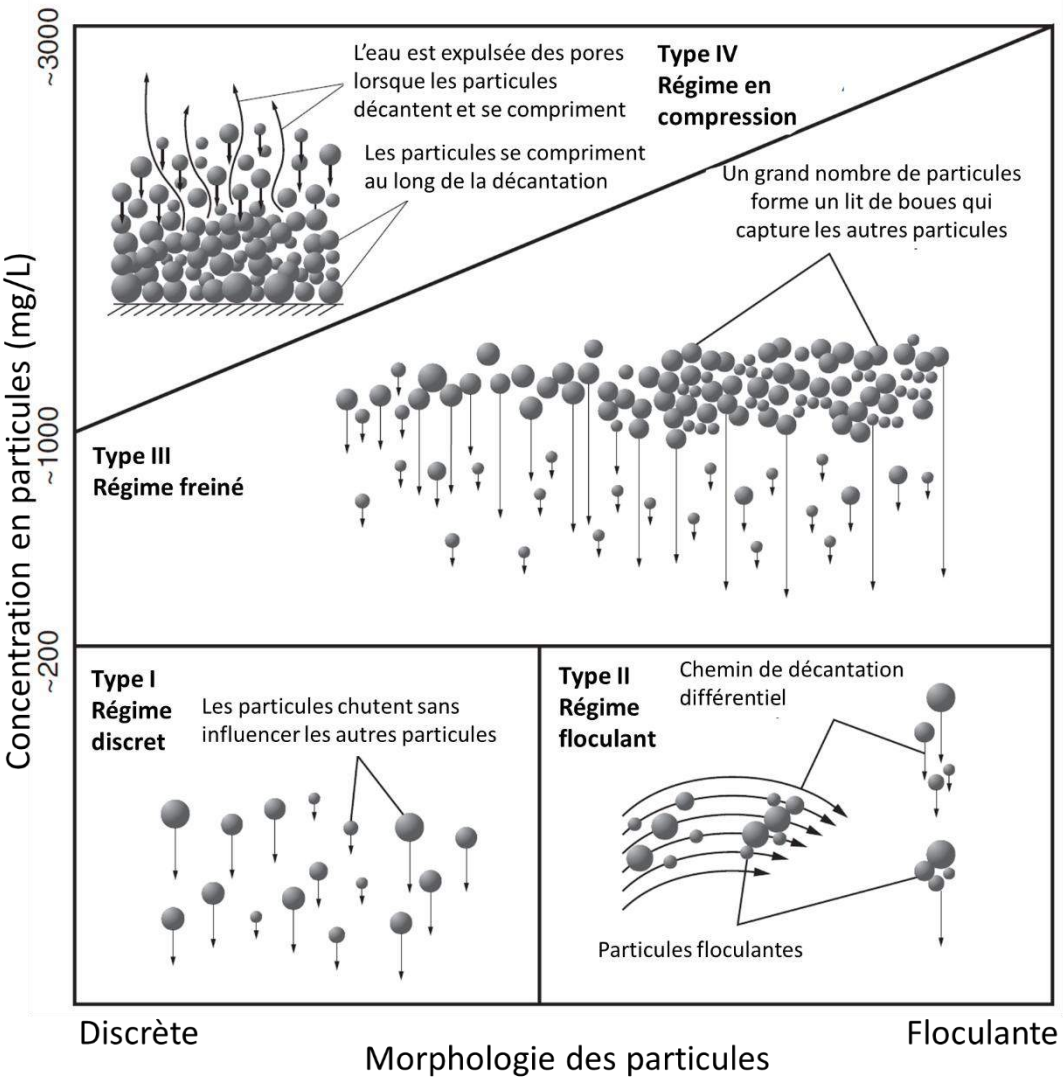


Figure 2.3 Relation entre les régimes de sédimentation, la concentration et la cohésion des particules (figure modifiée de Crittenden et al. (2012)).

Le régime floculant (Type II) a lieu également dans la zone du décanteur où la concentration en particules est relativement faible, mais suffisante pour que les particules commencent à interagir. La concentration en MES entre 600 et 1200 mg/L est la gamme typique où le régime floculant peut être observé dans un décanteur (Water Environment Federation, 2017). En utilisant les coagulants et les floculants qui renforcent les effets d'interactions inter-particules (voir les détails dans la section 2.1.3.2), ce régime peut également apparaître pour une concentration en particules plus faible que cette gamme. Dans le régime floculant, la probabilité de collision entre les particules pendant la décantation est élevée, ce qui conduit à la formation des particules floculées (flocs). Cette procédure augmente la masse et la taille des particules et donc accélère leur vitesse de chute.

Le régime freiné (Type III) apparaît quand la concentration en particules est supérieure à quelques centaines de mg/L. Dans ce régime, la vitesse de décantation des particules est ralentie par les forces d'interactions importantes. Par conséquent, les particules dans ce régime ont

tendance à toutes chuter à la même vitesse et forment un lit de boues (sludge blanket en anglais) qui peut capturer d'autres particules présentes dans son trajet de sédimentation (Crittenden *et al.*, 2012).

Enfin, le régime en compression (Type IV) se produit quand la concentration en particules est élevée (plusieurs grammes par litre). Dans ce régime, les particules dans le lit de boues s'enfoncent graduellement en expulsant l'eau entre les particules. Cette évacuation de l'eau est causée par le poids de particules qui s'accumulent au fur et à mesure sur le lit de boues. La structure du lit devient donc plus compacte que celle du régime freiné (Metcalf & Eddy, 2014).

Le régime discret et le régime floculant sont les régimes principaux observés dans les décanteurs primaires (Matko *et al.*, 1996). La décantation sous régime discret se trouve dans les zones supérieures des décanteurs où la concentration en MES est relativement faible. Sous conditions idéales où les particules sont parfaitement sphériques et le mode d'écoulement de l'eau dans le décanteur est laminaire, la vitesse de décantation discrète peut être estimée par l'équation de Stokes (Metcalf & Eddy, 2014):

Eq 2.9

$$v_s = \frac{(\rho_p - p_{eau}) d_p^2 g}{18 \mu_{eau}}$$

où
v_s est la vitesse de décantation discrète de la particule (m/s)
ρ_p et ρ_{eau} sont les masses volumiques de la particule et de l'eau (g/m^3)
g est l'accélération gravitationnelle (m/s^2)
μ_{eau} est la viscosité de l'eau (g/m/s)
d_p est le diamètre de la particule (m)

En réalité, les conditions hydrauliques dans un décanteur réel sont plus compliquées et rarement complètement laminaires. La présence de turbulence et d'écoulements en régime de transition influence la vitesse de chute discrète. De plus, la taille et la masse volumique des particules ne sont pas uniformes et couvrent une large gamme. Leurs distributions peuvent varier d'une station d'épuration à une autre et en fonction des conditions météorologiques (temps sec et temps de pluie) (Water Environment Federation, 2005a).

Le régime floculant peut être présent dans les zones inférieures des décanteurs primaires où la concentration en MES est relativement élevée (Matko *et al.*, 1996). L'utilisation de réactifs chimiques (coagulants ou polymères) peut aussi faire apparaitre ce régime. Sous l'effet de la floculation, les caractéristiques (masse volumique, forme et taille) des particules varient au cours de la décantation. La vitesse de chute des particules de ce régime est donc difficile à estimer par les équations de style Stokes (Davis et Cornwell, 2012).

Pour connaître la distribution des vitesses de chute de particules de l'affluent primaire, le protocole de mesure ViCAs (Vitesse de Chute en Assainissement) a été développé par Chebbo

et Gromaire (2009). Cette mesure est réalisée en décantant un échantillon dans une colonne sous condition statique. Au début de l'expérience, l'échantillon est considéré homogène. Une coupelle installée au fond de la colonne récupère les particules décantées. Celle-ci est récupérée et remplacée par une nouvelle coupelle vide à des intervalles de temps prédéterminés. Les masses des particules récupérées dans les coupelles sont mesurées afin de tracer une courbe de la masse de particule décantée accumulée en fonction du temps. Après avoir réalisé un traitement des données, qui transforme cette courbe à celle illustrant la distribution cumulative de la vitesse de chute (Torfs et al., 2016), les particules dans l'échantillon peuvent donc être fractionnées selon leurs vitesses de chute. La Figure 2.4 montre un exemple des résultats de mesures ViCAs obtenus sur des échantillons collectés en entrée de traitement primaire d'une station d'épuration (Bachis *et al.*, 2015). Tel que montré à cette figure, les auteurs utilisent les courbes de ViCAs pour diviser les MES en cinq classes de vitesse de chute (classes 1-5). Pour chaque classe considérée, la courbe de l'échantillon à forte charge en MES (300 mg/L) se trouve en-dessous de celle de l'échantillon à faible charge (70 mg/L). Cette observation signifie que par rapport aux particules présentes dans l'échantillon de 70 mg/L, les particules dans l'échantillon à forte charge décantent plus rapidement.

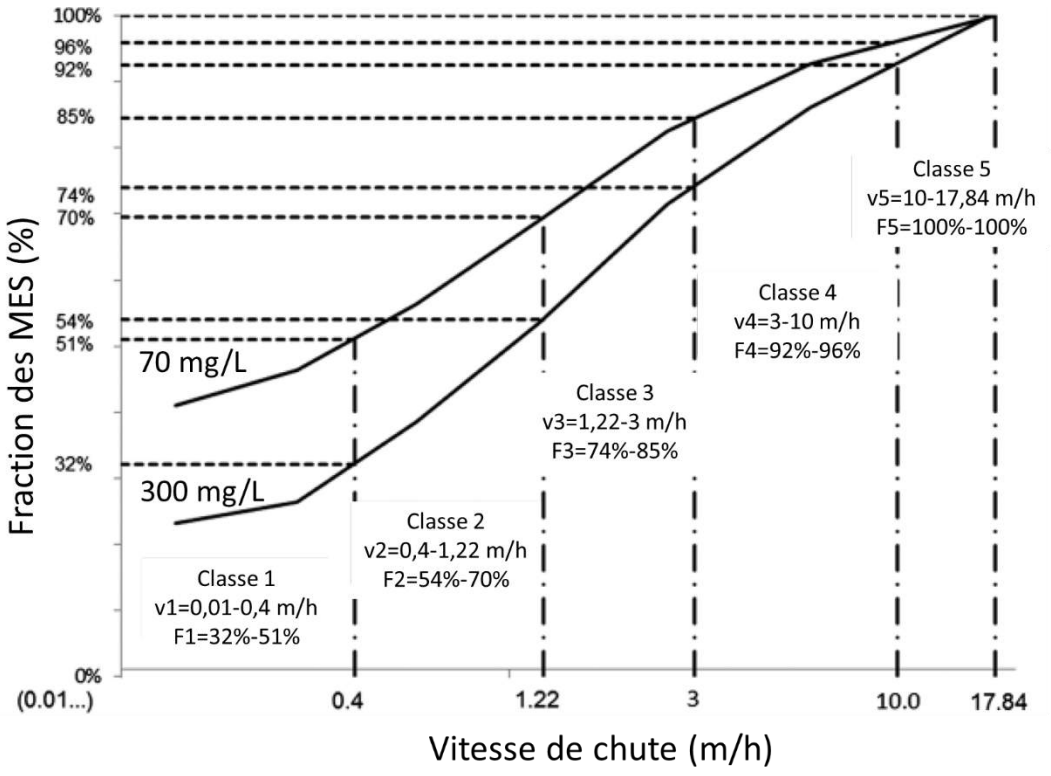


Figure 2.4 Distribution des particules dans les eaux en entrée du traitement primaire d'une station d'épuration (70 mg/L et 300 mg/L) en fonction de leurs vitesses de chute obtenue par test ViCAs (v1-v5 : vitesse de chute ; F1-F5 : fraction des MES) (figure traduite de Bachis et al. (2015)).

Les informations obtenues par test ViCAs peuvent servir à optimiser des procédés de traitement primaire ou à développer des modèles de décanteur (Bachis *et al.*, 2015; Torfs *et al.*, 2016). La

conception des décanteurs primaires peut également bénéficier de la mesure de ViCAs. Par exemple, en fixant l'efficacité de décantation, la vitesse de chute minimale correspondante peut être estimée à partir de la mesure de ViCAs, qui permet donc d'aider à déterminer la surface de décantation ou le temps de séjour hydraulique pour le traitement primaire.

- **Influences hydrauliques sur la performance du décanteur**

Tel que mentionné précédemment, en réalité, les conditions hydrauliques présentes dans un décanteur sont plus complexes que le cas d'étude théorique proposé par Camp (1953), ce qui peut influencer la performance de décantation. Pour obtenir une performance optimale, un écoulement piston est préférable, car celui-ci permet aux particules de sédimenter avec moins d'impacts issus de l'écoulement (effet d'advection, remise en suspensions des particules, etc.). Cependant, des courants de recirculation et des zones stagnantes existent toujours dans un décanteur. Les courants de recirculation peuvent augmenter l'intensité de la turbulence dans certains endroits du décanteur, ce qui réduit non seulement la probabilité que les particules atteignent le fond du décanteur, mais cause également des problèmes de remise en suspension pour les particules qui s'y trouvent déjà. Ces courants peuvent en plus causer des problèmes de court-circuitage d'une partie du volume du décanteur (Tamayol *et al.*, 2008). Les zones stagnantes sont les zones où le liquide ne se déplace pas ou se déplace très lentement. La présence de zones stagnantes diminue le volume effectif du décanteur, ce qui influence donc l'efficacité de décantation.

2.1.3.2. Principes du fonctionnement des décanteurs lamellaires physico-chimiques

Bien qu'il existe des options pour améliorer la performance d'un décanteur conventionnel en réduisant les influences hydrauliques comme, par exemple, l'installation de chicanes (barrières qui changeant l'écoulement du fluide) et l'optimisation de la position d'alimentation (López *et al.*, 2008; Razmi *et al.*, 2009), le taux d'enlèvement de ce type de décanteur est limité par la fraction non-décantable des particules en entrée de procédé. Le rapport volume/surface du bassin est aussi un facteur limitant l'efficacité de d'un décanteur conventionnel. Par rapport à la construction d'un décanteur avec très grande surface (qui est moins pratique), tel que mentionné précédemment, l'application des méthodes d'optimisation comme la décantation lamellaire et la décantation physico-chimique sont les options les plus faisables pour augmenter l'efficacité du traitement primaire. Les décanteurs lamellaires physico-chimiques prennent les avantages de ces deux méthodes d'optimisation.

- **Décantation lamellaire**

Tel que présenté précédemment, pour un décanteur idéal avec une surface A_D, la vitesse minimale de chute v_0 peut être estimée en divisant le débit d'affluent Q_{In} par la surface (voir Eq 2.6). Si ce décanteur idéal est divisé horizontalement en deux parties identiques par une plaque (voir Figure 2.5), pour le même débit Q_{In}, la vitesse minimale de chute (v_0') pour chaque partie est égale à la moitié de v_0 (voir Eq 2.10), ce qui permet donc d'enlever plus de particules (Camp, 1953).

Eq 2.10 $$v_0' = {Q_{In}}/{2A_D} = {v_0}/{2}$$

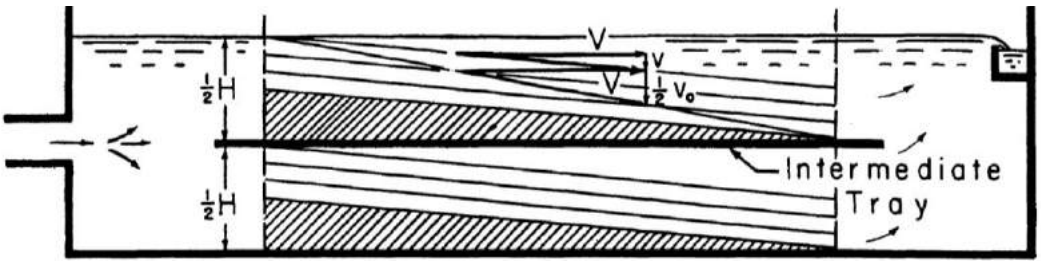


Figure 2.5 Décanteur idéal divisé en deux par une plaque (Camp, 1953).

Le procédé de décantation lamellaire est basé sur ce principe d'optimisation. Cependant, pour faciliter la collecte des boues décantées, notamment sur les plateaux supérieurs, les plaques purement horizontales sont remplacées par des plaques (ou tuyaux) inclinées, appelées lamelles, afin que les boues décantées sur celles-ci puissent glisser facilement vers le bas. La surface totale projetée de la zone lamellaire dépend du nombre de lamelles installées, de leur surface individuelle et de leur angle d'inclinaison (voir Eq 2.11) (Water Environment Federation, 2005a) :

Eq 2.11 $$A_{tp} = n \times a \times b \times \cos\theta$$

où
A_{tp} est la surface totale projetée par les lamelles (m²)
n est le nombre de lamelles (-)
a est la longueur d'une lamelle (m)
b est la largeur d'une lamelle (m)
θ est l'angle horizontal des lamelles (°)

La vitesse lamellaire v_l (m/j) peut être calculée à partir de débit d'affluent (Q_{In}) et de la surface totale de projection de la zone lamellaire (voir Eq 2.12) (Water Environment Federation, 2005a).

Eq 2.12

$$v_l = \frac{Q_{In}}{A_{tp}}$$

Un angle de lamelle moins important permet d'obtenir plus de surface de décantation. Cependant, lorsque l'angle d'inclinaison est trop faible, les particules décantées sont difficiles à collecter. Par conséquent, un arrêt périodique d'alimentation est nécessaire pour éliminer les boues accumulées sur les lamelles (Ross *et al.*, 1999). L'angle d'inclinaison typique se situe entre 45° et 60° par rapport à la surface de l'eau (Water Environment Federation, 2012b). L'espacement typique entre les lamelles est entre 40 et 120 mm (Water Environment Federation, 2005a). De manière similaire à l'angle d'inclinaison des lamelles, la diminution de l'espacement entre les lamelles peut également augmenter la surface de décantation, mais, en même temps, conduire à une augmentation de la remise en suspension des particules décantées (Dudley *et al.*, 1994). Fischerström (1955) propose que les conditions hydrauliques dans la zone lamellaire respectent un nombre de Reynolds inférieur à 2000 et un nombre de Froude supérieur à 10^{-5} pour réduire la turbulence et stabiliser la vitesse d'écoulement de l'eau entre les lamelles. Il propose aussi que le temps de séjour hydraulique dans la zone lamellaire soit maintenu entre trois et cinq minutes pour permettre d'obtenir de bonnes performances de décantation des particules.

Différentes configurations entre flux d'eau et flux de particules décantées peuvent être utilisées (voir Figure 2.6). Parmi celles-ci, la configuration contre-courant est la configuration la plus utilisée, parce qu'elle est la moins coûteuse à installer et à contrôler (Dudley *et al.*, 1994). Dans un décanteur lamellaire en configuration contre-courant, l'eau usée est alimentée en bas de la zone lamellaire et elle se déplace vers le haut dans les canaux formés par les lamelles. En parallèle, les particules contenues dans l'eau chutent jusqu'à la surface des lamelles et glissent vers la zone en-dessous des lamelles où les boues sont récoltées (Water Environment Federation, 2005a).

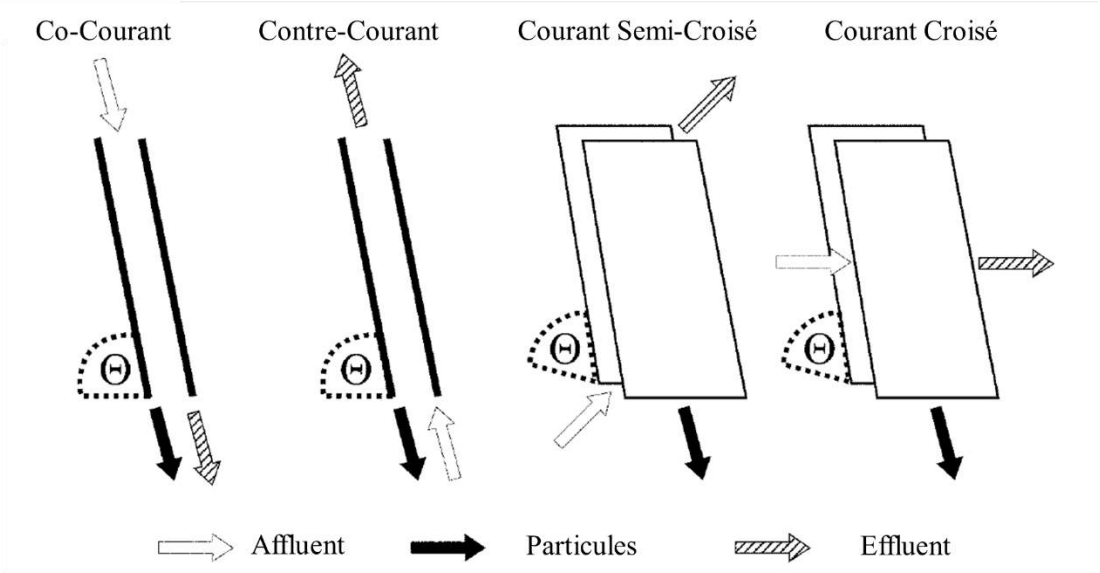


Figure 2.6 Différentes configurations entre flux d'eau et flux des particules pour la décantation lamellaire. (figure traduite de Water Environment Federation (2005a)).

- **Décantation physico-chimique**

La décantation physico-chimique vise à améliorer la performance de décantation en utilisant des réactifs qui peuvent interagir avec les particules par effets chimiques et physiques. C'est la méthode la plus simple à appliquer pour améliorer de manière importante la performance des décanteurs primaires conventionnels (Water Environment Federation, 2005a). Avec la décantation physico-chimique, le taux d'enlèvement des MES et de la DCO (ou la DBO) peut augmenter jusqu'à 90% (Water Environment Federation, 2012b). De plus, certaines formes de la pollution phosphorée peuvent aussi être éliminées lors du traitement par décantation physico-chimique, dépendant du produit chimique utilisé. En général, le traitement par décantation physico-chimique est réalisé en deux étapes successives : la coagulation et la floculation.

- **Coagulation**

La coagulation vise à déstabiliser les particules colloïdales et à favoriser les contacts entre les particules (Water Environment Federation, 2005c). En effet, la charge de surface des matières colloïdales présentes dans l'eau usée est généralement négative (Bratby, 2016). Ces particules sont donc encerclées principalement par des ions cationiques selon la théorie de la double couche. Dans ce cas, lorsque deux particules colloïdales s'approchent, la force de répulsion électrostatique entre elles est plus forte que celles d'attraction (forces de London-van der Waals), ce qui empêche l'attachement entre elles. Les particules colloïdales possèdent d'ailleurs de faibles vitesses de chute à cause de leurs petites tailles (0,001-1 µm) (Tzoupanos et Zouboulis, 2008). L'efficacité de coagulation est influencée par le type de coagulant choisi, la dose de coagulants appliquée et le pH (Water Environment Federation, 2005c).

Les coagulants couramment utilisés sont les sels métalliques (fer et aluminium) et les polymères. Les polymères cationiques et les cations des sels métalliques peuvent être adsorbés sur les colloïdes grâce à l'attraction électrostatique, et ainsi neutraliser leurs charges de surface. Cette neutralisation permet d'atténuer la force de répulsion entre les colloïdes, ce qui favorise l'attachement entre les particules. Les particules colloïdales sont donc déstabilisées (déstabilisation par le mécanisme de neutralisation).

L'utilisation des coagulants métalliques peut consommer des ions d'hydroxyde à cause des réactions d'hydrolyse des sels métalliques, ce qui conduit à la diminution de l'alcalinité et influence le pH (voir Eq 2.13 et 2.14).

Eq 2.13 $$Me^{x+} + xH_2O \rightarrow Me(OH)_x + xH^+$$

Eq 2.14 $$xH^+ + xHCO_3^- \rightarrow xH_2CO_3$$

En plus de l'influence sur le pH, pendant l'hydrolyse, les coagulants métalliques ont aussi tendance à polymériser et de former des polymères polynucléaires. Lorsque ces polymères

s'attachent sur plusieurs particules, un pont s'étendant entre les particules adjacentes est formé, ce qui favorise la déstabilisation (déstabilisation par le mécanisme de pont) des colloïdes et augmente la vitesse de chute des particules. Cette déstabilisation peut aussi être réalisée par les polymères (chargés ou non) (Bratby, 2016).

- **Floculation**

Suite à la coagulation, la floculation vise à accélérer la croissance des flocs et à améliorer leur forme et structure avec l'aide de polymères. Il existe deux mécanismes de floculation, le premier est la floculation péri-cinétique (perikinetic flocculation ou microflocculation) causée par le mouvement brownien des particules à petite taille (0,001-1µm). Pendant le mouvement brownien, les particules déstabilisées par les coagulants ont la possibilité d'entrer en collision et de rester attachées. C'est un processus naturel et rapide. La taille des flocs formés est limitée par l'intensité du mouvement brownien (Bratby, 2016).

Le deuxième mécanisme est la floculation ortho-cinétique (orthokinetic flocculation ou macroflocculation) provoquée par le mouvement du liquide (Tzoupanos et Zouboulis, 2008) qui est le mécanisme dominant dans la décantation physico-chimique. En effet, lorsque l'eau passe des chicanes ou des équipements de mélange mécanique, son mouvement sera changé et des gradients de vitesse seront créés. En conséquence, la vitesse relative entre les particules va être modifiée, ce qui augmente les probabilités de contact entre les particules et favorise ainsi l'augmentation de la taille de particules formées (Bratby, 2016).

Sous conditions de concentration et pH appropriées, les coagulants métalliques injectés peuvent former des précipités d'hydroxyde au cours de la floculation. Ces précipités, qui ont une grande taille, peuvent décanter comme les autres particules décantables. Pendant la décantation, les précipités peuvent emprisonner des particules présentes dans l'eau et donc augmenter l'enlèvement des particules. Ce mécanisme d'enlèvement des particules est appelé le mécanisme de balayage (sweep mechanism ou sweep flocculation), qui est couramment utilisé par les procédés de décantation dans le domaine de traitement des eaux usées (Metcalf & Eddy, 2014; Bratby, 2016)

Le processus de floculation est influencé par la nature des produits chimiques utilisés, les conditions hydrauliques dans le réacteur de floculation et la durée de floculation (Bratby, 2016). Les équipements de floculation sont souvent dimensionnés en fonction du gradient de vitesse moyen du réacteur (G) et du temps de séjour (t). L'équation Eq 2.15 est l'équation conventionnelle pour calculer G (Water Environment Federation, 2005a) :

Eq 2.15

$$G = \sqrt{\frac{1000P}{\mu \times V}} = \sqrt{\frac{1000P}{\mu \times Q_{In} \times t_F}}$$

où
G est le gradient de vitesse moyen du réacteur (1/s)
P est la puissance d'entrée de l'agitateur (kW)
V est le volume de réacteur de floculation (m^3)
μ est la viscosité dynamique de l'eau ($N.s/m^2$)
t_F est le temps de séjour hydraulique dans le réacteur de floculation (s)

En connaissant le gradient de vitesse, la cinétique de coagulation-floculation peut être généralement approximée par la cinétique d'agrégation et de rupture des flocs dans le réacteur (Argaman et Kaufman, 1970). Pour un réacteur discontinu (batch), cette cinétique peut être exprimée par l'équation Eq 2.16 (Filho *et al.*, 2000; Bratby, 2016).

Eq 2.16
$$\frac{dn_p}{dt} = -K_a n_P G + K_b n_0 G^2$$

où
n_p est la concentration en nombre de particules non-agrégées au temps t (L^{-1})
n_0 est la concentration en nombre de particules non-agrégées au temps 0 (L^{-1})
K_a et K_b sont les constantes d'agrégation et de rupture respectivement (-)

- **Jar-test**

En considérant que la coagulation et la floculation sont influencées par beaucoup de variables, les conditions optimales pour la décantation physico-chimique doivent être identifiées afin d'obtenir de bonnes performances de traitement en injectant un minimum de réactifs. La mesure « jar test » est la méthode expérimentale la plus utilisée pour étudier de manière pratique la décantation physico-chimique. Cette méthode permet de comparer différents types de produits chimiques, de déterminer le dosage optimal des coagulants et d'aider à étudier la cinétique de coagulation-floculation. Au début de la mesure, des béchers installés en parallèle dans un banc de jar test sont remplis par l'eau usée à décanter (normalement 1L) (voir Figure 2.7). Différentes concentrations en coagulants (ou différents types de coagulants à tester) sont injectées dans les béchers. Le pH peut être ajusté après l'injection des coagulants si nécessaire selon l'objectif de l'essai. Pour bien mélanger les produits chimiques avec l'eau à décanter et favoriser la coagulation, une agitation à vitesse rapide (environ 100 rpm) a été d'abord effectuée pour 15-30 secondes. Ensuite, des polymères sont injectés dans les béchers pour réaliser la floculation. La vitesse d'agitation est ralentie après l'injection des polymères pour faire la maturation des flocs (environ 10 minutes, 30-50 rpm) (Bratby, 2016). Après la floculation, l'agitation est arrêtée et l'eau est laissée à décanter pour un certain temps prédéterminé (environ 15-30 minutes). Le taux d'enlèvement de différents polluants dans chaque bécher peut être calculé en mesurant la concentration restée en suspension après la décantation, et en la comparant à la mesure équivalente réalisée sur l'eau brute initiale.

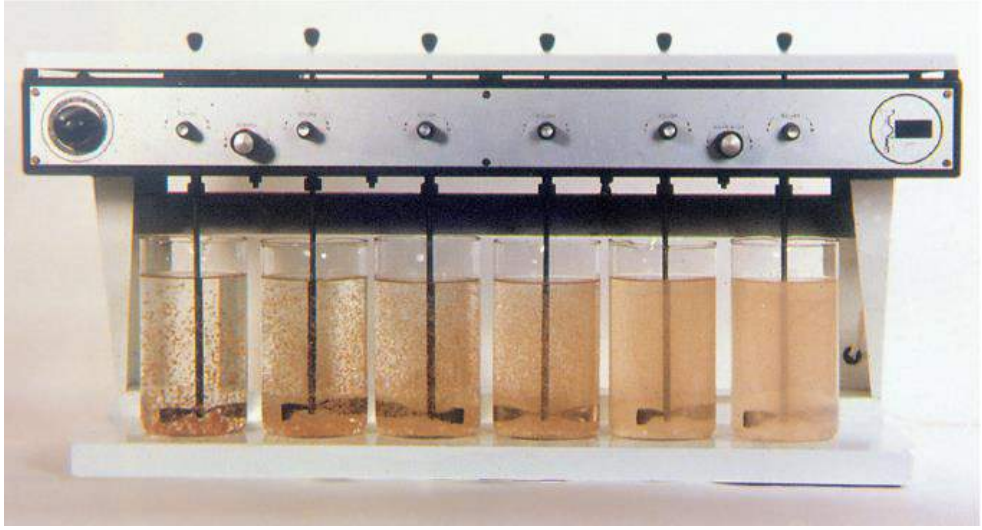


Figure 2.7 Exemple d'un banc de jar-test avec des béchers installés (Degrémont, 2005).

- **Utilisation des lests**

Lors de la floculation, des lests, qui alourdissent les flocs formés et augmentent ainsi leur vitesse de chute, peuvent être ajoutés afin d'améliorer la performance de traitement des particules. Les lests couramment utilisés sont les microsables et les boues recirculées de bassin de décantation (Water Environment Federation, 2005a).

- **Déphosphatation chimique**

En plus de renforcer l'enlèvement des particules par la coagulation et la floculation, l'injection des sels métalliques peut aussi précipiter certaines formes du phosphore dans l'eau usée et donc réaliser un traitement de déphosphatation. Parmi les différentes espèces de phosphore, l'orthophosphate et le phosphore particulaire peuvent être enlevés principalement par la précipitation chimique, tandis que le taux d'enlèvement des autres types de phosphore comme par exemple le phosphore organique soluble, est limité. En général, il existe trois processus simultanés d'enlèvement des phosphates par les sels métalliques (Maurer et Boller, 1999; Bratby, 2018). Le premier est la précipitation chimique. Les orthophosphates peuvent réagir avec les hydroxydes de métaux et former des complexes métal-phosphate-hydroxo qui sont peu solubles dans l'eau. Le deuxième processus est l'adsorption des phosphates solubles à la surface des précipités d'hydroxydes de métaux. Le troisième processus est la déstabilisation des particules colloïdales contenant du phosphore par la coagulation (Bratby, 2018). D'un point de vue de la conception et d'opération, la dose de sels métalliques nécessaire pour un enlèvement de phosphore souhaité peut être estimée par l'équation suivante (Water Environment Federation, 2005c) :

Eq 2.17

$$D_{Me} = \left(\frac{Me}{P}\right)\left(\frac{MW_{Me}}{MW_p}\right)\left(C_{p,in} - C_{p,res}\right)$$

où

D_{Me} est le dosage demandé (mg/L)
Me/P est le ratio moléculaire demandé entre ions métalliques (Me) et phosphore (P) pour atteindre la concentration en phosphore en sortie. (-)
MW_{Me}/MW_P est le ratio de la masse molaire entre ions métalliques et phosphore (-)
$C_{P,in}$ est la concentration en phosphore en entrée (mgP/L)
$C_{P,res}$ est la concentration en phosphore résiduel (mgP/L)

Différentes formules empiriques pour les produits précipités (métal-phosphate-hydroxo) ont été proposées. Luedecke *et al.* (1989) proposent une forme générale $Me_rPO_4(OH)_{3r-3}$ pour les sels ferriques et les sels d'aluminium, tandis que Gates *et al.* (1990) proposent une formule de $Me_rH_2PO_4(OH)_{3r-1}$ avec une valeur de r égale à 0.8 pour l'aluminium et 1.6 pour le fer. Les valeurs r proposées par Gates *et al.* (1990) sont déduites à partir des résultats expérimentaux avec ratios molaires Me/P initiaux entre 1-5 (mole/mole).

Le jar test peut être également appliqué pour étudier et identifier les conditions optimales pour réaliser la précipitation du phosphore. Par exemple, Szabó *et al.* (2008) ont effectué des jar tests et suivi la cinétique d'enlèvement des phosphores pour identifier les variables de conception et d'opération impactant la déphosphatation chimique. Selon les résultats obtenus, sous différentes conditions de pH, l'efficacité de traitement des sels d'aluminium est similaire à celle des sels de fer. Le pH optimal obtenu pour ces deux sels est entre 5 et 7 (voir Figure 2.8a).

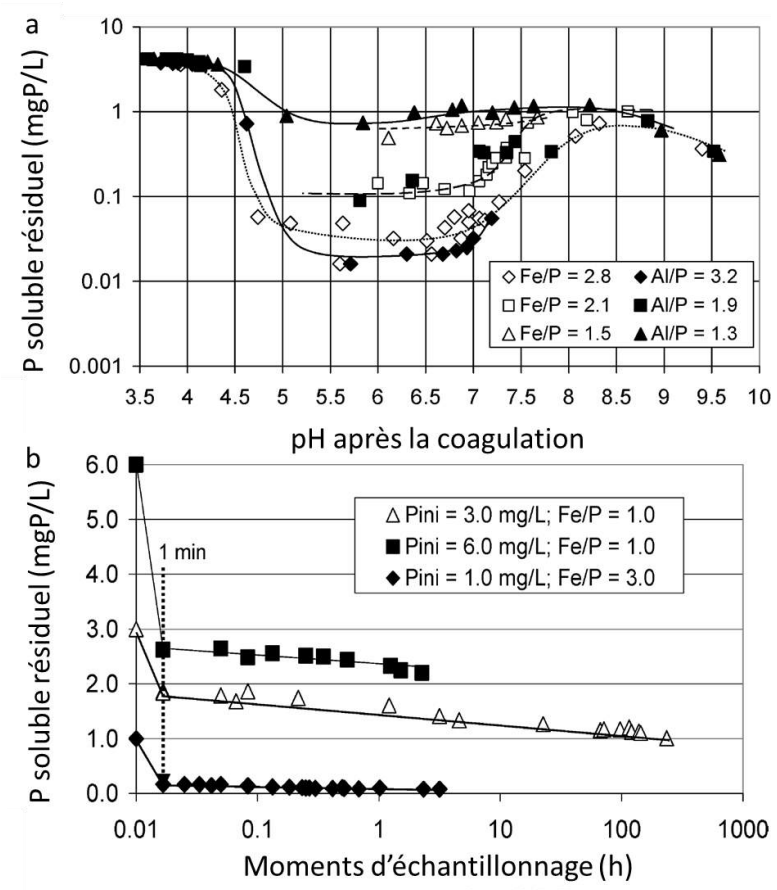


Figure 2.8 a) Influence de pH sur l'enlèvement de phosphore. b) Cinétiques d'enlèvement de phosphore. (Szabó et al., 2008)

Les auteurs indiquent aussi que la cinétique d'élimination du phosphore peut être séparée par deux périodes selon la vitesse d'élimination (voir Figure 2.8b). La première période est une période d'élimination rapide durant environ 1 minute après l'ajout des sels métalliques. La plupart du phosphore est éliminé à cette étape. Après cette période, la vitesse d'élimination commence à ralentir et une seconde période d'élimination lente apparait. Par rapport à la période rapide, cette période peut durer plusieurs heures jusqu'à quelques jours. D'un point de vue opération, ce résultat signifie que le taux d'enlèvement peut être amélioré en augmentant le temps de séjour sans ajout de sels supplémentaires. Les auteurs observent également que l'augmentation de l'intensité de mélange a aussi un effet positif sur l'efficacité d'enlèvement.

- **Influences de la décantation physico-chimique sur la boue produite**

A cause de l'ajout des réactifs, la quantité et le volume de boue produite par la décantation physico-chimique augmente par rapport à la décantation conventionnelle. La masse de boue produite pendant la décantation physico-chimique peut être estimée par l'équation 2.18 (Ødegaard et Karlsson, 1994):

Eq 2.18

$$Boue_p = MeS_{in} - MeS_{out} + K_{prec} \times D$$

où
$Boue_p$ est la masse de boue produite par volume d'eau traité (mg/L)
MES_{in} est la matière en suspension dans l'affluent (mg/L)
MES_{out} est la matière en suspension dans l'effluent (mg/L)
K_{prec} est le coefficient empirique de production de boue (4-5 pour sel de fer et 6-7 pour sel d'aluminium)(-)
D est la dose métallique injectée (mg/L)

- **Configuration d'un décanteur lamellaire physico-chimique**

En général, un décanteur lamellaire physico-chimique, est composé de trois réacteurs successifs. L'eau prétraitée entre d'abord dans le réacteur de coagulation où les coagulants sont injectés pour déstabiliser les particules colloïdales et former les flocs. Ensuite, les flocs formés et l'eau entrent dans le réacteur de floculation qui est divisée en deux chambres. La première chambre est la chambre d'injection où les polymères (et les lests) aidant la floculation sont injectés. La deuxième chambre est la chambre de maturation où la vitesse de mélange est maintenue à une condition optimale pour favoriser la floculation. Finalement, l'eau traitée par les réactifs chimiques est envoyée dans le bassin de décantation (le troisième réacteur) qui est équipé de lamelles pour réaliser la décantation lamellaire.

La Figure 2.9 illustre la procédure de décantation lamellaire physico-chimique effectuée par un décanteur de type Actiflo® (Veolia) qui utilise le microsable comme lest. Afin de récupérer et réutiliser autant que possible les microsables contenus dans les boues décantées, une étape de séparation microsable-boue est réalisée. Tel que montré à la figure, les boues en bas du bassin de décantation, qui contiennent des microsables, sont recirculées vers un hydrocyclone qui est installé au-dessus de réacteur de floculation. Dans l'hydrocyclone, les microsables sont séparés des boues sous la force centrifuge et ensuite réinjectés dans le réacteur de floculation. Après la séparation, les boues sont évacuées de l'hydrocyclone et envoyées vers les procédés de traitement des boues.

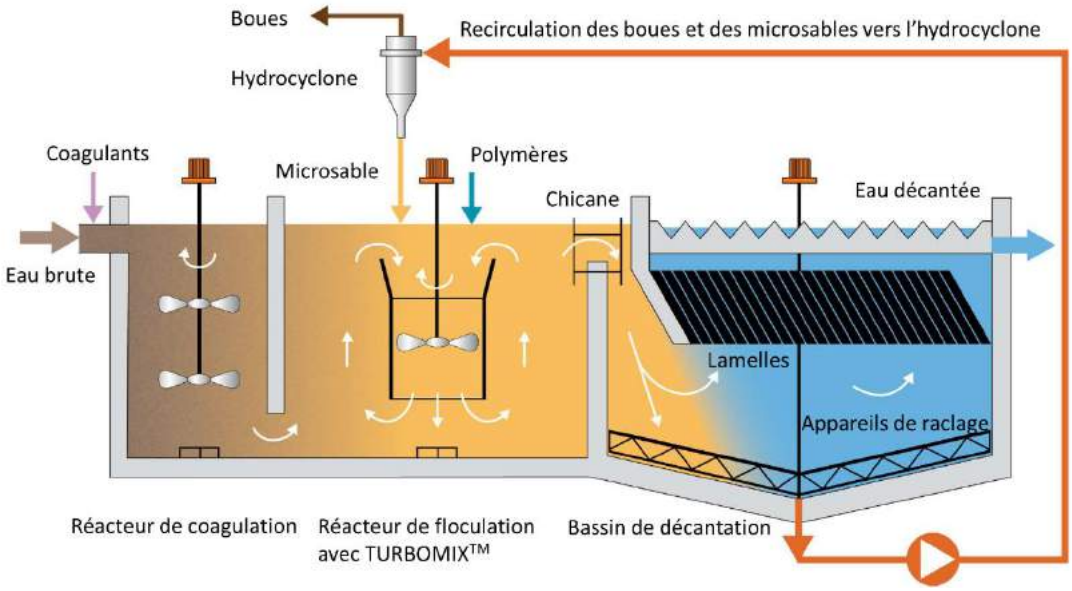


Figure 2.9 Vue générale d'un décanteur Actiflo® (traduite et modifiée de Treguer et al. (2012)).

2.1.4. Principes de fonctionnement de la biofiltration

La biofiltration est un procédé à culture fixée qui peut être utilisé pour le traitement biologique secondaire et tertiaire (Stensel et Reiber, 1983). Les réacteurs utilisés pour la biofiltration sont appelés biofiltres (BAF, Biological Aerated Filter ou Biological Active Filter). Ils permettent de réaliser le traitement biologique et un certain niveau de séparation liquide-solide dans un seul réacteur. Un biofiltre est constitué d'une colonne remplie d'un matériau filtrant (média) de type granulaire, colonisé par des biomasses épuratrices (Rocher *et al.*, 2008). En traversant le matériau filtrant, les matières organiques et les nutriments dans les eaux usées sont dégradés par les biomasses épuratrices et les particules sont retenues par le matériau. Normalement, la hauteur de matériau filtrant (lit de média) utilisée dans les biofiltres est entre 2 et 4 m (Stensel *et al.*, 1988; Pujol *et al.*, 1992). Les médias, ayant habituellement un diamètre entre 2 et 5 mm (Metcalf & Eddy, 2003), peuvent être fabriqués à l'aide de différents matériaux (argile, pouzzolane, polystyrène, etc.). Selon leur masse volumique, les médias peuvent être classés en tant que média « lourd », qui possède une masse volumique supérieure à celle de l'eau, et en tant que média flottant, qui est moins dense que l'eau. Cette catégorisation du média influence le choix de la configuration de l'alimentation en eau. Un biofiltre rempli par un média « lourd » peut être alimenté à flux descendant ou ascendant, tandis qu'un biofiltre utilisant un média flottant ne peut fonctionner qu'à flux ascendant (Mendoza-Espinosa et Stephenson, 1999). Actuellement, la majorité des biofiltres sont alimentés par flux ascendant qui permet les biofiltres de traiter un débit d'affluent plus élevé (Rocher *et al.*, 2008). En général, considérant la présence du média, le temps de séjour hydraulique réel pour la biofiltration est d'environ 30 minutes (Bernier, 2014). Les biofiltres sont aérés pendant le traitement secondaire et la nitrification. De manière similaire à l'alimentation en eau, l'aération dans les biofiltres peut être réalisée de manière ascendante ou, moins fréquent, descendante (par aspiration). Les diffuseurs d'air peuvent aussi être installés au milieu de l'étage de média, ce qui permet de créer une zone anoxie en bas de biofiltre et donc de réaliser la dénitrification. La dénitrification et la nitrification peuvent être aussi effectuées par biofiltres indépendants en appliquant différentes configurations de traitement. Selon la position dans l'ordre du traitement des biofiltres dénitrifiants par rapport aux biofiltres nitrifiants, les procédés d'enlèvement d'azote par biofiltration peuvent être divisés en trois groupes : dénitrification amont (DAM), dénitrification aval (DAV) et dénitrification amont-aval (DAM-DAV) (Rocher *et al.*, 2008).

Les Figures 2.10a-c montrent les configurations de traitement de trois types de biofiltres commercialisés. Les biofiltres de type Biofor® (Degrémont) (voir Figure 2.10a) utilisent un lit de média fabriqué en argile expansée (média dense). L'alimentation de l'eau à traiter et l'aération de ces biofiltres sont en flux ascendant. Comme les biofiltres de type Biofor®, le média utilisé par les biofiltres de type Biocarbone® (Veolia) (voir Figure 2.10b) est aussi un

média dense, qui est fabriqué en pouzzolane. Par contre, ces biofiltres sont alimentés à flux descendant, tandis que l'aération est réalisée de manière ascendante. Enfin, la Figure 2.10c montre un biofiltre de type Biostyr® (Veolia) qui utilise un média flottant fabriqué en polystyrène et fonctionne en flux ascendant d'eau et d'air. Tel que montrée à la figure, les diffuseurs d'air de traitement (« process air ») sont installés en moitié du lit de média afin de créer une zone anoxie pour la dénitrification. Il est à noter qu'en réalité, ces diffuseurs peuvent également être installés en-dessous du lit d'un biofiltre Biostyr® pour réaliser un traitement de carbone ou de nitrification par le biofiltre complet. Tel que mentionné précédemment, les biofiltres doivent être régulièrement lavés pour éviter l'encrassement excessif causé par la biomasse et les particules accumulées dans lit. Le lavage de ces trois types de biofiltres est réalisé par l'injection d'air surpressé (« air scour ») et d'eau de lavage (« backwash water »). Les débits d'air et d'eau de lavage appliqués sont en général plus élevés que ceux utilisés lors du traitement afin de renforcer le détachement de biofilm et des particules attachés sur le lit de média.

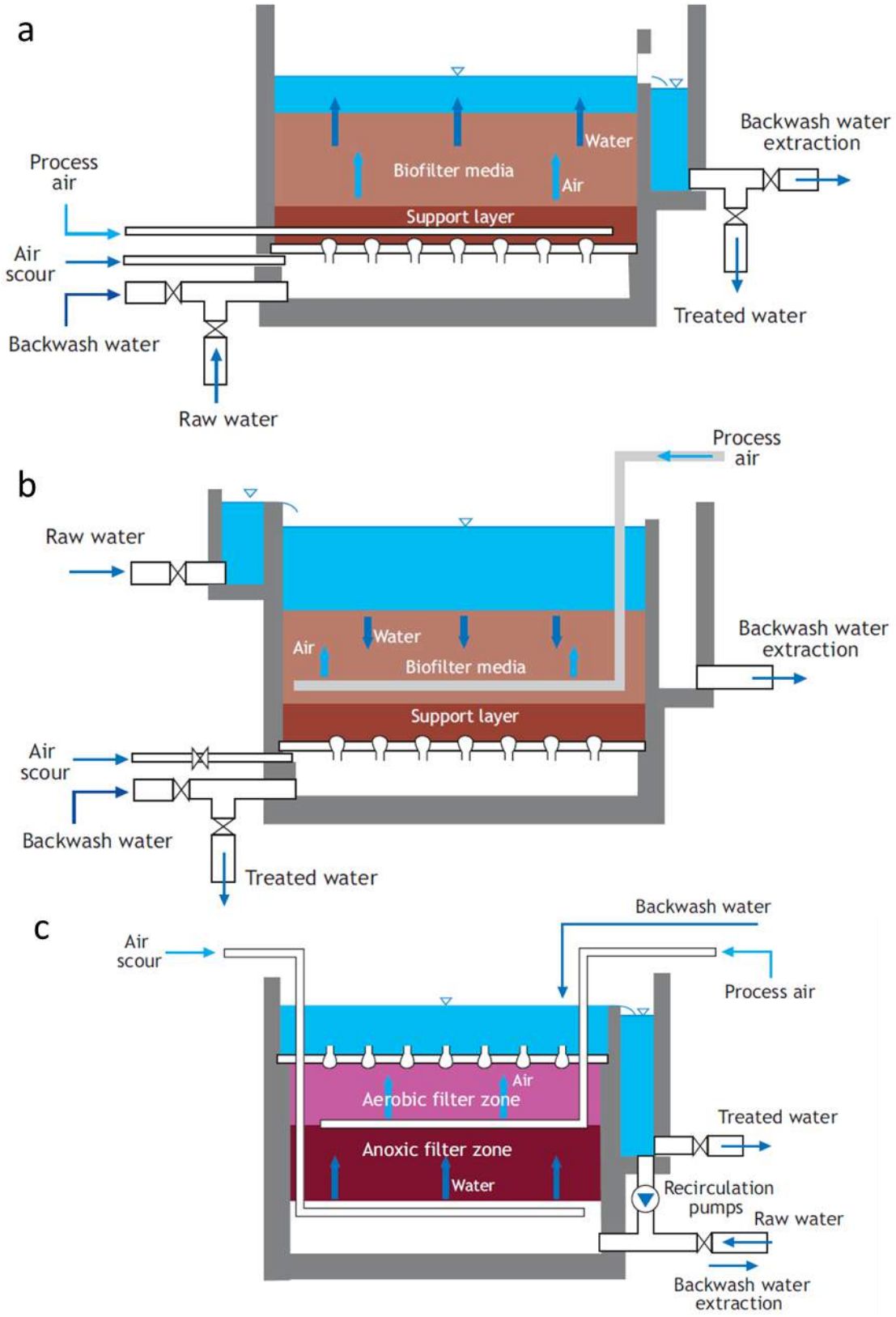


Figure 2.10 Configurations de traitement des biofiltres de type Biofor® (a), Biocarbone® (b) et Biostyr® (c) (Morgenroth, 2008a).

Le fonctionnement de biofiltres est principalement lié à la filtration des particules et l'activité biologique des biomasses épuratrices.

2.1.4.1. Filtration des particules

Les matériaux filtrants granulaires utilisés en biofiltration forment des milieux poreux. Lorsque l'eau traverse ces milieux, les particules de matières en suspension sont retenues par les matériaux sous l'effet de différents mécanismes de capture (Keir *et al.*, 2009). Ce type de filtration est appelé filtration granulaire. En général, la filtration granulaire se base principalement sur trois mécanismes dont la prévalence varie selon la taille des particules filtrées par rapport à la taille des pores des milieux (voir Figures 2.11a-c) : filtration par formation de gâteau, filtration par coincement et filtration en profondeur (McDowell-Boyer *et al.*, 1986).

La filtration par formation de gâteau (cake filtration) (Figure 2.11a) est présente principalement à la surface du lit de média. Les particules qui possèdent des tailles supérieures à celles des pores à la surface du lit ne peuvent pas y pénétrer et s'accrochent à sa surface (Metcalf & Eddy, 2014). Avec l'accumulation des particules, un gâteau est formé à la surface du lit. Le gâteau formé peut également participer à retenir des particules plus petites. Un gâteau peut aussi se former lorsque plusieurs petites particules passent dans un pore simultanément, notamment lors de périodes de débit ou de concentration en particules élevé en entrée (Holdich, 2002; Wakeman, 2007).

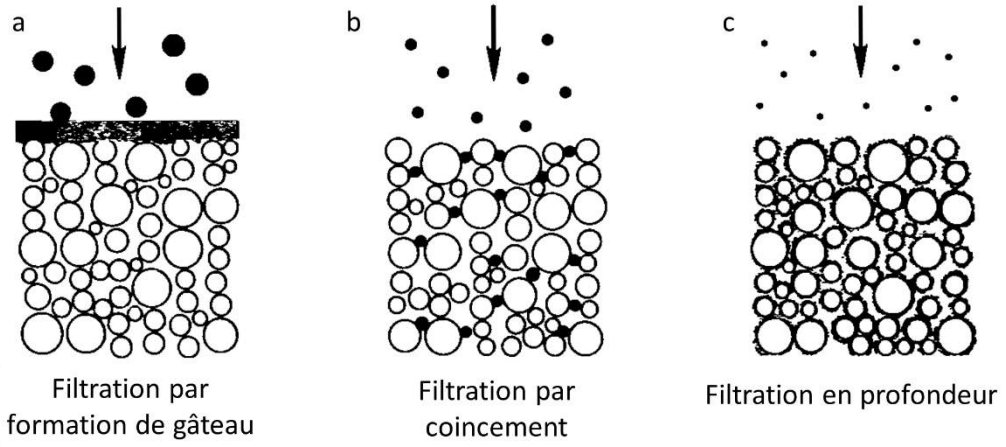


Figure 2.11 Trois mécanismes de filtration présents au cours de la filtration granulaire. a) Filtration par formation de gâteau. b) Filtration par coincement. c) Filtration en profondeur (McDowell-Boyer et al., 1986).

La filtration par coincement (straining filtration) (Figure 2.11b) se passe principalement près de la surface du lit de média, dans les premières couches. Les particules qui possèdent des tailles suffisamment petites pour entrer dans le lit sont coincées dans les pores plus petits à l'intérieur du lit (McDowell-Boyer *et al.*, 1986). De manière similaire à la filtration par formation de

gâteau, quand plusieurs petites particules traversent un pore en même temps, elles peuvent aussi y être coincées.

Contrairement à la filtration par formation de gâteau et la filtration par coincement qui retiennent mécaniquement les particules, la filtration en profondeur (depth filtration) (Figure 2.11c) consiste surtout en une interaction physico-chimique avec les grains de média. En effet, les particules très petites par rapport à celles du matériau filtrant peuvent entrer en contact avec le média, soit par collision directe, soit par différents mécanismes de transport (diffusion, sédimentation, action hydrodynamique, etc.) (Ives, 1970; Yao *et al.*, 1971). Après un contact, les particules peuvent s'attacher à la surface du média grâce à des interactions physico-chimiques (forces de Van der Waals, adsorption, liaison hydrogène, etc.) (Ives, 1970). Ce type de filtration se produit au sein du lit filtrant sur toute sa profondeur.

Par rapport aux deux autres types de filtration, la filtration en profondeur impacte moins l'écoulement de l'eau dans le lit filtrant et donc cause un effet de colmatage moindre (Ives, 1970; Keir *et al.*, 2009). Pour minimiser le colmatage causé par la filtration des particules, une séparation liquide-solide préalable à l'étape de biofiltration par tamisage ou par décantation lamellaire physico-chimique est suggérée (Water Environment Federation, 2010a).

2.1.4.2. Activité biologique

La formation et la croissance d'un biofilm sur le média et la conversion biologique des matières organiques et des nutriments sont les processus responsables du traitement biologique dans les biofiltres. La formation du biofilm permet aux bactéries d'obtenir des avantages compétitifs par rapport aux bactéries en suspension. Premièrement, il permet de protéger les bactéries en évitant qu'elles ne soient lessivées en cas de forts débits pendant le traitement, et donc de maintenir une quantité importante de biomasse dans les réacteurs (Wanner *et al.*, 2006). Deuxièmement, la structure physique du biofilm et la limitation de transfert des composants liquide-biofilm, comme, par exemple, la diffusion des substrats solubles, divisent le biofilm en différents environnements (oxygène, substrats, etc.) (biological « niches »). Ces derniers facilitent les croissances de micro-organismes qui sont moins compétitives dans un système de culture en suspension. De plus, les activités microbiologiques dans le biofilm peuvent modifier l'environnement interne en produisant des produits métaboliques ou changeant le pH afin de faire du biofilm un environnement plus propice à la croissance par rapport au liquide extérieur (Rittmann et McCarty, 2001; Wanner *et al.*, 2006).

Selon Lewandowski et Boltz (2011), la formation d'un biofilm consiste en plusieurs étapes successives (voir Figure 2.12), commençant par l'adsorption de différentes molécules présentes dans l'eau (protéines, polysaccharides, lipides, etc.) à la surface du média (étape 1). Ces molécules adsorbées forment une couche moléculaire (conditioning film) et modifient les

caractéristiques physico-chimiques de la surface du média, ce qui permet aux bactéries de s'y attacher (étape 2). Cet attachement est initialement réversible à cause de la faible adhésion entre la couche et les bactéries. Les fimbriaes et les flagellas peuvent favoriser la fixation des bactéries sur la couche (Donlan, 2002). En produisant des substances polymères extracellulaires (extracellular polymeric substances, EPS), qui sont principalement constituées par des polysaccharides et des protéines, les bactéries renforcent leur adhésion avec la couche (Lewandowski et Boltz, 2011). Dans ce cas-ci, l'attachement bactérien à la surface du média, qui est médiatisé par la couche moléculaire, devient irréversible (étape 3). Ensuite, les bactéries utilisent les nutriments présents dans la couche moléculaire et dans le liquide pour croitre et former la matrice du biofilm, principalement composée d'EPS. Celle-ci favorise ensuite elle-même la croissance bactérienne, la fixation de bactéries supplémentaires à la surface du média et les interactions bactériennes (par exemple l'échange d'informations génétiques) (Flemming et Wingender, 2010). Grâce à la matrice du biofilm, les bactéries attachées colonisent la surface du média et forment un biofilm mince (étape 4). L'épaisseur du biofilm augmente en fonction de la prolifération bactérienne et devient un biofilm mature (étape 5). Suite à la maturation, le biofilm peut se propager ou se disperser et finalement couvrir la surface entière du média (Lewandowski et Boltz, 2011) (étape 6).

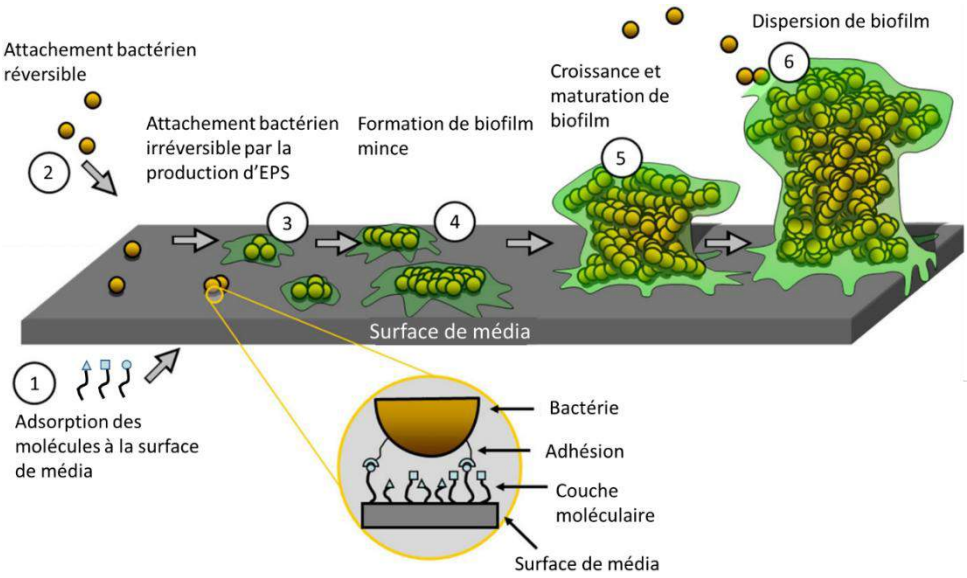


Figure 2.12 La formation de biofilm (modifiée de Sabaté Brescó et al. (2017)).

L'hétérogénéité structurale de biofilm a été observée par différentes techniques de microscopie comme la microscopie électrique à balayage (SEM) et la microscopie confocale à balayage laser (CLSM) (Zhang *et al.*, 2011). La Figure 2.13a montre la structure 3D d'un biofilm formé par la biomasse épuratrice cultivée au laboratoire (Li *et al.*, 2019). Cette structure est générée à partir d'images prises par CLSM. Tel que montré à la figure, la répartition du biofilm sur la surface de cultivation n'est pas uniforme. Il existe certains endroits qui ne sont pas couverts par le biofilm. De plus, l'épaisseur de biofilm est variable. En utilisant la microscopie à résonance

magnétique (MRM), Seymour *et al.* (2004) ont observé la structure intérieure des biofilm formés dans un bioréacteur capillaire. L'image de MRM obtenue par les auteurs montre qu'il existe des canaux et des creux à l'intérieur de biofilm (voir Figure 2.13b).

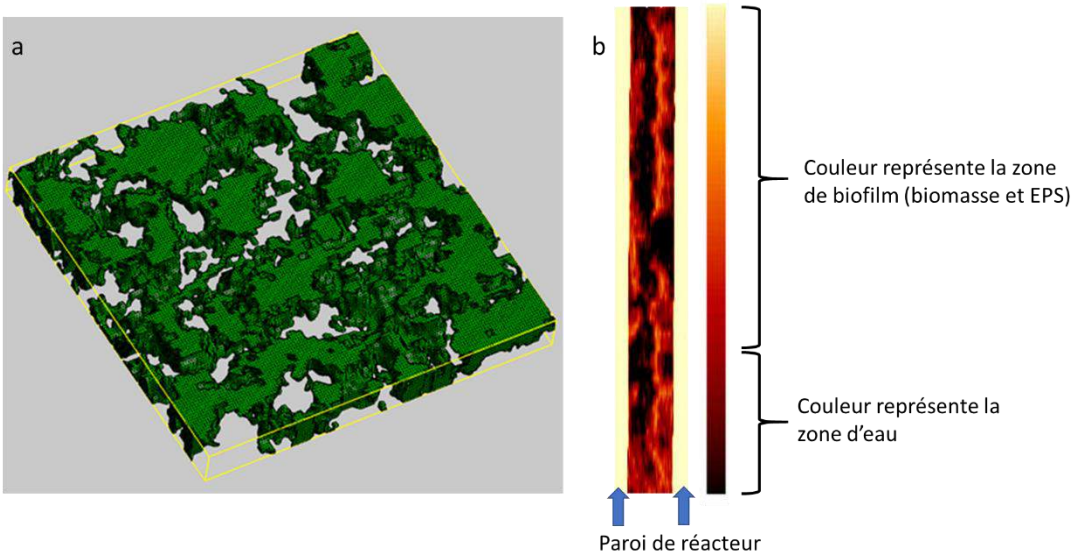


Figure 2.13 Structure 3D de biofilm générée par les images de CLSM (Li et al., 2019) (a) et structure à l'intérieur de biofilm obtenue par MRM (Seymour et al., 2004)(b).

Sous l'effet de la formation et de la croissance d'un biofilm, les matières organiques et les nutriments dans les eaux usées sont dégradées par les bactéries qui y sont accumulées. Bien que les principes de base de la conversion biologique (nitrification, dénitrification, etc.) se déroulant à l'intérieur du biofilm soient identiques à ceux des procédés à biomasse en suspension, certaines différences sont importantes.

Premièrement, pour un biofilm, seules les bactéries situées en surface peuvent avoir un accès direct à l'eau usée. Le transport de substrat dans le biofilm s'effectue principalement par diffusion moléculaire, mécanisme qui est généralement plus lent que la conversion biologique effectuée dans le biofilm (Morgenroth, 2008b). Par conséquent, des gradients de substrats y sont formés (Morgenroth, 2008b). Ces gradients apparaissent aussi entre la surface du biofilm et le liquide, à cause de la présence d'un film de liquide stagnant à proximité immédiate du biofilm. Pour les flocs bactériens dans les réacteurs de culture libre, il existe aussi des gradients de concentrations à l'intérieur des flocs. Cependant, la limitation de diffusion affecte principalement la conversion biologique dans les flocs à grande taille (diamètre > 300 µm). Pour les flocs à taille petite (diamètre autour de 80 µm), l'effet de cette limitation sur l'activité biologique est négligeable (Picioreanu *et al.*, 2016). La Figure 2.14 montre les gradients de substrats et de pH dans un biofilm nitrifiant cultivé dans un réacteur de tambour rotatif (rotating drum reactor) au laboratoire (Bishop *et al.*, 1995). La mesure de ces gradients a été réalisée par microélectrodes. Tel que montré à la figure, à cause de la nitrification, les concentrations en oxygène et en ammonium diminuent fortement dans la zone proche à la surface du biofilm

(distance de -100 à 0 µm). En revanche, pour la zone profonde du biofilm (distance de -200 à -100 µm), la capacité de nitrification est diminuée à cause de la limitation d'oxygène et d'ammonium. La figure montre aussi la production de nitrate et la diminution de pH dans le biofilm lors de la nitrification.

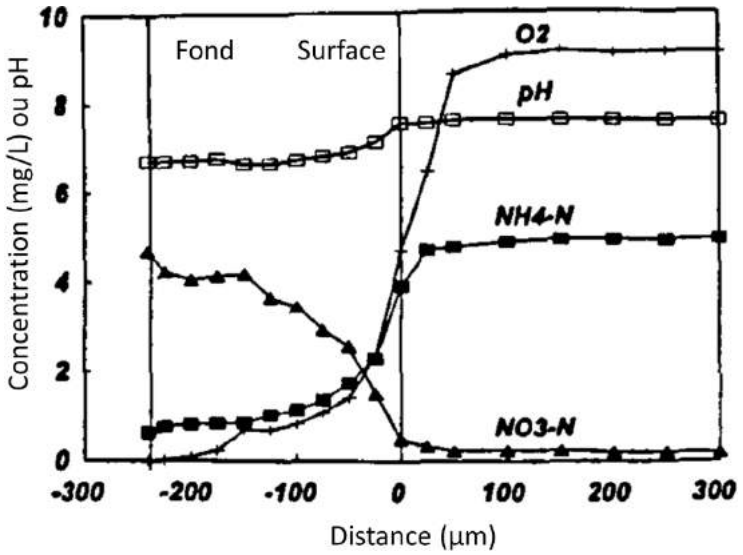


Figure 2.14 Gradients des substrats et du pH observés dans un biofilm nitrifiant cultivé dans un réacteur de tambour rotatif (figure traduite de Bishop et al. (1995)).

Deuxièmement, tel que mentionné précédemment sur les bénéfices du biofilm apportées aux bactéries, la formation de gradients de substrats dans le biofilm fournit différentes conditions de croissance pour les bactéries et crée une hétérogénéité de répartition de biomasse dans le biofilm. Par exemple, dans un biofiltre aéré, la dénitrification peut avoir lieu dans les couches de profondeur du biofilm, puisque la consommation d'oxygène par les bactéries se trouvant en surface est plus rapide que la cinétique de transfert, et qu'il existe donc une partie du biofilm se trouvant en conditions anoxies (Morgenroth, 2008b). A l'échelle macroscopique, la disponibilité des substrats influence aussi l'activité bactérienne sur la hauteur du biofiltre. Fdz-Polanco *et al.* (2000) ont étudié l'influence du ratio DCO/NH_4^+ dans l'affluent (en fixant NH_4^+ en entrée à 50 mgN/L) sur la répartition de l'activité biologique dans un pilote de biofiltration (2 m) par mesures de respirométrie. Les auteurs ont aussi suivi l'évolution de la DCO et de l'ammonium en fonction de la hauteur du pilote. Leurs résultats montrent que les premières 50 centimètres de média sont dominés principalement par la biomasse hétérotrophe. A cette hauteur, le taux d'enlèvement d'ammonium est très faible (autour de 10-20%), ce qui signifie une faible activité nitrifiante. Pour un ratio DCO/NH_4^+ entre 0,5 et 4 mgO_2/mgN, l'ammonium en entrée peut être presque tout dégradé par la biomasse autotrophe colonisée sur la hauteur entre 0,5-2,0 m. Les auteurs ont observé aussi que à cette gamme de ratio, l'activité nitrifiante dans les premiers 50 cm de média diminue en fonction de l'augmentation de la concentration en DCO en entrée à cause de la compétition en oxygène entre les bactéries hétérotrophes et

autotrophes. En revanche, une augmentation de l'activité nitrifiante à une hauteur de 2 m de média est observée quand le ratio augmente. Cette évolution d'activité est liée à l'augmentation de la disponibilité d'ammonium à cette hauteur. Lorsque le ratio DCO/NH_4^+ arrive à 8 mgO_2/mgN, il n'y a presque plus d'activité nitrifiante observée dans le pilote, ce qui indique que le pilote est dominé entièrement par la biomasse hétérotrophe. En plus du changement de l'activité nitrifiante, les auteurs ont aussi mentionné que l'évolution d'ammonium en fonction de la hauteur influence le ratio d'activité AOB/NOB dans le pilote, ce qui peut être expliqué par l'effet d'inhibition de l'ammoniac libre sur les NOB. Ces hétérogénéités biologiques spatiales ne peuvent pas être observées dans un réacteur de culture en suspension bien mélangé où la répartition de biomasse est assez homogène.

2.1.4.3. Facteurs influençant la performance de biofiltration

De manière pratique, l'opération des procédés de biofiltration se base sur la performance globale (entrée-sortie) des biofiltres, puisque la surveillance des conditions de traitement locales par l'installation de sondes à l'intérieur du lit de média est difficile et chère à l'échelle industrielle. Certains facteurs sont identifiés comme facteurs influents pour la performance globale de biofiltration.

- **Charge volumique**

La charge volumique (en kg-polluants/m^3/j) est un des paramètres de conception principaux du procédé de biofiltration. Elle est calculée en divisant la charge en entrée de biofiltration par le volume de lit de média. Ce paramètre varie en fonction du type de biofiltre appliqué, des exigences de traitement, des caractéristiques de l'eau à traiter et des procédés en amont (Water Environment Federation, 2010a). En général, une augmentation de la charge volumique appliquée au biofiltre entraine une production supplémentaire de biomasse sur le média, ce qui augmente la charge éliminée (Rocher *et al.*, 2008). Cependant, lorsque la charge dépasse la capacité maximale du biofiltre, le rendement de traitement commence à diminuer (Rüffer et Rosenwinkel, 1984). Cette production supplémentaire de biomasse entraine aussi une augmentation de l'épaisseur du biofilm, ce qui peut causer un colmatage du média.

Pour les biofiltres servant au traitement secondaire, les charges en DBO et en MES sont les facteurs à commander. Parmi ces deux facteurs, il est primordial de limiter le niveau de la charge en MES afin d'éviter le colmatage du média pendant la filtration (Rocher *et al.*, 2008).

Pour la nitrification tertiaire, la charge volumique en azote ammoniacal en entrée des biofiltres est le facteur principal à gérer. Pour ce type de traitement par biofiltration, une diminution prolongée de la charge appliquée au biofiltre peut réduire la quantité de biomasse nitrifiante dans le biofiltre, ce qui peut causer des problèmes de traitement ultérieurs (Tschui *et al.*, 1994).

En effet, une faible charge en azote ammoniacal pour les biofiltres nitrifiants peut être observée dans la période chaude, où la nitrification peut déjà avoir eu lieu en partie au cours du traitement secondaire. Cependant, lorsque la charge ré-augmente après la période estivale, le taux de traitement des biofiltres ne peut pas suivre immédiatement cette augmentation, à cause du manque temporaire de biomasse (Water Environment Federation, 2010a).

Rocher *et al.* (2011a) ont analysé l'effet de la charge en nitrate pour les biofiltres dénitrifiants de deux stations du SIAAP (Seine Centre et Seine Aval). Ils observent que pour des charges appliquées entre 4 et 5 kgN-NO_3/m^3/j, le taux d'enlèvement des nitrates peut être maintenu à environ 90%. Cependant, lorsque la charge est au-dessus de 3 kgN-NO_3/m^3/j, il est difficile de maintenir une faible concentration en nitrite (inférieure à 1 mgN-NO_2/L) dans les eaux dénitrifiées.

- **Rapport C/N**

Tel que mentionné précédemment, à cause de la compétition entre biomasses hétérotrophe et autotrophe, le rapport carbone/azote (C/N) peut influencer l'activité nitrifiante dans les biofiltres (Fdz-Polanco *et al.*, 2000). Rother (2005) a étudié l'influence du ratio DCO/N-NH_4^+ et DBO_5/N-NH_4^+ sur la vitesse de nitrification dans les biofiltres. Il observe que la vitesse de nitrification diminue lorsque le rapport C/N augmente. Rocher *et al.* (2008) rapportent qu'un rendement de nitrification supérieur à 90% peut être atteint à l'échelle industrielle lorsque le ratio $DCO_{soluble}$/N-NH_4^+ en sortie de traitement secondaire est d'environ 1,1 mgO_2/mgN.

Le rapport C/N est aussi important pour les biofiltres pré- et post-dénitrifiants. Rother et Cornel (2007) ont évalué différents rapports de DCO/N-NO_3 en entrée d'un biofiltre pré-dénitrifiant pilote. Ils observent que pour atteindre un taux de dénitrification supérieur à 80%, le rapport DCO_{totale}/N-NO_3^- et $DCO_{soluble}$/N-NO_3^- en entrée doit être supérieur à 15 et 9 mgO_2/mgN, respectivement. Rocher *et al.* (2011b) ont suivi le fonctionnement des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre sous différents dosages de méthanol, exprimés par le rapport DBO injectée sur N-NO_x appliqué (voir Figure 2.15). Les auteurs observent que la concentration en nitrate en sortie diminue d'environ 10 mgN/L à presque 0 mgN/L quand le rapport C/N passe de 0,5 à 3,5 mgO_2/mgN. Cependant, lorsqu'un rapport entre 2 et 2,5 est appliqué, une forte concentration en nitrite est observée (2-5 mgN/L) en sortie. Les auteurs trouvent que le dosage optimal pour le traitement en post-dénitrification est entre 3 et 3,2 mgO_2/mgN. A cette gamme de dosage, les nitrates en entrée sont presque tous dénitrifiés. De plus, les nitrites en sortie sont limités en dessous de 1 mgN/L.

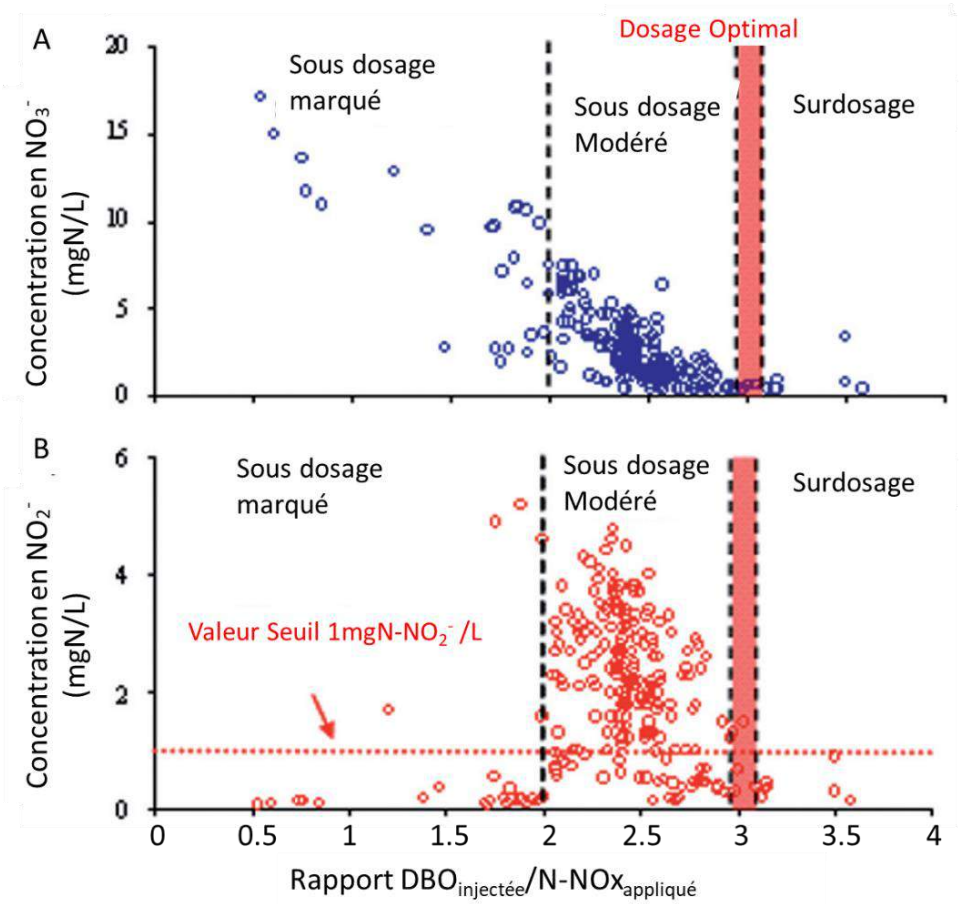


Figure 2.15 Evolution des concentrations en A) nitrate et B) nitrite dans l'eau dénitrifiée de Seine Centre en fonction du rapport DBO injectée/N-NOx appliqué. (figure adaptée de Rocher et al. (2011b))

- **Vitesse de filtration**

En plus de la charge volumique, la vitesse de filtration (charge hydraulique) est aussi un facteur qui doit être pris en compte pour la conception et l'opération de la biofiltration. Cette vitesse (en m/h) est calculée en divisant le débit d'eau en entrée de biofiltre par la surface de lit de média.

Une vitesse de filtration trop faible augmente le temps de séjours des particules dans le biofiltre et favorise l'adhésion et la fixation des particules sur le matériau filtrant, ce qui risque de causer une accumulation des particules à l'entrée du lit de média et conduit à un colmatage. Pour cette raison, la vitesse de filtration doit être maintenue au-dessus de 1,5 m/h (Vigne, 2007). L'augmentation de la vitesse de filtration diminue le temps de contact entre les biomasses et les substrats. Cependant, elle permet en contrepartie d'améliorer le transport des substrats entre le liquide et le biofilm en diminuant l'épaisseur du film liquide stagnante (Tschui *et al.*, 1994; Horn et Hempel, 1995). Husovitz *et al.* (1999) observent que pour une charge volumique constante, le taux d'enlèvement de l'ammonium augmente de 17% lorsque la vitesse de filtration augmente de 5,1 m/h à 15,8 m/h.

- **Aération**

En général, l'injection d'air dans les biofiltres aérés est contrôlée en fonction de la charge appliquée et de la qualité de traitement demandée en sortie (Vedry *et al.*, 1994). Pour le traitement secondaire, Rocher *et al.* (2008) observent qu'une aération entre 15 et 30 Nm^3 d'air/kg de DBO_5 est suffisante pour réaliser une élimination optimale de la matière organique. Pour la nitrification tertiaire, l'intensité d'aération demandée pour 1 kg $N\text{-}NH_4^+$ est entre 100 et 150 Nm^3 d'air (Deronzier *et al.*, 2011). A cause du temps de séjour court et de la charge en polluants élevée, la vitesse de consommation volumique d'oxygène (en $gO_2/m^3/h$) dans les biofiltres est en général plus élevée que celle dans les réacteurs à boue activée conventionnels (Metcalf & Eddy, 2014). Le débit d'air appliqué dans les biofiltres doit être assez fort, car ceci augmente la vitesse de transfert gaz-liquide d'oxygène (oxygen transfert rate, OTR, en gO_2/h) et donc satisfaire les besoins en oxygène. En plus du débit d'air, la présence du matériel filtrant prolonge le temps de séjour des bulles d'air dans le biofiltre et augmente donc la quantité d'oxygène transférée dans le liquide (Stensel *et al.*, 1988). Le média peut aussi disperser ou fusionner les bulles d'air, ce qui cause le changement de la taille des bulles et éventuellement impacte le transfert gaz-liquide (Fujie *et al.*, 1992). Enfin, les bulles d'air peuvent entrer en contact directement avec le biofilm, ce qui augmente aussi le transfert de la phase gazeuse (Lee et Stensel, 1986; Leung *et al.*, 2003). La vitesse de transfert gaz-liquide d'oxygène dans l'eau propre peut être estimée par l'équation Eq 2.19 (Stenstrom et Rosso, 2008). Le coefficient de transfert d'oxygène (k_La_{O2}, en 1/h) et la concentration en oxygène dissous à l'équilibre dans l'eau (C_{O2}^*, en g/m^3) varient en fonction de la température. Une augmentation de la température peut faire augmenter le coefficient de transfert, mais en même temps diminuer la concentration à l'équilibre dans l'eau.

Eq 2.19 $$OTR = k_L a_{O2} \times V_{eau} \times (C_{O2} - C_{O2}{}^*)$$

où
V_{eau} est le volume de l'eau (m^3)
C_{O2} est la concentration en oxygène dissous (g/m^3)

Gillot *et al.* (2005) ont appliqué la méthode de bilan gazeuse (off-gas method) pour étudier le transfert d'oxygène dans un pilote de biofiltre ascendant (média flottant, 4mm) alimentée avec de l'eau propre. Cette méthode consiste à désoxygéner les eaux dans le pilote à 0 mgO_2/L à l'aide de sulfite de sodium, puis à réaliser une réoxygénation (Amiel *et al.*, 2002). En mesurant les fractions molaires d'oxygène dans l'air en entrée et en sortie du pilot, l'efficacité de transfert d'oxygène (oxygen transfer efficiency, OTE), qui représente le rapport massique entre l'oxygène transférée et celle injectée, peut être calculée. A partir de cette efficacité, le coefficient de transfert d'oxygène (k_La_{O2}) dans le pilote est estimé. Les auteurs observent que l'efficacité standard de transfert d'oxygène (SOTE, oxygen transfer efficiency at standard

conditions : 20°C, 1 atm, OD initial à 0 gO_2/m^3) diminue quand la vitesse en air (vitesse surfacique, en $Nm^3/m^2/h$) utilisée augmente. Une tendance similaire a été aussi observée par Stenstrom *et al.* (2008) en eau usée. Le coefficient de transfert d'oxygène obtenu par Gillot *et al.* (2005) est entre 21,6 et 79,2 h^{-1} pour des vitesses en air entre 5 et 20 $Nm^3/m^2/h$. Contrairement à l'efficacité du transfert d'oxygène, le coefficient de transfert d'oxygène augmente lorsque la vitesse en air est augmentée (Gillot *et al.*, 2005; Maldonado *et al.*, 2008).

- **Taux de recirculation de l'eau nitrifiée**

Pour les stations utilisant une configuration de biofiltration avec pré-dénitrification, le taux de recirculation de l'eau nitrifiée influence le fonctionnement du biofiltre pré-dénitrifiant. Tel que mentionné précédemment, l'aération est généralement assez forte dans les biofiltres aérés, ce qui conduit à une concentration en oxygène dissous élevée en sortie des biofiltres nitrifiants. Dans ce cas-ci, une partie de biofilm dans les biofiltres dénitrifiants se trouve sous condition aérobie et consomme les matières organiques, ce qui réduit la DCO disponible pour la dénitrification et donc limite le taux d'enlèvement des nitrates (Water Environment Federation, 2010a). Pour compenser les contretemps créés par la présence d'oxygène dans l'eau recirculée et augmenter le taux de pré-dénitrification, un ajout d'une source de carbone exogène est recommandé (Niassi *et al.*, 1998; Rother et Cornel, 2007). En général, si la source de carbone exogène et la zone d'anoxie sont suffisantes, le taux de dénitrification augmente en fonction du taux de recirculation. Cependant, considérant que la présence d'oxygène devient plus forte lorsque le taux de recirculation est élevé, ainsi que les limites de vitesse de filtration dans le procédé, le ratio de recirculation ($Q_{recirculée}/Q_{décantée}$) utilisé est souvent inférieur à 3 (Water Environment Federation, 2010a).

- **Type de source de carbone exogène**

Tel que discuté précédemment, l'ajout d'une source de carbone exogène est souvent considéré pour atteindre un bon niveau de dénitrification en configuration pré-dénitrification, et carrément nécessaire pour la post-dénitrification. Le choix de la source de carbone doit être fait en prenant en compte non seulement la cinétique de dénitrification et la qualité de traitement à réaliser, mais aussi le coût d'injection. Le méthanol est une source de carbone exogène couramment utilisée pour la dénitrification dans les stations d'épuration. Par rapport aux substrats comme l'éthanol et l'acétate, il est moins coûteux et produit moins de boues (Mokhayeri *et al.*, 2009). De plus, Rocher *et al.* (2011b) rapportent que cette source de carbone ~~produit~~ accumule moins de nitrite pendant la dénitrification que les autres substrats testés (sucres, acides organiques simples et éthanol). Cependant, la vitesse de réaction avec le méthanol est les moins rapides par rapport aux autres substrats étudiés, tel que l'éthanol ou l'acétate (Christensson *et al.*, 1994; Mokhayeri *et al.*, 2009; Rocher *et al.*, 2011b). En plus de la vitesse de réaction, en générale, les

réacteurs de dénitrification utilisant le méthanol sont dominés par les bactéries *Hyphomicrobium* spp. (Isaacs *et al.*, 1994; Metcalf & Eddy, 2014). La vitesse de croissance de ce type de bactéries méthylotrophes est lente. Dans ce cas-ci, un temps d'adaptation est nécessaire pour les procédés de dénitrification utilisant le méthanol afin d'accumuler assez de bactéries *Hyphomicrobium* spp.

- **Conditions de traitement**

La température impacte le traitement de la biofiltration de différentes manières. En effet, une faible température influence négativement la croissance bactérienne, ce qui ralentit l'enlèvement des polluants. D'autre part, tel que mentionné précédemment, les facteurs liés à la vitesse de transfert gaz-liquide comme la solubilité de l'oxygène dans l'eau et le coefficient de transfert varient en fonction de la température, ce qui peut influencer la concentration en oxygène dissous dans les biofiltres et peut donc impacter les activités biologiques. Par rapport aux bactéries hétérotrophes, les bactéries autotrophes sont plus sensibles aux conditions de pH. Le pH optimal pour la nitrification se situe entre 7 et 8,5 (Ekama et Wentzel, 2008a). En dehors de cette plage, la performance de nitrification sera largement réduite.

- **Propriétés du matériau filtrant**

Le choix du média a aussi des effets importants en biofiltration. Un garnissage plus petit possède une surface spécifique d'échange (surface/volume) plus élevée, ce qui permet de maintenir une concentration en biomasse élevée et de favoriser le transfert des substrats vers le biofilm (Stensel *et al.*, 1988). Concernant l'enlèvement des particules, par rapport aux petits garnissages (diamètre < 3 mm), les grands garnissages (diamètre > 6 mm) retiennent moins de particules à cause d'espaces vides élevés. Cependant, les petits garnissages peuvent créer plus de perte de charge, même sans encrassement. Les biofiltres utilisant les petits garnissages ont donc besoin d'une fréquence de lavage plus élevée que ceux appliquant grandes garnissages, ce qui augmente le coût de traitement (Robinson *et al.*, 1994). En plus de la taille, Barton et Buchberger (2007) indiquent que par rapport au média rond, l'utilisation de média anguleux permet d'augmenter la gamme de tailles de particules retenues pendant la filtration. Un garnissage qui possède une surface rugueuse fournit plus de sites d'attachement pour le biofilm qu'une surface lisse. Par conséquence, le biofilm formé peut adhérer plus solidement sur le média et avoir moins de tendance à se décoller sous flux de liquide et d'air pendant le traitement (Harendranath *et al.*, 1996).

2.1.5. Principes de fonctionnement de la clarification tertiaire par décantation lamellaire physico-chimique

La clarification tertiaire n'est pas un procédé largement utilisé. Cependant, elle a quand même sa place pour réaliser certains traitements avancés incluant l'élimination du phosphore et des métaux, l'inactivation et l'élimination des pathogènes (bactéries et virus) et le prétraitement en amont de procédés par membrane ou par filtration pour la récupération et la réutilisation de l'eau (Water Environment Federation, 2005c). L'utilisation de décanteurs lamellaires physico-chimiques en clarification tertiaire vise principalement à enlever le phosphore encore présent en sortie de traitement biologique lorsque des normes de rejets particulièrement exigeantes sur ce polluant sont en vigueur. Ces exigences (par exemple 0,1 mgP/L, Water Environment Federation (2005c)) sont souvent difficiles à atteindre uniquement durant le traitement primaire ou par co-précipitation pendant le traitement biologique. En effet, de trop faibles concentrations en phosphore peuvent limiter la croissance bactérienne et donc impacter négativement le traitement biologique (Water Environment Federation, 2005c). Pour cette raison, il est relativement risqué d'enlever une trop grande quantité de phosphore avant ou pendant les étapes de traitement biologique. La clarification tertiaire permet aussi d'améliorer l'enlèvement de MES. Les principes de précipitation des phosphores et de décantation par décanteur lamellaire physico-chimique pour le traitement tertiaire sont généralement identiques à ceux du traitement primaire (voir la section 2.1.3.2).

Cependant, les différences des caractéristiques de l'eau à traiter peuvent avoir des influences sur la performance de traitement. Les particules en sortie de traitement secondaire sont celles qui n'ont pas été éliminées par les procédés de séparation liquide-solide en traitement secondaire (décanteur secondaire, biofiltration, etc.) à cause de leurs tailles ou des effets hydrauliques (Water Environment Federation, 2005c). Normalement, la concentration en particules dans l'effluent du traitement biologique, et particulièrement en biofiltration, est beaucoup plus faible que celle en entrée de station. Certaines études montrent que la présence des particules peut avoir un effet négatif sur la précipitation du phosphore par la voie chimique (Fettig *et al.*, 1990; Szabó *et al.*, 2008). La concentration en particules dans l'eau à traiter peut aussi influencer la vitesse de chute des particules selon les principes présentés précédemment. Également, les natures des particules dans l'effluent du traitement biologique sont différentes par rapport à celles de l'eau brute, ce qui peut conduire à différents comportements de décantation. Sans coagulants, en clarification tertiaire, le comportement de décantation des particules contenues dans un effluent de traitement biologique est dans le régime de décantation discrète. En utilisant des coagulants, le régime floculant ou le régime freiné peut apparaître dans le clarificateur selon la quantité de flocs formée (Water Environment Federation, 2005c).

L'installation de décanteurs lamellaires physico-chimiques permet aussi d'augmenter la flexibilité de traitement de la station. Pendant un épisode pluvieux, ils peuvent au besoin traiter également les débits de by-pass du traitement biologique ou servir comme décanteurs afin de renforcer le traitement primaire de la station (Water Environment Federation, 2005c).

2.2.Modélisation des procédés de traitement des eaux usées

2.2.1. Principes généraux

Un modèle peut être défini comme une représentation ou une description d'un système d'intérêt (Wentzel et Ekama, 1997). Cette représentation ou description est souvent simplifiée par rapport à la réalité, puisqu'il est impossible de décrire tous les éléments du système. Cependant, le modèle doit décrire la partie de la réalité du système que les utilisateurs du modèle souhaitent étudier ou prédire. Pour cette raison, le niveau de simplification du modèle dépend des attentes des utilisateurs. Pour le cas de la modélisation de procédés de traitement des eaux usées, la simplification varie en fonction des procédés à modéliser et des phénomènes à simuler définies par les utilisateurs du modèle. Par exemple, le phénomène de transfert gaz-liquide d'oxygène est souvent ignoré lors de la modélisation du fonctionnement d'un décanteur conventionnel. En revanche, pour prédire la performance d'un réacteur biologique aéré, ce transfert est en général pris en compte lors de la construction du modèle de réacteur.

En général, les modèles mathématiques de traitement des eaux usées peuvent être divisés en deux catégories : les modèles empiriques et les modèles mécanistes. Un modèle empirique contient certains paramètres essentiels qui illustrent les comportements des traitements par des relations définies à partir des données d'observation à différentes échelles (van Loosdrecht *et al.*, 2008). Ce genre de modèle demande très peu de connaissances sur les mécanismes de procédé de traitement lors de leur création. Contrairement aux modèles empiriques, les modèles mécanistes sont construits en se basant sur les connaissances des principaux mécanismes impliqués dans le fonctionnement des procédés à modéliser. Ceux-ci sont illustrés par des équations mathématiques liées aux principes physiques, chimiques et biologiques qui les régissent. Ce genre de modèle permet donc de décrire les procédés complexes comme la biofiltration avec un niveau de simplification plus faible que celui des modèles empiriques et donc de répondre à davantage de questions auxquelles les utilisateurs du modèle pourraient potentiellement chercher réponses. En termes d'adaptabilité, un modèle empirique peut difficilement être utilisé en extrapolant hors du système modélisé ou des conditions utilisées pour sa construction car il n'est pas basé sur des connaissances exportables et transposables à d'autres situations. Bien que certaines équations dans les modèles mécanistes soient issues de relations empiriques et difficiles à extrapoler aux autres systèmes ou conditions, en général, l'adaptabilité des modèles mécanistes demeure supérieure à celle des modèles empiriques. Par exemple, tel que présenté précédemment au Chapitre 1, le modèle mathématique SimBio a été dans le passé appliqué non seulement sur les biofiltres nitrifiants (Bernier *et al.*, 2014b), mais aussi sur les biofiltres post-dénitrifiants (Bernier *et al.*, 2014a). Comme cette thèse cherche à utiliser les modèles de procédé en les extrapolant sur plusieurs STEPs du SIAAP qui ont des

conditions de fonctionnement différentes, la revue de littérature se concentre sur les modèles mécanistes.

Dans les modèles mécanistes, les équations de bilan de masse sont souvent utilisées pour illustrer quantitativement les variations de la concentration des composants sous l'effet de différents processus (réactions, transports, etc.) considérés dans un réacteur en fonction du temps (van Loosdrecht *et al.*, 2008). Pour un composant i considéré, le bilan de masse peut être exprimé de manière suivante (Rieger *et al.*, 2012) (Eq 2.30):

Eq 2.20 $$\frac{d(M_i)}{dt} = Q_{in}C_{i,in} - Q_{out}C_{i,out} + r_iV$$

où
M_i est la masse du composant i (g)
r_i est la somme des vitesses des processus biologiques et chimiques liés au composant i (g/m^3/j)
V est le volume de réacteur ou de compartiment considéré (m^3)
Q_{in} et Q_{out} est le débit d'eau en entrée et en sortie respectivement (m^3/j)
$C_{i,in}$ et $C_{i,out}$ est la concentration du composant i en entrée et en sortie respectivement (g/m^3)

Les deux premiers termes à droite de l'équation Eq 2.20 représentent le flux du composant i en entrée et en sortie de réacteur, tandis que le terme r_iV illustre la somme de tous les processus biologiques et chimiques affectant le composant i. S'il y a d'autres processus de transport du composant i considérés par le modèle, par exemple le transfert gaz-liquide d'oxygène dans les procédés aérés, l'équation Eq 2.20 peut être étendue :

Eq 2.21 $$\frac{d(M_i)}{dt} = Q_{in}C_{i,in} - Q_{out}C_{i,out} + r_iV + J_{trans,i}$$

où
$J_{trans,i}$ est la somme des processus de transport concernant le composant i ayant lieu dans le réacteur (g/j).

La somme des vitesses r_i peut être exprimée par l'équation Eq 2.22. Les coefficients stœchiométriques dans l'équation servent à maintenir le bilan des éléments dans les réactions et indiquent la proportion à laquelle chaque composant participe dans la réaction.

Eq 2.22 $$r_i = \sum_j v_{i,j}\rho_j$$

où
$v_{i,j}$ est le coefficient stœchiométrique du composant i de la réaction j (-)
ρ_j est la cinétique de réaction j (g/m^3/j)

Pour les modèles biologiques, par exemple les modèles de la famille d'ASM (Activated Sludge Model) (Henze *et al.*, 2000b), la cinétique de Monod est largement utilisée pour exprimer la dépendance des vitesses des processus biologiques aux concentrations des réactifs intervenants. Avec ce type de cinétique, la vitesse de conversion est proportionnelle à la vitesse maximum de conversion et à la concentration en biomasse. Les facteurs influents de la vitesse de

conversion comme les facteurs environnementaux (pH et température), les concentrations en substrats de croissance et les concentrations en inhibiteurs peuvent être également intégrés dans cette cinétique (Rieger *et al.*, 2012). La forme générale de la cinétique de Monod est montrée à l'équation Eq 2.23. Le terme η dans l'équation Eq 2.23 est utilisé pour prendre en compte la réduction de la vitesse de réaction lorsque seulement une partie de biomasse dans le milieu qui peut réaliser la conversion biologique. Le terme de saturation $\left(\frac{S_B}{K_{SB}+S_B}\right)$ et le terme de saturation inverse/inhibition $\left(\frac{K_{SI}}{K_{SI}+S_I}\right)$ sont les termes de Monod qui représentent la variation de la vitesse de réaction en fonction de la concentration des composants S_B et S_I (Rieger *et al.*, 2012). Les constantes de demi-saturation (K_{SB} et K_{SI}) dans ces deux termes représentent les concentrations des composants (S_B et S_I) auxquelles la vitesse de réaction est égale à la moitié de sa vitesse maximale.

Eq 2.23
$$\rho_j = \mu_{max,XBio} \cdot \eta \cdot \frac{S_B}{K_{SB}+S_B} \cdot \frac{K_{SI}}{K_{SI}+S_I} \cdot X_{BIO}$$

où
$\mu_{max,XBio}$ est le taux de croissance maximale de la biomasse X_{Bio} (1/j)
η est le facteur de réduction de la vitesse de réaction (-)
S_B et S_I est la concentration en substrat et en inhibiteur respectivement (g/m^3)
K_{SB} et K_{SI} est la constante de demi-saturation de substrat S_B et d'inhibiteur S_I respectivement (g/m^3)
X_{BIO} est la concentration en biomasse (g/m^3)

Pour les modèles biologiques, lorsque le nombre de composants et de processus biologiques considéré dans le modèle est élevé, plusieurs équations de conversion biologique doivent être formulées, ce qui entraîne une augmentation de la complexité du modèle (van Loosdrecht *et al.*, 2008). La méthode de notation en matrice de Gujer est proposée dans ce cas-ci pour aider à montrer clairement la relation entre les composants et les réactions considérés par les modèles biologiques (Henze *et al.*, 2000b). Le Tableau 2.2 montre un exemple d'une matrice de Gujer pour un modèle biologique simple illustrant uniquement la croissance hétérotrophe aérobie et la décroissance de la biomasse hétérotrophe, nommé ASM0. Cet exemple considère trois composants : l'oxygène dissous (S_O), les substrats organiques solubles (S_S) et les bactéries hétérotrophes (X_H). Ils sont listés à la première ligne du Tableau 2.2. Les deux processus de conversion biologique : la croissance aérobie (« Aerobic growth » au Tableau 2.2) et la décroissance de la biomasse (« Lysis » au Tableau 2.2) considérées par le modèle sont listées respectivement à la troisième et la quatrième ligne de la première colonne à gauche du Tableau 2.2, tandis que les deux équations cinétiques correspondantes se trouvent dans la dernière colonne. Les coefficients stœchiométriques des composants de chaque processus sont montrés en-dessous des composants correspondants. Comme ce modèle simple se base sur la croissance de la biomasse, les coefficients stœchiométriques de la biomasse sont fixés à 1. Par conséquent,

les consommations et productions des autres variables sont calculées avec les coefficients stœchiométriques équivalents de celui de la biomasse.

Tableau 2.2 Exemple de matrice de Gujer (tableau issu de van Loosdrecht et al. (2008))

Components i	1: S_O	2: S_S	3: X_H	Process rate equation ρ_j
List of processes j				
Aerobic growth	$-\frac{1}{Y_H}+1$	$-\frac{1}{Y_H}$	+1	$\mu_H^{max} \cdot \frac{S_S}{K_S+S_S} \cdot X_H$
Lysis		+1	-1	$b_H \cdot X_H$
Observed transformation rate r_i	$r_i=\sum_j v_{j,i}\ \rho_j\ [M_i L^{-3} T^{-1}]$			
Definition of stoichiometric parameters: Y_H Heterotrophic yield coefficient $[M_H\ M_S^{-1}]$	Dissolved oxygen (O_2)	Dissolved organic substrate (COD)	Heterotrophic biomass (COD)	Definition of kinetic parameters: μ_H^{max} Maximum specific growth rate $[T^{-1}]$ K_S Saturation coefficient for substrate $[M_{COD} L^{-3}]$ b_H rate constant for decay $[T^{-1}]$

Les modèles de la famille d'ASM, qui sont beaucoup utilisés pour simuler les traitements biologiques, prennent en compte plus de composants et de réactions biologiques que l'exemple présenté. Par exemple, en plus de la croissance en aérobie de la biomasse hétérotrophe et sa mortalité, le modèle ASM1 considère la croissance/mortalité de la biomasse autotrophe, la croissance hétérotrophe en anoxie ainsi que les réactions d'ammonification et d'hydrolyse. Bien que plus de composants et de réactions soient considérés, le mode d'illustrer les composants ainsi que les réactions/activités du modèle ASM1 dans la matrice Gujer est similaire à l'exemple montré au Tableau 2.2.

Tel que montré à l'équation Eq 2.23, les vitesses de réaction dépendent des concentrations de composants présents dans le réacteur. Dans ce cas-ci, l'hydraulique du réacteur doit aussi être pris en compte lors de modélisation afin d'illustrer la répartition des composants dans le réacteur et d'estimer leur temps de séjour dans le réacteur. Lorsque les concentrations des composants sont presque homogènes partout dans un réacteur, le concept de réacteur complètement mélangé (continuously stirred-tank reactor, CSTR) peut être utilisé pour illustrer l'homogénéité du réacteur. Cependant, s'il existe des gradients de composants présents dans le réacteur, il est préférable de séparer le réacteur en plusieurs compartiments complètement mélangés en série afin de mieux décrire les profils des composants ainsi que l'évolution des vitesses de réaction dans le réacteur (van Loosdrecht *et al.*, 2008).

A l'aide des modèles de la mécanique des fluides numérique (computational fluid dynamics, CFD), les flux hydrauliques et les mouvements des composants dans le réacteur simulé peuvent être décrits plus précisément en illustrant le réacteur simulé par un nombre élevé de compartiments. Ce genre de modèle permet aussi d'intégrer plusieurs lois de la mécanique des

fluides comme la friction et la turbulence, ce qui augmente aussi la précision d'illustration du comportement hydraulique du réacteur. Cependant, le temps de simulation et le besoin de puissance de calcul, qui sont les facteurs importants à considérer, augmentent davantage lorsque les réactions biologiques et chimiques sont intégrées dans les modèles CFD. À ce titre, les modèles CFD sont utilisés principalement pour comprendre et résoudre les problèmes liés au comportement hydraulique de réacteurs plutôt que pour la simulation de la performance de traitement des procédés. Pour cette raison, les modèles CFD ne sont pas décrits dans les deux sections suivantes présentant respectivement la modélisation de la décantation lamellaire physico-chimique (la section 2.2.2) et de la biofiltration (la section 2.2.3).

2.2.2. Modélisation de la décantation lamellaire physico-chimique

En général, la modélisation des décanteurs lamellaires physico-chimiques peut être divisée en deux aspects selon l'objectif de modélisation. Le premier aspect est lié à la modélisation de la décantation des particules en prenant en compte l'effet de la coagulation-floculation des particules, qui peut réutiliser certains des concepts de la modélisation des décanteurs conventionnels. Le deuxième aspect concerne la modélisation de la précipitation des orthophosphates par les réactifs chimiques. Très peu d'études dans la littérature scientifique actuelle réunissent ces deux aspects en un seul modèle. De plus, tel que présenté précédemment, un décanteur lamellaire physico-chimique peut être utilisé en traitement primaire et tertiaire. Cependant, la plupart des modèles trouvés dans la littérature ont été proposés pour simuler le procédé en traitement primaire.

2.2.2.1. Modélisation de la décantation de particules

En général, les modèles mécanistes illustrent la décantation par les équations physiques liées aux mouvements des particules dans les décanteurs. Takács *et al.* (1991) ont développé un modèle pour simuler le comportement de décanteur secondaire. Les auteurs indiquent que ce modèle peut aussi être utilisé pour simuler la performance de traitement de décanteur primaire, mais ils n'ont pas donné une démonstration de ce genre de application. Tel qu'illustré à la Figure 2.16, ce modèle divise le bassin de décantation en un nombre (souvent 10) de couches (compartiments) horizontales complètement mélangées afin de représenter l'évolution de la concentration en particules selon la hauteur du bassin. L'affluent entre dans une certaine couche (par exemple la couche 6) du modèle (couche d'alimentation). L'effluent traité sort de la couche supérieure (1) et la boue est considérée être soutirée de la couche inférieure (10). Dans la couche d'alimentation, une partie de l'eau se déplace vers le haut, tandis que le reste s'écoule vers le bas sous l'effet du soutirage de boue. Pour les couches au-dessus de la couche d'alimentation (2-5), l'eau se déplace uniquement vers le haut. En revanche, l'eau dans les couches (7-9) situées en-dessous de la couche 6 s'écoule uniquement vers le bas.

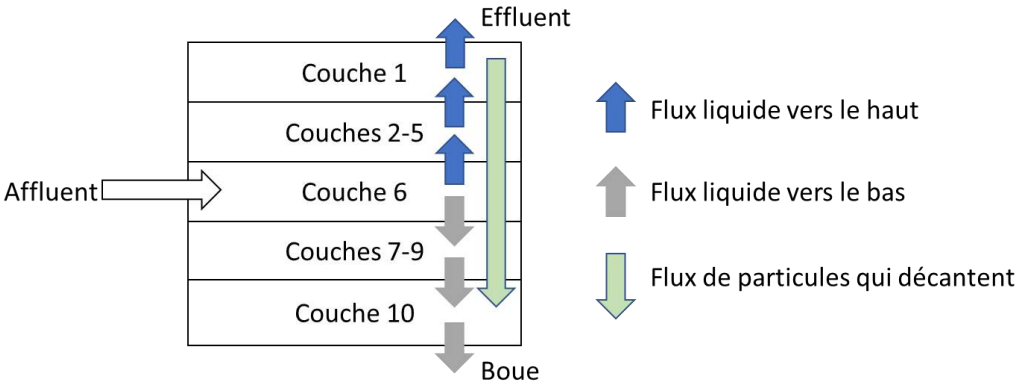


Figure 2.16 Structure générale du modèle de Takács et al. (1991).

Le mouvement des particules dans le modèle prend en compte l'effet d'advection et le flux de particules qui décantent sous l'effet de la gravité. Ce dernier est calculé à partir de la vitesse de chute moyenne des particules et la concentration en particules dans chaque couche (voir Eq 2.24). Avec ce schéma, l'équation de bilan de masse des particules dans chaque couche peut être établie.

Eq 2.24 $$J_{s,j} = X_j * v_{s,j}$$

où
$J_{s,j}$ est le flux des particules décantées sous la force gravitaire dans la couche j ($g/m^2/j$)
X_j est la concentration en MES dans la couche j (g/m^3)
$v_{S,j}$ est la vitesse de chute moyenne des particules dans la couche j (m/j)

Afin d'illustrer précisément la décantation des particules, la vitesse de chute moyenne des particules ($v_{s,j}$) de chaque couche du modèle de Takács *et al.* (1991) varie en fonction de la concentration en particules. Premièrement, une fraction de particules non-décantables (f_{ns}) dans l'affluent est considérée. Lorsque la concentration en particules dans une couche est inférieure à celle des particules non-décantables dans l'affluent (X_{Min}), la vitesse de chute dans cette couche est nulle. Dans le cas contraire, cette vitesse est calculée par une équation contenant deux termes exponentiels (voir Eq 2.25).

Eq 2.25 $$v_{s,j} = v_0 e^{-r_h(X_j - X_{Min})} - v_0 e^{-r_p(X_j - X_{Min})}$$

$$Avec\ 0 \leq v_{s,j} \leq v_{00}$$

où
v_0 est la vitesse de chute moyenne des particules maximum théorique (m/j)
v_{00} est la vitesse de chute moyenne des particules maximum réelle (m/j)
r_h est le paramètre caractéristique de la zone de décantation freinée (m^3/g)
r_p est le paramètre caractéristique de la décantation sous condition de faible concentration en particules (m^3/g)

Cette équation est développée en fonction de la relation entre la concentration et la vitesse de chute moyenne des particules dans les décanteurs secondaires, proposée par Patry et Takács (1992) (voir Figure 2.17). Selon les auteurs, quand la concentration en MES est faible (par exemple < 200 g/m^3, régime discret ou floculant), la vitesse de chute moyenne est influencée principalement par les petites particules et augmente en fonction de la concentration en particules. Un plateau de la vitesse de chute moyenne peut être observée pour une gamme de concentrations en particules entre 200-2000 g/m^3. A cette gamme de concentration, les particules sont considérées être bien floculées et leur vitesse de chute moyenne est considérée être indépendante de la concentration. Enfin, pour une concentration en particules plus élevée, le régime freiné devient le régime de décantation dominant et la vitesse de chute moyenne diminue en fonction de la concentration en MES. A ce niveau de concentration, l'effet des petites particules sur la vitesse de chute moyenne est considéré très faible. Le premier terme à

droite de l'équation Eq 2.25 illustre la vitesse de chute des grandes particules qui sont bien floculées, tandis que le deuxième terme représente la dépendance de la vitesse de chute aux petites particules. Les paramètres r_h et r_p utilisés dans ces deux termes permettent de caractériser respectivement les importances des vitesses de chute des grandes et petites particules sur la vitesse de chute moyenne en fonction de la concentration en MES.

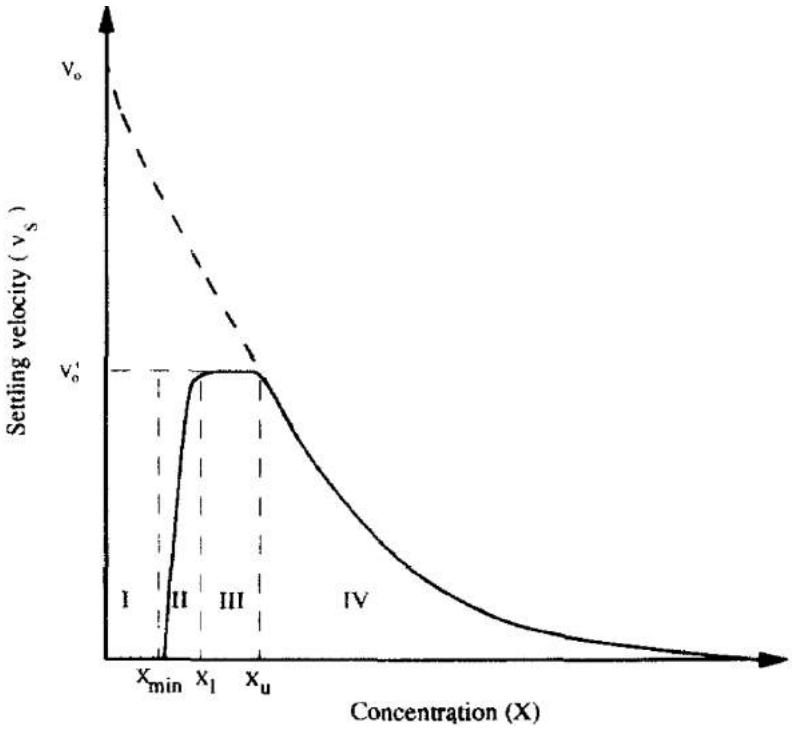


Figure 2.17 Relation entre la vitesse de chute et la concentration des particules (Patry et Takács, 1992).

Gernaey *et al.* (2001) étendent le modèle de Takács *et al.* (1991) pour le rendre compatible avec le modèle ASM1 (Henze *et al.*, 2000b) afin de simuler simultanément l'enlèvement des particules et de la DCO particulaire par les décanteurs primaires. Dans leur travail, les composants du modèle ASM1 sont utilisés. De plus, pour mieux simuler le comportement de la DCO soluble et la production de NH_4^+ observé au cours de la décantation primaire sous certaines conditions d'exploitation (temps de séjour hydraulique élevé, traitement des surverses issues de digesteurs anaérobies, etc.), le transport et la réaction des composants solubles est intégré dans le modèle de Gernaey *et al.* (2001). Premièrement, le transport des composants solubles par advection est considéré dans le modèle afin de prendre en compte temps de séjour de ces composants. Deuxièmement, la coagulation-floculation de la DCO soluble (S_I et S_S) et l'ammonification de l'azote organique (S_{ND}) sont intégrées dans le modèle à l'aide d'équations cinétiques d'ordre un. Les résultats de simulation indiquent que ces extensions permettent de bien prédire non-seulement la concentration en particules en sortie, mais aussi la DCO et l'ammonium dans l'effluent de traitement primaire. Ces nouveaux concepts proposées par Gernaey *et al.* (2001) permettent de mieux connecter le modèle de décanteur avec les modèles

de procédé biologiques.

Le modèle de Gernaey *et al.* (2001) est appliqué par Tik et Vanrolleghem (2017) pour leur étude de la commande d'injection ponctuelle d'alun dans les décanteurs lamellaires primaires d'une STEP de la ville de Québec. Afin de prédire la performance de décantation des particules sous l'effet de l'alun, des jar-tests ont été effectués par les auteurs. Ils ont observé que pour des doses d'alun entre 25 mg/L et 65 mg/L, le taux d'enlèvement des MES augmente en fonction de la dose utilisée. Cependant, aucun effet n'a pu être observé en dessous de 25 mg/L. De plus, le taux d'enlèvement atteint un plateau au-delà de 65 mg/L. En considérant que le taux de MES décantées lors de ces jar-tests peut représenter la fraction de particules décantables, les auteurs estiment l'effet du dosage d'alun sur la fraction de MES non-décantables par une fonction sigmoïdale (voir Figure 2.18a). Pour prendre en compte que l'ajout d'alun augmente la vitesse de chute moyenne des particules par l'effet de coagulation-floculation, l'équation utilisée pour calculer la vitesse de chute moyenne de particules de chaque couche dans le modèle de Takács *et al.* (1991) est également modifiée. Le paramètre v_0 dans l'équation est considéré à varier en fonction de la concentration en alun présente dans la couche. Cette variation est aussi illustrée par une fonction sigmoïdale (voir Figure 2.18b). Il est à noter que dans cet article, les auteurs n'ont pas mentionné qu'ils ont fait des mesures concernant l'effet d'alun sur la vitesse de chute moyenne. Mais, dans une autre étude, ils ont montré la variation de la vitesse de chute en fonction du dosage d'alun peut être estimée par la fonction sigmoïdale selon des mesures de ViCAs (Tik *et al.*, 2016).

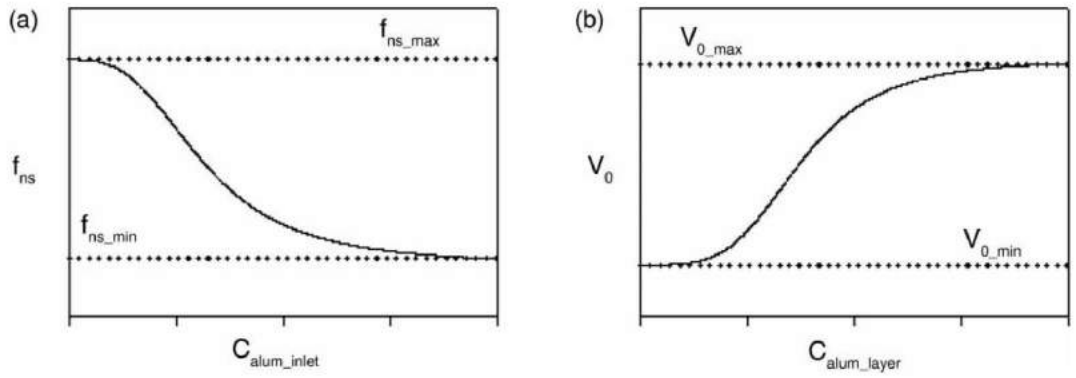


Figure 2.18 Évolutions proposées sur la concentration en particules non-décantation (f_{ns}) et la vitesse de chute (V_0) en fonction de la concentration d'alun injecté (C_{alum_inlet}) et locale (C_{alum_layer})(Tik et Vanrolleghem, 2017).

La calibration de ce modèle a été réalisée sur les données collectées en temps sec de la station sous différentes doses utilisées. Les jeux de données issus de périodes de temps de pluie ont été utilisés pour la validation. Les résultats de simulation montrent que le modèle peut reproduire les variations de MES en sortie causées par les changements de dosage des produits chimiques.

Par contre, les impacts sur la simulation de l'enlèvement de DCO particulaire et de DCO soluble apportés par les modifications ne sont pas étudiés dans le cadre de cette étude. De plus, le modèle ne prend pas en compte l'influence de l'alun sur les orthophosphates dans l'affluent.

Tel que mentionné précédemment sur le principe de décantation, Bachis *et al.* (2015) proposent d'intégrer la distribution des vitesses de chute de particules (particle settling velocity distribution, PSVD) dans la modélisation des décanteurs primaires. Il s'agit de fractionner les particules en un certain nombre de classes de vitesse de chute fixé selon des mesures de ViCAs réalisées sur les eaux en entrée de procédé. Avec cette conceptualisation, la vitesse de chute de particules estimée pour chaque couche de décanteur dans le modèle n'est plus unique, ce qui permet donc d'illustrer plus finement le déplacement des particules dans le décanteur. Il est observé que la distribution des vitesses de chute des particules arrivant aux décanteurs primaires dépend de la concentration en MES dans l'affluent. Selon les résultats de mesure des MES, le fractionnement des particules de chaque échantillon en fonction des classes de vitesse de chute est déterminé. Les auteurs ont vérifié leur proposition avec les données de traitement primaire issues de la même STEP que Tik et Vanrolleghem (2017) ont étudiée, mais sous condition d'exploitation sans ajout de coagulant et de floculant. Le nombre de classes de vitesse est fixé à cinq et la calibration du modèle vise à identifier les vitesses de chute appropriées pour chaque classe Les résultats de calibration-validation montrent qu'avec les classes de vitesse calibrées, le modèle qui prend en compte le PSVD montre de bonnes performances de la prédiction de l'enlèvement des particules des décanteurs. Les auteurs illustrent qu'il est aussi possible de prendre en compte l'effet de l'injection de réactifs en décantation physico-chimique avec cette méthode. Pour ce faire, les distributions des vitesses de chute doivent être tracées par mesures ViCAs sur des échantillons après injection de différentes doses de produits chimiques. Les fractions de particules des échantillons qui correspondent à chaque classe de vitesse de chute sont ensuite déterminées. Toujours par interpolation des fractions, l'effet du dosage de réactifs sur la répartition des vitesses peut donc être estimé pendant la simulation. Cette proposition n'est pas démontrée par les auteurs, mais elle a été appliquée par Tik *et al.* (2016) pour étudier la relation entre le dosage d'alun et la vitesse de chute de particule, précédemment présentée.

2.2.2.2. Modélisation de la précipitation des orthophosphates

La plupart des modèles mécanistes trouvés dans la littérature illustrant la précipitation des orthophosphates sont basés sur les interactions entre les ions métalliques et les orthophosphates sous différentes conditions de pH et de dosage de réactifs. Par exemple, Luedecke *et al.* (1989) proposent un modèle basé sur ce genre de concept. Leur modèle illustre l'enlèvement des orthophosphates sous l'effet de chlorure ferrique par deux mécanismes. Le premier mécanisme est la formation des précipités hydro-phosphate ferrique ($Fe_rPO_4(OH)_{3(r-1)}$), tandis que celui du

deuxième concerne l'adsorption des orthophosphates sur les précipités formés. Les auteurs ont supposé que cette adsorption était en compétition avec les hydroxydes présents sur les précipités (voir Eq 2.26). En plus de $Fe_rPO_4(OH)_{3(r-1)}$, le modèle de Luedecke *et al.* (1989) considère aussi que quand le dosage de chlorure ferrique est élevé par rapport aux orthophosphates en entrée, les précipités FeO(OH) peuvent être formés et participer à l'adsorption des orthophosphates.

Eq 2.26 $$Fe_rPO_4OH_{(3r-3)} + PO_4^{3-} \rightleftharpoons Fe_r(PO_4)_2OH_{(3r-6)} + 3OH^-$$

Le modèle détermine d'abord les types et les concentrations de précipités formés (sans précipité, $Fe_rPO_4(OH)_{3(r-1)}$ et/ou FeO(OH)) ainsi que la concentration en PO_4^{3-} non-précipité ($C_{P,eq}$ en mol/L) en fonction des orthophosphates en entrée et du dosage de $FeCl_3$. Les équations chimiques concernant l'équilibre acido-basique de l'acide orthophosphorique, l'hydrolyse de chlorure ferrique et la formation des précipités sont utilisées pour calculer ces concentrations. Ensuite, selon l'équilibre d'adsorption de PO_4^{3-} sur les précipités, le modèle calcule la concentration en orthophosphate résiduel (voir Eq 2.27) :

Eq 2.27 $$C_{P,ads} = k_{ads} \times \left[(3r-3) \times C_{P,prec} + C_{Fe,prec}\right] \times C_{P,res}/[OH^-]^3$$
$$avec\ C_{P,eq} = C_{P,res} + C_{P,ads}$$

où
$C_{P,ads}$ est la concentration molaire en PO_4^{3-} adsorbé (mol/L)
$C_{P,res}$ est la concentration molaire en PO_4^{3-} résiduel (mol/L)
k_{ads} est le coefficient de l'adsorption (mol²/L²)
$C_{P,prec}$ et $C_{Fe,\ prec}$ sont les concentrations molaires en $Fe_rPO_4(OH)_{3(r-1)}$ et en FeO(OH), respectivement (mol/L)

Pour estimer les valeurs des paramètres du modèle et la forme du précipité ($Fe_rPO_4(OH)_{3(r-1)}$) produit, les auteurs ont réalisé des mesures dans des réacteurs de boue activée aérés à l'échelle laboratoire et pilote dans lesquels étaient injectées différentes doses de $FeCl_3$ (4-60 g/m^3). Selon les résultats obtenus, une formule générale pour l'hydro-phosphate ferrique est proposée : $Fe_{2,5}PO_4(OH)_{4,5}$ (r=2,5).

De manière similaire au modèle de Luedecke *et al.* (1989), Smith *et al.* (2008) ont également proposé un modèle illustrant l'enlèvement des orthophosphates par deux mécanismes. Le premier mécanisme considéré dans leur modèle concerne la formation des précipités phosphate ferrique ($FePO_4$) et oxyde ferrique hydraté (hydrous ferric oxide, HFO, représenté par $Fe(OH)_3$). En plus de la formation de phosphate ferrique, les orthophosphates dans le liquide peuvent se fixer aussi à la surface des précipités HFO en partageant l'atome d'oxygène avec le fer, ce qui conduit à une coprécipitation (HFO-orthophosphate). Ceci est le deuxième mécanisme. Comme le modèle de Luedecke *et al.* (1989), l'estimation des concentrations en $FePO_4$ et en HFO dans

le modèle de Smith *et al.* (2008) est basée sur les équations liées à l'équilibre acido-basique de l'acide phosphorique et à l'hydrolyse de sel ferrique. Pour estimer la quantité des orthophosphates fixés à la surface de HFO, un sous modèle issu de Geelhoed *et al.* (1997) (surface complexation model, SCM) est utilisé. Il sert à illustrer les interactions entre le HFO et les orthophosphates. Dans ce sous modèle, les atomes d'oxygène à la surface de HFO sont considérés comme sites. L'efficacité de la coprécipitation orthophosphate-HFO est considérée varier en fonction de la densité de sites disponibles pour la fixation des orthophosphates. Cette densité est estimée en fonction de la concentration en fer présent dans le précipité, de l'âge du précipité produit et de la vitesse de mélange, ce qui permet de relier les conditions d'opération avec l'efficacité d'enlèvement des orthophosphates.

Le modèle de Smith *et al.* (2008) a été amélioré par Hauduc *et al.* (2015a) en intégrant les équations de cinétique pour les réactions afin de prédire l'enlèvement des phosphates sous conditions dynamiques. Les auteurs ont calibré et validé le modèle sur les données expérimentales des jar-tests réalisés par Szabó *et al.* (2008). Pendant ces jar-tests, Szabó *et al.* (2008) ont suivi la variations de la concentration en PO_4^{3-} résiduel en fonction du temps afin d'étudier les cinétiques d'enlèvement des orthophosphates sous différentes conditions chimiques (dosage de $FeCl_3$, rapport initial Fe/P, etc.) et physiques (vitesse de mélange et âge de précipité) (voir section 2.1.3.2). Les résultats de simulation montrent que le modèle peut bien reproduire la cinétique d'enlèvement des orthophosphates au début de tests (quelques minutes jusqu'à une heure après le lancement), sous différentes conditions expérimentales (rapport Fe/P initial, pH, âge de précipité, etc.). Pendant cette période initiale, l'élimination des orthophosphates est assez rapide. Par contre, la cinétique d'enlèvement observé durant la période d'élimination lente (quelques heures après le lancement) ne peut pas être bien prédite par le modèle.

2.2.2.3. SimDec-Modèle de décanteur lamellaire physico-chimique

Bernier *et al.* (2016) ont développé le modèle SimDec basé sur le modèle de Takács *et al.* (1991) pour simuler les décanteurs lamellaires physico-chimiques (Densadeg®, Technologie Degrémont) installés à la station Seine Centre (SEC). Ce modèle vise à prédire simultanément l'enlèvement des particules, de la DCO et des orthophosphates réalisé par les décanteurs. Dans ce cas-ci, les composants considérés par le modèle inclurent ceux du modèle ASM1 et les orthophosphates. Le transport des composants solubles sous l'effet d'advection, proposé par Gernaey *et al.* (2001), a été pris en compte dans le modèle. Contrairement au modèle de Takács *et al.* (1991), la vitesse de chute des particules est considérée constante dans toutes les couches. Les chambres de coagulation et de floculation en amont du décanteur sont représentées par un réacteur complétement mélangé dans lequel deux phénomènes sont considérés. Le premier

phénomène est la coagulation-floculation partielle de la DCO soluble, modélisé selon Gernaey *et al.* (2001). Le deuxième phénomène est la co-précipitation et la re-dissolution des orthophosphates sous forme de $Fe_{\alpha}PO_4(OH)_{3(\alpha-1)}$ selon les équations cinétiques du modèle ASM2d (Henze *et al.*, 2000b). Le modèle est calibré et validé sur des jeux de données journalières issues de la station pour une période longue. Les résultats de simulation obtenus indiquent que le modèle permet de simuler correctement l'enlèvement des MES et de reproduire les variations saisonnières observées pour la concentration en particules en sortie. La performance de prédiction des concentrations en DCO et en DCO soluble en sortie du traitement primaire est aussi satisfaisante. Par contre, bien que le modèle pourrait reproduire certaines variations de PO_4^{3-} en sortie qui sont liées à l'évolution des orthophosphates en entrée, à cause de certaines limites (seuil de quantification et résolution) de la mesure de PO_4^{3-} sur site, la performance de prédiction de la déphosphatation par le modèle est difficile à évaluer. De plus, comme le procédé étudié utilisait des doses de $FeCl_3$ relativement fortes (> 30 g/m^3), la performance de prédiction du modèle n'a pas été validée pour des doses plus faibles.

2.2.3. Modélisation du procédé de biofiltration

2.2.3.1. Modélisation de biofilm

De manière similaire à la modélisation des autres procédés de traitement à culture fixée, la modélisation du biofilm est au cœur de la construction d'un modèle de biofiltration. Le groupe expert de l'IWA (International Water Association) sur la modélisation des biofilms définit un cadre qui illustre certaines caractéristiques du biofilm qui doivent être prises en compte lors de la modélisation (Wanner *et al.*, 2006) :

(1) Le système de biofilm doit être divisé en différents compartiments, comme le média auquel est attaché le biofilm, le biofilm lui-même et le liquide environnant. Pour chaque compartiment, différents types de composants solubles et particulaires, comme les substrats et les bactéries, peuvent être considérés.

(2) Les composants peuvent être consommés ou produits par les processus d'activité biologique. Leurs déplacements dans le système de biofilm peuvent être catégorisés par transport et transfert. Le transport correspond aux mouvements des composants au sein d'un même compartiment, par exemple la diffusion de l'oxygène dissous dans le biofilm, tandis que le transfert représente les mouvements des composants entre les compartiments considérés, par exemple, le détachement de bactéries du biofilm vers le liquide. Tous les processus et déplacements considérés dans le modèle de biofilm doivent être quantifiés en termes de vitesses en utilisant des variables quantifiables comme les concentrations et les masses des composants.

(3) Dans un compartiment, le bilan de masse d'un composant peut être calculé en considérant la masse consommée/produite par les processus et celle transférée entre les compartiments. Les équations du bilan de masse doivent être résolues de manière numériques (ou analytiques). Les résultats obtenus sont les sorties du modèle.

En se basant sur ce cadre, le groupe distingue quatre types de modèles de biofilm en fonction de leur complexité et de la puissance de calcul nécessaire pour résoudre les équations du bilan de masse : modèles numériques multidimensionnels, modèles numériques unidimensionnels, modèles pseudo-analytiques unidimensionnels et modèles analytiques unidimensionnels (Wanner *et al.*, 2006).

Les modèles numériques multidimensionnels présentent la structure du biofilm et la répartition des quantités de composants en deux ou trois dimensions. Ils permettent d'illustrer les changements physiques de la morphologie du biofilm et les interactions hydrodynamiques entre le liquide et le biofilm. Cependant, ce genre de modèle a besoin d'une puissance de calcul élevée et la disponibilité de logiciels commerciaux adaptés à et proposant ce genre de modèle

est assez faible. Contrairement aux modèles numériques multidimensionnels, dans les modèles unidimensionnels, les concentrations de composants sont considérées ne varier que sur l'épaisseur des compartiments (liquide et média) et du biofilm. Selon Rittmann *et al.* (2018), les modèles unidimensionnels sont plus adaptés pour résoudre les problèmes pratiques pour les procédés de traitement des eaux usées à pleine échelle que ceux illustrant le biofilm à deux ou trois dimensions.

Parmi les trois types de modèles unidimensionnels, les modèles analytiques et pseudo-analytiques illustrent les biofilms avec un niveau de simplification élevé afin de diminuer le besoin de puissance de calcul. Par exemple, ils ne considèrent souvent qu'un seul type de biomasse et de substrat (le plus limitant) dans les biofilms (Wanner *et al.*, 2006). Rauch *et al.* (1999) proposent un modèle biofilm analytique relativement complexe qui prend en compte les activités des bactéries hétérotrophes et autotrophes et inclut plusieurs substrats (oxygène, nitrate, DCO soluble biodégradable et ammonium). Ce modèle considère deux compartiments complètement mélangés qui représentent respectivement l'eau à traiter et le biofilm. Pour obtenir les résultats de simulation, les auteurs proposent un mode de calcul qui consiste en deux étapes. La première étape est de déterminer la quantité de biomasse présente dans le biofilm en se basant sur les réactions de conversion biologique (ordre de 0). La deuxième étape vise à résoudre les calculs liés aux interactions liquide-biofilm comme par exemple, l'attachement et le détachement du biofilm en se basant sur les résultats de la première étape. Cependant, comme les autres modèles analytiques ou pseudo-analytiques, le modèle de Rauch *et al.* (1999) ne peut pas montrer la distribution spatiale des biomasses dans le biofilm (Rittmann *et al.*, 2018). Un autre inconvénient des modèles analytiques et pseudo-analytiques est que ils ne sont pas adaptés aux études nécessitant de simuler l'évolution dynamique du biofilm (Wanner *et al.*, 2006). Contrairement aux modèles analytiques et pseudo-analytiques, les modèles numériques unidimensionnels permettent d'illustrer de manière dynamique les phénomènes dans les biofilms, avec un niveau de simplification relativement faible et souvent à l'aide de logiciels de modélisation commerciaux pour le traitement des eaux (GPS-X™, WEST®, etc.). De plus, ces modèles peut montrer la répartition spatiale des biomasses en divisant le biofilm en plusieurs compartiments. Considérant les objectifs de travail de modélisation pour les étages de biofiltration présentés au Chapitre 1, et les caractéristiques de ces quatre types de modèle, la revue de littérature sur le sujet se concentre sur les modèles de biofiltration numériques unidimensionnels.

2.2.3.2. Modèles de biofiltration

Hidaka et Tsuno (2004) ont proposé un modèle de biofiltration qui considère en même temps l'hydraulique du biofiltre, les déplacements des composants entre le liquide et le biofilm et les

activités biologiques hétérotrophes et autotrophes. Le système de biofilm est divisé en trois compartiments : le média filtrant, le biofilm et le liquide. Pour illustrer les différents phénomènes de déplacement des composants particulaires (filtration, attachement et détachement), les auteurs séparent les particules en trois catégories : particules en suspension, particules attachées et particules capturées (filtrées). La différence entre les deux dernières catégories est que les particules attachées sur le média filtrant ne sont pas influencées par les lavages, tandis que les particules capturées sont considérées d'être enlevées pendant le lavage. Pour simplifier les calculs, les auteurs considèrent qu'après un lavage, les concentrations en particules capturées sur le média reviennent toujours à la même valeur fixée. Le compartiment biofilm est considéré complètement mélangé. La diffusion des composants solubles entre le liquide et le biofilm atteint l'équilibre instantanément. Du côté des activités biologiques, en plus des réactions biologiques issues du modèle d'ASM1 (Henze *et al.*, 2000b), les auteurs inclurent la dénitrification hétérotrophe endogène et considèrent que la biomasse hétérotrophe est capable d'utiliser le nitrate comme source d'azote. Comme la résistance de transfert des composants solubles par diffusion, qui impacte la disponibilité des composants soluble dans le biofilm, n'est pas prise en compte, la vitesse de croissance bactérienne n'est pas influencée par le transfert liquide-biofilm. Par contre, la disponibilité de surface totale du média est considérée comme un facteur qui limite la croissance bactérienne. L'intégration de ce concept dans le modèle a pour but de mieux illustrer la compétition pour la surface de média entre la biomasse hétérotrophe et autotrophe. Concrètement, lorsque le rapport entre la quantité de biomasse attachée (mgDCO) et la surface de média (m^2) dépasse un seuil préfixé, la croissance bactérienne sera ralentie, tandis que le détachement bactérien va accélérer. Considérant le fait que pour former la même quantité de biomasse, les bactéries autotrophes ont besoin de plus de surface de média que les bactéries hétérotrophes, les facteurs utilisés sur ces changements de la vitesse sont donc différents entre ces deux types de bactérie.

Les paramètres de la nitrification sont d'abord calibrés à la base des observations d'une cuve (3 L) à culture fixée de la biomasse autotrophe. La cuve est remplie avec du média granulaire (polystyrène, 6mm, 2 L) et alimentée chaque jour avec des eaux usées synthétiques contenant 200 mgN/L d'azote ammoniacal. Le taux d'enlèvement d'ammonium est suivi et utilisé pour la calibration. Les données provenant du suivi d'un pilote constitué de 3 étages de biofiltration (pré-dénitrification, nitrification et post-dénitrification) sont ensuite utilisées pour calibrer le reste des paramètres du modèle sous différentes conditions de traitement (température, temps de séjour hydraulique, etc.). Pour être en mesure de simuler l'évolution des composants en fonction de la hauteur des biofiltres, le modèle représente chaque étage du pilote par cinq réacteurs complétement mélangés. Les résultats de simulation montrent que le modèle développé peut bien prédire la vitesse de nitrification observée dans la cuve de culture fixée.

Les niveaux de DCO, d'ammonium et de nitrate observés en sortie de chaque étage correpondent en général à ceux observés. Cependant, comme les taux d'élèvement d'ammonium et de nitrate des trois étages de biofiltration sont élevés, les concentrations des composants en sortie sont assez stables. Dans ce cas, la performance de prédiction du modèle sur des conditions de traitement plus variables comme la biofiltration à l'échelle industrielle ne peuvent pas être évaluée. Également, comme ce modèle ne considère pas la limite de transfert des composants solubles et illustre le biofilm par une seule couche complétement mélangée, il est impossible de décrire les différentes zones écologiques (zone aérobique et zone anoxique) ainsi que les profils des substrats dans le biofilm (Rittmann *et al.*, 2018). Dans ce cas-ci, le modèle ne peut donc pas simuler certains phénomènes observés au sein de la biofiltration comme la dénitrification dans la zone profonde du biofilm et l'évolution de la vitesse de transfert des composants solubles entre le liquide et le biofilm en fonction de la vitesse de filtration.

En se basant sur les observations d'un biofiltre nitrifiant à l'échelle pilote semi-industriel, Vigne *et al.* (2010) ont évalué la performance de prédiction d'un modèle de biofiltration disponible dans le logiciel de modélisation GPS-X™ (Hydromantis). L'hydraulique de la zone du lit de média du pilote est décrit par six réacteurs verticaux. Chacun est constitué d'une couche de la phase liquide et cinq couches de biofilm qui sont considérées complètement mélangée (voir Figure 2.19).

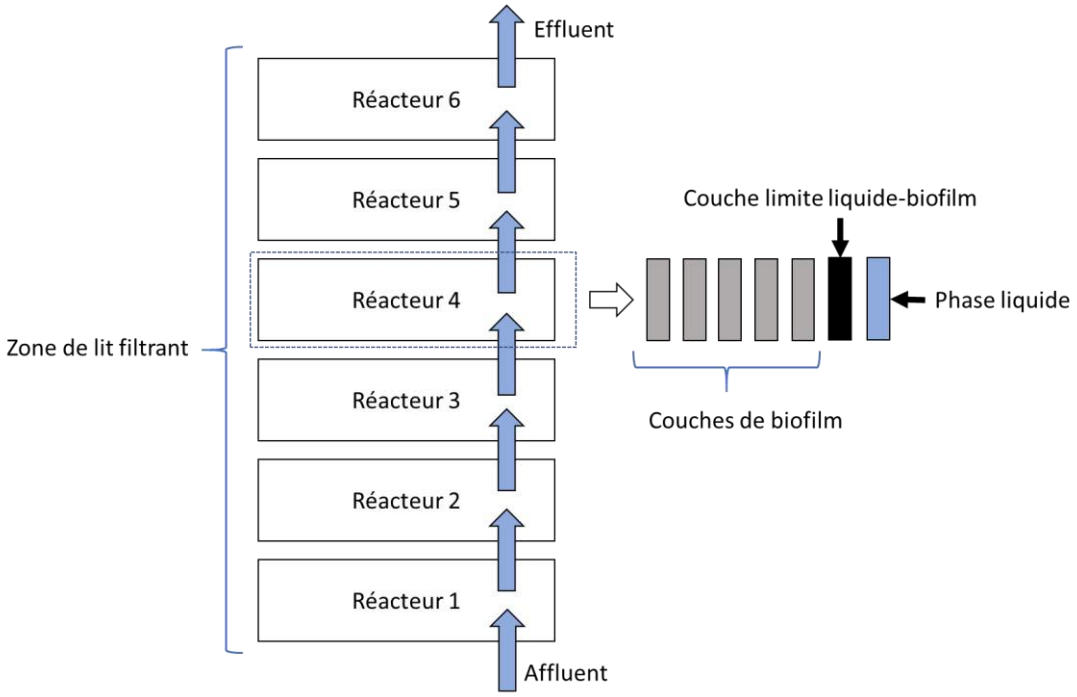


Figure 2.19 Structure de la zone de lit de média du modèle de biofiltration dans le logiciel GPS-X™ (selon (Vigne et al., 2010)).

Le transfert des composants solubles liquide-biofilm est illustré par la diffusion en appliquant les équations de loi de Fick. Une couche limite est considérée entre la phase liquide et la couche de surface du biofilm. Cette couche, qui a une épaisseur constante, n'est pas « vraiment » simulée. Elle est simplement prise en compte pour calculer la diffusion liquide-biofilm. En plus du transfert liquide-biofilm, le phénomène de diffusion est aussi utilisé pour illustrer le transport des composants solubles entre les couches du biofilm. Ces concepts permettent d'illustrer la diffusion partielle des composants dans le biofilm et les différentes zones écologiques qui en découlent.

Le phénomène de filtration en profondeur (McDowell-Boyer *et al.*, 1986) est considéré en utilisant les équations issues d'Ives (1970) et de Horner *et al.* (1986) afin d'illustrer l'enlèvement des particules par la biofiltration. De plus, contrairement au modèle de Hidaka et Tsuno (2004) qui considère que les particules attachés sur le média reviennent toujours à la même concentration après un lavage, ce modèle considère un décrochement de particules en fonction d'une cinétique d'extraction d'ordre un. En plus du décrochement de particules, le modèle prend en compte aussi l'effet du mélange de média filtrant le long le biofiltre pendant le lavage. Pour ce faire, à la fin de lavage, les composants solubles et particulaires se répartissent de manière homogène le long du lit de média. Le modèle ASM1 (Henze *et al.*, 2000b) est utilisé comme sous-modèle pour décrire les activités biologiques. Enfin, pour suivre la perte de charge dans le biofiltre, un indice important pour évaluer le niveau de colmatage du média filtrant, l'équation de Kozeny-Carman (Reynolds et Richards, 1996) est utilisée.

Les résultats de simulation montrent que le modèle permet de prédire la performance de nitrification et les profils longitudinaux de concentration d'ammonium observés dans le biofiltre pilote sous conditions dynamiques. Par contre, pour améliorer la vitesse de calcul lors de la simulation, une concentration en oxygène dissous élevée (proche de la concentration en saturation) est maintenue dans la phase liquide dans le modèle. En réalité, à cause de la répartition hétérogène de la biomasse dans le biofiltre, cette concentration varie en fonction de la hauteur du lit de média (Stenstrom *et al.*, 2008). D'ailleurs, la perte de charge prédite par le modèle ne peut pas reproduire celle observée du pilote. En effet, certains paramètres/variables utilisés par les équations liées au calcul de la perte de charge dans le modèle ne sont pas corrects, ce qui conduit à des résultats de calcul erronés sur cette variable en sortie. Cependant, comme le logiciel GPS-X™ était relativement fermé à l'époque des travaux de Vigne (2007), il était difficile voire impossible de reprogrammer les équations de calcul de la perte de charge pour améliorer la prédiction.

Bernier *et al.* (2014b) ont implanté une modification de ce modèle de biofiltration le logiciel Matlab/Simulink® (Mathworks) (nommé modèle SimBio). Comme les deux modèles de

biofiltration précédemment présentés, pour illustre l'hydraulique de biofilre, le modèle SimBio divise la zone de lit de média en plusieurs réacteurs (sections). Chacun contient un modèle de biofilm illustrant le média, le biofilm et le liquide autour du biofilm. Les processus de transfert et de transport des composants pris en compte par ce modèle sont similaires à ceux du modèle de Vigne *et al.* (2010). Cependant, afin d'accélérer la vitesse de calcul, le nombre de couches de biofilm a été réduit à deux au lieu des cinq utilisées par Vigne *et al.* (2010). L'évolution de la perte de charge est également considérée. L'équation d'Ergun et Orning (1949) est d'abord utilisée pour estimer la perte de charge du média propre. Elle est ensuite actualisée en fonction de l'épaisseur du biofilm attaché sur le média en appliquant les équations d'Ives (1970). Du côté de l'activité biologique, le modèle biologique ASM1 est également utilisé, mais avec certaines modifications. Premièrement, la nitrification et la dénitrification sont séparées en deux étapes de réactions afin de prédire la concentration en nitrite en sortie de traitement. Pour ce faire, le modèle prend en compte les activités des bactéries nitritantes (AOB) et nitratantes (NOB) (Sin *et al.*, 2008c). Pour la dénitrification hétérotrophe, des réactions issues du modèle ASMN (Hiatt et Grady, 2008) sont utilisées pour illustrer l'activité hétérotrophe en anoxie. Lors de la dénitrification, le nitrate est considéré d'être réduit d'abord en nitrite et ensuite en diazote. Deuxièmement, de manière similaire à l'assimilation d'ammonium pendant la croissance bactérienne dans le modèle ASM1, l'assimilation des orthophosphates est intégrée.

Contrairement à la simplification faite par Vigne *et al.* (2010), la variation de la concentration en oxygène dissous dans la phase liquide est considérée par le modèle SimBio. L'équation utilisée pour calculer la vitesse de transfert gaz-liquide d'oxygène dans chaque réacteur est similaire à l'équation Eq 2.19 précédemment présentée, mais prend en compte les influences des eaux usées, de l'encrassement des diffuseurs et de la pression de l'eau. De plus, les impacts du débit d'aération et de la température sur le coefficient de transfert d'oxygène est aussi inclut dans le modèle (voir Eq. 2.28). L'intérêt d'intégrer ces concepts liés au transfert gaz-liquide est d'expliquer une partie des variations en NH_4^+ observées sur les biofiltres nitrifiants liées aux évolutions des quantités d'air injectées. Dans ce cas-ci, le modèle permet de simuler des résultats d'observations sur des plages plus larges de conditions d'exploitation, et de considérer le débit d'aération dans l'optimisation du système.

Eq 2.28
$$k_L a_{O2,Qair2} = k_L a_{O2,Qair1} \left({Q_{air2}}/{Q_{air1}} \right)^m \times \theta_{kLa}^{T-20}$$

où
$k_L a_{O2,Qair2}$ est le coefficient de transfert d'oxygène au débit d'air Qair2 à T°C (1/h)
$k_L a_{O2,Qair1}$ est le coefficient de transfert d'oxygène au débit d'air Qair1 à 20°C (1/h)
θ est le facteur de correction d'Arrhenius (-)
m est une constante (-)

Le modèle SimBio a été calibré et validé sur différents procédés de biofiltration installés dans

les stations du SIAAP (élimination de DCO, nitrification et post-dénitrification) (Bernier, 2014; Bernier *et al.*, 2014a; 2014b). Les résultats montrent que le modèle calibré peut reproduire les performances de traitement des procédés de biofiltration et prédire correctement la perte de charge observée. Ce travail de modélisation démontre également que la performance d'un procédé de biofiltration contenant plusieurs biofiltres fonctionnant en parallèle peut être reproduite en ne simulant qu'un seul biofiltre soumis aux conditions moyennes en entrée de procédé.

Fiat *et al.* (2019) ont intégré au modèle SimBio l'estimation de l'émission de N_2O pendant la nitrification et de la dénitrification. Les réactions liées à la production/consommation biologique de N_2O proposées par Hiatt et Grady (2008) et Pocquet *et al.* (2016) ont été ajoutées au modèle. Afin de simuler plus précisément l'émission de N_2O, contrairement aux modèles présentés précédemment, une phase gazeuse contenant quatre composants gazeux (O_2, N_2O, NO et N_2) ont été intégrés dans chaque réacteur de lit de média. Le volume de cette phase varie en fonction de la vitesse superficielle du gaz. Les équations utilisées pour décrire cette relation sont issues de Gillot *et al.* (2005). Le calcul de la vitesse de transfert gaz-liquide est réalisé de manière similaire au modèle SimBio. Par contre, le coefficient de transfert d'oxygène (k_La_{O2}) est estimé en fonction de la température et de la vitesse superficielle du gaz (voir Eq 2.29). Pour les autres composants gazeux, leur coefficient de transfert (k_La_i) est déterminé à partir du k_La_{O2} et du rapport entre leurs coefficients de diffusion dans la phase liquide ($D_{L,i}$) et celui d'oxygène ($D_{L,O2}$) (voir Eq 2.30). Avec ces concepts, la variation du volume de la phase gazeuse ainsi que le bilan de masse des composants gazeux dans chaque réacteur peuvent être calculés, ce qui permet d'illustrer l'évolution de la composition du gaz dans les biofiltres aérés (Gillot *et al.*, 2005; Fiat *et al.*, 2019).

Eq 2.29
$$k_La_{O2} = A_{kLa} \times U_G^{B_{kLa}} \times \theta_{kLa}^{T-20}$$

Eq 2.30
$$k_La_i = k_La_{O2} \times \sqrt{D_{L,i} / D_{L,O2}}$$

où
A_{kLa} et B_{kLa} sont des constantes empiriques (-)
U_G est la vitesse superficielle de gaz ($m^3N/m^2/j$)

Ce modèle étendu a été calibré sur les mesures d'émission de N_2O réalisées sur les biofiltres nitrifiants de la station Seine Aval (Bollon *et al.*, 2016b). Les résultats de simulation montrent que l'intégration de la phase gazeuse permet d'améliorer la simulation de l'émission de N_2O. Les modifications apportées sur le modèle ne dégradent pas non plus la performance de prédiction des autres variables en sortie comme la concentration en ammonium et en nitrite. Les auteurs indiquent aussi que selon les simulations réalisées, la dénitrification hétérotrophe présente dans la zone anoxie des couches de profondeur du biofilm peut éliminer une partie du

N_2O produit pendant la nitrification. Cette étude d'extension du modèle SimBio a été réalisée en parallèle de la thèse, les différences du modèle développé par Fiat et al. (2019) et celui construit dans le cadre de la thèse seront présentées au Chapitre 4.

2.2.4. Procédure de calibration-validation de modèle

Normalement, avant d'utiliser un modèle pour simuler la performance de traitement d'un procédé, l'utilisateur doit réaliser une procédure de calibration-validation. La calibration d'un modèle vise à ajuster les valeurs de certains paramètres afin que les résultats de simulation soient les plus proches possible des observations faites sur le procédé modélisé (Rieger *et al.*, 2012). La validation du modèle sert quant à elle à vérifier la performance après calibration en effectuant des tests de simulations sur des jeux de données différents de ceux utilisés lors de la calibration. Certaines études proposent des protocoles de calibration-validation détaillés (Sin *et al.*, 2005; Mannina *et al.*, 2011; Rieger *et al.*, 2012). En général, la procédure de calibration-validation d'un modèle peut être divisée en cinq étapes (voir Figure 2.20).

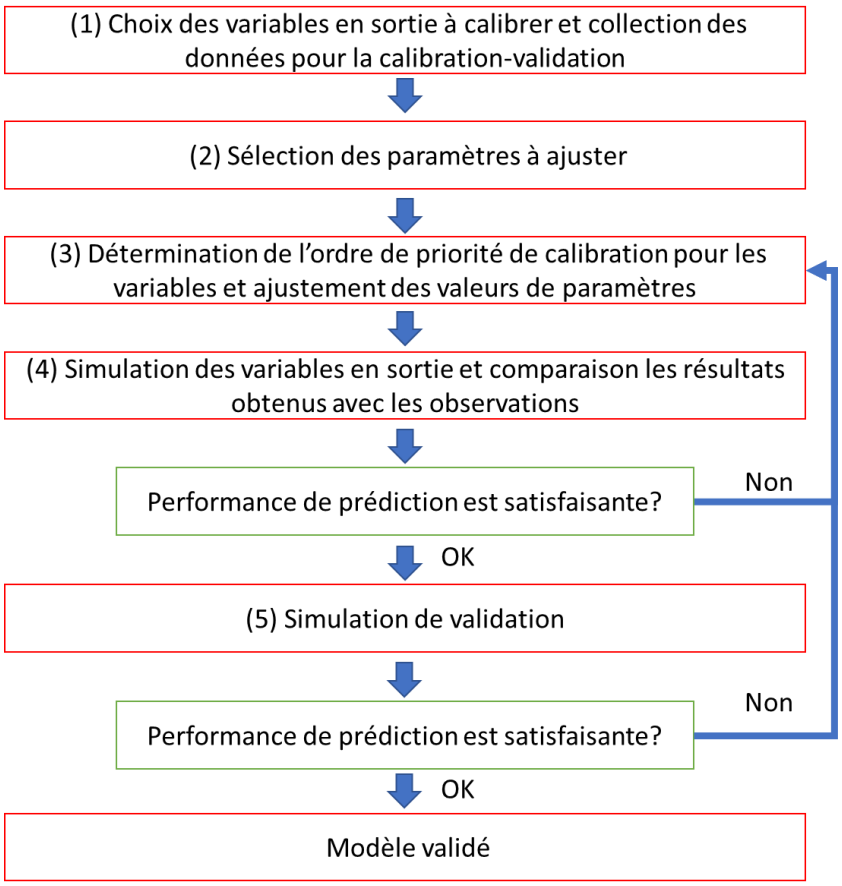


Figure 2.20 Procédure générale de calibration-validation d'un modèle (selon (Mannina et al., 2011; Rieger et al., 2012)).

La première étape consiste à définir les variables de sortie à calibrer et de collecter les données d'observations servant à la calibration-validation du modèle. La deuxième étape est la sélection des paramètres à ajuster pour chaque variable de sortie identifiée à l'étape précédente. Cette sélection peut être basée sur les connaissances du modèle et/ou sur les résultats d'une analyse de sensibilité (locale ou globale). La troisième étape est l'ajustement des valeurs de paramètres sélectionnés. Comme un paramètre peut influencer les résultats de plusieurs variables en sortie,

il est difficile à calibrer simultanément toutes les variables choisies (Mannina *et al.*, 2011). Pour cette raison, s'il y a plusieurs variables à calibrer, il est utile de déterminer à cette étape un ordre de priorité selon lequel les variables sont calibrées. La quatrième étape est de simuler les variables de sortie à calibrer avec les valeurs de paramètres ajustées et de comparer les résultats de simulation avec les données d'observation. Des scores statistiques peuvent être utilisés ici comme critères pour évaluer quantitativement les résultats de simulation par rapport aux mesures (Hauduc *et al.*, 2015b). Si les résultats de calibration sont satisfaisants, la simulation de validation (la cinquième étape) peut être lancée. Sinon, il faut retourner à la troisième étape pour réajuster les valeurs des paramètres. Des scores statistiques peuvent également être utilisés à l'étape de validation pour évaluer les résultats de simulation. Si les résultats de validation ne sont pas satisfaisants, les paramètres du modèle doivent être réajustés afin d'améliorer la qualité de prédiction du modèle.

Il est à noter que ces protocoles trouvés dans la littérature sont principalement conçus pour la calibration-validation des modèles simulant les procédés de traitement par boues activées. Leurs auteurs n'ont pas mentionné s'ils peuvent être adaptés aux modèles de procédés à culture fixée. Ces derniers contiennent normalement un nombre de paramètres plus élevé que ceux des modèles de traitement à culture libre (Rittmann *et al.*, 2018).

Dans le cadre de leur travail de modélisation, Vigne *et al.* (2010) ont proposé un protocole de calibration-validation du modèle de biofiltration relativement similaire à la procédure précédemment résumée. Les auteurs ont d'abord défini trois groupes de variables de sortie à calibrer : les caractéristiques dans la zone du lit de média (la quantité de la biomasse autotrophe, la vitesse de nitrification maximale et les profils des concentrations en NH_4^+ et en NO_3^-), les variables liées aux composants particulaires (MES en sortie et perte de charge) et les concentrations des composants solubles en sortie (NH_4^+ et NO_3^-) (Vigne, 2007). Ensuite, une analyse de sensibilité locale a été réalisée sur les paramètres qui ne peuvent pas être directement mesurés, en utilisant la méthode suggérée par Petersen *et al.* (2002). Cette dernière propose d'abord de faire une simulation initiale avec les valeurs par défaut des paramètres trouvées dans la littérature. Ensuite, sur le même jeu de données, des simulations ont été faites en modifiant la valeur d'un paramètre à la fois. La sensibilité relative de chaque paramètre par rapport aux variables de sortie à calibrer est calculée afin d'identifier les paramètres influents (voir Eq 2.31).

Eq 2.31
$$Sensibilité\ relative = \frac{\Delta y}{y}\frac{P}{\Delta P}$$

où
Δy est la différence entre le résultat de simulation de référence y et celui obtenu après la modification de la valeur du paramètre P
ΔP est la différence entre la valeur du paramètre P par défaut et celle modifiée

Ensuite, la calibration du modèle a été réalisée de manière itérative pour les trois groupes de calibration. Après la calibration, le modèle était validé sur un jeu de données dynamiques.

Bernier (2014) a également réalisé des travaux de calibration-validation pour le modèle SimBio sur les jeux de données issus des procédés de biofiltration du SIAAP. Les variables de sortie à calibrer ont été définies en fonction des types de biofiltres simulés (nitrifiants ou post-dénitrifiants) (Bernier *et al.*, 2014a; 2014b). Considérant le nombre de paramètres utilisés et la complexité du modèle développé, afin d'identifier les paramètres qui ont des influences importantes sur les variables en sortie et doivent donc être ajustés prioritairement, une analyse de sensibilité globale a été réalisée par simulation Monte-Carlo et régression linéaire multiple tel que proposé initialement par Saltelli *et al.* (2007). La simulation Monte-Carlo vise à obtenir des résultats de simulation pour les variables à calibrer avec des combinaisons de valeurs de paramètres qui sont générées par échantillonnage aléatoire. Pour ce faire, les espaces d'échantillonnage de paramètres sont d'abord définis pour fixer la gamme de valeurs à échantillonner. Ces espaces sont définis selon des valeurs de référence trouvées dans la littérature pour les paramètres étudiés, et les connaissances du modèle. Ensuite, des combinaisons de valeurs de paramètres à simuler sont générées en appliquant l'échantillonnage par hypercube latin (latin hypercube sampling, LHS). Ce dernier divise chaque espace d'échantillonnage de paramètre de manière uniforme à un certain nombre d'intervalles et échantillonne aléatoirement une valeur dans chaque intervalle. Il permet de réaliser des échantillonnages aléatoires plus efficace en couvrant en même temps entièrement l'espace. Les combinaisons de valeurs issues de LHS sont ensuite utilisées pour réaliser la simulation Monte-Carlo. Après la simulation, des régressions multilinéaires sont effectuées entre les résultats des variables à calibrer (Y) et les valeurs échantillonnées pour chaque paramètre (X) qui produisent ces résultats de simulation avec le modèle. Les paramètres influents par rapport aux variables à calibrer peuvent alors être identifiés selon les coefficients de régression standardisés obtenus. L'ajustement des valeurs des paramètres est ensuite réalisé de manière itérative pendant la calibration. Les scores statistiques ME (mean error) et MAE (mean absolute error) (Hauduc *et al.*, 2015b) ont été utilisés pour évaluer la performance de prédiction du modèle pendant la calibration et la validation.

Enfin, pour la modélisation de la décantation primaire et la clarification tertiaire, la plupart des modèles trouvés dans la littérature sont calibrés en se basant sur les connaissances des modèles. Seuls Gernaey *et al.* (2001) ont effectué l'estimation et l'ajustement des paramètres à partir d'une analyse de sensibilité locale selon la méthode de Petersen *et al.* (2002).

2.2.5. Modèle global de station d'épuration

Un modèle global d'une station d'épuration est constitué en connectant les modèles des procédés individuels simulant les différentes étapes de traitement de la station. Ce genre de modèle permet de prédire la performance globale d'une station et d'étudier les interactions entre les procédés de traitement installés. Pour cette raison, les modèles globaux sont utiles pour évaluer le coût et les impacts environnementaux d'une station et développer des stratégies de commande et de surveillance (Gernaey *et al.*, 2014). De plus, les modèles globaux eux-mêmes peuvent être connectés avec des modèles de réseau d'assainissement et de rivière afin de construire un modèle intégré du système complet (Rauch *et al.*, 2002; Benedetti *et al.*, 2013).

Développé par Gernaey *et al.* (2014), le modèle BSM2 (Benchmark Simulation Model No. 2) fournit une plateforme virtuelle pour tester et comparer des stratégies de commande et de surveillance de la station. Ce modèle représente la configuration de traitement d'une station d'épuration « normale » contenant un décanteur primaire conventionnel, des réacteurs de boues activées, un décanteur secondaire et des procédés de traitement de boue (épaississement, digestion anaérobie et déshydratation). Les auteurs ont également proposé différents critères d'évaluation des stratégies en termes de la qualité de traitement, des coûts de traitement et des impacts environnementaux (Flores-Alsina *et al.*, 2011; Gernaey *et al.*, 2014). En plus du modèle BSM2, plusieurs modèles globaux sont aussi développés pour simuler et optimiser la performance de traitement des stations réelles (Third *et al.*, 2007; Cierkens *et al.*, 2012; Sochacki *et al.*, 2013). Cependant, ces stations modélisées sont composées de procédés de traitement conventionnels au lieu des procédés intensifs comme la biofiltration et la décantation lamellaire physico-chimique utilisés à la station Seine Aval.

Quelques travaux de modélisation d'une filière complète de biofiltration sont disponibles dans la littérature. Samie *et al.* (2010) ont construit un modèle simulant la performance des trois étages de biofiltres en série de la station Seine Centre. Les deux premiers étages sont aérés et réalisent respectivement l'enlèvement de DCO et la nitrification. Le dernier étage est composé de biofiltres post-dénitrifiants. Ces derniers peuvent également fonctionner sous condition aérobie pour renforcer le traitement du carbone en temps de pluie. Ces trois étages sont simulés par le modèle de biofiltration disponible dans le logiciel GPS-X^{TM} évalué par Vigne *et al.* (2010). En utilisant les données collectées de la station, les modèles de ces trois étages sont d'abord calibrés et validés séparément. Ils sont ensuite mis en série pour simuler la performance globale de la filière en temps sec et en temps de pluie. Les résultats de simulation montrent que le modèle global permet de reproduire la performance de traitement des trois étages. Cependant, comme ce qui a été fait par Vigne *et al.* (2010), l'aération n'est pas considérée dans leur modèle et la concentration en oxygène dissous pour chaque étage de biofiltration ont été fixée. De plus,

les règles de commande des procédés comme l'ajout de carbone exogène et le changement de la configuration de traitement des biofiltres post-dénitrifiants ne sont pas considérées dans ce travail de modélisation. Dans ce cas-ci, il est difficile d'utiliser le modèle pour tester des scénarios d'optimisation pour la filière de traitement. Enfin, comme le traitement du carbone et de la nitrification de la station sont à peu près toujours réalisés complètement sur les biofiltres étudiés. Les performances de prédiction du modèle sont les conditions d'exploitation variées ne peuvent pas être démontrées. Le potentiel d'utilisation du modèle est donc moins éprouvé.

Zou *et al.* (2014) ont aussi proposé un modèle filière de biofiltration pour une station d'épuration réelle en utilisant le modèle disponible dans le logiciel de modélisation BioWin®. La filière de traitement contient un étage de pré-dénitrification et un étage de nitrification. Une partie de l'eau nitrifiée est recirculée à l'étage de pré-dénitrification. Une analyse de sensibilité locale a été réalisée avant la calibration-validation des deux étages pour identifier les paramètres influents. Les auteurs ont calibré six variables de sortie du modèle de filière (DCO, MES, nitrate, ammonium, azote total et phosphore total) avec un petit jeu de données journalières d'environ 20 jours issu de la station. Les données d'exploitation d'une autre période de 20 jours sont utilisées pour la validation. Les résultats de simulation montrent que le modèle peut en générale prédire les niveaux des polluants en sortie de la filière. Quelques tests de scénario ont été réalisés en modifiant respectivement le taux de recirculation de l'eau nitrifiée et la quantité de méthanol injectée dans l'étage de pré-dénitrification afin d'identifier les meilleurs choix d'opération en fonction de la qualité en sortie de la filière. Cependant, comme la calibration-validation du modèle est réalisée sur des périodes très courtes, les auteurs n'ont pas montré la performance du modèle sur la prédiction des variations saisonnières ou annuelles.

Références

Amiel, C., Gillot, S., Roustan, M., & Héduit, A. (2002). Vers une méthode de mesure du transfert d'oxygène en biofiltres. *Water Quality Research Journal, 37*(4), 729-743.

APHA, AWWA, & WEF. (1998). *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater* (20th ed.). American Public Health Association, American Water Works Association, Water Environment Federation, Washington, D.C., États-Unis.

Argaman, Y. et Kaufman, W. J. (1970). Turbulence and flocculation. *Journal of the Sanitary Engineering Division, 96*(2), 223-241.

Bachis, G., Maruéjouls, T., Tik, S., Amerlinck, Y., Melcer, H., Nopens, I., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2015). Modelling and characterization of primary settlers in view of whole plant and resource recovery modelling. *Water Science & Technology, 72*(12), 2251-2261.

Barton, J. M. H. et Buchberger, S. G. (2007). Effet fo media grain shape on particle straining during filtration. *Journal of Environmental Engineering, 133*(2), 211-219.

Benedetti, L., Langeveld, J., Comeau, A., Corominas, L., Daigger, G., Martin, C., Mikkelsen, P., Vezzaro, L., Weijers, S., & Vanrolleghem, P. A. (2013). Modelling and monitoring of integrated urban wastewater systems: Review on status and perspectives. *Water Science & Technology, 68*(6), 1203-1215.

Bernier, J. (2014). *Modélisation Simultanée de l'Enlèvment des Nutriments et de l'Evolution de la Perte de Charge en Biofiltration des Eaux Usées.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Bernier, J., Guérin, S., Azimi, S., Rocher, V., & Lessard, P. (2016). Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 391*, 75-82.

Bishop, P. L., Zhang, T. C., & Fu, Y.-C. (1995). Effects of biofilm structure, microbial distributions and mass transport on biodegradation processes. *Water Science & Technology, 31*(1), 143-152.

Bollon, J., Filali, A., Fayolle, Y., Guerin, S., Rocher, V., & Gillot, S. (2016a). Full-scale post denitrifying biofilters: Sinks of dissolved N_2O? *Science of the Total Environment, 563-564*, 320-328.

Bollon, J., Filali, A., Fayolle, Y., Guerin, S., Rocher, V., & Gillot, S. (2016b). N_2O emissions from full-scale nitrifying biofilters. *Water Research, 102*, 41-51.

Bratby, J. (2016). *Coagulation and Flocculation in Water and Wastewater Treatment*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Bratby, J. (2018). Phosphorus removal in wastewater treatment plants. In C. Schaum (Ed.), *Phosphorus: Polluter and Resource of the Future* (pp. 109-132). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Camp, T. R. (1936). A Study of the rational design of settling tanks. *Sewage Works Journal, 8*(5), 742-758.

Camp, T. R. (1953). Studies of sedimentation basin design. *Sewage and Industrial Wastes, 25*(1), 1-14.

Chebbo, G. et Gromaire, M. C. (2009). VICAS—An operating protocol to measure the distributions of suspended solid settling velocities within urban drainage samples. *Journal of Environmental Engineering, 135*(9), 768-775.

Christensson, M., Lie, E., & Welander, T. (1994). A comparison between ethanol and methanol as carbon sources for denitrification. *Water Science & Technology, 30*(6), 83-90.

Cierkens, K., Nopens, I., De Keyser, W., Van Hulle, S., Plano, S., Torfs, E., Amerlinck, Y., Benedetti, L., van Nieuwenhuijzen, A. F., Weijers, S., & De Jonge, J. (2012). Integrated model-based optimisation at the WWTP of Eindhoven. *Water Practice and Technology, 7*(2).

Comeau, Y. (2008). Biological metabolism. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design* (pp. 9-33). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Crittenden, J. C., Trussell, R. R., Hand, D. W., Howe, K. J., & Tchobanoglous, G. (2012). *Water Treatment: Principles and Design* (3rd ed.). John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, États-Unis.

Davis, M. L. et Cornwell, D. A. (2012). *Introduction to Environmental Engineering* (5th ed.). McGraw-Hill Education, New York, États-Unis.

Degrémont. (2005). *Mémento Technique de l'Eau*. Degrémont, Rueil-Malmaison, France.

Deronzier, G., Schétrite, S., Racault, Y., Canler, J.-P., Liénard, A., Héduit, A., & Duchène, P. (2011). *Traitement de l'Azote dans les Stations d'Epuration Biologique des Petites Collectivités*. Document technique. Rapport Technique. Cemagref, Antony, France.

Donlan, R. M. (2002). Biofilms: Microbial life on surfaces. *Emerging infectious diseases, 8*(9), 881-890.

Dudley, J., Mulhall, E., & Solomon, S. (1994). *Primary Treatment Processes to Reduce BOD and Suspended Solids—Final Report*. Rapport Technique. Water Research Center, Swindon, Wiltshire, Royaume-Uni.

Ekama, G. A. et Wentzel, M. C. (2008a). Nitrogen removal. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Ergun, S. et Orning, A. A. (1949). Fluid flow through randomly packed columns and fluidized beds. *Industrial & Engineering Chemistry, 41*(6), 1179-1184.

Fdz-Polanco, F., Méndez, E., Urueña, M. A., Villaverde, S., & García, P. A. (2000). Spatial distribution of heterotrophs and nitrifiers in a submerged biofilter for nitrification. *Water Research, 34*(16), 4081-4089.

Fettig, J., Ratnaweera, H. C., & Ødegaard, H. (1990). Simultaneous phosphate precipitation and particle destabilization using aluminium coagulants of different basicity. In H. H. Hahn & R. Klute (Eds.), *Chemical Water and Wastewater Treatment* (pp. 221-242). Springer Berlin, Heidelberg, Allemagne.

Fiat, J., Filali, A., Fayolle, Y., Bernier, J., Rocher, V., Sperandio, M., & Gillot, S. (2019). Considering the plug-flow behavior of the gas phase in nitrifying BAF models significantly improves the prediction of N_2O emissions. *Water Research, 156*, 337-346.

Filho, S. S. F., Hespanhol, I., & Moreira, H. A. (2000). Flocculation kinetics of colloidal suspensions: Effects of metallic coagulant dosage and primary particle concentration on the breakup and aggregation constants. In H. H. Hahn, E. Hoffmann, & H. Ødegaard (Eds.), *Chemical Water and Wastewater Treatment VI* (pp. 101-109). Springer, Berlin, Heidelberg, Allemagne.

Fischerström, C. N. H. (1955). Sedimentation in rectangular basin. *Proceedings of the American Society of Civil Engineers, 81*(5), 1-29.

Flemming, H.-C. et Wingender, J. (2010). The biofilm matrix. *Nature Reviews Microbiology, 8*(9), 623-633.

Flores-Alsina, X., Corominas, L., Snip, L., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Including greenhouse gas emissions during benchmarking of wastewater treatment plant control strategies. *Water Research, 45*(16), 4700-4710.

Fujie, K., Hu, H.-Y., Ikeda, Y., & Urano, K. (1992). Gas-liquid oxygen transfer characteristics in an aerobic submerged biofilter for the wastewater treatment. *Chemical Engineering Science, 47*(13-14), 3745-3752.

Gates, D., Lyedecke, C., Hermanowicz, S., & Jenkins, D. (1990). Mechanism of chemical phosphorus removal in activated sludge with Al(III) and Fe(III). In *Proceedings of the 1990 National Conference on Environmental Engineering*. Arlington, Virginia, États-

Unis, 8-11, Juillet, 1990.

Geelhoed, J. S., Hiemstra, T., & Van Riemsdijk, W. H. (1997). Phosphate and sulfate adsorption on goethite: Single anion and competitive adsorption. *Geochimica et Cosmochimica Acta, 61*(12), 2389-2396.

Gernaey, K. V., Vanrolleghem, P. A., & Lessard, P. (2001). Modeling of a reactive primary clarifier. *Water Science & Technology, 43*(7), 73-81.

Gernaey, K. V., Jeppsson, U., Vanrolleghem, P. A., & Copp, J. B. (2014). *Benchmarking of Control Strategies for Wastewater Treatment Plants*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Gillot, S., Kies, F., Amiel, C., Roustan, M., & Héduit, A. (2005). Application of the off-gas method to the measurement of oxygen transfer in biofilters. *Chemical Engineering Science, 60*(22), 6336-6345.

Guo, L. et Vanrolleghem, P. A. (2014). Calibration and validation of an activated sludge model for green house gases no. 1 (ASMG1) : Prediction of temperature-dependent N_2O emission dynamics. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*, 151-163.

Harendranath, C. S., Anuja, K., Singh, A., Gunaseelan, A., Satish, K., & Lala, K. (1996). Immobilization in fixed film reactors: An ultrastructural approach. *Water Science & Technology, 33*(8), 7-15.

Hauduc, H., Takacs, I., Smith, S., Szabo, A., Murthy, S., Daigger, G. T., & Spérandio, M. (2015a). A dynamic physicochemical model for chemical phosphorus removal. *Water Research, 73*, 157-170.

Hauduc, H., Neumann, M. B., Muschalla, D., Gamerith, V., Gillot, S., & Vanrolleghem, P. A. (2015b). Efficiency criteria for environmental model quality assessment: A review and its application to wastewater treatment. *Environmental Modelling & Software, 68*, 196-204.

Hazen, A. (1904). On sedimentation. *Transactions of the American Society of Civil Engineers, 53*, 57-63.

Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosdrecht, M. C. M. (2000b). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Henze, M. et Comeau, Y. (2008). Wastewater characterization. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design* (pp. 33-52). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Hiatt, W. C. et Grady, C. P. L. J. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification, and denitrification. *Water Environment Research, 80*(11), 2145-2156.

Hidaka, T. et Tsuno, H. (2004). Development of a biological filtration model applied for advanced treatment of sewage. *Water Research, 38*(2), 335-346.

Holdich, R. G. (2002). *Fundamentals of Particle Technology*. Midland Information Technology and Publishing, Shepshed, Leicestershire, Royaume-Uni.

Horn, H. et Hempel, D. C. (1995). Mass transfer coefficients for an autotrophic and a heterotrophic biofilm system. *Water Science & Technology, 32*(8), 199-204.

Horner, R. M. W., Jarvis, R. J., & Mackie, R. I. (1986). Deep bed filtration: A new look at the basic equations. *Water Research, 20*(2), 215-220.

Husovitz, K. J., Gilmore, K. R., Delahaye, A., Love, N. G., & Little, J. C. (1999). The influence of upflow liquid velocity on nitification in a biological aerated filter. In *Proceedings of the 72nd Annual Water Environment Federation Technical Exposition and Conference*. New Orleans, Louisiana, États-Unis, 9-13, Octobre, 1999.

IPCC. (2019). Wastewater Treatment and Discharge. In *2019 Refinement to the 2006 IPCC Guidelines for National Greenhouse Gas Inventories* (Vol. 5). IPCC, Geneva, Suisse.

Isaacs, S. H., Henze, M., Søeberg, H., & Kümmel, M. (1994). External carbon source addition as a means to control an activated sludge nutrient removal process. *Water Research, 28*(3), 511-520.

Ives, K. J. (1970). Rapid filtration. *Water Research, 4*(3), 201-223.

Kampschreur, M. J., Temmink, H., Kleerebezem, R., Jetten, M. S., & van Loosdrecht, M. C.

M. (2009). Nitrous oxide emission during wastewater treatment. *Water Research, 43*(17), 4093-4103.

Keir, G., Jegatheesan, V., & Vigneswaran, S. (2009). Deep bed filtration: Modeling theory and practice In V. Saravanamuthu (Ed.), *Water and Wastewater Treatment Technologies* (Vol. 3). EOLSS Publishers, Oxford, Royaume-Uni.

Lee, K. M. et Stensel, H. D. (1986). Aeration and substrate utilization in a sparged packed-bed biofilm reactor. *Journal (Water Pollution Control Federation), 58*(11), 1066-1072.

Leung, S. M., Little, J. C., Holst, T., & Love, N. G. (2003). Oxygen transfer and consumption in a biological aerated filter. In *Proceedings of the 76th Annual Water Environment Federation Technical Exhibition and Conferrence*. Los Angeles, Californie, États-Unis, 11-15, Octobre, 2003.

Lewandowski, Z. et Boltz, J. P. (2011). Biofilms in water and wastewater treatment. In P. Wilderer (Ed.), *Treatise on Water Science* (Vol. 4, pp. 529-570). Academic Press, Oxford, Royaume-Uni.

Li, X., Wang, X., Lee, D.-J., & Yan, W.-M. (2019). Highly heterogeneous interior structure of biofilm wastewater for enhanced pollutant removals. *Bioresource Technology, 291*, 121919.

López, P. R., Lavín, A. G., López, M. M. M., & Heras, J. L. B. (2008). Flow models for rectangular sedimentation tanks. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 47*(9-10), 1705-1716.

Lou, J., Xie, S., & He, S. (2002). *Principles and Applications of Biological Nitrogen and Phosphorus Removal (livre en chinois)*. National University of Defense Technlology Press, ChangSha, Chine.

Luedecke, C., Hermanowicz, S. W., & Jenkins, D. (1989). Precipitation of ferric phosphate in activated sludge: A chemical model and its verification. In *Proceedings of the 14th Biennial Conference of the International Association on Water Pollution Research and Control*. Brighton, Royaume-Uni, 18-21, Juillet, 1988.

Maldonado, J. G. G., Bastoul, D., Baig, S., Roustan, M., & Hébrard, G. (2008). Effect of solid characteristics on hydrodynamic and mass transfer in a fixed bed reactor operating in co-current gas–liquid up flow. *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 47*(8), 1190-1200.

Mannina, G., Cosenza, A., Vanrolleghem, P. A., & Viviani, G. (2011). A practical protocol for calibration of nutrient removal wastewater treatment models. *Journal of Hydroinformatics, 13*(4), 575-595.

Matko, T., Fawcett, N., Sharp, A., & Stephenson, T. (1996). Recent progress in the numerical modelling of wastewater sedimentation tanks. *Process Safety and Environmental Protection, 74*(4), 245-258.

Maurer, M. et Boller, M. (1999). Modelling of phosphorus precipitation in wastewater treatment plants with enhanced biological phosphorus removal. *Water Science & Technology, 39*(1), 147-163.

McDowell-Boyer, L. M., Hunt, J. R., & Sitar, N. (1986). Particle transport through porous media. *Water Resources Research, 22*(13), 1901-1921.

Mendoza-Espinosa, L. et Stephenson, T. (1999). A review of biological aerated filters (BAFs) for wastewater treatment. *Environmental Engineering Science, 16*(3), 201-216.

Metcalf & Eddy. (2003). *Wastewater Engineering: Treatment and Reuse* (4th ed.). McGraw-Hill Education, New York, États-Unis.

Metcalf & Eddy. (2014). *Wastewater Engineering : Treatment and Resource Recovery* (5th ed.). McGraw-Hill Education, New York, États-Unis.

Mokhayeri, Y., Riffat, R., Murthy, S., Bailey, W., Takacs, I., & Bott, C. (2009). Balancing yield, kinetics and cost for three external carbon sources used for suspended growth post-denitrification. *Water Science & Technology, 60*(10), 2485-2491.

Morgenroth, E. (2008a). Biofilm reactors. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design* (pp. 493-511). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Morgenroth, E. (2008b). Modelling biofilms. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design* (pp. 457-492). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Mujeriego, R. et Asano, T. (1999). The role of advanced treatment in wastewater reclamation and reuse. *Water Science & Technology, 40*(4-5).

Niassi, M. V., Peladan, J. G., & Pujol, R. (1998). Pre-denitrification of municipal wastewater: The interest of up-flow biofiltration. In *Proceedings of the 71st Annual Water Environment Federation Technical Exposition and Conference*. Orlando, Florida, États-Unis, 3-7, Octobre, 1998.

Ødegaard, H. et Karlsson, I. (1994). Chemical wastewater treatment — Value for money. In R. Klute & H. H. Hahn (Eds.), *Chemical Water and Wastewater Treatment III* (pp. 191-209). Springer, Berlin, Heidelberg, Allemagne.

Patry, G. G. et Takács, I. (1992). Settling of flocculent suspensions in secondary clarifiers. *Water Research, 26*(4), 473-479.

Peric, M., Riffat, R., Murthy, S. N., Neupane, D. R., & Cassel, A. (2008). Development of a laboratory clarifier test to predict full scale primary clarifier performance. *International Journal of Environmental Research, 2*(2), 103-110.

Petersen, B., Vanrolleghem, P. A., Gernaey, K., & Henze, M. (2002). Evaluation of an ASM1 model calibration procedure on a municipal–industrial wastewater treatment plant. *Journal of Hydroinformatics, 4*(1), 15-38.

Picioreanu, C., Pérez, J., & van Loosdrecht, M. C. M. (2016). Impact of cell culster size on apparent half-saturation coefficients for oxygen in nitrifying sludge and biofilms. *Water Research, 106*, 371-382.

Pocquet, M. (2015). *A Contribution to Analysis and Modeling of NO and N_2O Emissions during Nitritation.* (Thèse de Doctorat). INSA Toulouse, Toulouse, France.

Pocquet, M., Wu, Z., Queinnec, I., & Sperandio, M. (2016). A two pathway model for N_2O emissions by ammonium oxidizing bacteria supported by the NO/N_2O variation. *Water Research, 88*, 948-959.

Pujol, R., Canler, J. P., & Iwema, A. (1992). Biological aerated filters: An attractive and alternative biological process. *Water Science & Technology, 26*(3-4), 693-702.

Rauch, W., Vanhooren, H., & Vanrolleghem, P. A. (1999). A simplified mixed-culture biofilm model. *Water Research, 33*(9), 2148-2162.

Rauch, W., Bertrand-Krajewski, J. L., Krebs, P., Mark, O., Schilling, W., Schuetze, M., & Vanrolleghem, P. A. (2002). Deterministic modelling of integrated urban drainage systems. *Water Science & Technology, 45*(3), 81-94.

Ravishankara, A. R., Daniel, J. S., & Portmann, R. W. (2009). Nitrous oxide (N_2O): The dominant ozone-depleting substance emitted in the 21st century. *Science, 326*(5949), 123-125.

Razmi, A., Firoozabadi, B., & Ahmadi, G. (2009). Experimental and numerical approach to enlargement of performance of primary settling tanks. *Journal of Applied Fluid Mechanics, 2*(1), 1-12.

Reynolds, T. D. et Richards, P. A. (1996). *Unit Operations and Processes in Environmental Engineering*. PWS Publishing Company, Boston, Massachusetts, États-Unis.

Rich, L. G. (1961). *Unit Operation of Sanitary Engineering*. John Wiley & Sons, NewYork, États-Unis.

Rieger, L., Gillot, S., Langergraber, G., Ohtsuki, T., Shaw, A., Takács, I., & Winkler, S. (2012). *Guidelines for Using Activated Sludge Models*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Rittmann, B. E. et McCarty, P. L. (2001). *Environmental Biotechnology: Principles and Applications*. McGraw-Hill, New York, États-Unis.

Rittmann, B. E., Boltz, J. P., Brockmann, D., Daigger, G. T., Morgenroth, E., Sørensen, K. H., Takács, I., van Loosdrecht, M. C. M., & Vanrolleghem, P. A. (2018). A framework for good biofilm reactor modeling practice (GBRMP). *Water Science & Technology, 77*(5), 1149-1164.

Robinson, A. B., J., B. W., & Smith, A. J. (1994). Construction and operation of a submerged aerated filter sewage-treatment works. *Water and Environment Journal, 8*(2), 215-227.

Rocher, V., Paffoni, C., Gonçalves, A., Azimi, S., & Gousailles, M. (2008). La biofiltration des eaux résiduaires urbaines : Retour d'expérience du SIAAP. *Revue des sciences de l'eau, 21*(4), 475-485.

Rocher, V., Paffoni, C., Goncalves, A., Briand, C., & Azimi, S. (2011a). Conditions d'apparition des nitrites lors de la dénitrification des eaux usées 1. Importance de la charge azotée appliquée. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 344*, 92-96.

Rocher, V., Paffoni, C., Goncalves, A., Rechdaoui, S., Azimi, S., & Pauss, A. (2011b). Conditions d'apparition des nitrites lors de la dénitrification des eaux usées par biofiltration 2. Importance des apports en substrat carboné. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 344*, 97-105.

Ross, G., Zabel, T. F., & Edzwald, J. K. (1999). Sedimentation and flotation. In R. D. Letterman (Ed.), *Water Quality and Treatment* (pp. 7.1-7.78). McGraw-Hill, NewYork, États-Unis.

Rother, E. (2005). *Optimising the Design and Operation of BAF Processes for Municipal Wastewater Treatment.* (Thèse de doctorat). Darmstadt University of Technology, Darmstadt, Germany.

Rother, E. et Cornel, P. (2007). Potentials and limits of a pre-denitrification/nitrification biofilter configuration for advanced municipal wastewater treatment. *Water Science & Technology, 55*(8-9), 115-123.

Rüffer, H. et Rosenwinkel, K. H. (1984). The use of biofiltration for further wastewater treatment. *Water Science & Technology, 16*(10-11), 241-260.

Sabaté Brescó, M., Harris, L. G., Thompson, K., Stanic, B., Morgenstern, M., O'Mahony, L., Richards, R. G., & Moriarty, T. F. (2017). Pathogenic mechanisms and host interactions in Staphylococcus epidermidis device-related infection. *Fontiers in Microbiology, 8*, 1401.

Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., & Tarantola, S. (2007). *Global Sensitivity Analysis. The Primer*. John Wiley & Sons, Chichester, Royaume-Uni.

Samie, G., Lessard, P., & Rocher, V. (2010). Simulation du comportement d'unités de biofiltration des eaux useés. *Techniques Sciences Méthodes, 11*, 85-106.

Seymour, J. D., Codd, S. L., Gjersing, E. L., & Stewart, P. S. (2004). Magnetic resonance microscopy of biofilm structure and impact on transport in a capillary bioreactor. *Journal of Magnetic Resonance, 167*(2), 322-327.

Sin, G., Van Hulle, S. W., De Pauw, D. J., van Griensven, A., & Vanrolleghem, P. A. (2005). A critical comparison of systematic calibration protocols for activated sludge models: a SWOT analysis. *Water Research, 39*(12), 2459-2474.

Sin, G., Kaelin, D., Kampschreur, M. J., Takács, I., Wett, B., Gernaey, K. V., & van Loosdrecht, M. C. M. (2008c). Modelling nitrite in wastewater treatment systems: a discussion of different modelling concepts. *Water Science & Technology, 58*(6), 1155-1171.

Smith, S., Takács, I., Murthy, S., Daigger, G. T., & Szabó, A. (2008). Phosphate complexation model and its implications for chemical phosphorus removal. *Water Environment Research, 80*(5), 428-438.

Sochacki, A., Kubiatowicz, J., Surmacz-Górska, J., & Ćwikła, J. (2013). Plant-wide modelling and simulation using steady-state data: A case study of the Gliwice WWTP, Poland. *Water Practice and Technology, 8*(1), 142-150.

Stensel, H. D. et Reiber, S. (1983). Industrial wastewater treatment with a new biological fixed-film system. *Environmental Progress, 2*(2), 110-115.

Stensel, H. D., Brenner, R. C., Lee, K. M., Melcer, H., & Rakness, K. (1988). Biological aerated filter evaluation. *Journal of Environmental Engineering, 114*(3), 655-671.

Stenstrom, M. K. et Rosso, D. (2008). Aeration and Mixing. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design* (pp. 245-272). IWA Publishing, Londres, Royaume-

Uni.

Stenstrom, M. K., Rosso, D., Melcer, H., Appleton, R., Occiano, V., Langworthy, A., & Wong, P. (2008). Oxygen transfer in a full-depth biological aerated filter. *Water Environment Research, 80*(7), 663-671.

Szabó, A., Takács, I., Murthy, S., Daigger, G. T., Licskó, I., & Smith, S. (2008). Significance of design and operational variables in chemical phosphorus removal. *Water Environment Research, 80*(5), 407-416.

Takács, I., Patry, G. G., & Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research, 25*(10), 1263-1271.

Tamayol, A., Firoozabadi, B., & Ahmadi, G. (2008). Effects of inlet position and baffle configuration on hydraulic performance of primary settling tanks. *Journal of Hydraulic Engineering, 134*(7), 1004-1009.

Tebbutt, T. H. Y. et Christoulas, D. G. (1975). Performance relationships for primary sedimentation. *Water Research, 9*(4), 347-356.

Third, K. A., Shaw, A. R., & Ng, L. (2007). Application of the good modelling practice unified protocol to a plant wide process model for Beenyup WWTP design upgrade. In *Proceedings of the 10th IWA Specialised Conference on "Design, Operation and Economics of Large Wastewater Treatment Plants"*. Vienne, Autriche, 9-13, Septembre, 2007.

Tik, S., Bachis, G., Maruéjouls, T., Charette, S., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2016). A CEPT model based on particle settling velocity distributions. In *Proceedings of the IWA Particle Separation Conference (PS 2016)*. Oslo, Norvège, 22-24, Juin, 2016.

Tik, S. et Vanrolleghem, P. A. (2017). Chemically enhancing primary clarifiers: Model-based development of a dosing controller and full-scale implementation. *Water Science & Technology, 75*(5-6), 1185-1193.

Torfs, E., Nopens, I., Winkler, M. K. H., Vanrolleghem, P. A., Balemans, S., & Smets, I. Y. (2016). Settling tests. In M. C. van Loosdrecht, P. H. Nielsen, C. M. Lopez-Vazquez, & D. Brdjanovic (Eds.), *Experimental Methods In Wastewater Treatment* (pp. 235-261). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Treguer, R., Blair, B., Klaper, R., Royer, S., & Magruder, C. (2012). Evaluation of Actiflo® Crab Process for the combined removal of trace organic compounds and phosphorous during wastewater tertiary treatment In *Proceedings of the 85th Annual Water Environment Federation Technical Exposition and Conference*. New Orleans, Louisiana, États-Unis, 29 Septembre-2 Octobre, 2012.

Tschui, M., Boller, M., Gujer, W., Eugster, J., Mäder, C., & Stengel, C. (1994). Tertiary nitrification in aerated pilot biofilters. *Water Science & Technology, 29*(10-11), 53-60.

Tzoupanos, N. D. et Zouboulis, A. I. (2008). Coagulation-flocculation processes in water/wastewater treatment: The application of new generation of chemical reagents. In *Proceedings of the 6th ISAME/WSEAS International conference on heat transfer, thermal engineering and environment (HTE'08)*. Rhodes, Grèce, 20-22, Août, 2008.

van Loosdrecht, M. C. M., Ekama, G. A., Wentzel, M. C., Brdjanovic, D., & Hooijmans, C. M. (2008). Modelling activated sludge processes. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design* (pp. 361-392). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Vedry, B., Paffoni, C., Gousailles, M., & Bernard, C. (1994). First months operation of two biofilter prototypes in the waste water plant of acheres. *Water Science & Technology, 29*(10-11), 39-46.

Vigne, E. (2007). *Étude et Modélisation Dynamique d'un Procédé par Biofiltration en Nitrification Tertiaire.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Vigne, E., Choubert, J. M., Canler, J. P., Héduit, A., Sorensen, K., & Lessard, P. (2010). A biofiltration model for tertiary nitrification of municipal wastewaters. *Water Research, 44*(15), 4399-4410.

Wakeman, R. (2007). The influence of particle properties on filtration. *Separation and Purfication Technology, 58*(2), 234-241.

Wanner, O., Eberl, H. J., Morgenroth, E., Noguera, D. R., Picioreanu, C., Rittmann, B. E., & van Loosdrecht, M. C. M. (2006). *Mathematical Modeling of Biofilms*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Water Environment Federation. (2005a). High-rate and wet weather clarifier deign concepts and considerations. In *Clarifier Design: WEF Manual of Practice No. FD-8* (2rd ed., pp. 43-143). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2005b). Primary clarifier design concepts and considerations. In *Clarifier Design: WEF Manual of Practice No. FD-8* (2rd ed., pp. 9-42). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2005c). Tertiary clarifier design concepts and considerations. In *Clarifier Design: WEF Manual of Practice No. FD-8* (2rd ed., pp. 211-301). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2010a). Biological filters. In *Biofilm Reactors* (pp. 327-391). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2010b). Introduction. In *Biofilm Reactors* (pp. 1-14). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, USA.

Water Environment Federation. (2012a). Preliminary treatment. In *Design of Municipal Wastewater Treatment Plants* (5th ed., Vol. 2). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2012b). Primary treatment. In *Design of Municipal Wastewater Treatment Plants* (5th ed., Vol. 2). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2012c). Suspended-growth biological treatment. In *Design of Municipal Wastewater Treatment Plants* (5th ed., Vol. 2). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Water Environment Federation. (2017). *Liquid Stream Fundamentals: Sedimentation*. Fiche d'Informations. Water Environment Federation, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Wentzel, M. C. et Ekama, G. A. (1997). Principles in the modelling of biological wastewater treatment plants. In T. E. Cloete & N. Y. O. Muyima (Eds.), *Microbial Community Analysis : The Key to the Design of Biological Wastewater Treatment Systems*. International Association on Water Quality, Londres, Royaume-Uni.

Wentzel, M. C., Comeau, Y., Ekama, G. A., van Loosdrecht, M. C. M., & Brdjanovic, D. (2008). Phosphorus removal. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Wilderer, P. A. et Characklis, W. G. (1989). Structure and function of biofilms. In W. G. Characklis & P. A. Wilderer (Eds.), *Structure and Function of Biofilms* (pp. 5-17). John Wiley & Sons, New York, États-Unis.

Yao, K. M., Habibian, M. T., & O'Melia, C. R. (1971). Water and waste water filtration. Concepts and applications. *Environmental Science & Technology, 5*(11), 1105-1112.

Zhang, R., Han, Z. Y., Chen, C. J., Shi, D. Z., Huang, X. X., & Wu, W. X. (2011). Microstructure and microbial ecology of biofilm in the bioreactor for nitrogen removing from wastewater: A review (Article en chinois). *Chinese Journal of Ecology, 30*(11), 2628-2636.

Zou, Z., Shi, H., Chen, X., & Xie, X. (2014). Numerical simulation and operation optimization of biological filter (Article en chinois). *Environmental Science, 35*(12), 4627-4635.

Chapitre 3 Fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval et stratégie de modélisation adaptée

Tel que présenté au Chapitre 1, l'objectif général de cette thèse est de développer un modèle global pour la filière biofiltration de la station Seine Aval après sa modernisation. Afin de construire un modèle de filière représentatif par rapport à la réalité de la station Seine Aval, les informations liées au fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval sont collectées. Ceci compose la première partie de ce chapitre. A partir de ces informations, la stratégie de modélisation de la filière biofiltration par rapport aux phases de la refonte de la station Seine Aval est proposée et présentée dans la deuxième partie de ce chapitre.

3.1. Fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval

La refonte de la station Seine Aval consiste en trois parties : la modernisation du prétraitement (1), de la file de traitement des eaux (2) et de la file de valorisation des boues (3). Le travail de modélisation de cette thèse se concentre sur la modernisation de la file de traitement des eaux, qui est divisé en deux périodes de travaux. La première période est la réalisation du projet BioSAV, qui vise à améliorer la performance du traitement biologique en intégrant des biofiltres pré-dénitrifiants et des bioréacteurs à membrane (BRM) pour remplacer les quatre lignes de boue activées précédemment utilisées. Ces nouveaux procédés ont été mis en route au début de l'année 2017 et réceptionnés par le SIAAP en juillet 2018. Le fonctionnement actuel de la station respecte généralement les consignes élaborées à la conception du projet BioSAV. La deuxième phase de travaux vise à améliorer le traitement primaire en remplaçant les décanteurs "normaux" actuels par des décanteurs lamellaires physico-chimiques. La mise en route de ces nouveaux décanteurs est prévue en 2022.

3.1.1. Fonctionnement avant la refonte

Le mode de fonctionnement global de la file de traitement des eaux usées avant la refonte de la station Seine Aval est illustré à la Figure 3.1. Après le pré-traitement, l'eau est traitée d'abord par 20 décanteurs primaires conventionnels qui ont une capacité hydraulique totale de 34,6 m^3/s. L'eau décantée est ensuite épurée par quatre tranches de traitement par boue activée (9 bassins biologiques et 25 décanteurs secondaires) pour éliminer les matières organiques biodégradables. L'eau en sortie est envoyée vers 9 clarificateurs à grande vitesse (Actiflo®, Veolia) pour réaliser la déphosphatation et minimiser les particules en entrée des biofiltres situés en aval. La capacité totale des clarificateurs est de 25 m^3/s.

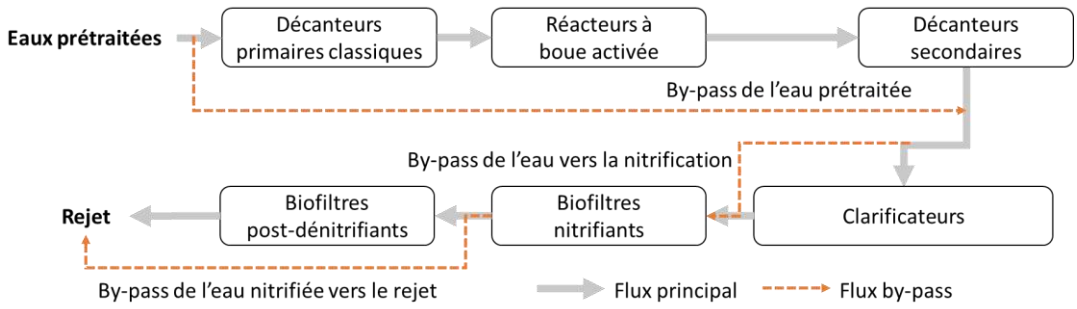


Figure 3.1 Mode de traitement de la file de traitement des eaux usées de la Station Seine Aval avant la refonte.

Après l'étape de clarification, l'enlèvement des polluants azotés est réalisé par deux étages de biofiltration successifs. Le premier étage est constitué de 84 biofiltres nitrifiants (Biostyr®, Veolia) divisés en six lignes de traitement parallèles (appelées batterie A1, A2, B1, B2, C1 et C2). Cet étage traite aussi les eaux de retour en tête issues de traitement des eaux sales produites lors du lavage des biofiltres. Les eaux à traiter pour l'étage de nitrification se réunissent dans le canal d'alimentation général de l'étage et sont relevées en haut vers les canaux d'alimentation des six batteries par les pompes installées dans chaque batterie (six pompes par batterie). Chaque biofiltre contient un média fabriqué en polystyrène (diamètre 4 mm), sur une hauteur de 3,5 mètres et une surface de 173 m². Le débit de pointe maximum de cet étage est de 50,4 m^3/s (SIAAP, 2016). Pour réaliser la nitrification, les biofiltres sont aérés pendant le traitement par 15 surpresseurs centrifuges divisés en trois unités d'aération. Chaque unité alimente donc deux batteries de traitement. Les informations sur le pompage de l'eau vers les biofiltres et les surpresseurs d'aération utilisés pour l'étage de nitrification peuvent être trouvées respectivement aux Tableaux A1.1 et A1.2 dans l'Annexe 1.

Le deuxième étage de biofiltration est un étage de post-dénitrification qui contient une batterie de 12 biofiltres Biofor® (Degrémont Technologies) et une batterie de 18 biofiltres Biostyr® (Veolia). Chaque biofiltre Biofor® contient un lit de média filtrant d'une hauteur de 3 m et d'une surface de 147 m². Ce média est fabriqué en billes de silico-aluminates (argile) d'un diamètre de 4,5 mm. Les dimensions des biofiltres Biostyr® de cet étage sont identiques à celles de l'étage de nitrification, à l'exception du diamètre de média qui est légèrement plus élevé (4,5 mm). Comme l'affluent de cet étage contient très peu de DCO biodégradable, pour réaliser la dénitrification, du méthanol est injecté comme source de carbone exogène à cette fin. L'injection d'acide phosphorique peut aussi être effectuée en tête de ces deux batteries afin d'assurer les besoins de phosphore pour la croissance bactérienne à l'étage de post-dénitrification.

En temps de pluie, il est possible d'envoyer une partie de l'eau prétraitée directement vers les clarificateurs en contournant les bassins biologiques. Il est aussi possible d'envoyer le mélange

de l'eau prétraitée et l'eau en sortie des décanteurs secondaires directement vers la nitrification en contournant les clarificateurs (voir Figure 3.1). Ces changements de la configuration de traitement permettent d'augmenter la capacité de traitement et de renforcer le traitement de particules en temps de pluie.

3.1.2. Fonctionnement actuel

a. Définition des débits de référence pour la file de traitement des eaux

Trois débits de référence ont été considérés en entrée de la station Seine Aval afin de dimensionner les étapes de traitement des eaux dans le cadre des études de conception du projet de refonte (SIAAP, 2016).

- Le débit minimum

Le cas de débit minimum considéré par le projet BioSAV est de 893 000 m^3/j (10,3 m^3/s). Cette valeur est trouvée dans le document de note justificative process du projet BioSAV qui est utilisée pour déterminer des temps de séjour des procédés (SIAAP, 2012).

- Le débit moyen annuel

Le débit moyen journalier défini pour la file de traitement des eaux de la station Seine Aval est de 1 210 000 m^3/j (14 m^3/s). En prenant en compte un débit supplémentaire de 240 000 m^3/j (2,8 m^3/s) pendant deux mois de l'année à cause de l'arrêt ou la maintenance des autres stations du SIAAP. Le débit moyen annuel devient donc 1 250 000 m^3/j (14,5 m^3/s).

- Le débit maximum

Le débit maximum considéré est de 2 300 000 m^3/j (26,6 m^3/s) qui correspond au débit de référence (défini par le Service de la Navigation de la Seine) en dessous duquel les rejets de la station Seine Aval doivent respecter les exigences de rejet imposées par la réglementation.

b. Configuration de traitement

La Figure 3.2 montre la configuration de traitement actuelle de la file de traitement des eaux de la station Seine Aval, qui correspond à la configuration envisagée lors de la conception du projet BioSAV. Comme c'était déjà le cas avant la modernisation de la station, l'eau prétraitée est d'abord décantée par les 20 décanteurs primaires conventionnels. Ensuite, l'eau en sortie des décanteurs est traitée par deux filières de traitement placées en parallèle : la filière BRM et la filière biofiltration. Parmi les 20 décanteurs, quatre (capacité totale : 7,8 m^3/s) servent principalement pour la filière BRM, tandis que le reste alimente plutôt la filière biofiltration. En cas de besoin, il est possible de contourner une partie de l'eau prétraitée mais non-décantée (2 m^3/s au maximum) vers la filière BRM afin d'augmenter la charge en carbone pour les réacteurs biologiques et donc optimiser la dénitrification et éventuellement la déphosphatation biologique dans les zones anoxie et anaérobie de la filière (voir la section de fonctionnement de la filière BRM).

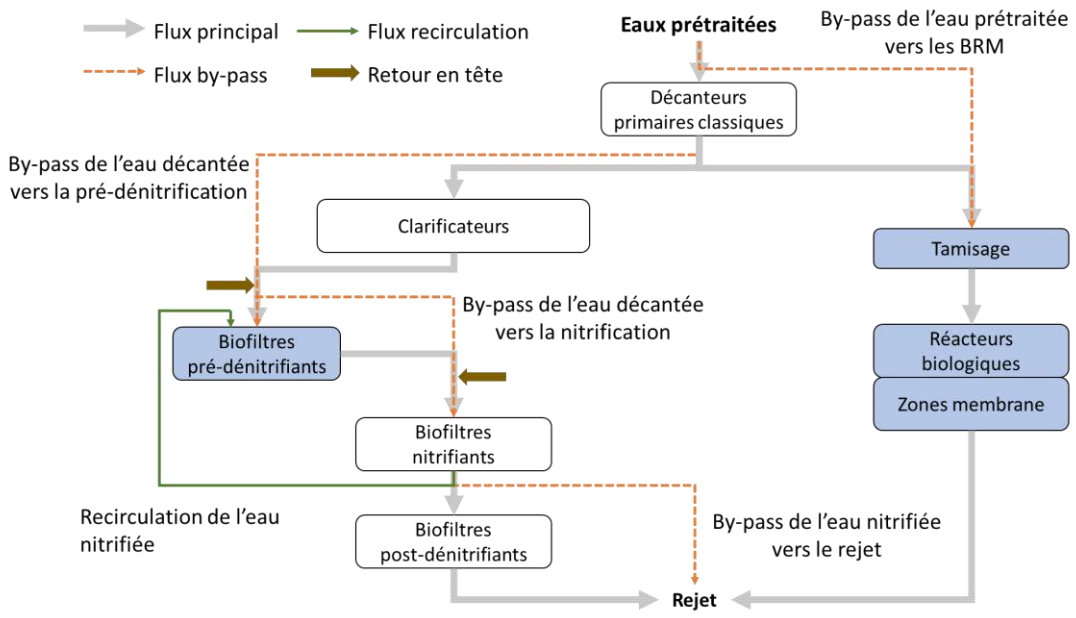


Figure 3.2 Mode de traitement global de la file de traitement des eaux usées de la Station Seine Aval après les travaux du projet BioSAV. Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV.

- Fonctionnement de la filière BRM

Le débit instantané pour la filière BRM est défini en fonction du débit entrant de la Station Seine Aval. Il peut varier de 1 à 4 m^3/s (voir Tableau 3.1). Il est à noter que le débit maximum de 4 m^3/s est limité à 13 heures par période de 24 heures afin de respecter le flux maximal pour la filière BRM.

Tableau 3.1 Consignes de débit instantané pour la filière BRM en fonction de débit entrant sur la station Seine Aval (SIAAP, 2016).

Débit entrant sur Seine Aval (Q_{SAV})	Consigne débit filière BRM
$Q_{SAV} < 7\ m^3/s$	$1\ m^3/s$
$7\ m^3/s \leq Q_{SAV} < 10\ m^3/s$	$1{,}5\ m^3/s$
$10\ m^3/s \leq Q_{SAV} < 14\ m^3/s$	$2\ m^3/s$
$14\ m^3/s \leq Q_{SAV} < 18\ m^3/s$	$2{,}5\ m^3/s$
$18\ m^3/s \leq Q_{SAV} < 21\ m^3/s$	$3\ m^3/s$
$21\ m^3/s \leq Q_{SAV} < 25\ m^3/s$	$3{,}5\ m^3/s$
$25\ m^3/s \leq Q_{SAV}$	$4\ m^3/s$

Les eaux envoyées à la filière BRM sont d'abord tamisées par 12 tamis de 1 mm pour réduire l'accumulation de filasses dans les membranes situées en aval. Elles sont ensuite distribuées uniformément sur 2 lignes de 3 réacteurs de traitement biologique en parallèle, chacune reliée avec 14 cuves de membranes qui servent à séparer l'eau épurée et les boues biologiques (voir Figure 3.3a). L'eau en sortie des cuves de filtration membranaire est soit envoyée au rejet global

de la station, soit réutilisée comme eau industrielle sur place (l'eau de lavage pour les tamis).

Chaque réacteur biologique de la filière BRM est constitué de 4 zones successives possédant un volume total de 19 573 m^3 (voir Figure 3.3b) : la zone pré-anoxie (dénitrification, 373 m^3), la zone anaérobie (déphosphatation biologique, 4 400 m^3), la zone anoxie (dénitrification, 6 000 m^3) et la zone aérée (traitement du carbone, nitrification et déphosphatation biologique, 8 800 m^3). Pendant le traitement, les liqueurs mixtes sont recirculées de la zone anoxie vers la zone pré-anoxie (environ 130% du débit d'entrée du réacteur) et de la zone aérée vers la zone anoxie (environ 240% du débit d'entrée du réacteur). Une partie des boues biologiques séparées par les membranes est recirculée à la zone aérobie (environ 400% du débit d'entrée du réacteur). Pour compléter la déphosphatation, chaque réacteur est équipé de deux points d'injection de chlorure ferrique ($FeCl_3$) pour enlever les phosphores par la voie physico-chimique en plus de la voie biologique. Le premier point d'injection est installé en sortie de la zone anaérobie et effectue un dosage continu, tandis que le deuxième se situe à la fin de la zone aérée pour réaliser un ajout supplémentaire en cas de besoin d'affinage de la concentration de phosphore en sortie.

Chaque cuve de filtration membranaire contient 480 modules membranaires (Zeeweed®, GE) possédant une surface totale de filtration de 16 512 m^2. Les membranes sont fabriquées en poly-fluorure de vinylidène (Polyninylidene fluoride en anglais, PVDF), et possèdent une taille des pores de 0,04 µm de diamètre.

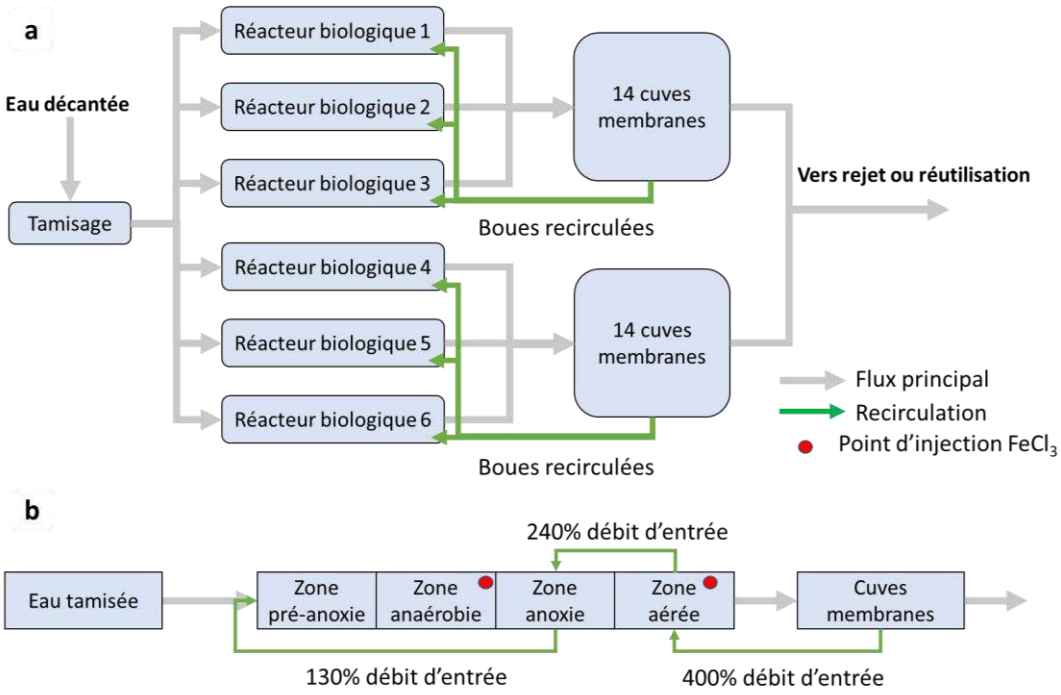


Figure 3.3 Fonctionnement détaillé de la filière BRM actuelle. a. La filière globale. b. Un des six réacteurs biologiques relié aux cuves membrane.

- Fonctionnement de la filière biofiltration

Le fonctionnement détaillé de la filière biofiltration est résumé à la Figure 3.4. Après la décantation primaire, une partie de l'eau décantée alimentant la filière biofiltration est d'abord traitée par les neuf clarificateurs Actiflo® qui étaient placés en aval des quatre files de boues activées avant la refonte (voir Figure 3.1).

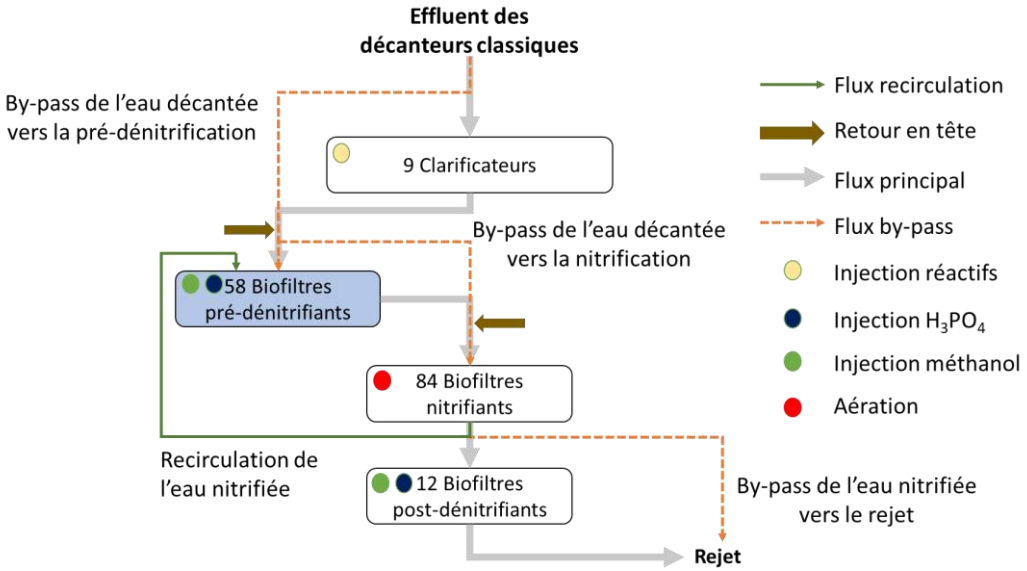


Figure 3.4 Fonctionnement détaillé de la filière biofiltration actuelle. Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV.

L'eau décantée non-traitée par les clarificateurs est pompée directement vers le procédé de biofiltration en trois étages. Considérant la capacité de traitement des clarificateurs (25 m^3/s) et de pompage du by-pass (22 m^3/s), le débit maximum d'eau décantée envoyée vers les trois étages de la biofiltration est de 47 m^3/s. Les informations techniques détaillées pour les pompes de bypass de l'eau décantée peuvent être trouvées dans le Tableau A1.3 dans l'Annexe 1.

Les eaux en sortie des clarificateurs et l'eau décantée by-passée se réunissent dans le canal d'alimentation de la pré-dénitrification et sont traitées ensuite par les trois étages de biofiltration : pré-dénitrification, nitrification et post-dénitrification. La pré-dénitrification vise à éliminer les nitrates et nitrites présents dans l'eau nitrifiée recirculée en utilisant les matières organiques dans l'eau décantée et le méthanol injecté. Cet étage consiste en 58 biofiltres (Biostyr®, Veolia) divisés en trois lignes de traitement (appelées batterie A, B et C). Les batteries A et B ont été construites dans le cadre du projet BioSAV et possèdent chacune 20 biofiltres, tandis que la batterie C consiste de 18 biofiltres anciennement affectés à la post-dénitrification. Ces trois batteries peuvent traiter jusqu'à 31,2 m^3/s, correspondant à une vitesse de filtration maximale de 12 m/h sur 54 biofiltres en fonctionnement. On considère qu'il y a quatre biofiltres qui ne sont pas en service. Ils sont considérés soit en lavage pour enlever le biofilm en excès (trois biofiltres), soit en maintenance pour réparer des ouvrages ou des

équipements (un biofiltre). Lorsque le débit d'eau décantée dépasse la capacité de traitement de la pré-dénitrification, des déversoirs installés dans le canal d'alimentation permettent de faire passer le surplus de débit vers le canal de sortie de cet étage. Les eaux contournées sont ainsi envoyées directement à l'étage de nitrification (voir Figure 3.4).

Le lit de média de chaque biofiltre possède une hauteur de 3,5 m et une surface de 173 m². Le média utilisé sont les billes de polystyrène qui ont un diamètre de 4,5 mm. Pendant le traitement, l'eau décantée et l'eau nitrifiée recirculée sont d'abord pompées par les systèmes de pompage de chaque batterie et ensuite mélangées par des planchers perforés (cas des batteries A et B) ou par un mur vertical muni de trous (cas de la batterie C), dans les deux cas situés dans les canaux entre l'arrivée des deux effluents et les biofiltres eux-mêmes. Les informations des pompes pour relever l'eau décantée et l'eau nitrifiée sont résumées au Tableau A1.4 de l'Annexe 1. Le taux de recirculation de l'eau nitrifiée se situe normalement entre 30% et 80% du débit d'eau décantée alimentant la biofiltration. Lorsque le débit d'eau décantée est élevé, les opérateurs de la station peuvent diminuer ce taux en fonction de la capacité hydraulique maximale de l'étage de pré-dénitrification. En plus de l'eau décantée et l'eau nitrifiée, l'étage de pré-dénitrification traite aussi l'effluent issu de l'unité de traitement des jus venant de l'hygiénisation thermique des boues, les eaux de retour de l'épaississement des boues (centrifugation et épaississeurs lamellaires) et les eaux issues du traitement des eaux de lavage des biofiltres pré-dénitrifiants. Ceci représente au total environ 10% de l'eau envoyée vers la pré-dénitrification. Ces retours en tête sont injectés soit en amont du pompage de l'eau décantée dans le carneau d'alimentation de la pré-dénitrification, soit directement dans la batterie C. En plus du méthanol, de l'acide phosphorique peut aussi être injecté en tête de la pré-dénitrification. Cet ajout vise à couvrir les besoins de phosphate pour le traitement biologique par la biofiltration en particulier pour la nitrification et la post-dénitrification.

L'eau pré-dénitrifiée et l'eau by-passée du canal d'alimentation de la pré-dénitrification sont pompées et traitées par l'étage de nitrification préexistant avant le projet BioSAV (voir section 3.1.1.). Hormis quelques exceptions, son fonctionnement actuel est resté similaire à celui avant la refonte. L'eau en sortie de l'étage de nitrification peut être recirculée vers l'étage de pré-dénitrification et s'écouler gravitairement vers l'étage de post-dénitrification. Lorsque le débit de l'eau nitrifiée non-recirculée dépasse la capacité de traitement des biofiltres post-dénitrifiants, la partie dépassée sera envoyée directement vers le rejet de la station en contournant le traitement de post-dénitrification (voir Figure 3.4).

L'eau nitrifiée arrivant à l'étage de post-dénitrification est traitée par la batterie de 12 biofiltres Biofor® préexistant avant la refonte et présentée à la section 3.1.1. La capacité totale de traitement prévue selon les études de conception du projet BioSAV est de 11,22 m^3/s avec 11

biofiltres en fonctionnement (considérant 1 biofiltre en lavage). Comme le mode de traitement avant la refonte, méthanol et H_3PO_4 sont ajoutés en tête de l'étage de post-dénitrification.

Les informations techniques de ces trois étages de biofiltration sont résumées aux Tableaux A1.5 dans l'Annexe 1.

3.1.3. Fonctionnement à l'issue de la refonte prévu en 2022

Le fonctionnement de la file de traitement des eaux de la station prévu pour l'année 2022 présenté ici est basé sur les informations actuellement disponibles issues des documents de conception et d'échange avec plusieurs agents du SIAAP. Il est probablement différent du fonctionnement final qui sera réellement mis en œuvre en 2022, mais il se base sur les projections les plus récentes disponibles jusqu'à la fin du travail de simulation de cette thèse (fin de l'année 2019). Ces projections sont avérées et suivies par les exploitants de la station Seine Aval. En 2022, le débit journalier de référence de la station ne devrait pas être modifié (2300000 m^3/j soit 26,6 m^3/s). La configuration de la file de traitement des eaux doit normalement varier en fonction du débit d'eau à traiter en entrée de la station.

a. Configuration de traitement prévu en cas de débit normal (Débit ≤ 30 m^3/s)

La configuration de traitement prévue en cas de débit normal est illustrée par la Figure 3.5. Par rapport à la configuration actuelle, de nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques (type de technologie de décanteur encore inconnu) remplaceront les décanteurs conventionnels (voir le bloc en orange dans la Figure 3.5). Il y aura 20 nouveaux décanteurs parmi lesquels 15 serviront principalement pour alimenter la filière biofiltration avec une capacité totale de 26 m^3/s. Les 5 décanteurs restant traiteront les eaux pour la filière BRM avec une capacité totale de 4 m^3/s. Des réactifs (coagulant et polymère de nature exacte encore inconnue) seront injectés dans les décanteurs pour la filière biofiltration pendant le traitement, tandis que l'utilisation des réactifs pour les 5 décanteurs en tête de la filière BRM sera optionnelle. De plus, les clarificateurs actuellement utilisés en tête de la filière biofiltration serviront plutôt comme clarificateurs tertiaires (voir le bloc en gris dans la Figure 3.5) pour réaliser principalement la déphosphatation par la voie physico-chimique après les trois étages de biofiltration. Cette déphosphatation tertiaire est réalisée de manière alternative en fonction de la capacité hydraulique des clarificateurs. Les modes de traitement actuellement utilisés pour le reste de la filière biofiltration ainsi que la filière BRM devraient être conservés en 2022. La Figure 3.6 montre le mode de fonctionnement en détails de la filière biofiltration en cas de débit normal. Les informations sur le pompage de l'eau décantée vers ces deux filières ainsi que le pompage de l'eau dénitrifiée vers la clarification tertiaire sont actuellement inconnues.

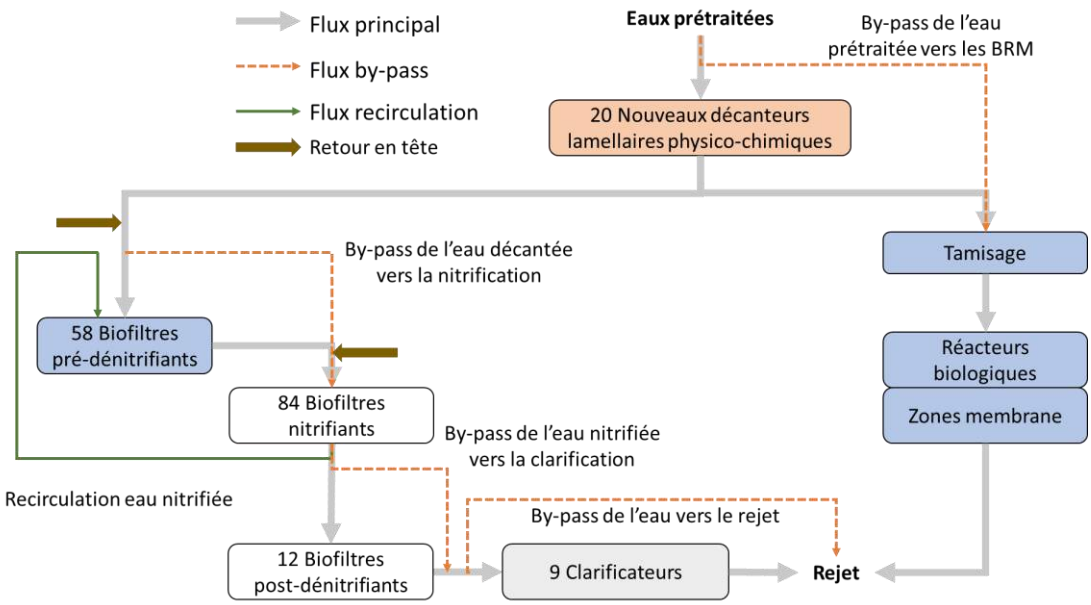


Figure 3.5 Mode de traitement global du traitement des eaux usées de la station Seine Aval en cas de débit normal prévu en 2022 (Débit ≤ 30 m3/s). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode tertiaire.

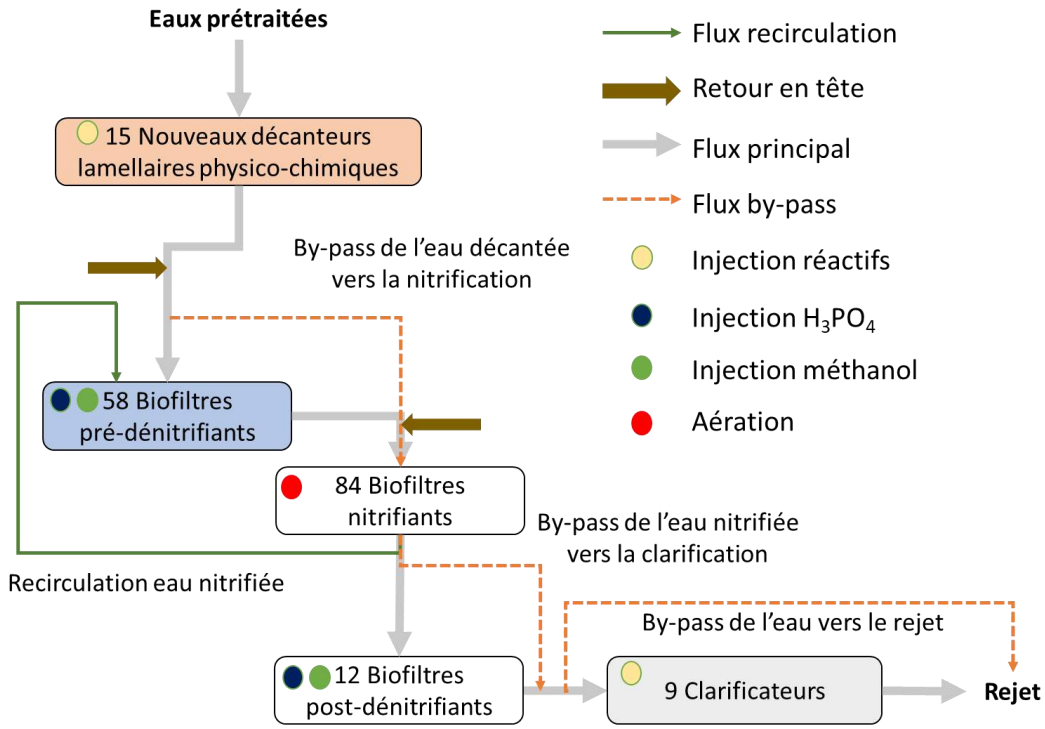


Figure 3.6 Mode de traitement en détails de la filière biofiltration prévu en 2022 (Cas de débit normal). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode tertiaire.

b. Mode de traitement prévu en temps de pluie (Débit > 30 m³/s)

Lorsque le débit à traiter par la file de traitement des eaux usées dépasse 30 m³/s, les clarificateurs tertiaires seront utilisés comme décanteurs primaires et travailleront en parallèle avec les nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques afin d'augmenter la capacité totale du traitement primaire jusqu'à 55 m³/s (voir Figure 3.7).

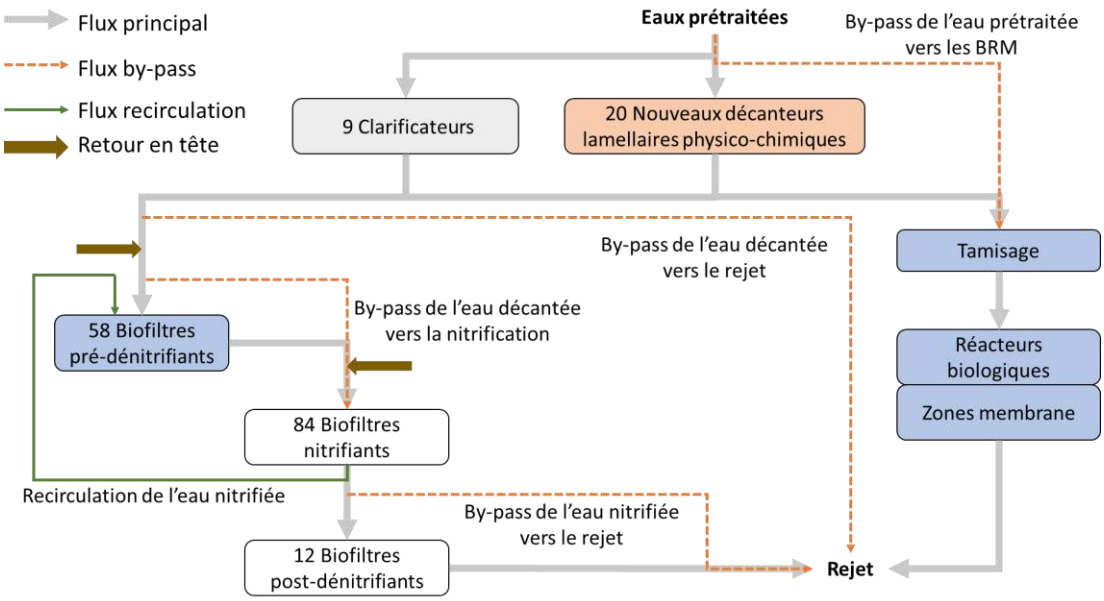


Figure 3.7 Mode de traitement global du traitement des eaux usées de la station Seine Aval en temps de pluie prévu en 2022 (Débit >30 m³/s). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode primaire.

Les eaux traitées par les clarificateurs en mode primaire seront envoyées vers les trois étages de biofiltration. Au besoin et lors de débits très élevés, tous les nouveaux décanteurs pourront traiter les eaux avec injection de réactifs avant de les envoyer vers la filière biofiltration. La filière BRM sera donc alimentée uniquement par les eaux prétraitées, avec un débit maximal de 2 m³/s. Ce débit est décidé pour éviter la surcharge du traitement par tamisage de la filière BRM. Dans ce cas-ci, la capacité totale de la file de traitement de l'eau de la station Seine Aval atteindra 57 m³/s (55 m³/s+2 m³/s). En fonction de la capacité de traitement des trois étages de biofiltration, il sera possible de rejeter directement une partie de l'eau décantée vers la Seine. Le mode de traitement des trois étages de biofiltration et de la filière de BRM en temps de pluie sera identique à celui en cas de débit normal. Cependant, le taux de recirculation de l'eau nitrifiée en sortie de l'étage de nitrification sera probablement diminué jusqu'à 0% à cause du fort débit de l'eau décantée en entrée de la filière biofiltration. La Figure 3.8 illustre le mode de traitement en détails de la filière biofiltration en cas de temps de pluie.

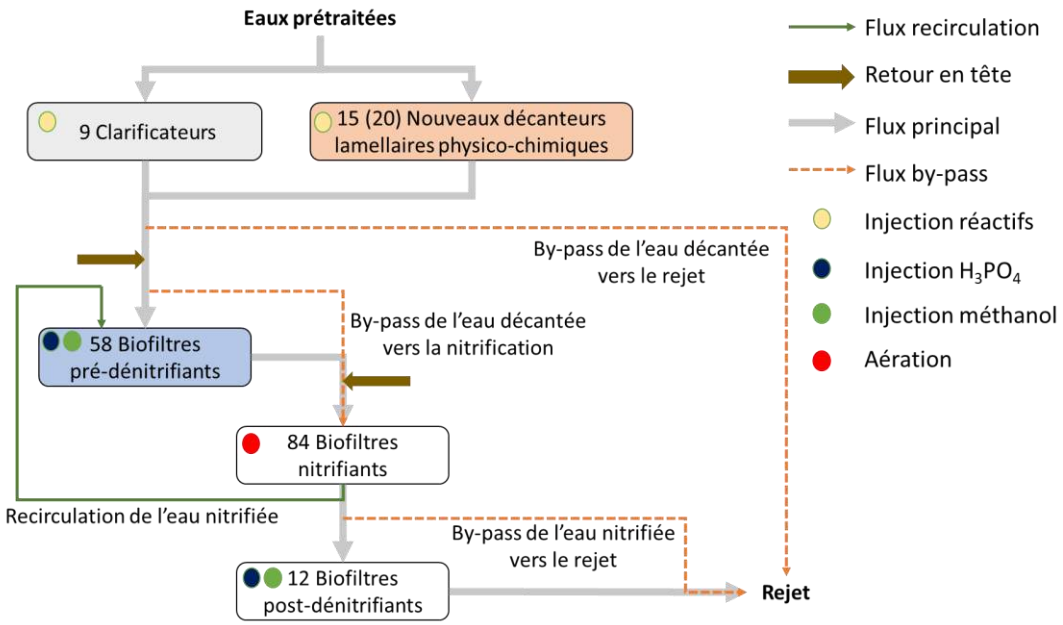


Figure 3.8 Mode de traitement en détails de la filière biofiltration prévu en 2022 (en temps de pluie). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Bloc en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Bloc en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode primaire.

3.2.Stratégie de modélisation de la filière biofiltration par rapport aux phases de la refonte de la station Seine Aval

Tel que mentionné dans le Chapitre 1, la modélisation de la filière biofiltration globale en 2022 consiste en deux étapes successives : la modélisation des procédés individuels dans la filière biofiltration et la construction du modèle filière à partir des modèles procédés individuels. Pour réaliser ces deux étapes, les informations des procédés (dimensions, opération et commande) ainsi que les données d'exploitations sont nécessaires pour réaliser la modélisation et la procédure de calibration-validation des modèles. Cependant, comme la refonte de la station Seine Aval n'est pas encore finie, certaines informations et données des procédés de la filière à modéliser ne sont pas encore disponibles ou accessibles. Pour surmonter ces contraintes, une stratégie de modélisation en deux temps a été développée pour réaliser ce travail de modélisation.

3.2.1. Stratégie de la modélisation des procédés individuels de la filière biofiltration

Pour être représentatif de la station Seine Aval en 2022, le modèle filière biofiltration à construire doit inclure les nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques primaires (pour la filière biofiltration), les trois étages de biofiltration et les clarificateurs tertiaires (en mode tertiaire et primaire) (voir la Figure 3.6 et la Figure 3.8). Comme les décanteurs primaires et les clarificateurs tertiaires sont prévus d'être mis en route en 2022, il n'y pas de données d'exploitation disponibles pour réaliser la modélisation. Parmi les trois unités de biofiltration, selon les échanges avec les agents du SIAAP de la station Seine Aval dans le cadre de la thèse, la pré-dénitrification qui a été mise en route en 2017 a des soucis de représentativité de mesure sur la performance de traitement causés par les sondes et les préleveurs installés, tandis que la post-dénitrification est en réparation pour résoudre des problèmes de colmatage. Afin d'éviter de perdre du temps pour attendre les données représentatives du fonctionnement des procédés qui sont en cours de rodage ou en construction, il faut d'abord chercher de construire les modèles sur des procédés similaires ailleurs au SIAAP et ensuite les adapter (ou ré-calibrer si nécessaire) à ceux de la station Seine Aval lorsque les données et informations des procédés sont disponibles. Une stratégie de modélisation par rapport à l'avancement de la refonte de la station Seine Aval et les états actuels des procédés a donc été proposée en début de thèse. Elle a défini l'ordre de modélisation des procédés individuels dans la filière et a identifié les procédés similaires à modéliser exploités dans d'autres stations du SIAAP (voir Tableau 3.2).

Tableau 3.2 Ordre de modélisation pour les procédés individuels de la filière biofiltration et stations correspondantes dont proviennent les données utilisées pour la calibration et validation.

Ordre de modélisation	Procédés à modéliser	Stations avec procédés installés
1	Nitrification	Station Seine Aval (SAV)
2	Post-dénitrification	Station Seine Centre (SEC)
3	Pré-dénitrification	Station Seine Grésillons (SEG)
4	Décantation primaire	Station Seine Centre (SEC)
5	Clarification tertiaire	Station Seine Amont (SAM)

La modélisation des procédés individuels commence par la construction du modèle pour l'étage de nitrification, directement sur le procédé installé à la station Seine Aval. Mis à part l'ajout de la recirculation de l'eau nitrifiée vers la pré-dénitrification après le traitement et l'augmentation du débit de traitement à cause de cette recirculation, son mode de traitement en 2022 ne sera pas différent de celui en place avant la refonte ou même actuellement. De plus, beaucoup de données mesurées sur la performance de traitement de ce procédé sont disponibles depuis plusieurs années. Selon les données d'exploitation disponibles depuis la réalisation du projet BioSAV, son fonctionnement correspond généralement à celui attendu pour 2022. De plus, la calibration et la validation du modèle SimBio (Bernier *et al.*, 2014b) ont été réalisées sur ce procédé en se basant sur les données avant la réalisation des travaux du projet BioSAV. Ceci permet donc de disposer d'une base de valeurs de paramètres de modèles déjà partiellement calibrées pour le travail de modélisation sur ce procédé. Pour ces raisons, la construction du modèle pour l'étage de la nitrification est réalisée directement sur le procédé lui-même. Pour réaliser les objectifs présentés dans le Chapitre 1 comme l'évaluation des coûts et des impacts environnementaux, le modèle développé est différent du modèle SimBio afin de prendre en compte la prédiction de la consommation d'énergie et de la production/dégradation biologique du N_2O pendant le traitement. Dans ce cas-ci, un travail de calibration-validation du modèle doit être réalisé. D'ailleurs, la performance du modèle doit aussi être validée sur des données plus récentes après les travaux du projet BioSAV.

De manière similaire à l'étage de nitrification, le mode de traitement actuel de l'étage de post-dénitrification des 12 biofiltres Biofor® de la station Seine Aval sera conservé en 2022. Cependant, tel que mentionné précédemment ce procédé a eu certains problèmes de colmatage excessif ces dernières années. Les biofiltres de cet étage sont donc souvent à l'arrêt pour maintenance ou fonctionnent en tant que filtre passant (filtre alimenté en eau mais pas en méthanol). Malheureusement, les informations sur le nombre de filtres passants ne sont pas enregistrées dans la base de données de la station. Les réparations pour régler ce problème de colmatage étaient en cours lors de la thèse et étaient prévus se terminer en 2019. Donc, les

données du fonctionnement pour cet étage ne sont pas jugées représentatives par rapport au fonctionnement normal attendu pour le procédé. Pour cette raison, la modélisation de l'étage de post-dénitrification est plutôt réalisée sur le procédé installé à la station Seine Centre. Celui-ci est aussi constitué de biofiltres Biofor®. Ces derniers ont une hauteur de média (diamètre 3 mm) de 2,9 m, avec une surface de 104 m² (voir Tableau A1.6 dans l'Annexe 1). Le procédé de post-dénitrification de la station Seine Centre a également été simulé par le modèle SimBio lors de travaux antérieurs (Bernier *et al.*, 2014a). Une modification des dimensions du lit de média dans le modèle de post-dénitrification calibré sur la station Seine Centre devra être faite pour l'adapter ensuite à la station Seine Aval. Eventuellement, une recalibration mineure des paramètres du modèle pourrait être nécessaire après la finalisation des travaux de réhabilitation des 12 biofiltres de la station Seine Aval.

Les 58 biofiltres pré-dénitrifiants de type Biostyr® ont été mis en route au mois de février 2017. Cependant, tel que présenté précédemment, à cause de problèmes des sondes et des préleveurs installés dans l'étage, certaines données d'exploitation actuellement disponibles ne sont pas représentatives pour le fonctionnement de la pré-dénitrification et donc ne peuvent pas être utilisées pour construire le modèle. Pour cette raison, la modélisation de ce procédé est réalisée sur celui installé à la station Seine Grésillons (SEG). Celui-ci contient 12 biofiltres pré-dénitrifiants de type Biostyr®. Les dimensions du lit de média ainsi que le diamètre des billes de polystyrène utilisées par les biofiltres de ces deux procédés sont identiques (voir le Tableau A1.7 dans l'Annexe 1). Cependant, le procédé sur Seine Grésillons (SEG) n'inclut pas d'injection d'une source de carbone exogène (méthanol ou autre). Les caractéristiques biologiques (vitesse de dénitrification et rendements bactériens) de ce procédé sont probablement quelque peu différentes par rapport à celles du procédé installé de la station Seine Aval. Tout comme pour la post-dénitrification, il est probable qu'une légère recalibration soit nécessaire pour le modèle pré-dénitrification après qu'une base de données représentatives du fonctionnement "normal" de l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval soit disponible. Comme ce procédé n'a jamais été modélisé par le SIAAP, il faut donc prendre du temps pour échanger avec les agents de la station Seine Grésillons afin de mieux connaître le fonctionnement du procédé et récolter les données d'exploitations et les informations de procédé pour la calibration du modèle. Ces travaux sont considérés d'être réalisés en parallèle de la modélisation de l'étage de nitrification et de post-dénitrification. Pour cette raison, le travail de modélisation de la pré-dénitrification a été réalisée après la construction du modèle en post-dénitrification.

Le travail de modélisation de ces trois étages de biofiltration fait l'objet du Chapitre 4.

L'étape suivante de la stratégie de modélisation consiste à construire le modèle pour les

nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques primaires. Les travaux de conception étaient en phase d'appel d'offre lors de l'élaboration de la stratégie de la modélisation des procédés. Comme il n'y a à ce jour aucune donnée d'exploitation disponible sur le fonctionnement du procédé et que les détails techniques précis sur les dimensions et la nature des réactifs à utiliser sont encore peu nombreuses, le modèle de décantation primaire a d'abord été construit sur les décanteurs lamellaires physico-chimiques (Densadeg®, Degrémont Technologies) de la station Seine Centre. La raison de ce choix est que le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016), qui illustre le fonctionnement de décanteur lamellaire physico-chimique, a été construit en se basant sur cet ouvrage et calibré sur les données d'exploitations long-terme collectées de la station (années 2000-2008). Les informations techniques principales sur les décanteurs Densadeg® de la station Seine Grésillons peuvent être trouvées au Tableau A1.8 dans l'Annexe 1.

Les clarificateurs tertiaires sont modélisés en dernière étape. Les informations techniques sur les neuf clarificateurs Actiflo® peuvent être trouvées dans le tableau A1.9 dans l'Annexe 1. Comme ces clarificateurs n'ont quasiment jamais été utilisés en traitement tertiaire dans le passé, les clarificateurs tertiaires de type Actiflo® dans la station Seine Amont (SAM, appelée aussi Seine Valenton) ont été choisis pour construire le modèle. Le dimensionnement des clarificateurs dans ces deux stations est identique. Considérant que le dosage de $FeCl_3$ utilisé et les caractéristiques de l'affluent des clarificateurs de la station Seine Aval seront probablement différents de ceux de la station Seine Amont, un léger ajustement des paramètres du modèle développé pourra être nécessaire.

Le travail de modélisation de ces deux procédés de traitement physico-chimique est présenté en détails au Chapitre 5.

3.2.2. Stratégie de construction du modèle filière globale

La construction du modèle filière globale consistera en un assemblage des modèles procédés individuels en faisant des liens entre eux selon les configurations du traitement prévues en 2022. Comme chaque modèle individuel représente la performance de procédé d'un seul décanteur ou biofiltre et qu'un nombre variable de réacteurs interagissent dans la filière biofiltration, une adaptation doit être réalisée afin de maintenir le bilan de débit d'eau en entrée et en sortie de chaque procédé modélisé. De plus, considérant que le modèle sera utilisé pour prédire et optimiser la performance de traitement de la station Seine Aval au complet, il doit prédire la performance de la filière sous différents scénarios d'entrée et d'optimisation proposés. Le modèle doit donc être capable de réagir et de s'adapter de lui-même aux variations d'affluent (débit et concentration) et en fonction des consignes de traitement demandées en sortie de chaque procédé, qui sera similaire aux comportements de la filière de traitement réelle. Par exemple, en réalité, le débit d'air injecté dans l'étage de nitrification peut être changé en fonction de la charge d'ammonium en entrée de procédé et de la consigne de traitement imposée par les exploitants. Pour cette raison, les règles de commande en vigueur pour chaque étape du traitement de la station doivent être intégrées dans le modèle filière. Cependant, comme la refonte de la station n'est pas encore complètement finie, les informations précises sur certaines règles de commande ne sont pas disponibles aujourd'hui surtout pour les ouvrages qui ne sont pas encore mis en route (décanteurs primaires et clarificateurs tertiaires). De plus, considérant la performance de traitement et l'état d'ouvrage (maintenance et réparation), certaines règles de commande imposées initialement pour les procédés existants (trois étages de biofiltration) ne sont pas toujours suivies par les exploitants. Ces règles de commande doivent donc être modélisées en combinant des hypothèses réalistes et les règles utilisées actuellement sur des procédés similaires ailleurs au SIAAP.

Après avoir étudié le mode de traitement de la filière biofiltration prévu en 2022 (voir Figure 3.6 et Figure 3.8), trois catégories de règles de commande à intégrer au modèle filière ont été identifiées. La première catégorie concerne la distribution et la répartition de l'eau entre les procédés, incluant les bypass et les recirculations. La deuxième catégorie inclut les règles de commande du nombre de réacteurs (décanteurs ou biofiltres) en service pour chaque procédé. Ces règles permettent de premièrement respecter le bilan de débit d'eau pour chaque modèle de procédé. Deuxièmement, contrairement à d'autres procédés de traitement comme la boue activée, les biofiltres peuvent facilement être démarrés ou arrêtés en fonction des besoins de traitement. Dans ce cas-ci, une estimation du nombre de biofiltres en fonctionnement est nécessaire pour reproduire correctement la performance de traitement de la filière. Finalement, tel que présenté précédemment, le mode de traitement (primaire ou tertiaire) en 2022 pour les

clarificateurs préexistants est décidé en fonction du débit à l'entrée de la station. Pour bien simuler la performance de traitement sous différentes configurations, une estimation du nombre de décanteurs (clarificateurs) fonctionnant en traitement primaire et/ou tertiaire est aussi nécessaire. La dernière catégorie concerne les règles d'ajout de réactif et d'aération (pour l'étage de nitrification).

Le Tableau 3.3 résume les règles de commande considérées à être intégrées dans le modèle filière et le niveau de disponibilité des informations techniques nécessaires pour y arriver. Le niveau 0 dans le tableau signifie qu'il n'y pas d'informations disponibles sur les règles de commande qui sont ou seront réellement utilisées sur Seine Aval. Leur modélisation doit donc être basée sur une combinaison d'hypothèses basées sur les règles de commande utilisées ailleurs au SIAAP. Le niveau 1 indique que les principes de commande sont illustrés dans les manuels de procédé ou présentés brièvement lors d'échanges avec les agents du SIAAP, mais les équations en détails et les valeurs de paramètres correspondantes ne sont pas disponibles. Il faut développer donc les équations de commande selon ces principes. Le niveau 2 correspond à la situation où les équations et les valeurs de paramètres pour les règles de commande sont disponibles en détails et peuvent être utilisées directement pour la modélisation.

Tel qu'indiqué au Tableau 3.3, les équations et paramètres de command de l'aération de la nitrification sont disponibles (le niveau de la disponibilité d'information=2). L'intégration de ces règles de commande est réalisée lors de la modélisation de l'étage de nitrification (voir Chapitre 4). La modélisation et l'intégration des autres règles de commande est quant à elle présentée en détails au Chapitre 6.

Tableau 3.3 Règles de commade des procédés considérées pour la construction du modèle filière et niveaux de disponibilité d'informations correspondants (détails fournis dans le texte).

Procédés	Règles de commande considérées	Unité	Disponibilité d'informations
Décantation primaire	Distribution de l'eau prétraitée entre la filière biofiltration et la filière BRM	m^3/j	1
	By-pass de l'eau prétraitée vers le rejet	m^3/j	0
	Nombre de décanteurs actifs	-	0
	Taux d'injection $FeCl_3$	g/m^3	0
Pré-dénitrification	By-pass de l'eau décantée vers la nitrification	m^3/j	1
	Recirculation de l'eau nitrifiée	m^3/j	1
	Nombre de biofiltres actifs	-	1
	Taux d'injection méthanol	$g/gN\text{-}NO_x$	1
	Taux d'injection H_3PO_4	g/m^3	1
Nitrification	Nombre de biofiltres actifs	-	1
	Débit d'air injecté	Nm^3/h	2
Post-dénitrification	By-pass de l'eau nitrifiée vers la clarification tertiaire	m^3/j	1
	Taux d'injection méthanol	$g/gN\text{-}NO_x$	1
	Taux d'injection H_3PO_4	g/m^3	1
Clarification tertiaire	By-pass de l'eau dénitrifiée vers le rejet	m^3/j	0
	Mode de fonctionnement primaire ou tertiaire	-	1
	Nombre de clarificateurs actifs	-	0
	Taux d'injection $FeCl_3$	g/m^3	0

Références

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Bernier, J., Guérin, S., Azimi, S., Rocher, V., & Lessard, P. (2016). Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 391*, 75-82.

SIAAP. (2012). *Note justificative process BioSAV.*

SIAAP. (2016). *Manuel général: Présentation de l'usine SAV.*

Chapitre 4 Modélisation des procédés de biofiltration

Ce chapitre qui est fractionné en six parties, présente en détails le travail de modélisation des procédés de biofiltration (pré-dénitrification, nitrification et post-dénitrification) réalisé dans le cadre de cette thèse. La première partie illustre les étapes principales de la construction, la calibration et la validation du modèle de biofiltration. La deuxième partie décrit en détail la construction du modèle de biofiltration à partir du modèle SimBio (Bernier *et al.*, 2014b). Les trois parties suivantes présentent chacune la méthode et les résultats de la calibration-validation d'un procédé de biofiltration selon l'ordre de modélisation présentée dans le Chapitre 3 : nitrification, post-dénitrification et pré-dénitrification. La dernière partie apporte les conclusions ainsi que les perspectives sur le travail de modélisation réalisé et le modèle de biofiltration développé.

4.1. Étapes principales de modélisation des procédés de biofiltration

La Figure 4.1 illustre la procédure générale de modélisation des procédés de biofiltration employée dans le cadre de ce travail. Tel que présenté au Chapitre 3, seule la modélisation de la nitrification est réalisée directement sur l'étage de la station Seine Aval. Les travaux sur la post-dénitrification et la pré-dénitrification sont réalisés sur l'étage correspondant de la station Seine Centre et celui de la station Seine Grésillons, respectivement. La première étape de modélisation concerne le choix du modèle de biofiltration et son implantation dans le logiciel WEST® (DHI, Høsholm, Danemark). Dans ce cas-ci, le modèle de biofiltration développé par Bernier *et al.* (2014b) a été choisi comme modèle de base. Les raisons derrière le choix de ce modèle sont que premièrement, les phénomènes principaux impliqués dans la biofiltration (transport des composants, système de biofilm, cycle de lavage, etc.) sont pris en compte par ce modèle. Deuxièmement, comme ce qui a déjà indiqué dans le Chapitre 3, ce modèle a déjà été calibré et validé dans le passé sur les performances de traitement de l'étage de nitrification de la station Seine Aval et l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre. Troisièmement, le concept de modélisation appliqué par Bernier (2014), qui décrit le biofiltre en plusieurs réacteurs homogènes en série et divise le biofilm en couches homogènes (voir la présentation du modèle SimBio dans la section suivante), est la façon courante utilisée par les professionnels de l'eau pour modéliser le traitement à culture fixée (Wanner *et al.*, 2006; Rittmann *et al.*, 2018). En plus de cette façon de modélisation, il est aussi possible de décrire le mouvement des composants dans le biofiltre de manière continue sans segmentation du biofiltre, à l'aide des équations aux dérivées partielles (Bourrel *et al.*, 2000; Torres Zúñiga *et al.*, 2012). Cependant, ces équations sont difficiles à résoudre par les simulateurs ordinaires. De plus, les modèles de biofiltration développés sous cette façon de modélisation simplifient beaucoup la description du système de biofilm et ne prend pas en compte le cycle de lavage

pour les biofiltres.

Le modèle SimBio est d'abord programmé dans le logiciel WEST® avec des modifications et améliorations au niveau de l'activité biologique et de la description des phénomènes de déplacement des composants solubles et particulaires. De plus, considérant les objectifs de modélisation présentés dans le Chapitre 1, certains concepts comme la production et l'émission de N_2O ainsi que l'évaluation de la consommation d'énergie durant le traitement par biofiltration sont intégrés dans le modèle.

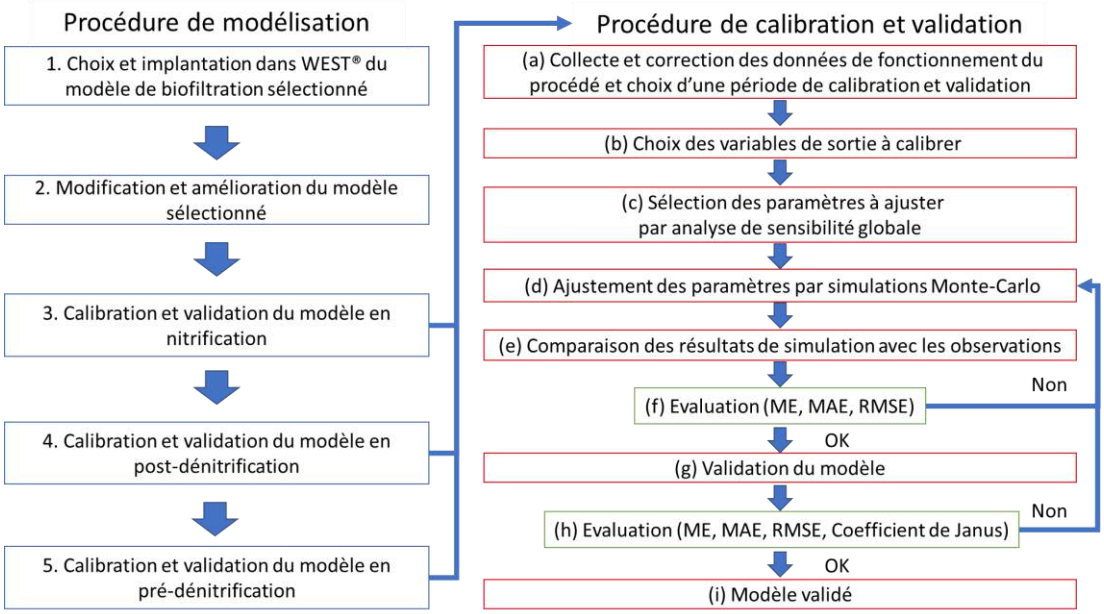


Figure 4.1 Procédure générale de modélisation et de calibration-validation du modèle pour les trois étages de biofiltration.

Le modèle développé a été ensuite calibré et validé successivement pour les trois étages de biofiltration selon l'ordre de modélisation présentée dans le Chapitre 3 : nitrification, post-dénitrification et pré-dénitrification. La procédure de calibration-validation du modèle de chaque procédé commence par la collecte et la correction des données de fonctionnement du procédé et le choix des périodes de calibration-validation. Ensuite, les variables en sortie à calibrer sont définies selon les objectifs de modélisation comme la prédiction de la performance de traitement et l'évaluation des impacts environnementaux.

Vue que le modèle développé relativement complexe (nombre de paramètres et temps de simulation), les paramètres à ajuster sont identifiés par la réalisation d'une analyse de sensibilité globale par simulation Monte-Carlo (Dochain et Vanrolleghem, 2001; Sin *et al.*, 2011). Selon les résultats de l'analyse, les paramètres à ajuster identifiés sont regroupés en fonction de leurs influences sur les variables en sortie à calibrer (Mannina *et al.*, 2011). Pour accélérer le calage des paramètres, de simulation Monte-Carlo est utilisée encore une fois afin de réaliser un ajustement semi-automatique des valeurs de paramètres (Sin *et al.*, 2008b). Trois scores statistiques : l'erreur moyenne (mean error, ME), l'erreur moyenne absolue (mean absolute

error, MAE) et la racine de l'erreur quadratique moyenne (root mean squared error, RMSE) (voir équations Eq 4.1 à 4.3) sont utilisés pour évaluer la performance de prédiction du modèle (Hauduc *et al.*, 2015b).

Eq 4.1 $$ME = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_i - O_i)$$

Eq 4.2 $$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|P_i - O_i|$$

Eq 4.3 $$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_i - O_i)^2}$$

où
n est le nombre d'observations.
P_i est le résultat de prédiction au pas de temps i.
O_i est l'observation au pas de temps i.

Si les résultats de calibration obtenus sont satisfaisants, le modèle calibré doit être validé sur le jeu de données issu de la période de validation précédemment choisie. Les trois scores statistiques utilisés en calibration sont également calculés ici pour évaluer la performance de prédiction du modèle pour la période de validation. De plus, le coefficient de Janus, qui permet de comparer quantitativement la performance de prédiction du modèle de la période de validation et de calibration est aussi calculé (voir Eq 4.4) (Rieger *et al.*, 2012). Si les résultats de validation ne sont pas satisfaisants, les paramètres doivent être réajustés et retestés avec les jeux de données de calibration et de validation précédemment utilisées afin d'améliorer la performance de prédiction du modèle. Après l'réajustement des paramètres, Une étape de revalidation du modèle doit également être réalisé sur un nouveau jeu de données.

Eq 4.4 $$Coefficient\ de\ Janus = \frac{\sqrt{\frac{1}{n_val}\sum_{i=1}^{n_val}\left(P_{val,i} - O_{val,i}\right)^2}}{\sqrt{\frac{1}{n_cal}\sum_{i=1}^{n_cal}\left(P_{cal,i} - O_{cal,i}\right)^2}}$$

où
n_val et n_cal sont les nombres d'observations pour la période de validation et de calibration, respectivement.
$P_{val,i}$ et $P_{cal,i}$ sont les résultats de prédiction au pas de temps i pour la période de validation et de calibration, respectivement.
$O_{val,i}$ et $O_{cal,i}$ sont les observations au pas de temps i pour la période de validation et de calibration, respectivement.

4.2. Description du modèle utilisé

4.2.1. SimBio-Modèle original

Tel que mentionné précédemment, le modèle SimBio est utilisé comme base pour développer le modèle de biofiltration. Ce modèle a été déjà présenté brièvement au Chapitre 2 (section 2.2.3.2). Ici, une description synthétique est donnée afin d'aider à mieux comprendre les modifications apportées au modèle (section 4.2.2). Plus de détails du modèle SimBio peuvent être trouvées dans la thèse de Bernier (2014) et l'Annexe 2 Informations supplémentaires de Chapitre 4 (Partie 1).

Pour décrire l'hydraulique du biofiltre, tel que montré à la Figure 4.2, le modèle décrit la zone du lit de média par sept réacteurs (réacteurs de média) homogènes en cascade. Chacun représente une septième de la hauteur du lit. Ce nombre de réacteurs avait été décidé selon les observations sur les profils des polluants (NH_4^+, NO_3^- et NO_2^-) à l'intérieur des biofiltres installés dans la station Seine Aval (biofiltres nitrifiants) et la station Seine Centre (biofiltres post-dénitrifiants) (Bernier, 2014). La zone de liquide surverse au-dessus du lit de média est aussi prise en compte par le modèle et décrit par un réacteur homogène.

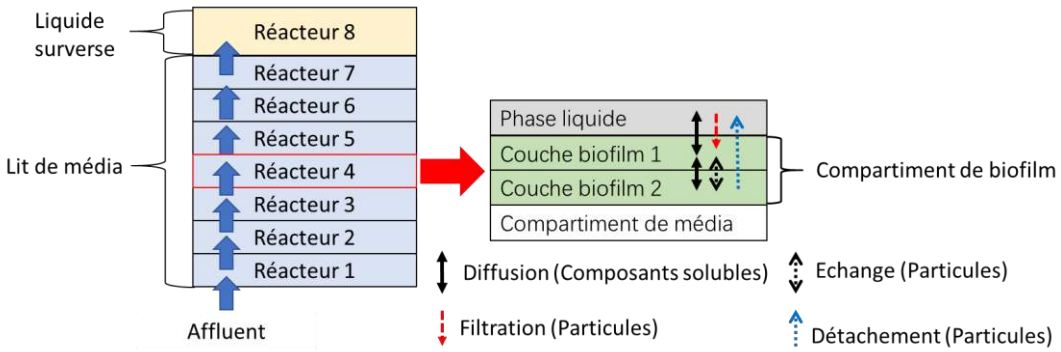


Figure 4.2 Structure générale du modèle SimBio et le transport/transfert des composants considérés dans le modèle de biofilm 1D.

Chaque réacteur de média contient trois compartiments décrivant respectivement la phase liquide, le biofilm et le média filtrant. Le système de biofilm dans chaque réacteur est simulé par un modèle de biofilm 1D qui divise le compartiment du biofilm en deux couches. Le compartiment de média, qui est considéré inerte, ne participe pas aux réactions biologiques ni au transport/transfert des composants. Le transfert des composants solubles liquide-biofilm ainsi que leur transport à l'intérieur du biofilm (entre les deux couches) sont tous décrits par le phénomène de diffusion. Contrairement aux composants solubles, plusieurs phénomènes physiques sont considérés pour simuler le déplacement des composants particulaires. Le flux de transfert des particules du liquide vers le biofilm est calculé par les équations liées au phénomène de filtration en profondeur, tandis que le transfert des composants particulaires du

biofilm vers le liquide est représenté par le phénomène de détachement. Trois types de détachement ont été considérés dans le modèle SimBio. Le premier type de détachement est le détachement sous l'effet de la force de cisaillement qui cause l'érosion du biofilm. Ce détachement n'affecte que la couche de surface du biofilm (« Couche biofilm 1 » dans la Figure 4.2). Le deuxième type de détachement, qui dépend de l'épaisseur du biofilm formé, a lieu lorsque l'épaisseur d'une couche du biofilm atteint une épaisseur maximale définie. Enfin, le modèle prend aussi en compte le détachement sous l'effet du lavage de biofiltre qui conduit à la desquamation du biofilm. Pour simuler ce dernier type de détachement et les variations des particules attachées sur le média en fonction des conditions d'exploitation du biofiltre (traitement et lavage), le cycle de traitement-lavage du biofiltre est considéré dans le modèle. En plus du transfert des composants particulaires liquide-biofilm, le modèle considère aussi les échanges des particules entre les deux couches de biofilm. Cet échange est décrit de manière similaire à la diffusion des composants solubles entre les deux couches.

Tel que présenté précédemment, le lit de média est divisé de manière uniforme en sept réacteurs homogènes. Cette conceptualisation, qui est couramment utilisée par les modèles de procédé à culture fixée, permet de fixer une aire d'échange liquide-biofilm constante pour chaque réacteur (Boltz et al., 2017). Cependant, elle fait retenir/isoler le média dans chaque réacteur. En réalité, il n'y a pas ce genre de segmentation qui limite le mouvement du média (sous l'effet d'écoulement de l'eau) ainsi que le biofilm y attaché (Boltz et al., 2017). Vu que le mouvement du média peut influencer la distribution des différentes fractions particulaires (biomasse hétérotrophe et autotrophe, composants particulaires biodégradable et inertes) dans le lit de média, afin de mieux décrire le comportement du biofiltre, le modèle SimBio considère un phénomène de mélange de média (avec biofilm attaché) entre les sept réacteurs pendant le lavage du biofiltre.

Considérant que les concentrations en biomasse dans la phase liquide sont beaucoup plus faibles par rapport à celles dans le biofilm, seulement les activités biologiques ayant lieu dans les deux couches du biofilm sont prises en compte dans le modèle SimBio. Le modèle biologique utilisé est une version modifiée du modèle ASM1 (Henze et al., 2000). Contrairement au modèle ASM1 qui illustre la nitrification et la dénitrification par une seule étape de réactions, la production/élimination du nitrite est considérée pour ces deux processus biologiques. Cette extension du modèle permet de prédire la concentration en nitrite en sortie des biofiltres. Concrètement, la nitrification est décomposée en nitritation et nitratation (Sin et al., 2008b). Les activités des bactéries AOB et NOB sont donc simulées. Pour la dénitrification, le nitrate est d'abord réduit en nitrite et puis en diazote. Les équations issues du modèle de Hiatt et Grady (2008) sont modifiées pour décrire ces deux étapes de dénitrification. En plus des modifications sur la nitrification et la dénitrification, l'assimilation du phosphore pendant la

croissance des bactéries est prise en compte dans le modèle (Hauduc et al., 2013). La matrice de Gujer du modèle SimBio est montré aux Tableaux Tableau A2.1 et Tableau A2.2 l'Annexe 2.

Enfin, pour mieux simuler la dégradation des polluants liées à la quantité d'air injectée dans les biofiltres aérés, le transfert gaz-liquide d'oxygène est considéré dans le modèle.

4.2.2. Modèle développé

Basé sur le modèle SimBio, le modèle de biofiltration développé dans le cadre de cette thèse est programmé dans le logiciel WEST® (DHI, Danemark). Ce logiciel contient déjà une certaine base de modèles de procédé à culture fixée, comme le lit bactérien et le bioréacteur à lit mobile (moving bed biofilm reactor, MBBR). Cependant, il ne s'y trouve pas un modèle de base spécifique pour la biofiltration et les modèles de procédé à culture fixés préinstallés ne peuvent pas être utilisés directement pour simuler le procédé de biofiltration. Premièrement, l'interaction liquide-biofilm considérée par les modèles préinstallés est relativement simple. Ils ne prennent pas en compte les éléments qui sont spécifiques à la biofiltration, comme, par exemple, la filtration des particules et le cycle de traitement-lavage. Deuxièmement, ces modèles ne permettent pas de prédire l'émission de gaz à effet de serre et les coûts d'exploitation pour la biofiltration. Pour ces raisons, le modèle SimBio (Bernier, 2014) a été utilisé comme la référence. Il est programmé, modifié et amélioré dans le logiciel WEST®.

4.2.2.1. Structure générale du modèle développé

La structure générale du modèle de biofiltration développé est montrée à la Figure 4.3. Comme le modèle SimBio, pour illustrer l'hydraulique vertical du biofiltre, le modèle développé représente le lit de média par sept réacteurs complètement mélangés successives, chacun couvert une septième de la hauteur de lit de média. Le modèle développé prend en compte aussi la zone de surverse au-dessus de lit. Cette dernière n'est pas affichée explicitement dans le diagramme provenant du logiciel WEST®. L'intégration de cette zone dans le modèle sert à simuler la mesure d'oxygène dissous réalisée par les sondes installées dans la zone. Selon Séguret et Racault (1998), le comportement hydraulique de cette zone est complexe. Dans ce cas-ci, le temps de résidence du liquide dans cette zone n'est pas calculé pour une raison de simplification. Pour évaluer la performance de prédiction du modèle, comme ce qui avait été fait par Bernier (2014), les résultats de simulation en sortie du bloc « Réacteur 7 » ont été collectés et comparés avec les observations en sortie des étages de biofiltration simulés. Le modèle de biofiltration construit contient aussi une commande du cycle de traitement-lavage (bloc « Commande Traitement-lavage » en Figure 4.3) qui commande le type d'eau (l'eau à traiter ou l'eau de lavage) alimentant les sept réacteurs de média. Ce bloc sera présenté en détails dans la section 4.2.2.4. Par rapport au modèle SimBio, une phase gazeuse, qui fait partie de la description du transfert gaz-liquide, est inclus dans le modèle développé. Le volume de cette phase n'est pas décrit de manière explicite dans le modèle. De plus, il ne participe pas à la fragmentation du volume de réacteur de média. Dans ce cas-ci, le volume d'un réacteur de média est divisé entre volumes occupés par le compartiment de média, le compartiment de biofilm et la phase liquide. La conceptualisation de la phase gazeuse sera présentée en détails dans la section 4.2.2.6.

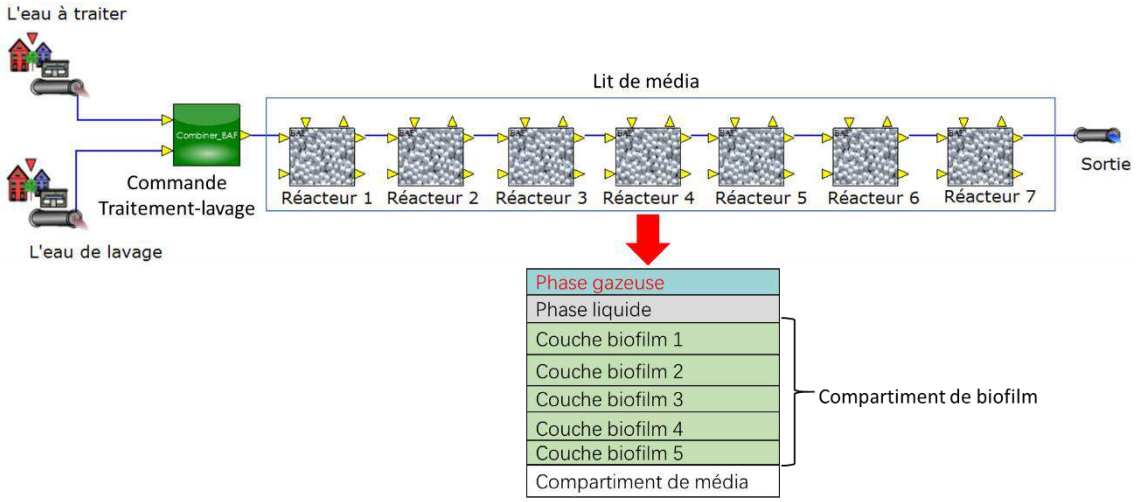


Figure 4.3 Structure générale du modèle de biofiltration construit dans le logiciel WEST®.

De manière similaire au modèle SimBio, le volume du compartiment de média de chaque réacteur ($V_{média}$) est fixé (voir Eq 4.5), tandis que celui de liquide ($V_{liquide}$) change en fonction du volume de biofilm ($V_{biofilm}$) attaché sur le média (voir Eq 4.6).

Eq 4.5 $$V_{média} = V_{réacteur} * (1 - \varepsilon_0)$$

Eq 4.6 $$V_{liquide} = V_{réacteur} - V_{média} - V_{biofilm} = V_{réacteur} \times \varepsilon$$

où
ε_0 est la porosité initiale du média propre sans biofilm attaché (-)
ε est la porosité du média avec biofilm attaché (-)

Comme le modèle SimBio, un modèle de biofilm 1D est utilisé pour décrire le système du biofilm dans chaque réacteur de média. Ce genre de modèle divise le compartiment du biofilm à certaines couches homogènes. Le nombre de couches du biofilm est un paramètre du modèle, qui peut être modifié selon les besoins de l'utilisateur. Afin d'avoir une meilleure précision sur les gradients des composants dans le biofilm, tel que montré à la Figure 4.3, le nombre de couches de biofilm considéré pour le compartiment de biofilm a été augmenté de deux (SimBio) à cinq. Ce choix du nombre de couches du biofilm est identique à celui de Vigne *et al.* (2010) et permet d'obtenir un bon compromis entre précision et temps de simulation. Selon Rittmann *et al.* (2018), en général, trois à dix couches de biofilm sont suffisantes pour la plupart des applications des modèles simulant les procédés à culture fixée. Lors de la construction du modèle, des tests de simulation ont été réalisés pour comparer différents choix de nombre de couches de biofilm. Les gradients des composants dans le biofilm et le temps requis pour réaliser la simulation ont été suivis pour aider à déterminer le nombre de couches à utiliser.

4.2.2.2. Calcul de l'épaisseur des couches du biofilm et des concentrations de composants présents dans les couches

Dans le modèle SimBio, une épaisseur maximale constante (d_{max}) de biofilm est considérée et fixée comme un paramètre. En fonction de cette épaisseur maximale et du rapport entre la concentration de particules dans la couche et la masse volumique sèche du biofilm, l'épaisseur de chaque couche du biofilm peut être déterminée (voir Eq 4.7).

Eq 4.7 $$d_j = {\sum X_{i,j}}/{\rho_{sec}} \times {d_{max}}/{N_{couche}} = {\sum X_{i,j}}/{\rho_{sec}} \times d_{max,j}$$

où
d_j est l'épaisseur de la couche j du biofilm (m)
$d_{max,j}$ est l'épaisseur maximale de la couche j prédéfinie (m)
$X_{i,j}$ est la concentration de composant particulaire i dans la couche j du biofilm (g/m^3)
ρ_{sec} est la masse volumique de la masse sèche du biofilm (g/m^3)
N_{couche} est le nombre de couches (-)

L'épaisseur maximale prédéfinie pour le biofilm sert aussi à calculer les concentrations des composants présents dans les couches. En effet, afin de faciliter les calculs des conversions biologiques, le modèle SimBio considère chaque couche du biofilm comme un réacteur de boues activées. Le volume du réacteur est fixé et correspond au volume maximal de la couche (voir Eq 4.8).

Eq 4.8 $$C_{i,j} = {M_{i,j}}/{V_{max,j}} = {M_{i,j}}/{(A_a \times d_{max,j})}$$

où
$M_{i,j}$ est la masse de composant i dans la couche du biofilm j (g)
$V_{max,j}$ est le volume maximal de la couche du biofilm (m^3)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m²)
$C_{i,j}$ est la concentration du composant i dans la couche du biofilm (g/m^3)

Le calcul de l'épaisseur de chaque couche de biofilm est modifié dans le modèle développé. L'approche du modèle de biofilm existant dans le logiciel WEST®, qui considère une masse volumique constante de biofilm (Vanhooren, 2002), est préférée. Pour chaque couche de biofilm, son épaisseur est calculée en fonction de la masse des composants particulaires qu'elle contient, la masse volumique du biofilm et la surface d'échange média-liquide (voir Eq 4.9). Les concentrations des composants dans chaque couche sont calculées avec un volume du biofilm dynamique (voir Eq 4.10) au lieu d'un volume fixé tel que considéré dans le modèle SimBio.

Eq 4.9 $$d_j = {\sum M_{X,i,j}}/{(\rho_{biofilm} \times A_a)}$$

Eq 4.10 $$C_{i,j} = {M_{i,j}}/{(d_j \times A_a)}$$

où
$M_{X,i,j}$ est la masse de composant particulaire i dans la couche j du biofilm (gDCO/m^3)
$\rho_{biofilm}$ est la masse volumique du biofilm (gDCO/m^3)

4.2.2.3. Transfert et transport des composants solubles

Tel que montré à la Figure 4.4, comme le modèle SimBio, le transfert liquide-biofilm et le transport des composants solubles entre les couches du biofilm sont décrits par le phénomène de diffusion.

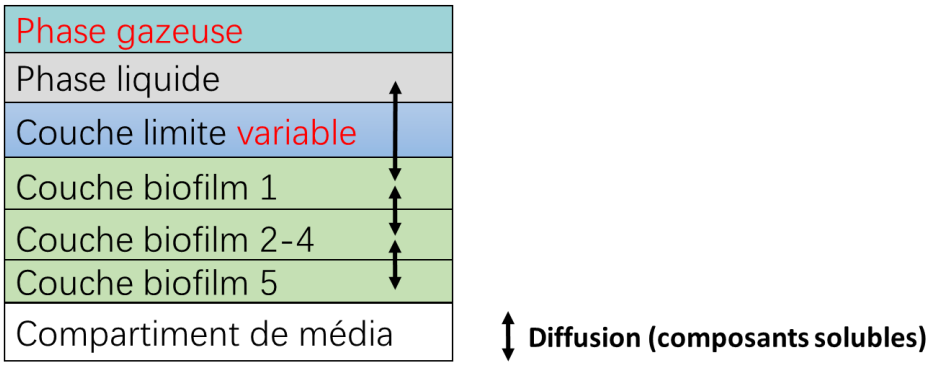


Figure 4.4 Schéma des phénomènes physiques pris en compte dans le modèle développé pour simuler le transfert et le transport des composants solubles dans le biofilm.

De manière similaire au modèle SimBio, les flux de diffusion des composants solubles dans le modèle développé sont calculés en se basant sur une approximation de la loi de Fick. Les équations Eq 4.11 et Eq 4.12 décrivent respectivement le flux de diffusion liquide-biofilm et celui entre les couches de biofilm. Deux conceptualisations issues du modèle SimBio sont conservées. Premièrement, une couche limite, qui représente le film liquide stagnant entre le biofilm et la phase liquide, est considérée afin de simuler la résistance de diffusion liquide-biofilm (voir Figure 4.4 et Eq 4.11). Deuxièmement, considérant que le transport des composants solubles dans le biofilm n'est pas une ligne droite et doit suivre le chemin de l'eau pour traverser les pores présents dans le biofilm, la vitesse de diffusion dans le biofilm est réduite par rapport à celle dans l'eau en appliquant un facteur de réduction (f_D).

Eq 4.11 $$J_{Diffusion,S,i,liq} = \frac{f_D \times D_{W,S,i}}{L_f} \times \left(S_{i,liq} - S_{i,1}\right) \times A_a$$

où
$J_{Diffusion,S,,i,liq}$ est le flux de composant soluble i diffusé du liquide vers la couche 1 du biofilm (g/j)
L_f est l'épaisseur de la couche limite entre le liquide et le biofilm (m)
$D_{W,S,i}$ est le coefficient de diffusion du composant soluble i dans l'eau (m^2/j)
$S_{i,liq}$ et $S_{i,1}$ sont les concentrations de composant soluble i dans le liquide et dans la couche 1 du biofilm, respectivement (g/m^3)

Eq 4.12 $$J_{Diffusion,S,i,j} = \frac{f_D \times D_{W,S,i}}{d_j} \times \left(S_{i,j} - S_{i,j+1}\right) \times A_a \ \ (j = 1 - 4)$$

où
$J_{Diffusion,S,i,j}$ est le flux du composant soluble i diffusé de la couche j du biofilm vers la couche j+1 (g/j)
d_j est l'épaisseur de la couche j du biofilm (m)
$S_{i,j}$ et $S_{i,j+1}$ sont les concentrations du composant soluble i dans la couche j et j+1 du biofilm, respectivement (g/m^3)

Contrairement au modèle SimBio qui considère que l'épaisseur de la couche limite entre le liquide et le biofilm est constante, une couche limite avec épaisseur variable est utilisée dans le modèle développé. En effet, tel qu'expliqué au Chapitre 2 (section 2.1.4.3), le transfert des composants entre le biofilm et la phase liquide est influencé par les conditions hydrauliques autour du biofilm. Le changement de la vitesse de filtration peut influencer l'épaisseur du film liquide stagnant qui est la résistance principale à la diffusion. Vu que les débits envoyés aux biofiltres peuvent varier fortement, il est donc plus réaliste de considérer une couche limite à épaisseur variable afin de mieux décrire la résistance à la diffusion, notamment pour les conditions d'exploitation éloignées des conditions moyennes. Dans le modèle développé, l'épaisseur de la couche limite est calculée en se basant sur l'équation d'Ohashi *et al.* (1981) (voir Eq 4.13). Cette équation a été déjà appliquée par Christiansen *et al.* (1995) et Vigne *et al.* (2010) pour déterminer l'épaisseur de la couche limite autour du biofilm dans les biofiltres pour différents composants solubles étudiés.

Eq 4.13 $$L_{f,i} = \frac{d_p}{Sh_i} = \frac{d_p}{A+K'*(B'*Re^m)^n*Sc_i^{\beta'}}$$

où
$L_{f,i}$ est l'épaisseur de la couche limite spécifique pour le composant soluble i (m)
d_p est le diamètre de média filtrant (m)
Sh_i est le nombre de Sherwood spécifique pour le composant soluble i (-)
Re est le nombre de Reynolds (-)
Sc_i est le nombre de Schmidt spécifique pour le composant soluble i (-)
A, K', B', m, n et β' sont les constantes empiriques (-)

Le nombre de Reynolds dans l'équation Eq 4.14 est lié aux caractéristiques de la géométrie du média filtrant (diamètre des particules du média filtrant) et à la vitesse du fluide en colonne vide (Morgenroth, 2008b), tandis que le nombre de Schmidt change en fonction des propriétés du fluide ainsi que le coefficient de diffusion du composant.

Eq 4.14 $$Re = {(d_p \times u)}/{(\nu \times \varepsilon_0)} \quad et\ Sc_i = {\nu}/{D_{W,S,i}}$$

où
u est la vitesse du fluide en colonne vide (m/j)
ν est la viscosité cinématique de l'eau (m^2/j)
ε_0 est la porosité initiale du média propre sans biofilm attaché (-)

Pour une raison de simplification du modèle, une épaisseur moyenne de la couche limite est calculée à chaque pas de temps à partir des épaisseurs individuelles déterminées pour chaque composant soluble (voir Eq 4.15). Pour simuler l'effet de la couche limite sur la diffusion entre la phase liquide et le biofilm, cette valeur moyenne est utilisée pour tous les composants solubles considérés. Cette conceptualisation avait déjà été proposée par Vigne (2007).

Eq 4.15 $$L_f = {\sum L_{f,i}}/{N_{soluble}}$$

4.2.2.4. Transfert et transport des composants particulaires

Comme le modèle SimBio, plusieurs phénomènes physiques liées au transfert et au transport des composants particulaires sont considérés par le modèle développé (voir Figure 4.5). Cependant, comme davantage de couches de biofilm sont considérées dans le modèle développé (5) par rapport à SimBio (2), certaines conceptualisations derrière le transport et le transfert des composants particulaires appliquées dans le modèle SimBio ne s'adaptent pas à ce changement. Pour cette raison, ces conceptualisations ainsi que les équations associées sont modifiées dans le modèle développé, en particulier pour le détachement.

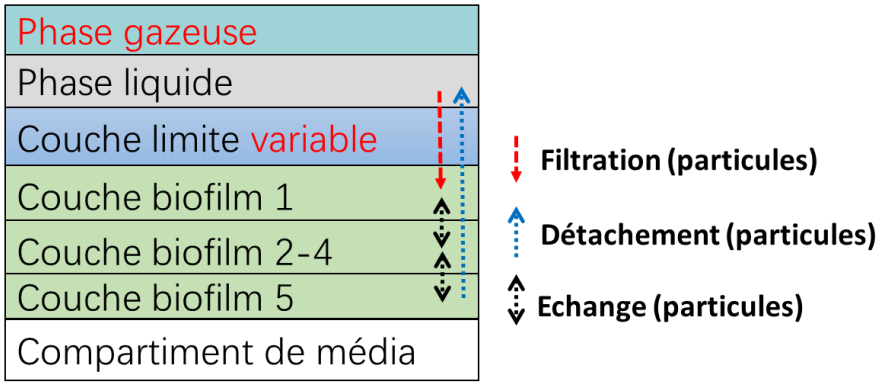


Figure 4.5 Schéma des phénomènes physiques pris en compte par le modèle développé pour simuler le transfert et le transport des composants particulaires dans le système biofilm.

- **Filtration**

Dans le modèle SimBio, la filtration en profondeur est le phénomène physique principal de la capture des composants particulaires dans l'eau à traiter par le média filtrant. Cette conceptualisation est conservée dans le modèle développé. Pour rappel, la filtration en profondeur n'est pas un simple coincement physique, il correspond au enlèvement des particules plus petites que les pores du média filtrant par les interactions physico-chimiques entre le composant particulaire et le média (McDowell-Boyer *et al.*, 1986). Pour décrire la cinétique de filtration, Horner *et al.* (1986) proposent de représenter l'accumulation des particules sur le média filtrant par le dépôt volumique (volume de particules accumulées/volume de média). Ils ont aussi proposé des équations pour estimer l'évolution du dépôt dans le temps en fonction du coefficient de filtration du média filtrant, la concentration volumique de particules et la vitesse du fluide. L'équation utilisée par le modèle SimBio, qui calcule le flux de transfert des composants particulaires du liquide vers le biofilm sous l'effet de filtration en profondeur, est modifiée et simplifiée à partir des équations proposées par Horner *et al.* (1986). Cette équation est incluse dans le modèle développé pour illustrer la cinétique de filtration (voir Eq 4.16).

Eq 4.16
$$J_{F,i} = \frac{\lambda \times X_{i,l} \times u \times A_a}{a_a \times \left(1 - \sum X_{i,l} / \rho_{\text{biofilm}}\right)}$$

où
$J_{F,i}$ est le flux du composant particulaire i transféré du liquide vers la couche du biofilm 1 sous l'effet de filtration en profondeur (g/j)
λ est le coefficient de filtration du média filtrant (1/j)
$X_{i,l}$ est la concentration en composant particulaire i dans la phase liquide (g/m^3)
a_a est l'aire spécifique du média filtrant (m^2/m^3)

Le coefficient de filtration du média filtrant (λ) dans l'équation 4.16 représente la réduction de l'efficacité de filtration causée par l'accumulation des particules sur le média. Afin d'estimer ce coefficient sous conditions dynamiques, l'équation semi-empirique développée par Ives (1970) est utilisée dans le modèle SimBio (Eq 4.17). Elle est aussi conservée dans le modèle développé. Cette équation considère une efficacité initiale du média filtrant propre (λ_0). Les trois termes suivant λ_0 dans l'équation décrivent chacun un phénomène affectant l'efficacité de la filtration. Le premier terme représente l'augmentation de la surface disponible pour capter des particules dû à l'accumulation des particules autour du média filtrant. Le deuxième terme représente la diminution de la probabilité de contact entre les particules et le média à cause de l'augmentation de la vitesse du fluide dans les pores du média encrassés. Enfin, une quantité limite de particules accumulées sur le média (σ_u) est considérée par le dernier terme. Lorsque cette limite est dépassée, la filtration ne peut plus être effectuée.

Eq 4.17
$$\lambda = \lambda_0 \left(1 + \beta \frac{\sigma}{\varepsilon_0}\right)^y \left(1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_0}\right)^z \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^x$$

où
σ est le dépôt volumique des particules autour du média (m^3/m^3)
λ_0 est le coefficient de filtration du média filtrant propre (1/j)
β est le coefficient géométrique lié à l'empilement du média (-)
σ_u est le dépôt volumique ultime des particules atour de média (m^3/m^3)
x, y et z sont des constantes empiriques (-)

- **Echange des particules entre les couches du biofilm**

Comme le modèle SimBio, le modèle développé prend en compte le phénomène d'échange des particules entres les couches du biofilm. Lorsqu'il y a une différence massique des composants particulaires entre deux couches voisines, l'échange des particules est déclenché. Un taux d'échange constant (k_{exc}) est considéré pour décrire la vitesse d'échange :

Eq 4.18
$$J_{Exc,X,i,j} = -J_{Exc,X,i,j+1} = k_{Exc} \times \left(M_{X,i,j} - M_{X,i,j+1}\right)$$

où
$J_{Exc,X,i,j}$ et $J_{Exc,X,i,j+1}$ sont les flux d'échange de composant particulaire i entre la couche j et la couche j+1 du biofilm (g/j)
k_{exc} est le taux d'échange (1/j)
$M_{X,i,j}$ et $M_{X,i,j+1}$ sont les masses de composant particulaire i de la couche j et la couche j+1 du biofilm, respectivement (g)

- **Détachement**

Tel que présenté précédemment sur le modèle original (section 4.2.1), trois types de détachement des composants particulaires du biofilm sont considérés par le modèle SimBio : le détachement sous l'effet de la force de cisaillement, le détachement quand une couche atteint une épaisseur maximale et le détachement sous l'effet de lavage. Les modifications apportées pour ces trois types de détachement sont présentées ci-dessous.

- **Détachement sous l'effet de la force de cisaillement**

Le détachement des particules sous l'effet de la force de cisaillement, qui ne concerne que la couche à la surface du biofilm, n'est pas pris en compte dans le modèle développé. Les raisons derrière de cette décision est que premièrement, lorsque un biofiltre est en traitement, l'effet de la filtration est globalement plus important que celui de détachement, ce qui conduit à une réduction des MES de l'entrée vers la sortie du biofiltre. Deuxièmement, selon les résultats de simulation obtenus par Bernier (2014), le détachement sous l'effet de la force de cisaillement, qui est illustré par une cinétique de premier ordre n'avait que peu d'impact sur les résultats finaux du modèle SimBio.

- **Détachement dû à l'atteinte d'une épaisseur maximale prédéfinie**

Le détachement des particules des couches dû à l'atteinte d'une épaisseur maximale est conservé dans le modèle développé. Dans le modèle SimBio, lorsque l'épaisseur d'une couche dépasse l'épaisseur maximale prédéfinie, la quantité de particules qui correspond à ce dépassement est calculée. Cette quantité de particules se déplaceront soit vers l'autre couche, soit vers le liquide lorsque cette dernière est pleine aussi. Cependant, pour le modèle développé, qui considère cinq couches de biofilm, il est difficile de réutiliser directement les schémas de SimBio concernant le choix du sens des flux de détachement des particules (vers les couches du biofilm voisines ou vers l'eau). Donc, le détachement dans le modèle développé est réalisé de la manière suivante : d'abord, des seuils d'épaisseur maximale sont définies pour le biofilm ainsi que pour les couches du biofilm (voir Eq 4.19).

Eq 4.19 $$d_{j,seuil} = {}^{d_{seuil}}/_{N_{couche}}$$

où
d_{seuil} est le seuil d'épaisseur maximale du biofilm (m)
$d_{j,seuil}$ est le seuil d'épaisseur maximale de la couche de biofilm j (m)
N_{couche} est le nombre de couches du biofilm considéré (-)

Ensuite, lorsque l'épaisseur totale du biofilm dépasse le seuil maximal, une partie des particules de chaque couche va être détachée vers le liquide. La quantité de particules à détacher pour chaque couche est liée à son épaisseur (voir Eq 4.20) (Morgenorth, 2008). Cette conceptualisation est similaire à celle du modèle SimBio se produisant quand les deux couches

sont pleines.

Eq 4.20 $$J_{Dét-liquide,X,i,j} = k_{Dét,liquide} \times d_j \times A_a \times X_{i,j} \times {}^{(d - d_{seuil})}/_{d} \quad (d > d_{seuil})$$

où
$J_{Dét\text{-}liquide,X,i,j}$ est le flux de détachement du composant particulaire i de la couche j du biofilm vers le liquide quand le seuil d'épaisseur totale maximale du biofilm est dépassé (g/j)
$k_{Dét,liquide}$ est le taux du détachement des couches vers le liquide (1/j)
$X_{i,j}$ est la concentration du composant particulaire i dans la couche j du biofilm (g/m^3)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)
d et d_j sont l'épaisseur du biofilm et l'épaisseur de la couche j du biofilm (m)

Finalement, si le seuil d'épaisseur totale du biofilm n'est pas dépassé, mais l'épaisseur de certaines couches du biofilm est supérieure au seuil maximal prédéfini pour les couches, les particules dans ces couches vont être détachées vers les couches voisines, peu importe si ces dernières sont pleines ou pas (voir Eq 4.21). Pour la couche de surface (couche biofilm 1) et la couche du fond (couche biofilm 5), le flux de particules est dirigé vers les couches 2 et 4 respectivement. Pour les couches 2 à 4, le flux est divisé en deux et dirigé de manière égale vers les deux couches voisines.

Eq 4.21 $$J_{Dét-couche,X,i,j} = k_{Dét,couche} \times d_j \times A_a \times X_{i,j} \quad \left(d \leq d_{seuil}\ et\ d_j > d_{j,seuil}\right)$$

où
$J_{Dét\text{-}couche,X,i,j}$ est le flux de détachement du composant particule i de la couche j du biofilm vers les couches voisines quand le seuil d'épaisseur maximale de la couche est dépassé (g/j)
$k_{Dét,couche}$ est le taux pour le détachement d'une couche vers les couches voisines (1/j)

- **Détachement sous l'effet de lavage**

La conceptualisation de détachement des composants particulaires sous l'effet de lavage pris en compte dans le modèle SimBio est aussi conservée dans le modèle développé. Comme le modèle SimBio, pour simuler ce détachement, le modèle développé prend en compte la présence d'un cycle de traitement-lavage durant la biofiltration. Tel que présenté au début de cette section sur le choix du modèle de base, ce phénomène n'est pas intégré dans les modèles de réacteurs à culture fixée préexistant dans WEST®. Pour cette raison, une commande du cycle de traitement-lavage est ajouté dans le modèle développé (voir le bloc « Commande Traitement-lavage» dans la Figure 4.3). Il permet de distinguer la période de traitement et celle de lavage durant un cycle de traitement-lavage du biofiltre à l'aide d'une variable qui compte le nombre de cycles de traitement-lavage réalisés (N_{lavage}). Pour ce faire, l'utilisateur du modèle doit indiquer à la commande la fréquence du cycle de traitement-lavage (f_{cycle}, en j^{-1}) et la durée d'un lavage (T_{lavage}, en j). La durée de traitement pendant un cycle ($T_{traitement}$, en j) peuvent être calculée par l'équation suivante :

Eq 4.22 $$T_{traitement} = {}^{1}/_{f_{cycle}} - T_{lavage}$$

Lorsque la simulation est déclenchée, le biofiltre est considéré en mode de traitement et le bloc de commande envoie l'eau à traiter aux réacteurs de média. La durée de traitement pendant un cycle, qui est précédemment calculée, est utilisée pour déterminer quand le biofiltre doit être transféré en mode de lavage et alimenté par l'eau de lavage (voir Eq 4.23).

Eq 4.23 $$Si\ \left(T_{simulé} - N_{lavage} \times {}^{1}/_{f_{cycle}}\right) < T_{traitement}\ \Rightarrow Biofiltre\ en\ traitement$$

$$Sinon\ \Rightarrow Biofiltre\ en\ lavage$$

où
$T_{simulé}$ est le temps simulé jusqu'à présent (j)

De manière similaire à l'équation Eq 4.23, la fréquence du cycle de traitement-lavage est utilisée comme indicateur pour décider quand le lavage doit être terminé. Une fois le lavage arrêté, un nouveau cycle est déclenché et le biofiltre revient en mode de traitement (voir Eq 4.24).

Eq 4.24 $$Si\ (T_{simulé} - N_{lavage} \times {}^{1}/_{f_{cycle}}) = {}^{1}/_{f_{cycle}} \Rightarrow Fin\ de\ lavage$$

$$N_{lavage} = N_{lavage} + 1$$

Lorsque le biofiltre est en mode de lavage, le détachement des particules sous l'effet de lavage est activé. Dans le modèle SimBio, ce détachement n'a lieu que dans la couche de surface du biofilm. Cette conceptualisation est modifiée dans le modèle développé, puisque si le lavage est très efficace, les particules dans la zone profonde du biofilm peuvent être enlevées aussi. De plus, par rapport à un biofilm simulé en deux couches, l'utilisation de cinq couches rend chacune d'entre elle beaucoup plus mince, et donc moins « chargée » en particules. Il serait difficile voire impossible d'enlever les masses de particules typiquement récupérées sur site dans les eaux de lavages si l'on considère que seules les particules de la couche de surface sont impactées par le lavage. Dans le modèle développé donc, une fraction d'épaisseur totale du biofilm est considérée d'être enlevée lors d'un lavage, représentée par un paramètre du modèle (voir Eq 4.25).

Eq 4.25 $$d_{lavage} = f_{lavage} \times \sum d_j$$

où
d_{lavage} est l'épaisseur totale du biofilm à enlever pendant le lavage (m)
f_{lavage} est la fraction de l'épaisseur totale à enlever pendant le lavage (-)

Dans le modèle développé, le détachement des particules sous l'effet de lavage commence toujours par la couche de surface. Si l'épaisseur de cette dernière est supérieure à l'épaisseur à enlever, le lavage n'influence que cette couche. Sinon, les particules des couches suivantes doivent être également détachées en tout ou en partie jusqu' à ce que la fraction d'enlèvement demandée soit atteinte (voir Eq 4.26 et Eq 4.27). Cependant, afin d'éviter les problèmes

numériques pendant le calcul, une épaisseur fine minimale ($d_{j,min}$) est considérée de rester pour les couches normalement vidées complètement par le lavage. Par exemple, si l'épaisseur du biofilm à la fin de traitement du biofiltre ($d_{j,fin}$) est de 100 µm (20 µm pour chaque couche) et que la fraction d'épaisseur totale du biofilm à enlever et l'épaisseur minimale de la couche sont fixées à 0,4 (40 µm au total à enlever) et 5 µm, respectivement. Sous ces conditions, la couche 1 et 2 du biofilm doivent être enlevées jusqu'à 5 µm (30 µm au total est enlevé), tandis que 50% des particules (10 µm) de la couche 3 seront détachées. Les couches 4 et 5 ne seront pas affectées directement par le lavage.

Eq 4.26
$$Si\ d_{lavage} > \left(d_{1,fin} - d_{j,min}\right), \Delta d_1 = d_{1,fin} - d_{j,min}$$
$$Sinon, \Delta d_1 = d_{lavage}\ et\ \Delta d_{2-5} = 0$$

Eq 4.27
$$Si\ \left(d_{lavage} - \sum \Delta d_{j-1}\right) > \left(d_{j,fin} - d_{j,min}\right), \Delta d_j = d_{j,fin} - d_{j,min}\ (j = 2 - 5)$$
$$Sinon, \Delta d_j = d_{lavage} - \sum \Delta d_{j-1}$$

où
Δd_j est l'épaisseur à enlever pour la couche j du biofilm après la phase de traitement (m)
$d_{j,min}$ est l'épaisseur minimale à conserver pour les couches normalement vidées complètement par le lavage (m)
$d_{j,fin}$ est l'épaisseur de la couche j du biofilm à la fin de traitement du biofiltre (au moment de déclenchement du lavage) (m)

Une fois l'épaisseur à enlever pour chaque couche déterminée, l'équation Eq 4.28 est utilisée pour calculer le flux des composants particulaires à détacher pour chaque couche de biofilm pendant le lavage.

Eq 4.28
$$J_{lavage,X,i,j} = {\Delta d_j \times A_a \times X_{i,j}}/{T_{lavage}}$$

où
$J_{lavage,X,i,j}$ est le flux de composant particulaire i lavé issue de la couche j du biofilm (g/j)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)
$X_{i,j}$ est la concentration de composant particulaire (g/m^3)
T_{lavage} est le temps de lavage (j)

4.2.2.5. Mélange de média

Tel que mentionné précédemment lors de la présentation du modèle original (section 4.2.1), pour prendre en compte l'effet du mouvement de média, le modèle SimBio considère un phénomène de mélange de média entre les sept réacteurs. Ce mélange, qui a lieu uniquement pendant le lavage dans le modèle SimBio, redistribue les composants particulaires attachés sur le média des réacteurs. Pour ce faire, la masse moyenne de chaque composant particulaire dans le biofilm sur les sept réacteurs est calculée. Ensuite, les réacteurs qui ont une masse d'un composant particulaire dans le biofilm supérieure à la moyenne calculée, vont « donner » une partie du composant qu'ils possèdent aux réacteurs qui ont une masse inférieure à la moyenne. Un taux d'échange qui module l'importance de ce genre d'échange est considéré dans le modèle SimBio (voir Eq 4.29). L'aire d'échange liquide-biofilm n'est pas influencée par le phénomène de mélange.

Eq 4.29 $$J_{mix,X,i,j,k} = k_{mix}\left(\sum_k \frac{M_{X,i,j,k}}{N_{réacteur}} - M_{X,i,j,k}\right)$$

où
$J_{mix,X,i,j,k}$ est le flux du composant particulaire i à perdre ou recevoir pour la couche j du réacteur k lors du mélange (g/j)
k_{mix} est le taux d'échange du média (1/j)
$N_{réacteur}$ est le nombre de réacteurs (-)
$M_{X,i,j,k}$ est la masse de composant particulaire i dans la couche j du biofilm du réacteur k (g/m^3)

Le phénomène de mélange du média est également pris en compte dans le modèle développé mais avec certaines modifications par rapport à celui du modèle SimBio. Premièrement, afin de mieux illustrer le comportement du biofiltre ainsi que le mouvement du média, le phénomène de mélange du média est considéré d'avoir lieu non seulement pendant le lavage, mais aussi dans la phase de traitement. Deuxièmement, les composants particulaires dans les couches du biofilm de chaque réacteur sont échangés uniquement avec ceux dans les réacteurs adjacents au lieu de tous les autres six réacteurs. Par exemple, la couche 2 dans le deuxième réacteur n'échange qu'avec la couche 2 du premier et du troisième réacteur (voir Figure 4.6). Cette conceptualisation permet de maintenir la distribution spatiale des composants entre les couches du biofilm dans chaque réacteur lors du mélange du média. De plus, ce mode de mélange proposé est plus facile à réaliser dans le logiciel WEST® que celui appliqué dans le modèle SimBio.

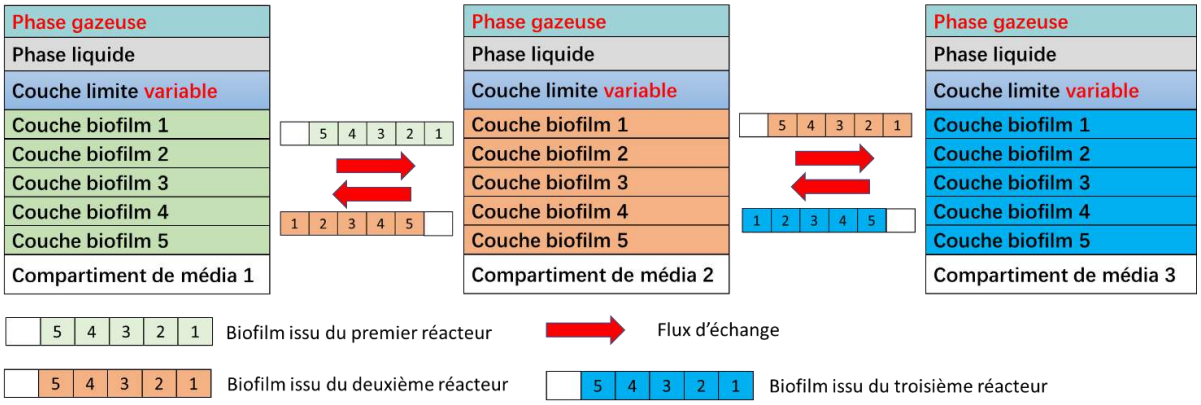


Figure 4.6 Mode de mélange du média (avec biofilm attaché) considéré dans le modèle développé.

Vu que le modèle développé considère cinq couches de biofilm, cinq flux d'échange indépendants sont donc créés pour chaque réacteur de média. De manière similaire au modèle SimBio, un taux d'échange du média est considéré pour illustrer l'importance de l'effet de mélange. Pour prendre en compte le fait que le débit de l'eau de lavage est normalement beaucoup plus élevé que celui appliqué pendant le traitement, ce qui peut influencer le mouvement du média, le taux d'échange pendant le lavage est considéré être différent par rapport à celui durant le traitement. Dans ce cas-ci, ces deux taux sont représentés par différents paramètres du modèle (voir Eq 4.30).

Eq 4.30
$$Biofiltre\ en\ traitement: J_{mix,X,i,j,k} = k_{mix,t} M_{X,i,j,k}$$
$$Biofiltre\ en\ lavage: J_{mix,X,i,j,k} = k_{mix,l} M_{X,i,j,k}$$

où
$J_{mix,X,i,j,k}$ est le flux d'échange du composant particulaire i de la couche j du réacteur de média k (g/j).
$k_{mix,t}$ et $k_{mix,l}$ sont les taux d'échange du média pendant le traitement et pendant le lavage, respectivement (1/j)

4.2.2.6. Modification des conversions biologiques et intégration de la phase gazeuse

Bollon et *al.* (2016a et b) ont suivi l'émission de N_2O des biofiltres nitrifiants et dénitrifiants des stations du SIAAP. Selon les auteurs, le N_2O émit par l'étage de nitrification est la source principale de gaz à effet de serre de la filière de biofiltration, tandis que les biofiltres post-dénitrifiants sont au contraire capables de consommer une partie du N_2O présent dans l'eau nitrifiée. Afin d'évaluer l'émission de N_2O dans la filière biofiltration et donc aider à contrôler et diminuer la production de gaz à effet de serre pendant le traitement, les conversions biologiques concernant la production/consommation de N_2O doivent être prises en compte dans le modèle développé. De plus, afin d'évaluer l'évolution de l'émission de N_2O pendant la montée de l'air le long du biofiltre (Fiat *et al.*, 2019), la conceptualisation du transfert gaz-liquide utilisée par le modèle SimBio doit être modifiée pour bien décrire le changement de la composition de l'air injectée dans le biofiltre dans la phase gazeuse. Les textes suivants présentent les modifications apportées au modèle SimBio sur ces deux aspects pour réaliser l'évaluation de l'émission de N_2O pour le traitement par biofiltration. Tel que présenté au Chapitre 2 (section 2.2.3.2), en parallèle de cette thèse, Fiat *et al.* (2019) avait également réalisé une extension du modèle SimBio afin d'évaluer l'émission de N_2O lors de la biofiltration. Les différences entre le modèle de biofiltration développé et celui proposé par Fiat *et al.* (2019) seront présentées à la fin de cette section.

- **Modification des conversions biologiques**

Les équations des conversions biologiques utilisées par le modèle développé sont issues des modèles biologiques de Pocquet *et al.* (2016) et de Hiatt et Grady (2008). Tous les processus de conversions biologiques considérés par le modèle développé sont résumés au Tableau 4.1. Par rapport au modèle SimBio, six processus supplémentaires sont ajoutés dans le modèle. Les deux premiers processus (réactions 4 et 5) illustrent la production/consommation de N_2O lors de la dénitrification (Hiatt et Grady, 2008), tandis que les autres quatre (réactions 6, 8, 9 et 10), qui sont issus du modèle proposé par Pocquet *et al.* (2016) concernent la production de N_2O liée à la nitrification.

Tableau 4.1 Processus de conversion biologique pris en compte par le modèle développé (les lignes en gris sont les procédés qui étaient déjà considérés dans le modèle SimBio)

j	Processus
1	Croissance aérobie de la biomasse hétérotrophe
2	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur le nitrate
3	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur le nitrite
4	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur l'oxyde nitrique
5	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur l'oxyde nitreux
6	Oxydation de l'ammoniac en hydroxylamine
7	Croissance aérobie de la biomasse nitritante
8	Oxydation de l'oxyde nitrique en nitrite
9	Réduction de l'oxyde nitrique en oxyde nitreux
10	Réduction de l'acide nitreux en oxyde nitreux
11	Croissance aérobie de la biomasse nitratante
12	Mort de la biomasse hétérotrophe
13	Mort de la biomasse nitritante
14	Mort de la biomasse nitratante
15	Ammonification
16	Hydrolyse du substrat particulaire biodégradable
17	Hydrolyse de l'azote organique particulaire

Tel qu'illustré à la Figure 4.7, par rapport au modèle SimBio, trois nouveaux composants solubles sont intégrés dans le modèle en lien avec les processus ajoutés. Il s'agit de l'hydroxylamine (NH_2OH, S_{NH2OH}), l'oxyde nitrique (aussi appelé monoxyde d'azote, NO, S_{NO}), l'oxyde nitreux (aussi appelé protoxyde d'azote, N_2O, S_{N2O}). Selon la proposition de Pocquet *et al.* (2016), l'ammoniac est le vrai substrat pour les bactéries nitritantes. Pour cette raison, l'équilibre chimique entre l'ammonium et l'ammoniac, qui est influencé par la température et le pH, est intégré dans le modèle (Anthonisen *et al.*, 1976). De même, le HNO_2 est considéré comme le vrai substrat pour la réduction de NO_2^- en N_2O (processus 10 dans le Tableau 4.1), l'équilibre chimique entre le nitrite et l'acide nitreux est aussi considéré (Pocquet *et al.*, 2016). Vue que l'évolution du pH sous l'effet de la nitrification et la dénitrification n'est pas prise en compte dans le modèle, on fixe pendant la simulation le pH à 7. En revanche, l'évolution de la température dans les biofiltres, qui est mesurée dans les stations du SIAAP est prise en compte dans le modèle pour calculer les concentrations en NH_3 et en HNO_2. Le Tableau 4.2 résume tous les composants solubles et particulaires considérés dans le modèle développé. Les

symboles utilisées pour représenter les composants suivent le nouveau standard de la nomenclature pour la modélisation de traitement des eaux usées proposé par Corominas *et al.* (2010). La matrice de Gujer du modèle développé est présentée dans les Tableaux Tableau A2.3-Tableau A2.6 dans l'Annexe 2.

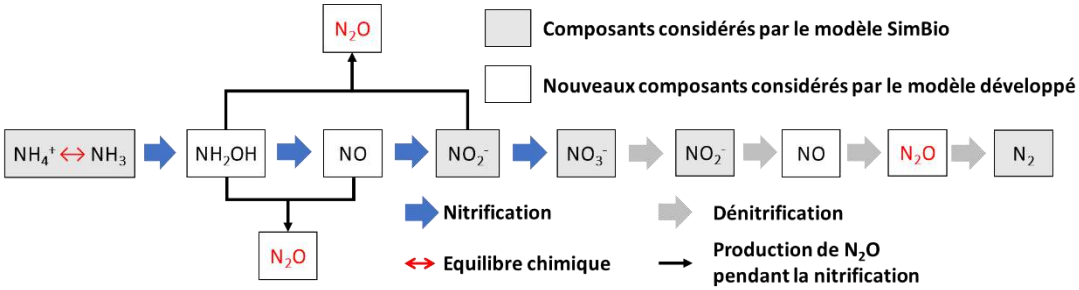


Figure 4.7 Composants et réactions liées à la nitrification, la dénitrification ainsi que la production/consommation biologique de N_2O pris en compte par le modèle développé.

Tableau 4.2 Composants solubles et particulaires pris en compte par le modèle développé.

Composants solubles	Symboles	Composants particulaires	Symboles
Alcalinité	S_{ALK}	Azote organique particulaire	$X_{CB,N}$
DCO soluble biodégradable	S_B	Biomasse hétérotrophe	X_{OHO}
DCO soluble inerte	S_U	Biomasse nitritante	X_{AOB}
Azote organique soluble	$S_{B,N}$	Biomasse nitratante	X_{NOB}
Azote ammoniacal	S_{NH4}	DCO particulaire biodégradable	X_{CB}
Hydroxylamine	S_{NH2OH}	DCO particulaire inerte	X_U
Nitrate	S_{NO3}	DCO particulaire inerte issue de la mort cellulaire	$X_{U,E}$
Nitrite	S_{NO2}		
Oxyde nitrique	S_{NO}		
Oxyde nitreux	S_{N2O}		
Diazote dissous	S_{N2}		
Oxygène dissous	S_{O2}		
Orthophosphate	S_{PO4}		

- **Intégration de la phase gazeuse et modélisation du transfert gaz-liquide**

Tel que mentionné précédemment au début de section 4.2.2.6, afin de mieux décrire le transfert gaz-liquide et évaluer l'émission de N_2O pendant la biofiltration, l'évolution de la composition gazeuse pendant la montée de l'air le long du biofiltre doit être prise en compte. Une phase gazeuse est donc considérée pour chaque réacteur de média dans le modèle développé. Le volume de cette phase est représenté implicitement par la quantité molaire totale des gaz. Vu que les données expérimentales sur l'évolution du volume et de la composition des gaz dans les biofiltres étudiés n'étaient pas disponibles, on a fait l'hypothèse que la quantité molaire totale des gaz dans chaque réacteur n'est pas influencée par le transfert gaz-liquide, c'est-à-dire le volume de la phase gazeuse pour chaque réacteur de média est identique. Concrètement, à l'entrée de chaque réacteur de média, un flux de gaz (en mole/j) est considéré. Ce flux contient cinq composants gazeux : O_2, NO, N_2O, N_2 et CO_2. Les quatre premiers composants, qui possèdent chacun un composant soluble correspondant dans le modèle de conversion biologique précédemment présenté, participent au transfert gaz-liquide. Le gaz CO_2 considéré ici sert à maintenir la masse molaire malgré les échanges gaz-liquide et les réactions biologiques. Lorsqu'une mole des quatre premiers composants gazeux est formée, une mole de CO_2 disparait, tandis que quand une mole de ces gaz diffuse dans le liquide, une mole de CO_2 produit. Cette hypothèse n'est pas strictement correcte. En effet, le quotient respiratoire (ratio entre moles de CO_2 produit et moles d'O_2 consommée) dépend du type de substrat dégradé et du type de biomasse (hétérotrophe et autotrophe) présente dans le système (Hellinga *et al.*, 1996). Par exemple, selon l'étude de Vanhooren (2002) sur un lit bactérien traitant simultanément la DCO et l'ammonium, le quotient respiratoire observé peut varier entre 0,7 et 0,9. Cependant, cette hypothèse permet de simplifier le modèle en considérant un nombre de moles de gaz constant. Cette hypothèse pourra être vérifiée et éventuellement améliorée en réalisant des mesures de la composition de gaz en entrée et en sortie des biofiltres.

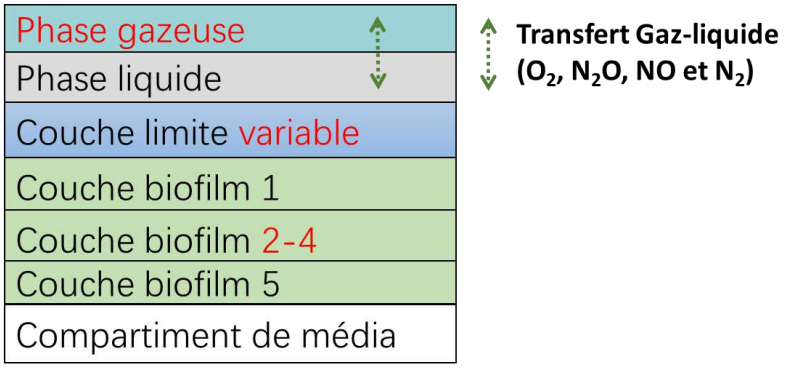


Figure 4.8 La phase gazeuse et le transfert gaz-liquide pris en compte dans le modèle développé.

Le mode de calcul utilisé par le modèle développé pour estimer les flux de transfert des composants gazeux dans chaque réacteur (voir Eq 4.31) est similaire à celui utilisé dans le

modèle SimBio pour le transfert d'oxygène. Le coefficient de transfert d'oxygène (k_La_{O2}) est déterminé en fonction du débit d'air injectée et de la température selon l'équation issue du modèle SimBio (voir section 2.2.3.2, Eq 2.28). Les coefficients de transfert des autres composants gazeux (N_2, N_2O et NO), sont estimés à partir du k_La_{O2} déterminé (Munz et Roberts, 1988).

Eq 4.31 $$J_{air,i,k} = \alpha \times F \times k_L a_i \times \left(\beta_{sol} \times C_i^* - C_{i,k}\right) \times V_{liquide,k}$$

où
α est le facteur de la réduction de transfert gaz-liquide dans l'eau usée (-)
F est le facteur de la réduction de transfert gaz-liquide issue de l'encrassement des diffuseurs (-)
k_La_i est le coefficient de transfert gaz-liquide du composant gazeux i (1/h)
C_i^* est la concentration du composant gazeux i à l'équilibre dans le liquide (g/m^3)
$C_{i,k}$ est la concentration en composant gazeux i dans le liquide du réacteur k (g/m^3)
β_{sol} est le facteur de la réduction de solubilité dans l'eau usée (-)
$V_{liquide,k}$ est le volume du liquide de réacteur k (m^3)

Le mode d'estimation de la concentration à l'équilibre de chaque composant (C_i^*), qui est basé sur la loi d'Henry et prend en compte l'effet de la pression de l'eau sur la solubilité de gaz, est aussi issu du modèle SimBio (voir Eq 4.32). Les fractions molaires des composants gazeux en entrée des réacteurs sont calculées et utilisées comme les fractions volumiques des gaz (f_i) dans la phase gazeuse.

Eq 4.32 $$C_i^* = f_i \times K_{H,i} \times \left(P_{atm} + \delta\left(H_{r,k} + H_{surverse}\right)\right)$$

où
$K_{H,i}$ est la constante d'Henry pour le composant i (g/m^3/atm)
P_{atm} est la pression d'atmosphère (atm)
δ est le facteur de conversion de la hauteur de l'eau en pression (atm/m)
f_i est la fraction volumique du composant i dans le gaz (-)
$H_{r,k}$ et $H_{surverse}$ sont le profondeur du réacteur k et la hauteur de la zone de surverse au-dessus du lit de media, respectivement (m)

Le flux de gaz en sortie de chaque réacteur est calculé par l'équation Eq 4.33. Pour le premier réacteur, qui est celui recevant directement l'affluent et l'air injecté, le flux de gaz à l'entrée correspond au flux d'air injecté par l'aération. Les fractions volumiques de l'oxygène et du diazote dans le flux d'air injecté sont fixées à 21% et 78%, respectivement. La fraction du protoxyde d'azote est fixée à $3{,}28*10^{-5}$ % selon les données issues de l'agence européenne pour l'environnement. Pour le monoxyde d'azote, très peu d'informations sont disponibles sur sa concentration dans l'atmosphère. Dans le modèle développé, la fraction volumique de monoxyde d'azote est fixée avec un ordre de grandeur similaire au protoxyde d'azote ($5*10^{-5}$ %). Ce choix permet d'éviter des problèmes numériques pendant la simulation en particulier pour le premier réacteur de média. Enfin, tous les autres gaz présents dans l'air sont considérés

d'être du CO_2 (avec une fraction volumique autour de 1%).

Eq 4.33 $$J_{air,out,i,k} = J_{air,in,i,k} - J_{air,i,k}$$

où
$J_{air,in,i,k}$ et $J_{air,out,i,k}$ sont les flux du composant gazeux i en entrée et en sortie du réacteur k, respectivement (g/j)

- **Comparaison entre le modèle développé et celui proposé par Fiat *et al.* (2019)**

Tel que mentionné précédemment, en parallèle de cette thèse, Fiat *et al.* (2019) ont aussi étendu le modèle SimBio pour évaluer l'émission de N_2O pour le traitement par biofiltration. Ils ont également modifié les conversions biologiques du modèle SimBio et intégré une phase gazeuse dans leur modèle. Pour ces deux aspects, les différences principales entre le modèle de biofiltration développé dans le cadre de cette thèse et celui proposé par Fiat *et al.* (2019) sont suivantes :

1) Pour la conversion biologique, Fiat *et al.* (2019) ont aussi appliqué les équations biologiques issues des modèles biologiques de (Hiatt et Grady, 2008) et de (Pocquet *et al.*, 2016) pour décrire la production/élimination de N_2O pendant la nitrification et la dénitrification. La seule différence est que le modèle de Fiat *et al.* (2019) ne prend pas en compte l'équilibre existant entre l'ammonium et l'ammoniac ainsi que celui entre acide nitreux et le nitrite. Pour cette raison, dans leur modèle, l'ammonium et le nitrite sont directement utilisés comme substrats pour les réactions correspondantes (voir réactions 6 et 10 dans le Tableau 4.1).
2) Pour la description de la phase gazeuse, contrairement au modèle développé, le volume de la phase gazeuse dans le modèle de Fiat *et al.* (2019) est décrit de manière explicite, qui est calculé à partir de la vitesse superficielle du gaz (Gillot *et al.*, 2005). Cette conceptualisation permet d'estimer le temps de rétention des gaz présents dans le biofiltre. Les auteurs considèrent aussi que la phase gazeuse participe à la fragmentation du volume des réacteurs de média, ce qui influence le calcul du volume de liquide présent dans chaque réacteur ainsi que le temps de séjour hydraulique estimé.
3) Concernant la description du transfert gaz-liquide, le modèle de Fiat *et al.* (2019) prend en compte quatre composants gazeux : O_2, NO, N_2O et N_2. Le composant CO_2 , qui est considéré dans le modèle développé, n'est pas intégré dans leur modèle. Similaire au modèle développé, les composants O_2, NO, N_2O et N_2 sont considérés participer au transfert gaz-liquide. Fiat *et al.* (2019) ont remplacé l'équation de calcul du coefficient de transfert d'oxygène (k_La_{O2}) utilisée dans le modèle SimBio (conservé dans le modèle développé) par celle issue de Gillot *et al.* (2005) (voir Eq 2.29 dans le Chapitre 2).

4.2.2.7. Intégration de l'estimation de la consommation d'énergie

Selon les travaux d'Azimi et Rocher (2017) sur la consommation d'énergie de la station Seine Aval avant la modernisation, la filière de biofiltration (nitrification et post-dénitrification) représente environ 30% de la consommation d'électricité de la station. Les équipements pour l'aération et le pompage sont les principaux consommateurs d'énergie électrique pour le traitement des eaux usées dans la station. Pour réaliser une évaluation économique du traitement de la filière biofiltration et proposer des stratégies d'optimisation en termes de coûts de traitement et d'impacts environnementaux, il y a donc un intérêt d'intégrer l'estimation de la consommation d'énergie liée à l'aération et au pompage dans le modèle développé. Pour cette raison, les équations de consommation d'énergie par des pompes et des suppresseurs d'aération sont ajoutées dans le modèle. Ces équations sont simplifiées de celles provenant de la littérature sur le sujet et sont ensuite appliquées sur la station Seine Aval en utilisant de la documentation technique des équipements.

L'équation de consommation d'énergie par pompage utilisée dans le modèle développé est simplifiée de celle proposée par Gernaey *et al.* (2006). Selon les auteurs, la puissance fournit par une pompe (P_{pompe}, en kW) peut être estimée en fonction du débit d'eau qu'il relève (Q, en m^3/s) et de la hauteur manométrique totale (HMT, en m) (voir Eq 4.34). Cette hauteur représente la pression à fournir pendant le pompage en hauteur de colonne d'eau, qui est composée principalement par trois éléments (voir Eq 4.35) : la hauteur géométrique ($H_{géo}$) représentant la hauteur à surmonter, la charge de la vitesse hydraulique (velocity head ou velocity gradient) (H_{vit}) et la perte de charge par frottement ($H_{frottement}$) (De Keyser *et al.*, 2014).

Eq 4.34 $$P_{Pompe} = {\rho \times g \times HMT \times Q}/{1000}$$

Eq 4.35 $$HMT = H_{géo} + H_{vit} + H_{frottement} = H_{géo} + K_{vit}Q^2 + K_{frottement}Q^2$$

où
ρ est la masse volumique du liquide pompé (g/m^3)
g est l'accélération gravitationnelle (m/s^2)
K_{vit} est le coefficient de la charge de la vitesse hydraulique ($1/s^2/m^5$)
$K_{frottement}$ est le coefficient de perte de charge par frottement ($1/s^2/m^5$)

Des coudes dans les tuyaux de pompe génèrent une perte de charge supplémentaire (perte de charge singulière) liée aux caractéristiques de la pompe, ce qui doit être également pris en compte dans le calcul de la hauteur manométrique totale (Gernaey et al., 2006) :

Eq 4.36 $$H_{singulière} = K_{singulière}\frac{u^2}{2g} = K_{singulière}\frac{Q^2}{2g}\left(\frac{4}{\pi D}\right)^2$$

où
$H_{singulière}$ est la perte de charge singulière (m)
$K_{singulière}$ est le coefficient de perte de charge singulière (-)

u est la vitesse du fluide dans le tube (m/s)
D est le diamètre du tuyau (m)

Cependant, la plupart des manuels techniques de pompes de la filière de biofiltration (biofiltres pré-dénitrifiant, biofiltres nitrifiants et recirculation des eaux nitrifiée) ne fournissent que les valeurs de la hauteur géométrique et la hauteur manométrique totale au débit nominal (et/ou au débit maximal et minimal). Les informations concernant le coefficient de la charge de la vitesse hydraulique et les pertes de charge ne sont pas clairement indiquées. Afin d'estimer la puissance des pompes et l'énergie consommée, le calcul de la hauteur manométrique totale est simplifié en appliquant un coefficient général (K_{pompe}) multiplié par Q^2 (voir Eq 4.37), élément qui est présent dans les calculs de tous les termes sauf $H_{géo}$. Ce coefficient général peut être estimé à partir des informations des pompes au point de fonctionnement nominal trouvées dans la documentation technique des équipements (Eq 4.38).

Eq 4.37 $$HMT = H_{géo} + H_{vit} + H_{frottement} + H_{singulière} = H_{géo,manuel} + K_{pompe}Q^2$$

Eq 4.38 $$K_{pompe} = \left(HMT_{manuel} - H_{géo,manuel}\right) / Q_{manuel}^2$$

où
HMT_{manuel} est la hauteur manométrique totale au point de fonctionnement nominal indiquée dans le manuel technique des pompes (m)
$H_{géo,\ manuel}$ est la hauteur géométrique indiquée dans le manuel technique des pompes (m)
Q_{manuel} est le débit de liquide à la sortie de la pompe indiqué dans le manuel technique des pompes (m^3/s)
K_{pompe} est le coefficient général utilisé pour estimer la hauteur manométrique totale ($1/s^2/m^5$)

Il est à noter qu'en réalité, la hauteur géométrique peut aussi varier en fonction des niveaux d'eau dans la zone d'aspiration et la zone de décharge du liquide. Cependant, comme ces informations ne sont pas disponibles, les valeurs de la hauteur géométrique sont fixées à celles trouvées dans les documents techniques. Une fois la puissance de pompe calculée, l'énergie consommée par le moteur de pompe peut être estimée avec les valeurs de rendement pompe-moteur indiquées dans les manuels techniques des pompes :

Eq 4.39 $$E_{pompage} = \int P_{pompe} / (3600 \times \eta_{pompe-moteur})$$

où
$E_{pompqge}$ est l'énergie consommée pour le pompage (kW.h)
$\eta_{pompe\text{-}moteur}$ est le rendement pompe-moteur (%)

Dans la filière biofiltration de la station Seine Aval, seul l'étage de nitrification est aéré, par des surpresseurs centrifuges. L'estimation de l'énergie consommée par ce type d'équipement peut se baser sur le débit d'air qu'il fournit et la pression différentielle créée entre l'entrée et la sortie (Wu *et al.*, 2005) (voir Eq 4.40 et 4.41). Il est à noter que le débit d'air injecté à la station Seine Aval est exprimé en Nm^3/s. Dans ce cas-ci, la conversion du débit d'air mesuré (sous condition

normale : 0°C et 101325 Pa) en débit de la condition environnementale réelle est prise en compte dans le modèle (voir Eq 4.42). Pendant la simulation, on fixe $P_{réel}$ à 101325 Pa (selon le manuel du surpresseur), tandis que la température réelle ($T_{réel}$) est fixée à 307 K (22 °C). Cette température prend en compte la température moyenne annuelle du local (12 °C) où les surpresseurs sont installés ainsi que l'échauffement de la température de l'air entre le point d'extraction et celui de sortie des surpresseurs (10 °C, selon le manuel technique des surpresseurs).

Eq 4.40 $$P_{surpresseur} = {Q_{air} \times \Delta P}/{1000}$$

Eq 4.41 $$E_{aération} = \int {P_{surpresseur}}/{(3600 \times \eta_{surpresseur-moteur})}$$

Eq 4.42 $$Q_{air} = {(Q_{air,mesure} \times P_{normal} \times T_{réel})}/{(P_{réel} \times T_{normal})}$$

où
$P_{surpresseur}$ est la puissance du surpresseur (kW)
Q_{air} est le débit d'air (m^3/s)
ΔP est la pression différentielle entre l'entrée et la sortie du surpresseur (Pa)
$E_{aération}$ est l'énergie consommée par aération (kW.h)
$\eta_{surpresseur\text{-}moteur}$ est le rendement surpresseur-moteur (%)
$Q_{air,mesure}$ est le débit d'air mesuré (Nm^3/s)
P_{normal} et T_{normal} sont la pression (101325 Pa) et la température (273K) de la condition normale, respectivement.
$P_{réel}$ et $T_{réel}$ sont la pression (Pa) et la température (K) de condition environnementale réelle, respectivement.

4.3. Modélisation de la nitrification par biofiltration

Cette section présente les travaux réalisés sur la modélisation de l'étage de nitrification de la station Seine Aval à l'aide du modèle développé présenté à la section précédente. Le fonctionnement de cet étage avant et après les travaux de modernisation de la station a déjà été décrit au Chapitre 3. Pour rappel, cet étage est constitué de 84 biofiltres nitrifiants (Biostyr®, Veolia) divisés en six batteries. Chaque biofiltre contient un média filtrant fabriqué en polystyrène (diamètre 4 mm), sur une hauteur de 3,5 mètres et avec une surface de média de 173 m². Pendant le traitement, les biofiltres sont aérés par 15 surpresseurs centrifuges divisés en trois unités d'aération. Chacune alimente donc deux batteries de traitement. Tel que mentionné au Chapitre 3, hormis la mise en place d'une recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-dénitrification, le fonctionnement de cet étage n'est que peu modifié suite à la modernisation de la station Seine Aval.

Cette partie du travail de modélisation est présentée sous la forme d'un article préparé à publier (section 4.3.3). Des détails supplémentaires concernant la collecte des données pour la calibration-validation du modèle, le modèle de fractionnement des données d'entrée et l'identification des paramètres à calibrer à partir de l'analyse de sensibilité globale sont toutefois fournis aux sections 4.3.1 et 4.3.2 afin de compléter l'article.

4.3.1. Description des jeux de données et du modèle de fractionnement utilisés

4.3.1.1. Période choisie et données collectées pour calibration-validation du modèle

La période choisie pour calibrer le modèle de biofiltration en nitrification est l'année 2009 (360 jours), soit la même que celle utilisée par Bernier *et al.* (2014b). A cette période, l'étage de nitrification traitait les eaux issues du traitement par boues activées. La performance du traitement de l'étage correspondait à celle attendue de la station avant la modernisation. Tel que présenté au Chapitre 3, le fonctionnement de l'étage de nitrification prévu en 2022 (voir section 3.1.3) est déjà en vigueur depuis la mise en route de l'étage de pré-dénitrification en 2017 (voir section 3.1.2). Afin de s'assurer que le modèle est capable de bien simuler la nitrification après la modernisation de la station, des données collectées après la mise en route du projet BioSAV (de mi-avril à mi-octobre 2017, 180 jours) sont donc utilisées pour la validation. Ceci permet une validation de haute qualité, car les conditions d'exploitation des biofiltres pour la période de validation choisie sont éloignées de celles pour la période de calibration. Pour rappel, après la mise en route du projet BioSAV, l'étage de pré-dénitrification a été installé en amont de l'étage de nitrification. Le Tableau 4.3 montre les conditions d'exploitation principales des biofiltres nitrifiants (selon les données d'exploitation journalières) pour les périodes de calibration et de validation.

Tableau 4.3 Conditions d'exploitation principales de l'étage de nitrification de la station Seine Aval en 2009 (période de calibration) et de mi-avril à mi-octobre 2017 (période de validation).

Conditions d'exploitation (2009)	Nombre d'observations	Moyenne	Ecart-type
Débit d'eau (1000.m^3/j)	360	1 635	274
DCO total (mgO$_2$/L)	347	93,6	28,6
MES (mg/L)	347	36,4	18,8
NH_4^+ (mgN/L)	347	35,9	7,1
Nombre de biofiltres en fonctionnement (j^{-1})	360	68,7	8,9
Débit d'air injecté par filtre (Nm^3/j)	360	67 890	14 640
Conditions d'exploitation (mi-avril à mi-octobre 2017)	**Nombre d'observations**	**Moyenne**	**Ecart-type**
Débit d'eau (1000.m^3/j)	180	1 861	269
DCO total (mgO$_2$/L)	178	61,6	17,3
MES (mg/L)	179	20,8	9,2
NH_4^+ (mgN/L)	179	18,1	4,4
Nombre de biofiltres en fonctionnement (j^{-1})	180	66,2	10,5
Débit d'air injecté par filtre (Nm^3/j)	180	49 483	11 012

Par rapport à la période de calibration (voir Tableau 4.3), la concentration moyenne en NH_4^+ dans l'affluent diminue de 50% (de 36,4 mgN/L à 18,1 mgN/L). Tel que mentionné précédemment au début de cette section, après la mise en route du projet BioSAV, l'eau nitrifiée est recirculée vers l'étage de pré-dénitrification (taux de recirculation autour de 50%) qui se trouve en amont de l'étage de nitrification, ce qui dilue la concentration en azote ammoniacal en entrée de l'étage de nitrification. En plus de l'effet de dilution liée à la recirculation de l'eau nitrifiée, tel que montré à la Figure 4.9, la charge en NH_4^+ en entrée de l'étage de la période de validation est en général plus faible que celle de calibration, ce qui conduit aussi à la diminution de la concentration en azote ammoniacal en entrée de l'étage pour la période de validation. La Figure 4.9 montre aussi que pour toutes les deux périodes, la charge en azote ammoniacal en entrée dans les biofiltres nitrifiants de la station diminue en été et re-augmente à partir du mois de septembre. Ceci est généralement considéré être dû aux vacances estivales, pendant lesquelles le nombre d'habitants dans la région parisienne diminue de manière importante.

La recirculation de l'eau nitrifiée influence aussi le débit traité par les biofiltres nitrifiants, tel que montré au Tableau 4.3, le débit moyen à l'entrée de l'étage pour la période de validation augmente d'environ 10%-15% (de 1 635 000 m^3/j à 1 861 000 m^3/j). Cependant, par rapport à l'année 2009, le débit moyen de l'eau brute en entrée de la station Seine Aval pour la période de validation diminue de 1 667 000 m^3/j à 1 367 000 m^3/j. Dans ce cas-ci, l'augmentation du débit moyen à l'entrée de l'étage de nitrification pour la période de validation est liée à la recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-nitrification.

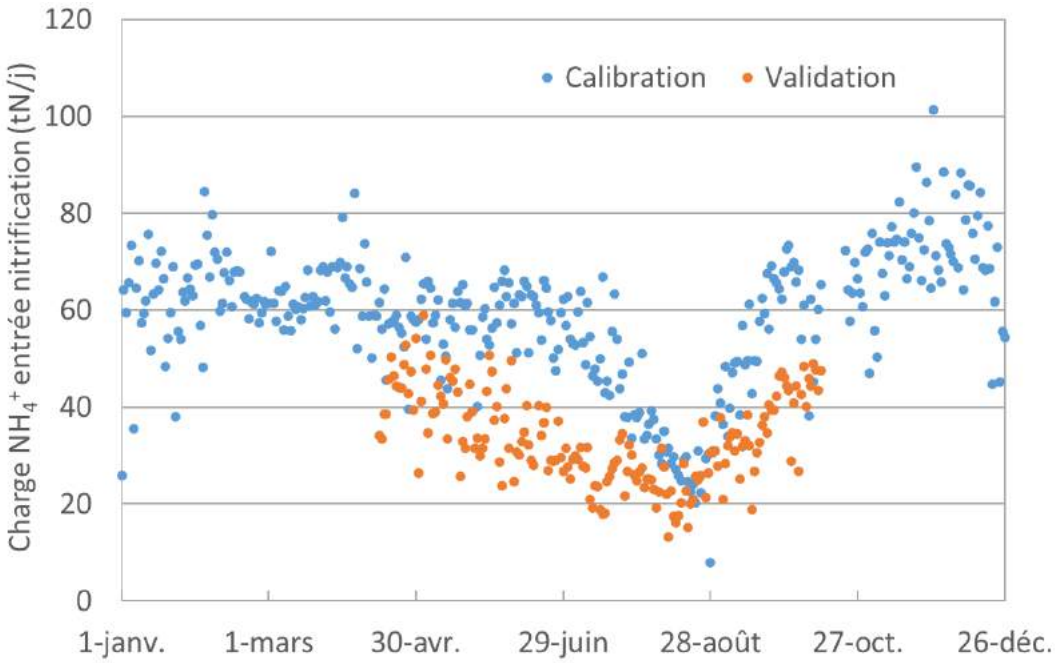


Figure 4.9 Évolution de la charge en NH_4^+ en entrée de l'étage de nitrification (points bleus : calibration; points oranges : validation).

Les données collectées pour calibrer et valider le modèle sont composées de deux types de données. Le premier type concerne la performance de traitement des biofiltres tel qu'observée par les divers capteurs installés en entrée et en sortie de chaque batterie ou de l'étage de nitrification au complet ainsi que le suivi quotidien réalisé dans le cadre de l'autosurveillance de la station (voir Tableau 4.4). Celle-ci consiste en la collecte d'échantillons composites 24 heures par des préleveurs automatiques installés en entrée et en sortie de l'étage. Différentes analyses sont ensuite réalisées sur ces échantillons par le laboratoire de la station. Il est à noter que les données d'autosurveillance sur l'alcalinité en entrée de l'étage ne sont que disponibles pour l'année 2009, tandis que la DCO filtrée en entrée est mesurée uniquement en 2017. Le deuxième type de données concerne les informations de fonctionnement de l'étage de nitrification, comme le nombre de pompes et suppresseurs utilisés pendant le traitement, leur consommation en énergie ainsi que le nombre de batteries et de biofiltres en fonctionnement. Ces informations sont enregistrées de manière automatique par les commandes de traitement de l'étage et le système mesurant la consommation électrique installés à la station.

Tableau 4.4 Résumé des données de performance de traitement collectées pour l'étage de nitrification pour la calibration et la validation du modèle.

Données de capteurs (moyenne 15 minutes)	Localisation des capteurs	Données d'autosurveillance	Localisation des préleveurs
Débit d'eau (m^3/j)	Entrée[1]	DCO total (mgO_2/L)	Entrée/Sortie
Débit d'air (Nm^3/j)	Entrée[1]	DCO filtrée[3](mgO_2/L)	Entrée
NH_4^+ (mgN/L)	Entrée/Sortie[2]	MES (mg/L)	Entrée/Sortie
MES (mg/L)	Entrée[2]	NH_4^+ (mgN/L)	Entrée/Sortie
PO_4^{3-} (mgP/L)	Entrée[2]	NO_3^- (mgN/L)	Entrée/Sortie
OD (mgO_2/L)	Sortie[1]	NO_2^- (mgN/L)	Entrée/Sortie
Température (°C)	Entrée[2]	NTK (mgN/L)	Entrée
NO_x^- (mgN/L)	Sortie[2]	Alcalinité[4] (mmol/L)	Entrée
		PO_4^{3-} (mgP/L)	Entrée/Sortie

[1]Capteurs installés en entrée ou en sortie de chaque batterie
[2]Capteurs installés en entrée ou en sortie de l'étage de nitrification au complet
[3]Les données DCO filtrée ne sont que disponible pour l'année 2017
[4]Les données alcalinité ne sont que disponible pour l'année 2009

Avant de construire les jeux de données de calibration et de validation, les mesures de l'étage sont corrigées afin d'éliminer les valeurs aberrantes. La valeur moyenne et l'écart-type standard sont calculés pour chaque variable afin d'aider à identifier les valeurs aberrantes avec le critère de moyenne ± 2*σ (Rieger *et al.*, 2012). Ces valeurs aberrantes identifiées sont systématiquement enlevées des données collectées et remplacées par les données adjacentes qui sont validées. En plus de cette analyse statistique, les données issues des capteurs MES en entrée de procédé ont été corrigées et lissées en utilisant la méthode proposée par Alferes et Vanrolleghem (2016) pour éliminer les données aberrantes provenant des défauts de capteur tels que l'encrassement des organes de mesure. Pour chaque mesure, le nombre de valeurs aberrantes éliminées représente autour de 5% des données collectées. En plus des données aberrantes, des différences constantes et parfois non-négligeables ont été observées entre les moyennes journalières des données de capteurs (MES et NH_4^+) et les résultats du suivi laboratoire quotidien correspondants. Ces derniers sont jugés plus fiables que les mesures de sonde, car ils sont utilisés par les exploitants de la station pour évaluer la performance de traitement de l'étage. Dans ce cas-ci, afin de corriger les mesures de capteurs pour les ramener au niveau de celles du laboratoire, les moyennes journalières des données de capteurs de MES et de NH_4^+ en entrée ont d'abord été calculées (après l'enlèvement des données aberrantes). Les valeurs moyennes calculées ont ensuite été comparées avec les mesures laboratoire journalières correspondantes pour obtenir les ratios journaliers labo/capteur. Enfin, les données de capteurs de MES et de NH_4^+ ont été multipliés par les ratios journaliers obtenus.

4.3.1.2. Modèle de fractionnement utilisé

- **Fractionnement de l'affluent pour la période de calibration**

Le modèle de fractionnement de l'affluent a été construit à partir des mesures disponibles. Tel que montré à la Figure 4.10, pour la calibration, les concentrations en DCO soluble et particulaire (DCOs et DCOx) dans l'affluent ont été estimées à partir des concentrations en DCO (données laboratoire) et en MES mesurées (données de capteur). Pour éviter des problèmes comme résultats de fractionnement négatifs causés par les différentes fréquences de mesure (sonde et laboratoire), des données de DCO 15 minutes ont été construites en multipliant les données de capteur de MES en entrée par le ratio journalier laboratoire DCO/MES.

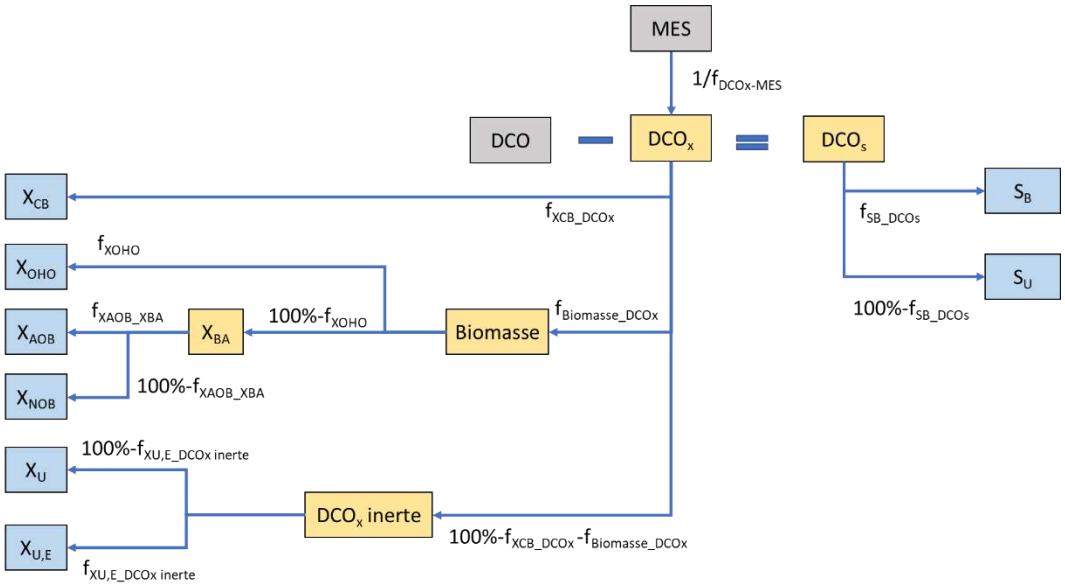


Figure 4.10 Estimation des composants de DCO à partir des mesures en entrée de l'étage de la nitrification pour la période de calibration du modèle (blocs gris : mesures en entrée, blocs jaunes : variables composites intermédiaires, blocs bleus : variables d'état en entrée du modèle).

Pour la période de calibration, les valeurs des paramètres utilisées pour le fractionnement de DCO sont basées sur le modèle SimBio avec certaines modifications, en particulier pour le fractionnement de la DCO particulaire (voir Tableau 4.5). Premièrement, pour prendre en compte la faible activité de nitrification au niveau du traitement par boues activées en amont de l'étage de nitrification, une présence de biomasse autotrophe dans l'affluent est considérée dans le modèle développée. Dans ce cas-ci, la fraction de la biomasse dans la DCO particulaire ($f_{Biomasse_DCOx}$) est légèrement augmentée (de 25% à 30%) par rapport à celle utilisée dans le modèle SimBio qui ne considère que la présence de la biomasse hétérotrophe dans l'affluent. Deuxièmement, la fraction de la DCO particulaire biodégradable dans la DCO particulaire (f_{XCB_DCOx}) est augmentée de 10% à 20%. Cette modification, qui réduit la fraction de la DCO particulaire inerte, permet d'éviter des résultats négatifs pour le fractionnement des composants azotés (voir le paragraphe suivant). Enfin, comme l'affluent de l'étage de nitrification peut contenir des particules inertes issues de la mortalité de la biomasse provenant du traitement par

boues activées, la fraction du composant ($X_{U,E}$) dans la DCO particulaire inerte en entrée ($f_{XU,E_DCOx\ inerte}$) est considérée par le modèle développé.

Tableau 4.5 Valeurs des paramètres de fractionnement utilisées pour la période de calibration.

Paramètre de fractionnement	Symbole	Valeur
Fraction de la DCOs biodégradable dans la DCOs en entrée (%)	f_{SB_DCOs}	25%
Facteur de conversion de DCOx en MES (g/gO_2)	$f_{DCOx\text{-}MES}$	0,56
Fraction de la DCOx biodégradable dans la DCOx en entrée (%)	f_{XCB_DCOx}	20%
Fraction de la biomasse dans la DCOx en entrée (%)	$f_{Biomasse_DCOx}$	30%
Fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	$f_{XOHO_Biomasse}$	90%
Fraction de la biomasse AOB dans la biomasse autotrophe (%)	f_{AOB_XBA}	5%
Fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particule inerte en entrée (%)	$f_{XU,E_DCOx\ inerte}$	55%

Pour les autres variables, les mesures de l'azote ammoniacal, du nitrite, du nitrate, de l'alcalinité et des orthophosphates en entrée de l'étages sont utilisées directement pour représenter respectivement les concentrations des variables S_{NH4}, S_{NO3}, S_{NO2}, S_{ALK} et S_{PO4} en entrée. Les concentrations des variables d'azote organique biodégradable ($S_{B,N}$ et $X_{CB,N}$) en entrée sont déduites à partir des mesures de NTK (données laboratoire) et de NH_4^+ (données de capteur), des concentrations en biomasse et en DCOx inerte estimées et de la concentration en S_{NH2OH} en entrée (voir Eq 4.43). Cette dernière n'est pas mesurée et donc fixée à une valeur faible par défaut faible (0,005 mgN/L) pour éviter des problèmes numériques de calcul. De manière similaire à ce qui est fait pour le fractionnement de DCO, des données de NTK 15 minutes sont construites à partir du ratio laboratoire journalier NTK/NH_4^+.

Eq 4.43 $$X_{CB,N} + S_{B,N} = NTK - NH_4^+ - S_{NH2OH} - i_{N_XBio} * Biomasse - i_{N_Xinerte} * DCO_X\ inerte$$
$$avec\ S_{B,N}/(S_{B,N} + X_{CB,N}) = 0{,}8$$

où
i_{N_XBio} est la quantité d'azote dans la biomasse (gN/gO_2)
$i_{N_Xinerte}$ est la quantité d'azote dans la DCO particulaire inerte (gN/gO_2)

Les concentrations en S_{N2O} et S_{NO}, qui ne sont pas mesurées en entrée de l'étage, sont également fixées à une valeur faible (0,002 mgN/L). Comme la température de l'eau en entrée pour la période de calibration ne varie pas trop (température moyenne : 19±3 °C), les concentrations en S_{O2} et en S_{N2} sont respectivement fixées à 8,1 mgO_2/L et 15,3 mgN/L qui sont près des concentrations en saturation de ces deux gaz dissous dans l'eau (1 atm et 20°C)(Sander, 2015b).

- **Fractionnement de l'affluent pour la période de validation**

Etant donné qu'après la mise en route du projet BioSAV en 2017, l'étage de nitrification traite principalement la sortie des biofiltres pré-dénitrifiants, le mode de fractionnement de la DCO ainsi que certains paramètres de fractionnement (voir le Tableau 4.6) sont modifiés pour la

période de validation. Premièrement, tel que mentionné précédemment, la mesure de la DCO filtrée est disponible en 2017. Dans ce cas-ci, la concentration en DCO soluble en entrée de l'étage est considérée égale à la DCO filtrée mesurée au lieu d'être estimée selon les mesures de la DCO totale et des MES. Deuxièmement, en supposant que la concentration moyenne en DCO soluble inerte (S_U) présente dans l'affluent de l'étage de nitrification de la période de validation soit proche de celle estimée pour la période de calibration (autour de 24 mgO_2/L), la fraction de la DCO soluble biodégradable dans la DCO soluble (moyenne : 40 mgO_2/L) est augmentée de 25% à 40%. Pour rappel, du méthanol est injecté dans les biofiltres pré-dénitrifiants qui se situent en amont de l'étage de nitrification. Selon les exploitants de la station Seine Aval, du méthanol résiduel est observé en sortie de l'étage de pré-dénitrification, ce qui peut expliquer l'augmentation du ratio de la DCO soluble biodégradable dans la DCO soluble. Troisièmement, le facteur de conversion $f_{DCOx\text{-}MES}$ est augmenté de 0,56 mg/mgO_2 à 0,75 mg/mgO_2 selon les données de la DCO totale, de la DCO filtrée et des MES mesurées. Cette valeur de conversion correspond à la valeur typique proposée par Gernaey *et al.* (2014) pour estimer les MES en sortie de traitement secondaire dans le modèle BSM2. Enfin, par rapport aux réacteurs à boues activées, les biofiltres peuvent mieux retenir la biomasse. Pour cette raison, on suppose que la sortie de pré-dénitrification contient très peu de biomasse. La fraction de la biomasse présente dans la DCO particulaire en entrée de l'étage de nitrification est donc réduite de 30% à 5%. En plus de la modification du fractionnement de la DCO, l'alcalinité de l'eau (composant S_{ALK}) en entrée de l'étage, qui n'est pas mesurée en 2017, est fixée à 8,75 mmol/L. Le mode de fractionnement de l'affluent pour les autres composants est identique à celui appliqué pour la calibration.

Tableau 4.6 Valeurs des paramètres de fractionnement utilisées pour la période de validation.

Paramètre de fractionnement	Symbole	Valeur
Fraction de la DCOs biodégradable dans la DCOs en entrée (%)	f_{SB_DCOs}	40%
Facteur de conversion de DCOx en MES (g/gO_2)	$f_{DCOx\text{-}MES}$	0,75
Fraction de la DCOx biodégradable dans la DCOx en entrée (%)	f_{XCB_DCOx}	15%
Fraction de la biomasse dans la DCOx en entrée (%)	$f_{Biomasse_DCOx}$	5%
Fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	$f_{XOHO_Biomasse}$	90%
Fraction de la biomasse AOB dans la biomasse autotrophe (%)	f_{AOB_XBA}	5%
Fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particule inerte en entrée (%)	$f_{XU,E_DCOx\ inerte}$	55%

4.3.2. Analyse de la sensibilité globale

Tel que mentionné précédemment dans le Chapitre 2 (section 2.2.4), l'analyse de sensibilité globale consiste à identifier les paramètres influents pour chaque variable d'intérêt en sortie du modèle. Cette analyse permet de diminuer le nombre de paramètres à considérer durant la calibration et d'améliorer la compréhension de leur impact sur le modèle. Pour ce travail de modélisation de l'étage de nitrification, huit variables en sortie ont été choisies pour la calibration des paramètres de modèle. Les premières sept variables sont les concentrations des composants chimiques liées à la qualité de l'eau en sortie des biofiltres nitrifiants : NH_4^+, NO_3^-, NO_2^-, OD, DCO, MES et PO_4^{3-}. Dans le modèle, la concentration en MES en sortie est estimée à partir de la DCO particulaire en appliquant un facteur de conversion de DCO particulaire à MES. La dernière variable est le facteur d'émission de N_2O représentant le ratio entre la quantité de N_2O émise (dans le liquide et l'air) et la quantité de NH_4^+ enlevée (Bollon *et al.*, 2016b). C'est un indicateur qui évalue les impacts environnementaux de l'étage de nitrification.

Tel que présenté à la section 4.1, l'analyse de sensibilité des paramètres est réalisée selon l'approche de simulation Monte-Carlo proposée par Sin *et al.* (2008b). Cependant, considérant le nombre de paramètres utilisés par le modèle et le temps de simulation, certains paramètres ne sont pas intégrés dans l'analyse. Cette sélection de paramètres est basée selon les expériences et les connaissances acquises lors de la construction du modèle. Les paramètres liés aux réactions biologiques, au transfert gaz-liquide et aux déplacements des composants solubles et particulaires sont en général inclus dans l'analyse, tandis que les autres paramètres, comme, par exemple, les caractéristiques physiques des composants (coefficients de diffusion, la constante d'Henry, etc.) et les dimensions du biofiltre sont fixés et donc pas intégrés dans l'analyse. Parmi les 142 paramètres du modèle, 93 sont sélectionnés pour analyser leur influence sur les différentes variables de sortie (voir Tableau A2.7 dans l'Annexe 2). Un échantillonnage semi-aléatoire par la méthode LHS (Latin Hypercube Sampling) est ensuite réalisé sur chacun des paramètres choisis afin de générer des combinaisons de valeurs de paramètres à simuler (Saltelli *et al.*, 2007). Tel que présenté au chapitre 2 sur la procédure de la calibration-validation de modèle, cette méthode d'échantillonnage divise d'abord l'espace d'échantillonnage de paramètre en intervalles de même largeur selon le nombre d'échantillons à collecter. Un échantillonnage aléatoire est ensuite réalisé dans chaque intervalle. Des échantillonnages semi-aléatoires couvrant entièrement l'espace d'échantillonnage ciblé sont donc réalisés. Pour le modèle en nitrification, l'espace d'échantillonnage des paramètres est fixé selon le niveau de connaissances et d'expérience sur la valeur de référence de chaque paramètre. Pour les paramètres qui ont été beaucoup étudiés, un espace de ± 20% est attribué autour de leur valeur par défaut trouvée dans la littérature. Un espace de ± 50% est attribué pour les paramètres moins étudiés ou sans valeur de référence (Brun *et al.*, 2002). Le Tableau A2.7 de l'Annexe 2 résume

les espaces des valeurs attribués aux paramètres analysés.

Pour ce travail d'analyse de sensibilité globale, 480 simulations Monte-Carlo ont été effectuées, ce qui est supérieur à 5 fois de nombre de paramètres analysés (n=93). Ce rapport simulations/paramètres est décidé en prenant en compte la vitesse de calcul du modèle (30 minutes pour simuler 30 jours) et le nombre de paramètres à analyser ainsi que la gamme des valeurs (entre 1,3 et 40) proposées dans la littérature pour l'analyse de sensibilité globale des modèles de traitement des eaux usées et de la qualité de l'eau en rivière (Benedetti *et al.*, 2011). De plus, ce rapport est supérieur à celui appliqué pour le modèle SimBio (autour de 4)(Bernier, 2014). Pour accélérer les simulations, quatre séries de simulations Monte-Carlo sont réalisées en parallèle sur différents cœurs du même ordinateur (Benedetti *et al.*, 2011). Chacun effectue 120 échantillonnages différents dans l'espace d'échantillonnage des paramètres précédemment choisis. 480 différentes combinaisons des valeurs de paramètres ont donc été construites.

Pour chaque combinaison générée, une simulation en régime permanent de 30,5 jours est réalisée en utilisant les valeurs moyennes du jeu de données en entrée de l'année 2009 (période de calibration). Différents tests menés lors de la construction du modèle ont montré que les valeurs des variables de sortie étaient en temps normal stables après une simulation de 30 jours en régime permanent. Les différences entre les résultats simulés au jour 30,5 sont donc considérées être liées uniquement aux valeurs des paramètres utilisées. Les résultats de simulation au moment du jour 30,5 (Y) et les valeurs échantillonnées de ces quatre tests (X) sont regroupées, normalisées et analysées par une régression multilinéaire (Saltelli *et al.*, 2007; Sin *et al.*, 2011) à l'aide de la fonction « regress » disponible dans le logiciel Matlab®. Au total, après avoir éliminé quelques combinaisons pour lesquelles la simulation n'a pas réussi à atteindre 30,5 jours à cause des erreurs numériques, la régression multilinéaire a été réalisée sur 473 simulations. L'importance de l'influence des paramètres sur chaque variable de sortie du modèle a été évaluée selon le coefficient de régression standardisé (SRC) obtenu pour chaque paramètre à l'issu de la construction de la régression multilinéaire. Trois groupes d'importance ont été distingués en fonction de la valeur absolue du coefficient de régression associé (Bernier, 2014) (voir Tableau 4.7).

Tableau 4.7 Groupes d'importance d'influence en fonction des coefficients de régression (SRC) (Bernier, 2014).

Valeur absolue du coefficient de régression standardisé (SRC)	Importance de l'influence des paramètres sur les variables en sortie de modèle
Entre 0 et 0,1	Influence négligeable
Entre 0,1 et 0,25	Influence faible
Supérieure à 0,25	Influence forte

Les Figure 4.11a et b montrent un exemple de résultats de l'analyse de sensibilité obtenus pour les concentrations en NH_4^+ et en NO_3^- en sortie. Il est à noter qu'un coefficient de régression

positif signifie que la variable en sortie augmente lorsque le paramètre en fait autant, tandis qu'un coefficient négatif indique que la variable en sortie diminue lorsque la valeur du paramètre augmente. Les figures indiquent que les paramètres concernant le transfert gaz-liquide d'oxygène (paramètres : Air_ref, β_{Sol}, F, k_La_ref, m et θ_{kLa}), l'épaisseur de la couche limite et du biofilm (paramètres : β', K', m', n, $\rho_{Biofilm}$), l'activité de la biomasse AOB (paramètres : $\mu_{AOB,\ Max}$ et $\theta_{\mu AOB,\ Max}$) et l'enlèvement des particules sous l'effet de lavage (paramètre : f_{Lavage}) ont des influences non-négligeables (coefficient de régression absolu > 0,1) sur la concentration en NH_4^+ en sortie du modèle. Tel que montré aux Figures 4.11a et 4.11b, ces paramètres influencent également la concentration en NO_3^- en sortie du modèle mais avec des effets inverses par rapport au NH_4^+. Ces résultats sont à première vue raisonnables, puisque plus la quantité de NH_4^+ nitrifié est élevée, plus il devrait y avoir de NO_3^- en sortie de l'étage. Certains paramètres influents identifiés se trouvent dans la même équation, par exemple les paramètres β', K', m' et n (voir équation Eq 4.13). Cette observation signifie que le modèle développé n'est pas un modèle identifiable, c'est-à-dire, avec les données de mesures et les informations disponibles, il est possible de trouver différentes combinaisons des valeurs de paramètres fournissant les mêmes résultats de simulation (Dochain et Vanrolleghem, 2001). Ce problème arrive souvent pour la calibration des modèles de traitement des eaux usées appliquant les équations non-linéaires complexes, comme, par exemple, l'équation Monod. Bien qu'il existe le problème d'identifiabilité du modèle, on trouve que la méthode d'analyse de sensibilité globale appliquée ici, qui avait été appliquée pour aider à la calibration des modèles de réacteurs à boues activées (Sin *et al.*, 2008b), est une méthode pratique qui permet d'identifier rapidement les paramètres influents les résultats de simulation du modèle développé. Elle peut donc faciliter l'étape suivante de la procédure de calibration (voir les détails dans la section 4.3.3.2)

Les autres résultats d'analyse de sensibilité du modèle en nitrification sont mis à l'Annexe 2 (voir Figure A2.1Figure A2.5). Pour accélérer la procédure de calibration, les variables de sortie qui ont des paramètres influents communs, comme, par exemple le NH_4^+ et le NO_3^- en sortie sont inclus dans le même groupe de calibration (voir les détails dans la section 4.3.3.2).

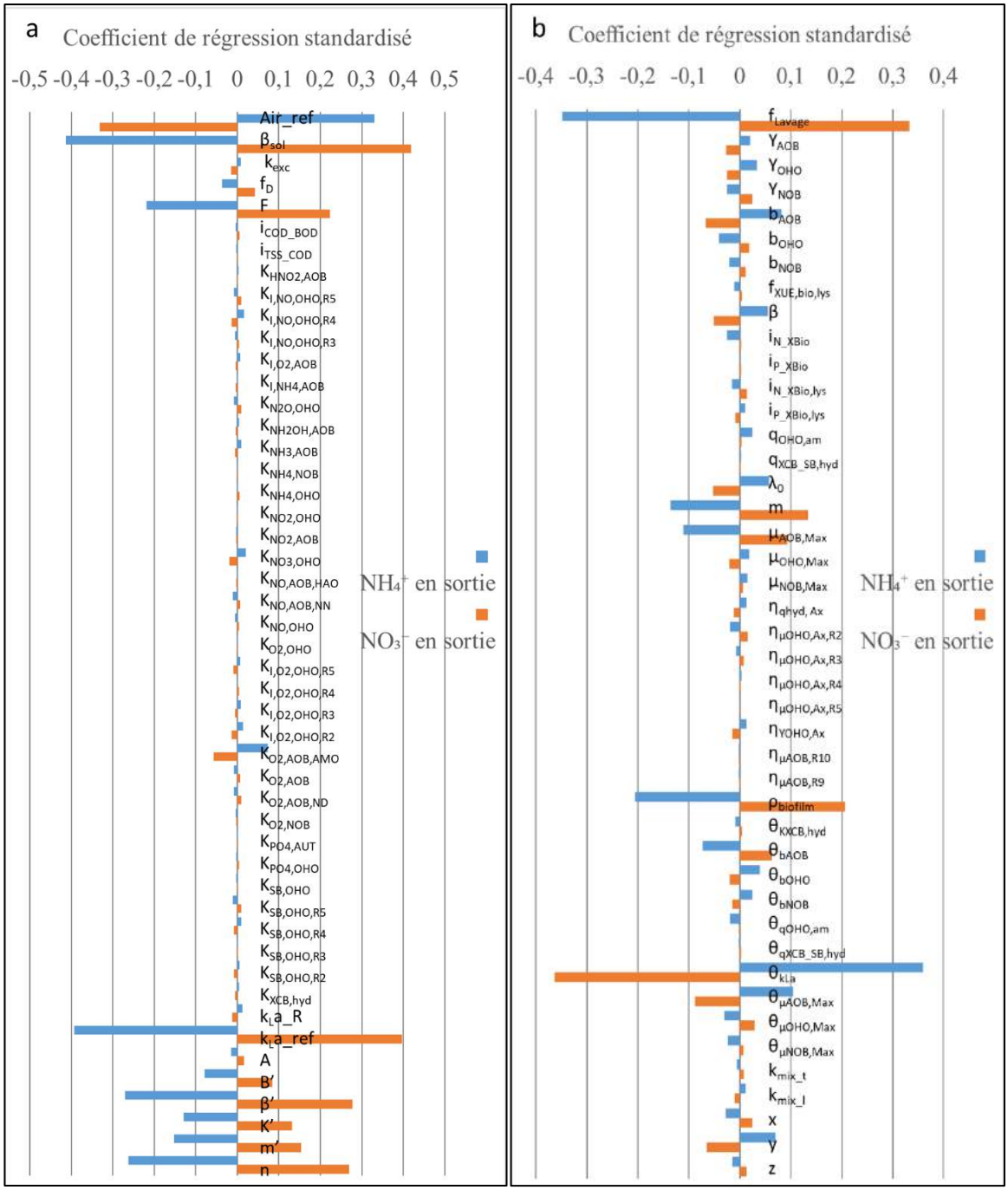


Figure 4.11 Résultats d'analyse de sensibilité globale pour les concentrations en NH_4^+ et en NO_3^- en sortie du modèle en nitrification (Colonnes bleues : NH_4^+ en sortie, colonnes oranges : NO_3^- en sortie).

4.3.3. Modélisation complète d'une unité de biofiltres nitrifiants à grande échelle : Calibration et validation sous différentes configurations de traitement

Résumé

Un modèle de biofiltration a été développé pour l'unité de biofiltres nitrifiants de la station d'épuration (STEP) Seine Aval (SAV) qui est actuellement en cours d'être modernisée. Ce modèle développé est basé sur un modèle de biofiltration trouvé dans la littérature contenant des sous-modèles illustrant les phénomènes de filtration, de diffusion et de détachement et les réactions de la nitrification et la dénitrification en deux étapes. Le modèle original a été amélioré pour le transport de composants (diffusion et transfert gaz-liquide) et les réactions biologiques (nitrification / dénitrification en quatre étapes). De plus, le modèle développé a intégré également l'évaluation de la consommation d'énergie (aération et pompage), les émissions de N_2O et le système de commande de l'aération. Ce modèle a été calibré et validé respectivement avec les données de hautes fréquences provenant de la configuration de traitement avant la modernisation et la configuration actuelle. Les résultats de simulation ont montré que les performances de l'étage de nitrification sous chaque configuration de traitement étaient bien prédites par le modèle. Etant donné que les conditions d'exploitation des biofiltres nitrifiants de la période validation étaient très différentes que celles de la calibration, il peut être conclu que l'on a réalisé une forte validation du modèle Le facteur d'émission de N_2O simulé était dans la même ordre de grandeur que la valeur moyenne trouvée dans la littérature pour les biofiltres nitrifiants. De bons résultats de prédiction ont également été obtenus pour la consommation d'énergie et la simulation de commande de l'aération pour l'étage de nitrification.

Mots-clés : Modélisation de biofiltration; Calibration et validation de modèle; Commande d'aération; Consommation d'énergie; Émission de gaz à effet de serre.

Remarque : Tous les tableaux, figures et équations marqués avec un «S» (par exemple Table S1) dans l'article peuvent être trouvé dans le « supporting information for article».

Comprehensive modelling of a full-scale nitrifying biofilter unit: Calibration and validation under different treatment configurations

Jialu Zhu [1,2,*], Jean Bernier [1], Sam Azimi [1], André Pauss [2], Vincent Rocher [1] and Peter A. Vanrolleghem [3]
[1] SIAAP, Direction Innovation et Environnement, 82 avenue Kléber, 92700, Colombes, FRANCE
[2] Sorbonne Universités, EA 4297 TIMR UTC/ESCOM, UTC, CS 60319, 60203 Compiègne cedex, France
[3] model*EAU*, Université Laval, Département de génie civil et de génie des eaux, 1065, Avenue de la Médecine, Québec, QC, G1V 0A6, Canada
[*] Corresponding author, phone number: +86 13681899603; E-mail address: brunozhu@163.fr

Abstract

A comprehensive biofiltration model has been developed for the nitrifying biofilter unit of the Seine Aval (SAV) wastewater treatment plant (WWTP) which is currently being upgraded. The model was based on a biofiltration model found in literature containing sub-models for filtration, diffusion and detachment phenomena and two-step reactions for nitrification and denitrification. The original model was improved with respect to mass transport (diffusion and gas-liquid transfer) and biological reactions (four-step nitrification/denitrification). In addition, sub-models for energy consumption (aeration and pumping), N_2O emission and aeration control scheme were integrated in the model. The model was calibrated and validated with high frequency data sets from previous and current process and plant configurations. Given that the process conditions for the validation period were substantively different from those for the calibration period, it can be concluded that a strong validation of the model was achieved. Simulation results showed that the treatment performance for each treatment configuration were well predicted by the model. The simulated N_2O emission factor was in the same order of magnitude of the average value found in literature for nitrifying biofilters. Good prediction results were also obtained for energy consumption and aeration control simulation.

Keywords: Biofiltration modelling; Model calibration and validation; Aeration control; Energy consumption; Greenhouse gas emission.

4.3.3.1. Introduction

To tackle population growth and urbanization in the Paris region and meet the good chemical and ecological status of the receiving water body as required by the European Water Framework Directive 2000/60/EC (Council of the European Communities, 2000), the Seine Aval (SAV) WWTP (1.7 million m^3/d, the largest plant in Europe) has been under upgrade since 2013. The upgrade program aims to replace the existing activated sludge process with more intensive treatment processes, including MBRs, biofilters and chemically enhanced primary clarifiers. Intensive processes are efficient, but generally involve higher expenditures due to chemical addition (coagulants, polymers, methanol, etc.) and higher energy consumption. Delicate operation strategies are thus required for the plant. A comprehensive evaluation of the modernized plant should be performed on a regular basis in terms of effluent quality as well as treatment costs and sustainability. This can, however, be difficult to realize without support tools.

With the development of engineering and modelling software, process models have become essential tools in the life cycle of treatment plants (Sin *et al.*, 2008a). A well calibrated model can provide reliable support for performance evaluation and optimization in different upgrading phases of a plant (Rieger *et al.*, 2012). With this in mind, SIAAP (the interdepartmental association for sewage handling for the Paris agglomeration) launched a long-term project, which aims to establish a whole plant model of the SAV WWTP. The modelling work began with the nitrifying biofiltration unit of the plant. To ensure the plant model can be used as a support tool to comprehensively evaluate treatment performance after upgrades, the goals of the nitrifying biofilter modelling should include not only the prediction of treatment performance (filtration and nitrification) with long-term intensive data sets, but also the evaluation of treatment cost and environmental impacts such as energy consumption and N_2O emissions. Besides, to facilitate scenario testing for operation optimization, treatment control like aeration for the nitrification unit should also be considered in the modelling work of the unit.

Nitrifying biofilter models have been proposed in several studies and for different treatment scales. Hidaka and Tsuno (2004) developed a successful biofilter model which includes attachment, detachment and backwash as mass transport processes. Microbiological processes in their model consider activities of heterotrophic and autotrophic bacteria including 1-step nitrification/denitrification reactions. However, the model has only one homogeneous biofilm layer with constant thickness and full penetration is considered at all times. These simplifications do not allow to describe different ecological niches (Rittmann *et al.*, 2018) nor the evolution of fouling during filtration (Bernier *et al.*, 2014b).

Vigne *et al.* (2010) developed a more complex biofiltration model available in the GPS-X® modelling software (Hydromantis Inc.). In this model, the carrier bed was described by 6 vertical tanks-in-series and the biofilm in each reactor was divided into five layers. Penetration of soluble components was affected by the selected, fixed thickness of the stagnant liquid film around the biofilm. The biofilm thickness changes according to the quantity of solid components in the biofilm and the density of dry biofilm. The calibrated model performance was tested with experimental data from a pilot-scale nitrifying biofilter under different dynamic conditions. Simulation results indicated that the model could well predict quantity of autotrophic bacteria, ammonium concentration profiles along the biofilter and effluent nitrate concentrations. However, in order to decrease the calculation time, the dissolved oxygen concentration in the liquid phase was maintained at a fixed concentration, close to saturation, which doesn't match the observations under the real conditions.

Bernier *et al.* (2014b) developed a biofilm model in Matlab®/Simulink® (MathWorks, USA) to simulate the nitrifying biofilter unit of the Seine Aval plant. In their study, the performance of the entire unit (84 biofilters) was considered as that of one single biofilter. Due to calculation time issues, the heterogeneity of the biofilm was described by only two biofilm layers. The mass transport processes considered in their model were similar to the model of Vigne *et al.* (2010) but more microbiological processes were added, including two-step nitrification/denitrification to simulate effluent NO_2 and assimilation of phosphorus. The model was calibrated using nitrogen gradient data collected along two biofilters and one year (2009) of daily monitoring data from the treatment unit. It was validated on a separate 45-day monitoring campaign performed in 2012. Results showed nitrification performance as well as effluent nitrite and nitrate concentrations were well simulated by the model.

To predict N_2O emission from nitrifying biofilters, Fiat *et al.* (2019) integrated biological production and consumption of N_2O in the model of Bernier *et al.* (2014b). Furthermore, a gas phase was considered in the model to precisely describe the evolution of gas composition influenced by gas-liquid transfer in the biofilter. A 14-day measuring campaign on a nitrifying biofilter of the Seine Aval plant (Bollon *et al.*, 2016a) was used to calibrate the extended model. Results showed that the good nitrification prediction performance of the original model was maintained while the consideration of the gas phase behavior improved the N_2O emission prediction.

Considering the goals of the modelling work for the nitrifying biofiltration unit, all existing biofilter models found in literature have one or more of the following inadequacies: (1) Model prediction performance is tested only over the short-term and with limited data sets collected in lab-scale or pilot-scale studies that were, moreover, conducted under more stable conditions

than those occurring in real treatment plants. (2) Assessments of energy consumption, treatment costs and environmental impacts such as greenhouse gas (GHG) emissions are rarely considered in biofiltration modelling. (3) Process control systems such as aeration control are not integrated in the biofilter models.

This paper presents an enhanced biofiltration model based on the model of Bernier *et al.* (2014b) for the nitrifying biofilter unit of the SAV WWTP. Compared with the original model, a variable boundary layer thickness and more biofilm layers are used to describe the mass transport process more precisely. Estimations of energy consumption (aeration and pumping) and biological production of N_2O as well as a simplified gas-liquid transfer process are integrated in the model in order to evaluate treatment costs and GHG emissions respectively. The aeration control scheme used in the unit is also modelled to better predict the necessary air flow injected during treatment. The model is calibrated and especially validated with intensive (15-minute interval) long-term data sets collected from previous and current treatment configurations of the SAV plant.

4.3.3.2. Materials and methods

- **WWTP treatment configuration before and after upgrade**

Before upgrade, the SAV plant was designed to treat a nominal flow of 1,700,000 m^3/d (Bernier *et al.*, 2014b). As shown in Figure 1a, after pre-treatment and primary clarification, carbon removal is achieved by high-loaded activated sludge lines. Secondary effluent is treated by a chemically enhanced settling unit (Actiflo® clarifiers, Veolia) to minimize the suspended solids flux to the subsequent two stages of biofilters. The first stage is a nitrification stage of 84 Biostyr® (Veolia) filters, followed by a second post-denitrification stage of 12 Biofor® (Degrémont Technologies) and 18 Biostyr® filters (Veolia) (Figure 4.12a).

Currently (Figure 4.12b), the activated sludge reactors and secondary clarifiers in the plant have been decommissioned. The primary clarifiers and Actiflo® clarifiers are used as a temporary two-stage primary clarification unit. The biological carbon and nutrient removal now occur in two parallel units: an MBR process and three stages of biofilters. The first stage is a newly constructed pre-denitrification stage of 58 Biostyr® filters (18 filters were recovered from the original post-denitrification stage). The pre-existing nitrification stage (the second stage) remains unchanged with the exception of the recirculation of nitrified water to the pre-denitrification stage. The remaining 12 post-denitrifying Biofor® filters serve as the third stage.

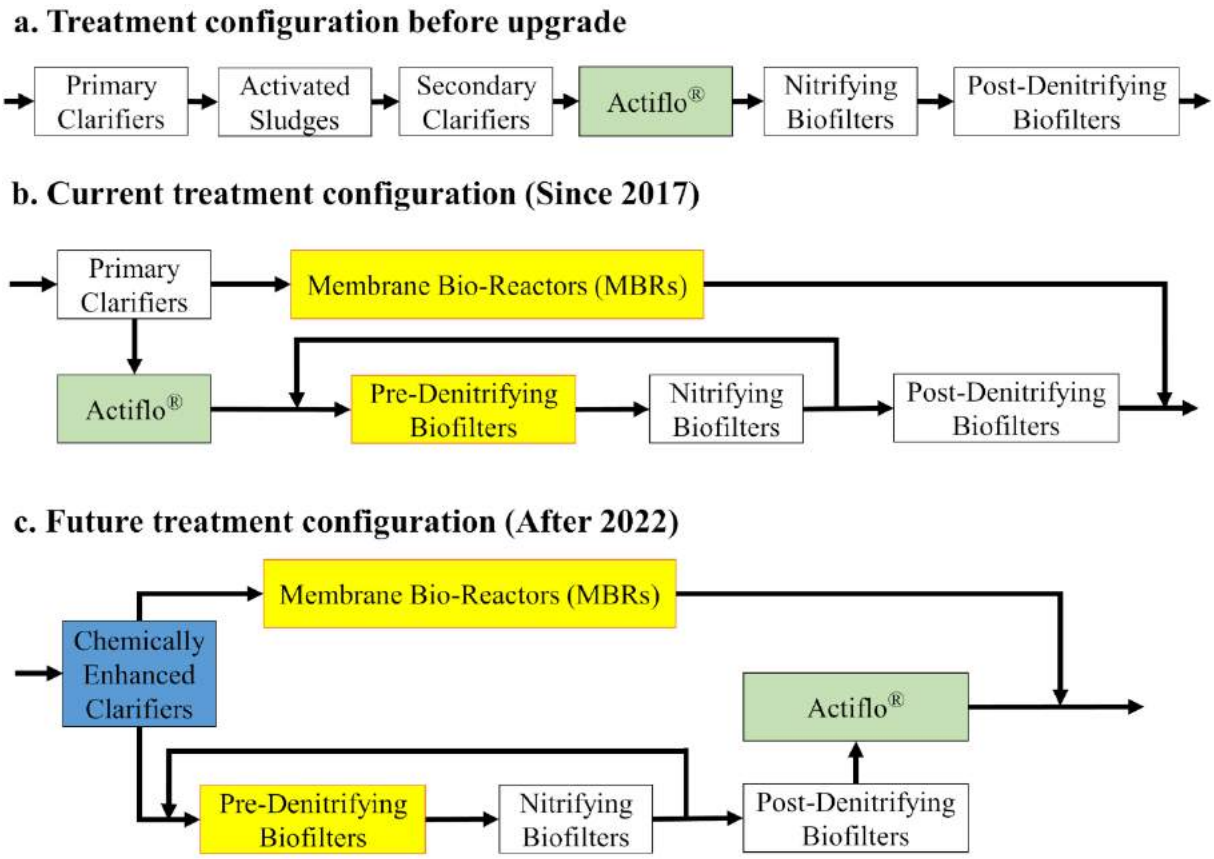


Figure 4.12 Treatment configuration of the Seine Aval WWTP. a. Configuration before upgrade b. Current configuration c. Future configuration

In 2022 (Figure 4.12c), the primary clarifiers will be replaced by a new chemically enhanced primary treatment unit. The Actiflo® clarifiers will mainly be used for tertiary treatment, they can also assist the primary treatment during rain events if needed. The current treatment configuration of the nitrification stage will serve as the final configuration once the upgrade of the plant is completed in 2022.

- **Nitrification stage description**

Each biofilter in the nitrification stage is composed of a 3.5-meter-high filter bed with a filtration area of 173 m². The bed material consists of polystyrene beads (Biostyrene®) with 4 mm diameter. The 84 biofilters are organized in six parallel treatment cells. Each cell has 14 filters in a concurrent up-flow configuration and are fed by four pumps. Aeration of the nitrification stage is realized by 15 compressors.

- **Data collection and correction**

Data sets describing the removal performance of the nitrification stage under the previous (year 2009) and current (from mid-April to mid-October 2017) treatment configurations of the plant were collected for model calibration and validation. Each data set consisted in daily average monitoring data and sensor data. Daily average monitoring data was obtained from 24-hour composite samples collected by automatic refrigerated samplers installed at the influent and effluent of the stage. Samples were analysed by the plant's laboratory. Daily average monitoring data included NH_4^+, TSS, COD, filtered COD (2017 only), NO_3^-, NO_2^-, PO_4^{3-}, TKN and influent alkalinity (2009 only).

Sensor data were available for air flow rate, influent flow rate and temperature, concentrations of influent NH_4^+, TSS, PO_4^{3-} and effluent NH_4^+ and NO_x^- (sum of NO_3^- and NO_2^-). Effluent DO concentrations for each biofilter cell (composite value of 14 units) were also recorded. 15-minute averaged values were available for all sensor data. Operating conditions such as number of active pumps, cells and biofilters as well as energy consumption for aeration and pumping were also collected. The average influent characteristics of the nitrification stage for the two periods are shown in Table S1.

Before use, outlier values were removed from the collected data using the statistical analysis (mean values and standard deviations) method of Rieger *et al.* (2012). The influent TSS sensor data were corrected and smoothed following the method of Alferes et Vanrolleghem (2016) to eliminate abnormal data caused by sensor faults such as optics fouling. The influent NH_4^+ dataset from NH_4^+ sensors (Amtax®, Hach) contained very few apparent abnormal data. They were thus manually removed. Concentrations below 10 mgN/L or above 60 mgN/L were removed. To correct for the bias between the laboratory and sensor measurements, the cleaned TSS and NH_4^+ sensor data were first averaged over the day. These average values were then

compared with daily laboratory measurements to obtain the daily laboratory/sensor ratios. The sensor data were then multiplied by these daily ratios. To avoid negative values in the influent fractionation, 15-minute influent TKN and COD time series were constructed by multiplying the influent NH_4^+ and TSS sensor data with the daily ratios of TKN/ NH_4^+ and COD/TSS obtained from laboratory measurements.

- **Biofiltration model description**

- **Original model**

The biofiltration model used in this work is based on the model developed by Bernier *et al.* (2014b) for the same nitrifying biofilters unit of the SAV plant. The original model includes a media bed zone and an overflow zone. Based on concentration profile measurements in the biofilters, the media bed zone consists in seven reactor tanks-in-series, each representing 0.5-meter of the media bed immerged in the bulk liquid. The model contains four principal sub-models: biofilter hydraulics, mass transport, a two-layer biofilm model and biological reactions. In each reactor, the bulk liquid is considered completely mixed. The mass transport sub-model considers different physical phenomena. The transport of soluble components is described by diffusion (Fick's law) and limited by the thickness of the boundary and biofilm layers. Particle exchange is considered between the two biofilm layers. Filtration (Equation S1) and first-order detachment of the surface biofilm layer illustrate the transport of particulate components between the bulk liquid and the biofilm surface. The detachment of biofilm also occurs when a pre-set maximum biofilm thickness is exceeded. Similar to the model of Vigne *et al.* (2010), the model also considers biofilm removal and mixing along the media bed height during backwash. Aeration is modelled by using a classical k_La mass transfer equation. The biological reactions sub-model applied is based on ASM1 (Henze *et al.*, 2000b) modified as follows: Nitrification and denitrification are divided in two steps with NO_2 as intermediate, and phosphorus assimilation during biomass growth is considered, similar to ammonia assimilation.

- **Modified model**

The original model is improved and implemented in the WEST® modelling software (DHI, Hørsholm, Denmark). The biological reactions (nitrification and denitrification) and physical phenomena considered in the improved model are illustrated in Figure 4.13a et b. Modifications and improvements to the original model include:

(1) As boundary layer thickness has significant impacts on the diffusion of soluble components in the biofilm system and it varies depending on the hydrodynamics around the biofilm (Boltz *et al.*, 2011), a variable layer thickness boundary is considered to replace the constant value used in the original model. The equations (Equation S2) developed by Ohashi *et al.* (1981), based on Reynolds and Schmidt numbers, are used to estimate the boundary layer thickness.

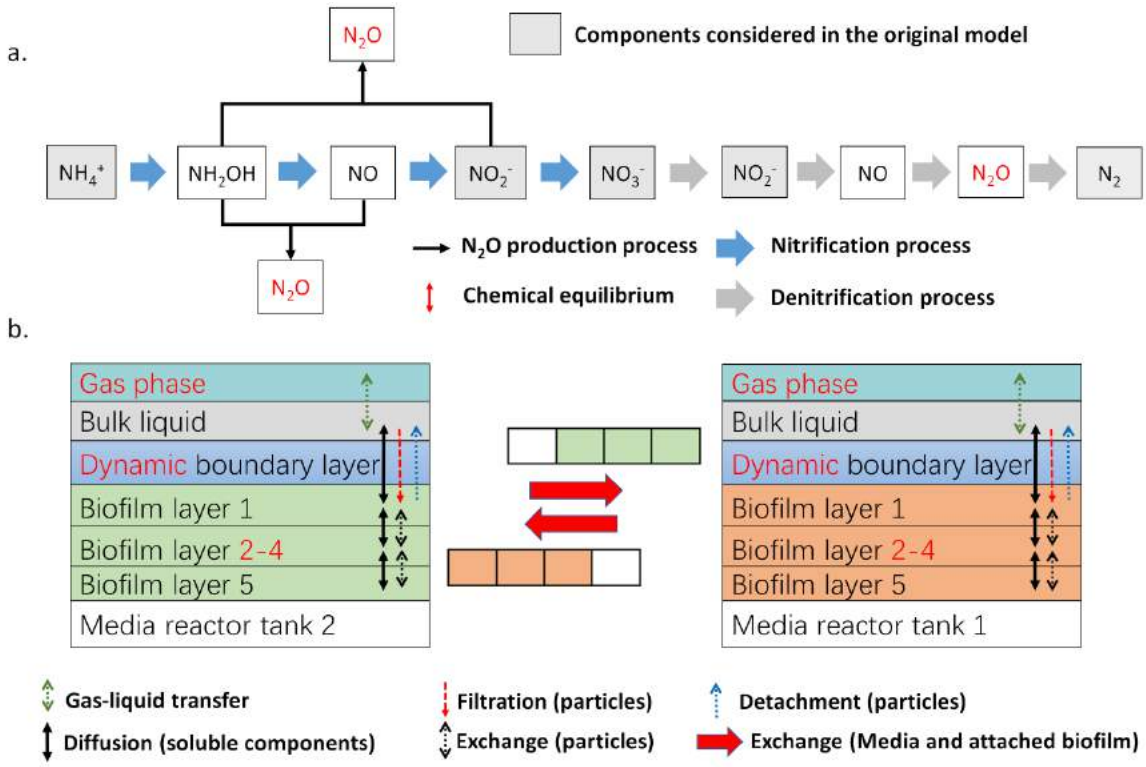


Figure 4.13 Biological reactions (nitrification and denitrification) and physical phenomena considered in the improved model. a. Biological reactions b. Physical phenomena

(2) The number of biofilm layers is increased from two to five in order to more precisely approximate the concentration gradients in thick biofilms and provide ecological niches for the different organisms.

(3) The filtration is considered as main phenomenon of particle transport between the bulk liquid and the biofilm surface. The first order detachment of the surface layer is not applied in this model. Rather, in the developed model, the detachment from the biofilm occurs when a pre-set biofilm thickness is exceeded or during backwash.

(4) Media mixing between the different reactors is considered to not only occur during backwash as in the original model, but also during treatment, at a lower mixing intensity.

(5) Biological reactions considered in the original model are extended in order to simulate biological N_2O production. The original one-step nitritation reaction model is replaced by the model of Pocquet *et al.* (2016), one of the few N_2O models that include the two known pathways of N_2O production by nitrifiers. The four-step reactions from the ASMN model (Hiatt and Grady, 2008) are used to describe denitrification, considering not only NO_2^- but also NO and N_2O as intermediates.

(6) To allow simple prediction of greenhouse gas emissions and aeration, an explicit gas phase is also integrated in the model using a modelling concept different to the detailed model of Fiat *et al.* (2019). In this model, five gas components are considered in the gas phase: O_2, N_2, NO,

N_2O and CO_2. The first four participate in gas-liquid transfer. They are considered as soluble components in the biofilm layers and transported by diffusion. Gas component CO_2 is used to maintain the quantity of gas molecules unchanged in the gas phase. By introducing the new gas phase, air composition for each media reactor can be calculated according to as-liquid transfer equations and Henry's law.

(7) To estimate energy consumption for aeration and pumping in the stage, energy-related equations found in the literature (Wu *et al.*, 2005; Gernaey *et al.*, 2006) were simplified and integrated in the model (Equations S3 and S4).

- **Aeration control model description**

In the nitrification stage, the aeration intensity for each treatment cell is controlled by Feed-Forward (FF) and Feed-Back (FB) control rules (See Equation S6). The FF control estimates the requirements of the air flow rate for the treatment cell according to the outlet ammonium set-point and the influent ammonium loads to the cell. The FB control adjusts the air flow rate proposed by the FF control rules based on the influent flow rate and the difference between the measured effluent ammonium concentrations and the outlet ammonium set-point. Since the biofiltration model represents the entire nitrification stage in one filter, the aeration control implemented in the model is slightly modified to obtain air flow regulated for one filter instead of one treatment cell (Equation S6). It should be noticed that, since the air flow rates cannot be correctly simulated without good prediction results for the effluent ammonium concentration, the implementation of the aeration control model was only realized after validation of the biofiltration model. During calibration and validation of the biofiltration model, air flow rates data collected from the stage were used as model input.

- **Calibration and validation procedure for the biofiltration model**

- **Initial parameter values**

Parameter values found in the original models and in literature were used as initial values for model calibration. Parameter values for the boundary layer thickness equations applied were taken from Ohashi *et al.* (1981). Parameter values for diffusion, filtration and aeration equations were taken from Bernier *et al.* (2014b). The gas molecular solubility parameters used were those summarized by Sander (2015b). Default values for heterotrophic growth in aerobic and anoxic conditions and nitrite oxidizing biomass activities were taken from Hiatt and Grady (2008) and Bernier *et al.* (2014b). Parameter values found in the model developed by Pocquet *et al.* (2016) were used for nitritation reactions. As free ammonia concentration changes with pH and temperature (Anthonisen *et al.*, 1976), the values for the half-saturation constant $K_{NH3,\ AOB}$ and $K_{NH2OH,\ AOB}$ were pre-adjusted based on standard simulation conditions (pH=7 and 20°C)

and the $K_{NH4, AOB}$ value (1 gN/m^3) reported by Bernier *et al.* (2014b). The corresponding values for $K_{NH3, AOB}$ and $K_{NH2OH, AOB}$ obtained are 0.004 mgN/L and 0.018 mgN/L, respectively.

- **Selection of practically identifiable parameters**

To start the model calibration and deal with practical identifiability issues of such complex model (Dochain and Vanrolleghem, 2001), a global sensitivity analysis was first realized to identify influential parameters (Sin *et al.*, 2011). Out of the total 142 parameters of the biofiltration model, 49 parameters such as biofilter dimension and physical constant parameters were set at fixed values and thus excluded from the analysis. Each of the remaining 93 parameters was sampled using a Latin hypercube sampling (LHS) design of 473 experiments. The sampling range for each parameter was 20% of the default parameter value for relatively well-known parameters such as biological kinetic parameters used in the ASM1 model. For parameters with less available information, the sampling range was extended to 50%. The sampled parameter values were then screened by a Monte-Carlo based approach in steady state on the 2009 data sets (Sin *et al.*, 2011). According to standardized regression coefficients (SRC) obtained from the global sensitivity analysis, the most influential parameters for different effluent variables were identified and divided into five independent calibration groups to facilitate their estimation (Mannina *et al.*, 2011): (1) filtration and carbon removal (effluent TSS and COD) (2) ammonium removal and oxygen consumption (effluent NH_4^+, NO_3^- and DO) (3) nitrite production and removal (effluent NO_2^-) (4) orthophosphate consumption (effluent PO_4^{3-}) (5) N_2O production (N_2O emission factor). The first two groups contain about ten influential parameters and the other groups keep five parameters for calibration (see Tables S2-S6).

- **Calibration and validation methodology and objectives**

Monte-Carlo simulations were also used for the calibration of the first four calibration groups (Sin *et al.*, 2008b). Each sampled parameter set was used for a 30-day steady-state simulation (using the 2009 dataset and the measured air flow rate) to initialize the model followed by a dynamic simulation over another 30-day period (from mid-July to mid-August 2009) during which nutrient loading decreased due to summer holidays. To identify the best parameter values, differences between simulations and measurements were quantified by calculating the mean error (ME), mean absolute error (MAE) and root mean square error (RMSE) (see in Equation S5) (Hauduc *et al.*, 2015b). When one group of parameters was calibrated, the parameter values of this group were fixed and the next group was tackled. Since the calibration groups were independent, the calibration didn't had to return to the first group. After the Monte-Carlo simulation, the identified parameter values of the four groups were checked for a simulation of the period covering mid-August to mid-October 2009 during which the nutrient loading re-increased and then with data collected over the entire year of 2009 to evaluate model

performance under seasonal variations. Parameters were adjusted manually if necessary and model accuracy after adjustment was re-evaluated with the aforementioned statistical scores.

For the last group, the N_2O emission factor (EF %) was calculated by dividing the N_2O emission rate (kgN/d) by the ammonium removal rate (kgN/d) (Bollon *et al.*, 2016a). Since the N_2O emission in the stage was not monitored experimentally during the calibration and validation periods, the model was calibrated approximately and adjusted according to the observed emission factor values reported by Bollon *et al.* (2016a). In their study, two short measurement campaigns were realized on the nitrifying biofiltration stage of the SAV plant in the summer of 2014 and the winter of 2015.

The model was finally validated by confronting the model simulation results with data collected from the current treatment configuration (from mid-April to mid-October of year 2017). As the configuration of the overall treatment plant changed significantly, a different influent fractionation had to be applied in 2017. The k_La reference value also had to be reduced by 15% which is acceptable given the aging of the aeration equipment of the process. To quantitatively compare prediction performances of the model between validation and calibration periods, Janus coefficient was calculated (Rieger *et al.*, 2012).

- **Integration and test of the aeration control model**

After validation, the biofiltration model was combined with the aeration control model. The parameter values used for the control model (see Equation S6) were the averaged values collected from the six cells in the stage. The influent data sets for model validation were used again to test the model prediction performance with aeration control model. Input data for the aeration control model consisted in influent NH_4^+ concentration data, water flow rates applied to the entire stage and the number of active cells and filters. The prediction accuracy of the aeration control model was evaluated by comparing the simulated air flow rates (for one filter) to the values applied to the stage which were used as model input during model validation.

4.3.3.3. Results and Discussion

- **Estimation of biofilm and boundary layer thickness**

The average simulated biofilm thickness on the media bed was 95 ± 18 µm and 79 ± 13 µm for the calibration and validation period respectively, which corresponds to the plausibility check range (80-120 µm) proposed by Rittmann *et al.* (2018). Furthermore, the simulated thicknesses decreased along the media height (see Table S7) and followed the variations of ammonium load observed in the nitrification stage (see Figures S1a and b).

For a one-dimensional biofilm models, the mass transfer boundary layer thickness (between the bulk liquid phase and the biofilm surface) is an important factor for the prediction of biofilm-reactor treatment performance (Boltz *et al.*, 2011). Thus, the boundary layer thickness calculated by the model was also checked. The average thicknesses obtained by the simulations were 97 ± 9 µm and 86 ± 9 µm for the year 2009 and 2017 respectively which were close to typical values (100 µm) found in the literature for submerged biofilm reactors (Morgenroth, 2008b). As the influent flow rate increased after the upgrades of the plant (see Table S1), the estimated thickness for the year 2017 was about 10% thinner than that of the year 2009. The estimated boundary layer thickness was stable in each simulation period (coefficient of variation was about 10%), indicating the filtering velocity applied to the nitrifying biofilters were well maintained. In fact, in order to stabilize the process conditions of the biofilters, operators in the SAV plant can adjust the number of activated biofilters according to the influent flow and the ammonium load.

- **Simulation of treatment performance in the nitrification stage**

- **Calibration results**

Figures 4.14a et b show a part of the simulation results for the effluent ammonium concentrations obtained for the calibration period (year 2009). According to the figures, the nitrification performance of the stage under different temperature conditions were well predicted by the model. The statistical scores summarized in Tableau 4.8 also confirm good model prediction accuracy for the effluent ammonium concentrations, as the ME value (-0.32 mgN/L) obtained for the calibration period was close to the magnitude of the measurement error. However, nitrification performance was underestimated by the model from February 25th to March 5th (Figure 4.14a). These deviations increased the MAE and RMSE values (2,64 mgN/L for MAE and 3,57 mgN/L for RMSE) for the effluent ammonium predictions.

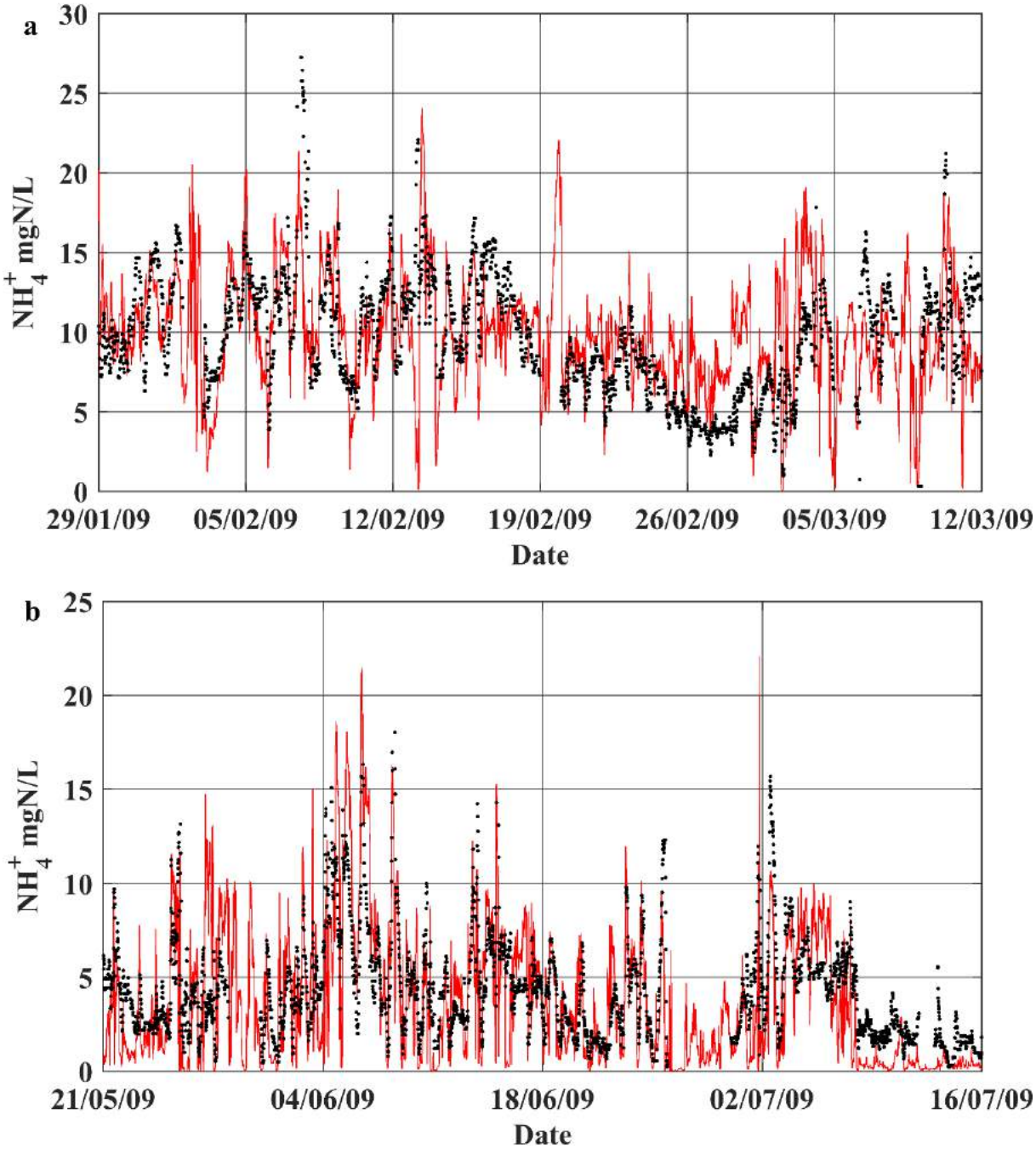


Figure 4.14 Calibration simulation results for the effluent ammonium concentrations. a. Late January to mid-March 2009. b. Late May to mid-July 2009. (Red line: simulation results; black dots: observations)

Tableau 4.8 Statistical score results for the nitrification stage simulation in 2009 (Calibration) and 2017 (Validation)

Scores for 2009 (Calibration)	**N-NH_4^+**	**N-NO_x^-**	**DO**	**N-NO_2^-**	**COD**	**TSS**	**P-PO_4^{3-}**
Number of observations	27048	34272	33313	329	331	332	329
Observed mean (mg/L)	5.55	34.04	6.63	0.78	62.27	21.58	0.39
ME (mg/L)	-0.32	2.84	-0.22	-0.13	-2.99	3.88	0.07
MAE (mg/L)	2.64	3.92	0.66	0.34	10.53	8.44	0.12
RMSE (mg/L)	3.57	4.88	0.79	0.56	15.08	11.83	0.16
Scores for 2017 (Validation)	**N-NH_4^+**	**N-NO_x^-**	**DO**	**N-NO_2^-**	**COD**	**TSS**	**P-PO_4^{3-}**
Number of observations	14841	14841	17226	178	180	180	180
Observed mean (mg/L)	2.30	19.12	6.40	0.77	41.52	10.68	0.76
ME (mg/L)	-0.32	2.27	-0.89	0.17	-0.31	-0.31	-0.12
MAE (mg/L)	1.06	2.77	1.11	0.45	4.15	2.47	0.14
RMSE (mg/L)	1.53	3.53	1.27	0.79	5.37	3.39	0.17
Janus coefficient	0.42	0.72	1.61	1.41	0.36	0.29	1.06

During the same period, effluent nitrite peaks were observed in the effluent of the stage, and these were not simulated by the model (Figure 4.15a). A similar prediction failure for the effluent nitrite was observed between July 2nd and July 9th. As the effluent PO_4^{3-} concentrations observed were low during these periods (Figure 4.15b), a lack of phosphorus available for NOB growth at the end of the media bed may be an explanation for these peaks. Since the lack of phosphorus was not simulated, the model prediction failures on nitrite in these periods may relate to an underestimation of the phosphorus assimilation. However, except for these periods, the effluent nitrite and phosphate concentrations were generally well predicted by the model and re-calibration focusing on these prediction failures influence the entire prediction performance (results not shown). Further measurements inside the media bed would be required to better identify the reasons for the presence of such nitrite peaks in the nitrifying stage and help improve model prediction performance. Simulation results for the other effluent variables in the calibration period can be found in Figures S2a to S2d.

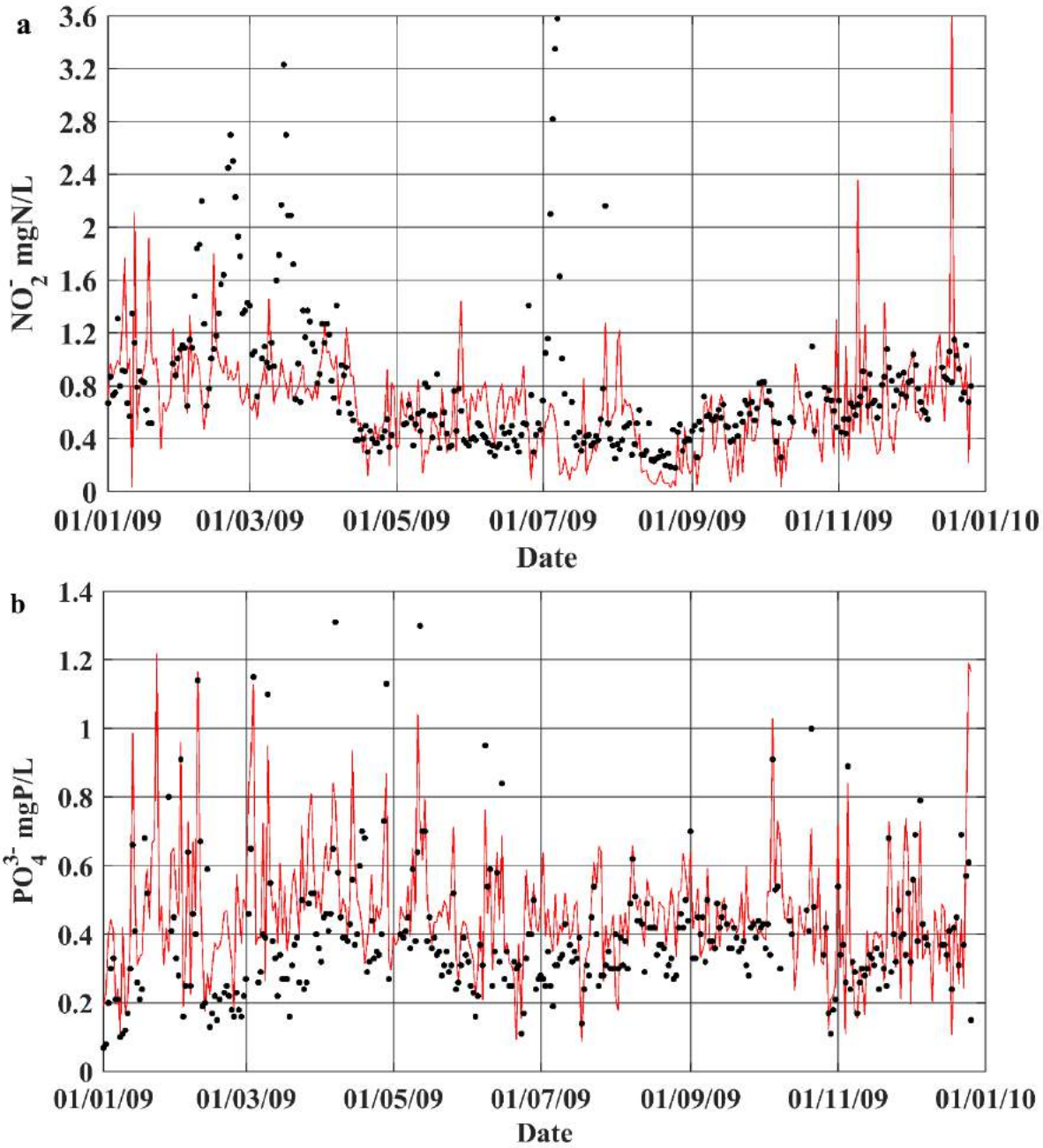


Figure 4.15 Calibration simulation results for the effluent NO_2^- (a) and PO_4^{3-} (b) concentrations (Red line: simulation results; black dots: observations)

According to Tableau 4.8, effluent NO_x^-, DO and COD were also well predicted by the model for the calibration period. Their ME and MAE values stayed below 20% of the observed means. The ME value (3.88 mg/L) of the effluent TSS prediction was also low (about 15% of the observed mean), but the MAE and RMSE scores for this variable increased, which represented about 40%-50% of the observed mean. It must be remembered that in 2009, during rain events, the Actiflo® process located upstream of the nitrifying biofilter stage treated a mixture of the activated sludge effluent and raw wastewater. The concentration and nature of the particles in the influent of the nitrifying biofilter stage were thus different from “normal operation”. Since

biofilter filtration performance is influenced by the particles size distribution in the influent (Mackie and Bai, 1993) , predicting the filtration performance using only the available influent TSS measurements can be challenging. The RMSE value (15.08 mgO_2/L) obtained for effluent COD were also slightly higher (about 25% of the observed mean) for the calibration period, due to the filtration prediction errors.

As pH strongly impacts nitrification (Ekama and Wentzel, 2008) , the simulated alkalinity evolution was checked. Simulation results showed that alkalinity decreased by an average of 226 ± 41 $mgCaCO_3/L$ (N=360) during nitrification, which was close to observations from the stage in 2012 (214 ± 66 $mgCaCO_3/L$, N=335). The effluent alkalinity found from simulation results (141 ± 31 $mgCaCO_3/L$, N=360) and measured at the stage in 2012 (174 ± 44 $mgCaCO_3/L$, N=335) was in both cases around 150 $mgCaCO_3/L$. The acid-base environment for nitrification is considered to be stable at such concentrations according to Ekama and Wentzel (2008a).

- **Validation results**

For the validation period (year 2017), the ME value (-0.32 mgN/L) obtained for the effluent ammonium concentrations was the same as that found for the calibration period (see Tableau 4.8). Although MAE and RMSE values of this effluent variable decreased in the validation period (MAE: 1.06 mgN/L, RMSE: 1.53 mgN/L), the ratios between the scores and the observed mean were not changed (about 50% - 60% of the observed mean). According to Figure 4.16, the variations of the nitrification performance of the stage after the upgrade of the plant (from mid-September to mid-October 2017) were also well followed by the model. Simulation results for the other effluent variables can be found in Figures S3a to S3e.

According to the statistical scores in Tableau 4.8, the effluent nitrite concentrations were overestimated by the model for the validation period. This was mainly due to the nitrite peaks observed around August 1st (see Figure S3a) probably caused by a slight overestimation of the phosphorus assimilation (see Figure S3b).

The model prediction performance for the effluent TSS and COD concentrations was improved for the validation period (see Tableau 4.8 and Figures S3d and S3e). These improvements are partially related to the availability of soluble COD data in 2017 which allowed for a better influent fractionation. On the other hand, the addition of an upstream pre-denitrification biofiltration stage also decreased the variability in influent TSS concentrations, which also facilitated better model predictions for filtration. These improvements should be further confirmed with more influent data collected from the new configuration.

Although the process conditions for the validation period are substantially different from those for the calibration period, the Janus coefficient (see Tableau 4.8) for each effluent variable was

between 0.3-1.6, indicating the success of a strong validation of the developed model.

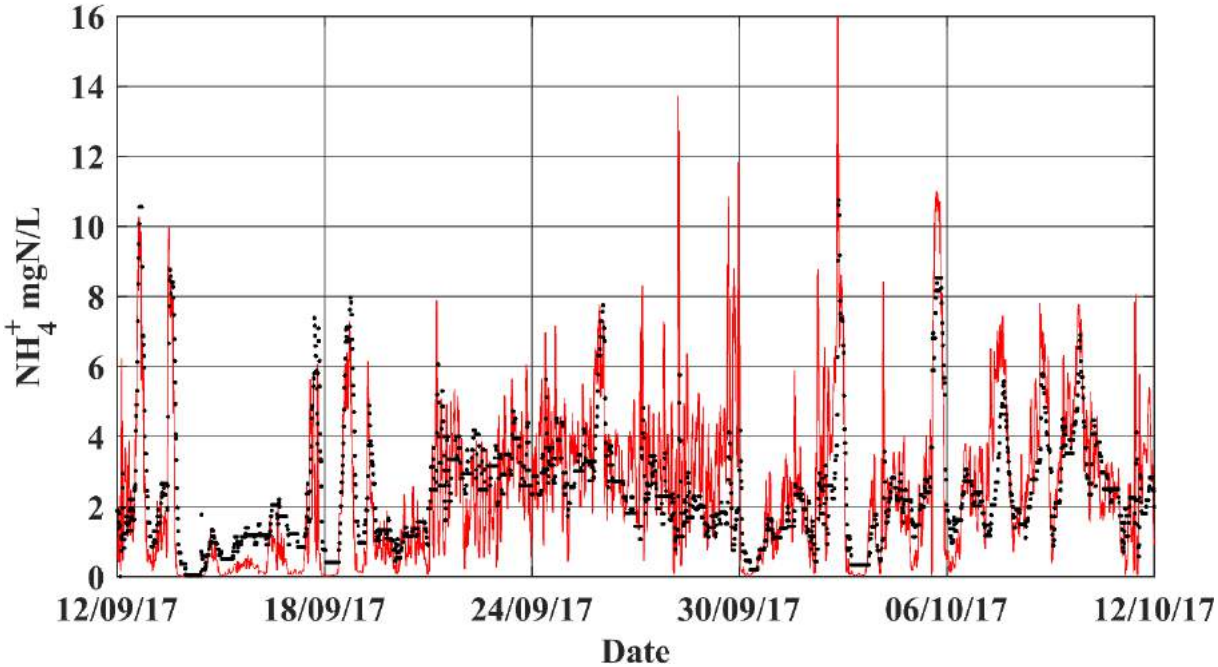


Figure 4.16 Validation simulation results for the effluent ammonium concentrations from mid-September to mid-October 2017. (Red line: simulation results; black dots: observations)

- **Simulation of N_2O emission factor**

The 60-day average emission factor simulated for the winter period of 2009 was 5.86% ± 2.7%, which was higher than the factor simulated for the summer period (2.89% ± 2.18%). These results were slightly higher than those observed in the study of Bollon *et al.* (2016a) (4.86% ± 0.54% in winter and 2.26% ± 0.46% in summer), but the seasonal difference observed was the same. Noteworthy, the effluent nitrite concentrations observed in 2009 (1.21 ± 0.54 mgN/L in winter and 0.43 ± 0.14 mgN/L in summer) were however higher than the values reported by Bollon *et al.* (2016b) (0.68 ± 0.22 in winter and 0.25 ± 0.09 in summer). The presence of higher nitrite concentrations in the nitrification stage can lead to an increase of N_2O emissions (Kampschreur *et al.*, 2009), which may explain the higher simulated emission factors.

- **Simulation of the energy consumption and the aeration control system**

Figures 4.17a et b show simulation results for the daily energy consumption for aeration and pumping in the nitrification stage for 2017. The magnitudes and variations of the energy consumptions are very well simulated with the proposed energy-related equations. The corresponding statistical scores (see Table S8) are all lower than 5% of the observed mean values.

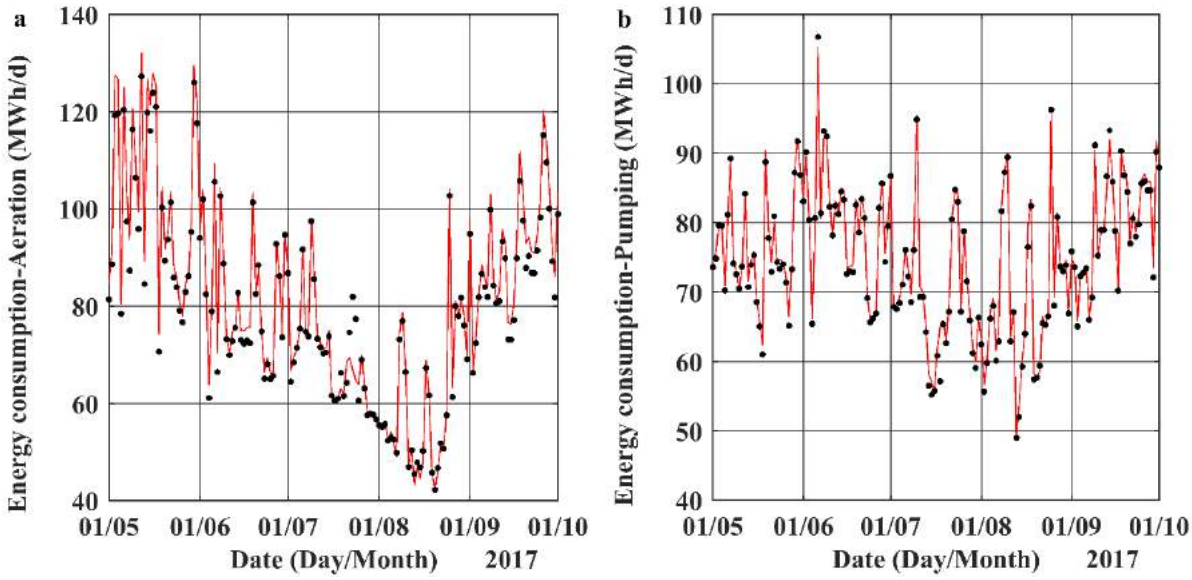


Figure 4.17 Simulation results for daily energy consumption of the nitrification stage from May to October 2017. a. Aeration energy consumption b. Pumping energy consumption. (Red line: simulation results; black dots: observations)

Figure 4.18a shows that the variations of the average air flow rates calculated by the aeration controller (from September 30th to October 12th 2017) are well predicted by the model. The mean absolute error (MAE) for the average air flow prediction for the validation period is 249.1 $Nm^3/h/filter$ (Observed mean: 2048 $Nm^3/h/filter$, Number of observations: 16902). These results suggest that the aeration control scheme is correctly implemented. According to Figure 4.18b, the prediction of the effluent ammonium concentrations for the validation period remains satisfying after integration of the aeration control model. The MAE for the effluent ammonium concentrations was 0.96 mgN/L which was close to the value (1.06 mgN/L) obtained from the validation results. With the integration of the aeration control sub-model, scenario analyses such as aeration enhancement/reduction can be realized e.g. by applying different effluent NH_4^+ set-points. Furthermore, the associated energy required by each scenario can now be comprehensively estimated and thus provide the necessary support information to develop process optimization strategies for nitrification. On the other hand, the aeration controller itself can also be replaced by other control schemes (e.g. PID control), which allow predicting and comparing the nitrification performance of the stage under different aeration control strategies.

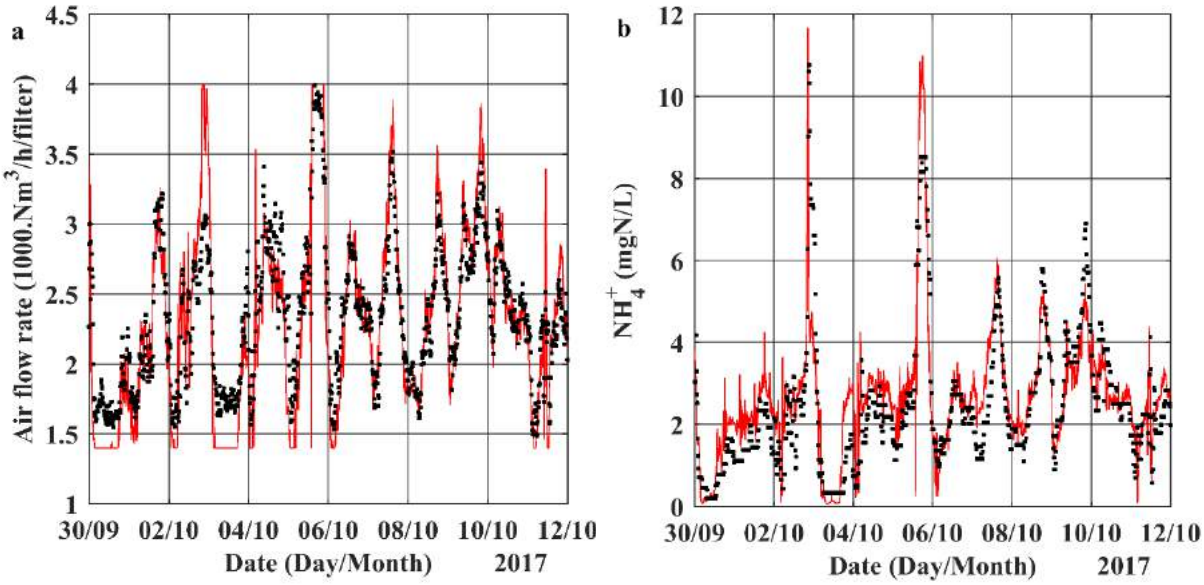


Figure 4.18 Simulation results obtained for late-September to mid-October 2017 after integration of the aeration control sub-model. a. Average air flow rate injected in the biofilters b. Effluent NH_4^+ concentrations (Red line: simulations; black dots: observations)

- **Calibrated parameter sets**

Table S9 presents the calibrated model parameter set and compares them with their default values (the remaining parameters were set at their default values). Most of the calibrated parameters were influential parameters identified for the five calibration groups (see Table S2-6). For the filtration sub-model, the geometric coefficient of the media bed (β) and the filter coefficient for clean filter (λ_0) were reduced by approximately 50% which indicated that the filtration efficiency was reduced. As described before (see section <<Modified model>>), the description for detachment of particulates from the biofilm was modified in the developed model, which influenced the model filtration performance and thus caused these large parameter changes during calibration. The reference value of the volumetric oxygen transfer coefficient in the biofilter (k_La_Ref) was increased from 82 (1/h) to 116 (1/h) for the calibration period. Unlike the original model, the reduction of the oxygen fraction in the gas phase was considered. This led to a decrease of the saturated dissolved oxygen concentration in the water along the media bed, thus affecting the oxygen transfer rate. To maintain the oxygen transfer efficiency and nitrification capacity in the model, the k_La_Ref value was increased during model calibration. A similar increase was also reported by Fiat *et al.* (2019). The two pre-adjusted parameters $K_{NH3,\ AOB}$ (0.004 gN/m^3) and $K_{NH2OH,\ AOB}$ (0.018 gN/m^3) were not changed after calibration. They were lower than those found by Pocquet *et al.* (2016)($K_{NH3,\ AOB}$=0.2 gN/m^3 and $K_{NH2OH,\ AOB}$=0.9 gN/m^3). However, it should be noticed that those values were obtained under different conditions (pH=8.5 and Temperature = 28°C). The modelled nitratation capacity was limited through a significantly reduced growth rate ($\mu_{NOB,Max}$ = 0.569/d)

and a high half-saturation constant for oxygen ($K_{O2,NOB}$ = 0.793 gO_2/m^3). The remaining calibrated parameters were close to their default values.

4.3.3.4. Conclusion

Based on previous works, a biofiltration model was developed for the full-scale nitrifying biofilter unit of the SAV plant. The model was calibrated and strongly validated under different treatment configurations with several intensive datasets. The simulated biofilm and boundary layer thicknesses were in the range reported in the literature. Expected variations of the biofilm thickness under different ammonium loads were observed in the simulations. The treatment performance of the nitrification unit was also well followed by the model. Nitrite peaks that either appeared or were missed in simulation are acknowledged as a weakness of the model. Simulation errors for the filtration efficiency before the upgrade of the plant were reduced thanks to the availability of better influent data for the new treatment configuration. The N_2O emission factors estimated by the model were higher than those found in the literature which can be explained by the presence of higher nitrite concentrations in the simulated periods. Still, the results are in the same order of magnitude. The observed seasonality in the emissions was also observed in the simulation results. Good estimations for energy consumption for aeration and pumping were obtained. The aeration control model was also integrated successfully. The model prediction performance for the nitrification capacity was maintained after integration of the aeration control model. Future modelling work will focus on applying the developed biofilter model to the pre-/post-denitrification unit in order to build a whole model for the three-stage biofiltration treatment.

4.4.Modélisation de la post-dénitrification par biofiltration

Cette section présente les travaux réalisés sur la modélisation des biofiltres post-dénitrifiants à partir du modèle de biofiltration précédemment développé. Tel qu'expliqué au Chapitre 3 sur la stratégie de construction du modèle filière, à cause de certains problèmes de colmatage excessif sur l'étage de post-dénitrification de la station Seine Aval ces dernières années, le fonctionnement de cet étage n'est pas représentatif de celui attendu en temps normal et après la refonte. Pour cette raison, les travaux de modélisation ont été réalisés sur le procédé de la station Seine Centre (SEC). Pour rappel, comme à la station Seine Aval, la station Seine Centre utilise des biofiltres de type Biofor® pour réaliser la post-dénitrification. La méthodologie appliquée pour la calibration et la validation du modèle en post-dénitrification est similaire à celle présentée pour le modèle en nitrification..

4.4.1. Description de la station et du procédé modélisé

La station Seine Centre est située à Colombes, dans le département des Hauts-de-Seine (92). Cette station a une capacité de traitement de 240 000 m³/j (2,78 m^3/s) correspondant à un équivalent-habitant de 800 000 personnes. Les eaux usées en entrée de la station sont d'abord traitées par un dégrillage suivi d'un dessablage-déshuilage. Après le prétraitement, une décantation lamellaire physico-chimique est réalisée pour minimiser les quantités de particules envoyées au traitement par biofiltration en aval. Ce traitement consiste en trois étages qui fonctionnent en série en temps sec (voir Figure 4.19a). Dans cette configuration, le premier étage, qui contient 24 biofiltres Biofor®, effectue l'enlèvement du carbone en condition aérobie. Cet étage est suivi par un étage de nitrification qui contient 29 biofiltres nitrifiants (Biostyr®). Ces derniers sont suivis par un étage de post-dénitrification, qui est l'objet de ce sous-chapitre, contenant 12 biofiltres de type Biofor®. Pour assurer l'efficacité de la post-dénitrification, du méthanol est ajouté dans les biofiltres post-dénitrifiants comme source de carbone exogène. En temps de pluie, pour faire face à l'augmentation du débit d'eau à traiter par la station, les 12 biofiltres post-dénitrifiants peuvent fonctionner en aérobie et travaillent en parallèle avec les biofiltres du premier étage pour éviter les surcharges hydrauliques (voir Figure 4.19b). Le fonctionnement des biofiltres nitrifiants ne change pas en temps de pluie. Cependant, comme il n'y a plus de post-dénitrification, le traitement de l'azote de la station est limité.

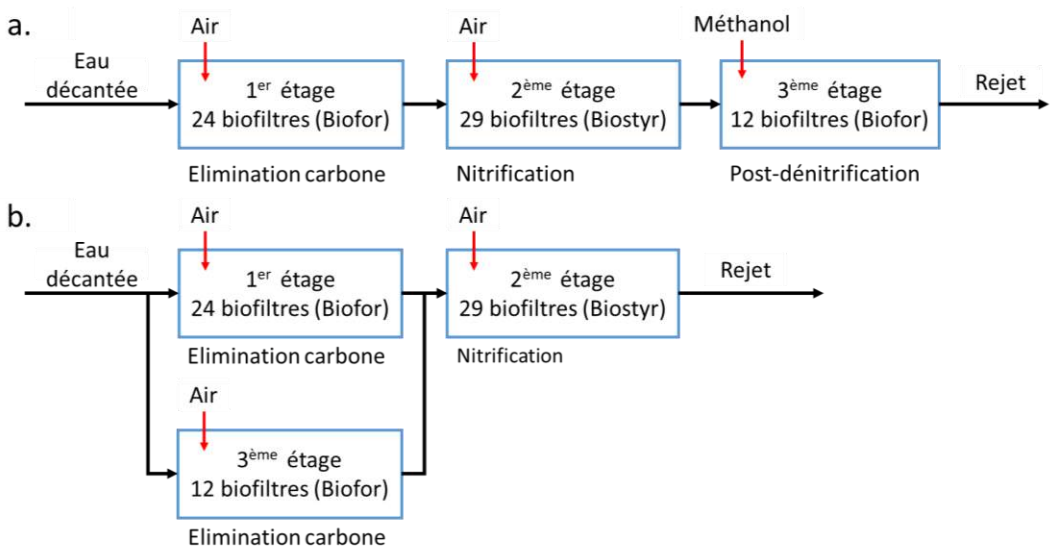


Figure 4.19 Configurations de traitement des trois étages de biofiltration de la station Seine Centre. a. Configuration en temps sec ; b. Configuration en temps de pluie.

Le média utilisé par les 12 biofiltres post-dénitrifiants est fait d'argile expansée et avec une masse volumique autour de 1500 kg/m³. Le lit de garnissage de chaque biofiltre a une hauteur de 2,9 m et une surface de 104 m² (volume d'environ 302 m³). Les biofiltres sont divisés en trois files de traitement, chacune contenant 4 biofiltres. Comme les biofiltres nitrifiants de la station Seine Aval précédemment modélisés, les biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre sont opérés à courant ascendant. La quantité de méthanol injecté est commandée de manière anticipative, en multipliant la charge d'azote à éliminer avec un ratio méthanol à enlever sur NO_x^- à éliminer ($Taux_{Méthanol}$) qui est fixé manuellement par les exploitants de la station (autour de 2-3 gMeOH/gN-NO_x^-) (voir Eq 4.42).

Eq 4.44 $$M_{Méthanol} = Taux_{Méthanol} \times Q_{file} \times \left(NO^-_{x,entrée} - NO^-_{x,consigne}\right)$$

où
$M_{Méthanol}$ est le flux de méthanol injecté dans la file de traitement (g/j)
Q_{file} est le débit d'eau nitrifiée en entrée de la file de traitement (m³/j).
$NO_x^-{}_{entrée}$ est la concentration en NO_x^- en entrée de la file de traitement (gN-NO_x^-/m³)
$NO_x^-{}_{,consigne}$ est la consigne de la concentration en NO_x^- en sortie de la file de traitement (gN-NO_x^-/m³)

4.4.2. Description des jeux de données et du mode de fractionnement utilisés

4.4.2.1. Jeu de données pour la calibration du modèle

La calibration du modèle en post-dénitrification a été réalisée sur une file de traitement (file 3) de l'étage de post-dénitrification. Une période de 50 jours entre les mois d'octobre et de novembre de l'année 2008 a été choisie comme période de calibration. Pendant cette période, une expérience spécifique concernant l'impact du dosage de méthanol injecté sur l'apparition de nitrites et de nitrates en sortie de post-dénitrification a été réalisée sur la file 3 (Rocher *et al.*, 2011a; 2011b). Pendant l'expérience, un capteur était installé en sortie de la file de traitement qui mesurait les nitrates et les nitrites en sortie toutes les 30 minutes (Pham *et al.*, 2010; Rocher *et al.*, 2011b). Ces données mesurées par capteur sont importantes pour la calibration du modèle. En effet, à l'exception de cette période de test, il n'y a que des sondes mesurant le NO_x^- installées en sortie des files. Elles ne permettent pas d'évaluer précisément les concentrations individuelles en NO_2^- et en NO_3^- simulées avec les données de haute fréquence. La quantité de méthanol injecté dans la file étudiée était proportionnelle à la charge en NO_x^- en entrée. Deux paliers du rapport méthanol/NO_x^- ont été testés. Le premier palier vise à obtenir un rapport de 2,25 gMeOH/gN et a été réalisé sur les premiers 12 jours du test, tandis que le deuxième applique un rapport de 2,45 gMeOH/gN pour les 38 jours restants. Il est à noter que ces deux paliers étaient seulement appliqués en temps sec lorsque l'étage était en mode de post-dénitrification. Pour rappel, en temps de pluie, les biofiltres post-dénitrifiants fonctionnent en traitement secondaire du carbone et il n'y pas d'injection du méthanol. Pour la période de calibration, il y avait huit jours qui sont partiellement ou totalement affectés par des évènements de pluie.

En plus des données de capteur des concentrations en nitrites et en nitrates en sortie précédemment mentionnées, les données horaires issues des différents capteurs et les mesures journalières en entrée et en sortie de l'étage de post-dénitrification ont été récoltées afin de construire le jeu de données de calibration (voir Tableau 4.9). Ces mesures journalières sont issues des analyses laboratoire sur les échantillons composites 24 heures prélevés en entrée et en sortie de l'étage. Afin de prendre en compte l'impact du changement de la configuration de traitement sur la performance de dénitrification des biofiltres, pour les événements de pluie où les biofiltres traitement du carbone, le modèle est alimenté avec les données journalières de l'eau décantée issue des mesures en laboratoire sur les échantillons composites 24 heures. Ces données sont maintenues pour ces événements. De plus, pour ces événements, une forte aération est appliquée. Les résultats de simulation obtenus pour ces événements de pluie ne sont pas pris en compte lors de l'évaluation de la performance de prédiction du modèle pendant la

calibration et la validation.

Tableau 4.9 Synthèse des données récoltées pour établir le jeu de données de calibration.

Types de mesures	Entrée	Sortie
Capteurs	Débit en entrée de la file (m^3/j)	NO_2^-
	NO_x^- (mgN/L)	NO_3^-
	Débit de méthanol (m^3/j)	
	Température (°C)	
Laboratoire	DCO (mgO_2/L)	DCO (mgO_2/L)
	DCO filtrée (mgO_2/L)	DCO filtrée (mgO_2/L)
	MES (mg/L)	MES (mg/L)
	NH_4^+ (mgN/L)	NH_4^+ (mgN/L)
	NO_3^- (mgN/L)	PO_4^{3-} (mgP/L)
	NO_2^- (mgN/L)	
	NTK (mgN/L)	
	PO_4^{3-} (mgP/L)	
	Alcalinité ($mgCaCO_3/L$)	

Le Tableau 4.10 résume les conditions d'exploitation principales de la file 3 en mode de post-dénitrification pour la période de calibration. Le débit moyen en entrée pour la période du premier palier (18 465 m^3/j) est d'environ 10% supérieur à celui pour la période du deuxième (16 685 m^3/j). Par contre, les concentrations en NO_x^- en entrée pour ces deux périodes sont proches (autour de 27,5 mgN/L). Les deux paliers du rapport méthanol/NO_x^- visés pour la file sont généralement respectés pendant le traitement.

Tableau 4.10 Conditions d'exploitation principales de la file 3 de l'étage de post-dénitrification pour la période de calibration (sous mode de traitement de post-dénitrification).

Période	Conditions d'exploitation	n	Moyenne	Ecart-type
Jours 0-12 (palier 2,25 g/gN)	Débit moyen par filtre (m^3/j)	292	18 456	2 748
	NO_x^- en entrée (mgN/L)	256	27,4	2,9
	Rapport méthanol/NO_x^- (gMeOH/gN)	256	2,27	0,22
	Température	292	20,9	0,5
Jours 13-50 (palier 2,45 g/gN)	Débit moyen par filtre (m^3/j)	842	16 685	1 950
	NO_x^- en entrée (mgN/L)	716	27,8	3,0
	Rapport méthanol/NO_x^- (gMeOH/gN)	716	2,50	0,17
	Température (°C)	842	19,6	1,1

4.4.2.2. Jeux de données pour la validation du modèle

Contrairement à la calibration, la validation du modèle est réalisée sur l'étage de post-dénitrification au complet. Le modèle simule donc la performance moyenne de tous les 12 biofiltres post-dénitrifiants qui fonctionnent en parallèle. Les données récoltées pour la validation sont issues de deux périodes. La première période est d'avril à mi-septembre de l'année 2008 (environ 165 jours), juste avant le test de l'impact du dosage méthanol effectué sur la file 3. Pendant cette période, les biofiltres fonctionnaient principalement en mode de post-dénitrification. Il n'y avait que 20 jours où les biofiltres servaient partiellement ou totalement au traitement secondaire du carbone. Les conditions d'exploitation des biofiltres de cette période sont résumées au Tableau 4.11.

Tableau 4.11 Conditions d'exploitation principales de l'étage de post-dénitrification pour la période d'avril à mi-septembre 2008 et pour celle de février à mi-avril 2016 (données horaires).

Conditions d'exploitation (période 1 : avril à mi-septembre 2008)	n	Moyenne	Ecart-type
Débit moyen par filtre (m^3/j)	3708	21 905	3 389
NO_x^- en entrée (mgN/L)	3683	23,7	3,6
Rapport méthanol/NO_x^- (gMeOH/gN)	3683	2,46	0,3
Température (°C)	3708	21,7	1,9
Conditions d'exploitation (période 2 : février à mi-avril 2016)	**n**	**Moyenne**	**Ecart-type**
Débit moyen par filtre (m^3/j)	1529	16 035	1 454
NO_x^- en entrée (mgN/L)	1527	24,6	3,3
Rapport méthanol/NO_x^- (gMeOH/gN)	1527	2,83	0,23
Température (°C)	1529	16,3	0,8

Par rapport à la période de calibration (voir Tableau 4.10), le débit moyen attribué aux biofiltres de cette période de validation (21 889 m^3/j) augmente d'environ 20%-25%. En revanche, la concentration en NO_x^- moyenne en entrée de cette période diminue d'environ 20%, ce qui donne une charge en NO_x^- équivalente à celle de la période de calibration. Cette diminution de la concentration en NO_x^- est principalement liée à la diminution de la concentration en ammonium en entrée de la station pendant la période estivale. Le rapport méthanol/NO_x^- appliqué pour les biofiltres de la période de validation est d'autour de 2,46 gMeOH/gN, ce qui est proche de celui du deuxième palier test de la période de calibration (2,50 gMeOH/gN).

Afin de tester la performance de prédiction du modèle dans des conditions d'exploitation plus récentes par rapport à celles de calibration et de la première période de validation, la deuxième période de validation choisie est de février à mi-avril de l'année 2016 (environ 70 jours). Par rapport à la première période de validation (voir Tableau 4.11), le débit moyen traité par les biofiltres diminue d'environ 25%. Comme les concentrations moyennes en NO_x^- en entrée de ces deux périodes de validation sont similaires, la charge en NO_x^- traitée par les biofiltres pour

la deuxième période est diminuée. Le rapport méthanol/NO_x^- augmente de 2,46 à 2,83 g/gN. Comme cette deuxième période consiste principalement des jours d'hiver et de printemps, la température moyenne d'exploitation observée (16,3 °C) est plus faible que celle de la première période qui couvre principalement des jours d'été (21,7 °C). En plus de ces différences d'exploitation entre ces deux périodes de validation, les trois files de biofiltres fonctionnent en alternance pour les jours de fin-février à mi-avril 2016. A chaque moment, il y avait deux files en service et une file en arrêt, ce qui n'est pas le cas pour les jours de fin-avril à mi-septembre (première période de validation) où les trois files fonctionnent simultanément. Ce changement du mode de fonctionnement des biofiltres était probablement pour une raison de maintenance des biofiltres afin d'éviter les problèmes de colmatage.

Les données récoltées pour construire les jeux de données de validation pour ces deux périodes sont similaires à celles de la calibration. Par contre, comme les données des capteurs de NO_3^- et de NO_2^- en sortie ne sont plus disponibles, les données de capteurs de NO_x^- installés en sortie de chaque file de traitement sont récoltées dans ce cas-ci.

4.4.2.3. Mode de fractionnement utilisé

Comme le modèle en nitrification, un modèle de fractionnement a été construit à partir des mesures disponibles et des variables d'état considérées. Pour réaliser le fractionnement des composants de la DCO de l'eau nitrifiée en entrée de l'étage, la concentration en DCO filtrée en entrée est considérée égale à celle de la DCO soluble. La concentration en DCO particulaire est obtenue en calculant la différence entre les concentrations en DCO totale et filtrée mesurées en entrée (voir Figure 4.20).

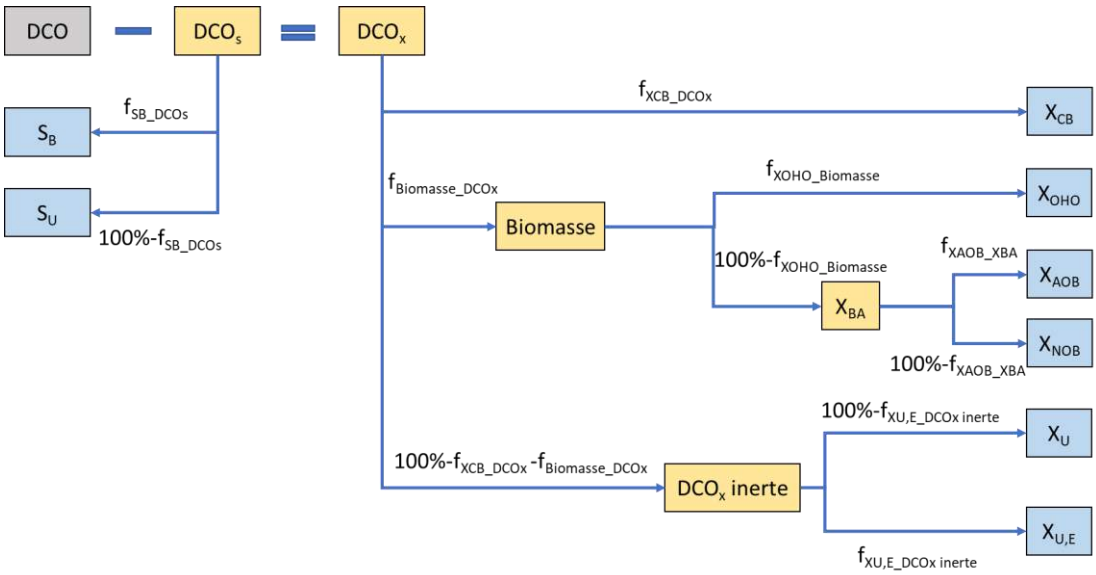


Figure 4.20 Modèle de fractionnement de la DCO en entrée utilisé par le modèle de biofiltration en post-dénitrification.

Le fractionnement pour les autres composants de la DCO est réalisé de manière similaire à celui du modèle de biofiltration en nitrification. Le Tableau 4.12 résume les valeurs des paramètres utilisées pour le fractionnement de la DCO pour le modèle en post-dénitrification. La valeur du paramètre f_{SB_DCOs} est fixée à 15%, ce qui est identique à celle utilisée par le modèle SimBio pour la post-dénitrification (Bernier, 2014). La somme de f_{XCB_DCOx} et $f_{Biomasse_DCOx}$ est considérée égale à 85% pour obtenir une fraction inerte de la DCO particulaire de 15%, ce qui correspond au pourcentage considéré par le modèle SimBio. Il est à noter qu'après la nitrification, la plupart de DCO biodégradables (soluble et particulaire) dans l'affluent de la station sont enlevées. D'ailleurs, comme la DCO en entrée de l'étage (autour de 25 mgO_2/L) est proche de celle de DCO soluble (autour de 20 mgO_2/L), les valeurs des paramètres liés au fractionnement de la DCO particulaire n'ont pas d'impact évident sur les résultats de simulation du modèle.

Tableau 4.12 Valeurs des paramètres de fractionnement de la DCO pour le modèle en post-dénitrification.

Paramètres de fractionnement	Symbole	Valeur
Fraction biodégradable de la DCO soluble en entrée	f_{SB_DCOs}	15%
Fraction biodégradable de la DCO particulaire en entrée	f_{XCB_DCOx}	65%
Fraction de la biomasse de la DCO particulaire en entrée	$f_{Biomasse_DCOx}$	20%
Fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	$f_{XOHO_Biomasse}$	80%
Fraction de la biomasse AOB dans la biomasse autotrophe	f_{AOB_XBA}	50%
Fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particule inerte en entrée	$f_{XU,E_DCO\ inerte}$	70%

Le modèle de fractionnement pour les variables d'azote biodégradables ($X_{CB,N}$ et $S_{B,N}$) est également similaire à celui du modèle en nitrification (voir Eq 4.43). La concentration en NH_2OH en entrée, qui n'est pas mesurée, est fixée à une valeur très faible 0,008 (mgN/L). Ce composant n'a pas d'influence sur les résultats de simulation, puisqu'il ne participe pas aux réactions biologiques liées à la dénitrification hétérotrophe.

Eq 4.45 $$XC_{B,N} + S_{B,N} = NTK - NH_4^+ - S_{NH2OH} - i_{N_XBio} * Biomasse - i_{N_Xinerte} * DCO_X\ inerte$$
$$avec\ S_{B,N}/(S_{B,N} + XC_{B,N}) = 0{,}7$$

où
i_{N_XBio} est la quantité d'azote dans la biomasse (gN/gDCO).
$i_{N_Xinerte}$ est la quantité d'azote dans la DCO particulaire inerte (gN/gDCO).

Les concentrations en NO et en N_2O en entrée sont estimées à partir de la concentration en NO_x^-. Selon l'étude de Bollon *et al.* (2016a) sur les émissions du N_2O des biofiltres post-dénitrifiants de types Biostyr® de la station Seine Aval, le ratio entre la concentration de N_2O et celle de NO_x^- en entrée de procédé est autour de 0,01 (mgN/mgN). Cette valeur est appliquée pour calculer la concentration en N_2O en entrée. Pour estimer la concentration en NO en entrée, qui n'est pas mesurée à la station, le ratio NO/NO_x^- en sortie de l'étage de nitrification (0,00005 mgN/mgN) issu des résultats de validation du modèle en nitrification est utilisé.

4.4.3. Modifications apportées au modèle

Par rapport au modèle de biofiltration précédemment présenté, certaines modifications ont été apportées afin de l'adapter aux conditions d'exploitation et à la performance de traitement de l'étage de post-dénitrification. Premièrement, tel que mentionné précédemment, le méthanol est utilisé comme source de carbone exogène par l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre. Comme le méthanol n'est pas inclus comme variable dans le modèle, un bloc a été ajouté en tête du modèle dans le logiciel WEST®. Ce bloc convertit donc à chaque instant le débit de méthanol injecté (qui est mesuré par la station) en flux de DCO soluble biodégradable (S_B) équivalent (1g méthanol = 1,5 gDCO) (Bernier *et al.*, 2014a).

Deuxièmement, comme il n'y a pas d'aération lorsque les biofiltres fonctionnent en post-dénitrification, le débit d'air injecté est fixé à 0 Nm^3/j. Le coefficient du transfert gaz-liquide utilisé dans le modèle devient 0 h^{-1} et le transfert gaz-liquide d'oxygène ainsi que les autres composants gazeux ne sont donc pas actifs dans le modèle en post-dénitrification. Or, pendant la dénitrification les gaz N_2, NO et N_2O peuvent être produits. Toutefois, selon l'étude de Bollon *et al.* (2016a), presque tout le N_2O en sortie des biofiltres post-dénitrifiants (type Biostyr®, actuellement en pré-dénitrification) de la station Seine Aval sont observés dans la phase liquide et non gazeuse. Cette observation indique que le transfert liquide-gaz du N_2O est très faible dans les biofiltres post-dénitrifiants. Les auteurs indiquent aussi qu'un biofiltre post-dénitrifiant est un puits à N_2O quand la source de carbone est suffisante pour la dénitrification. Selon les données d'exploitation, le taux d'enlèvement des nitrates de l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre est proche de celui de la station Seine Aval (environ 90%). Dans ce cas-ci, on suppose que le N_2O en sortie des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre reste aussi principalement présent dans la phase liquide. Le transfert gaz-liquide de N_2O n'est donc pas considéré. Enfin, vu que la prédiction des émissions de N_2 et de NO n'est pas un objectif prioritaire de ce travail de modélisation, le transfert gaz-liquide de ces deux composants n'est pas non plus considéré.

Enfin, selon des tests de simulation préliminaires réalisés sur le modèle en post-dénitrification, à cause de la faible concentration en ammonium en entrée, la vitesse de croissance hétérotrophe simulée par le modèle est souvent limitée. Par contre, selon les données d'exploitation, ce faible niveau d'ammonium en entrée semble ne pas influencer les réactions de dénitrification hétérotrophe dans l'étage. Dans ce cas-ci, on suppose que la biomasse hétérotrophe dans les biofiltres post-dénitrifiants soit capable de réduire le nitrate à l'ammonium lorsqu'il y a une carence de la source d'azote afin de satisfaire leur besoin de croissance (Hiatt et Grady, 2008). Une réaction supplémentaire, illustrant la réduction des nitrates en ammonium, est donc ajoutée dans le modèle (voir Eq 4.44).

Eq 4.46 $$\rho_{NO_3_NH_4} = q_{NO_3_NH_4,red} * \frac{S_{NO_3}}{S_{NO_3}+K_{NO_3,red}} * \frac{K_{I,NH_4,red}}{S_{NH_4}+K_{I,NH_4,red}} * X_{OHO}$$

où

$\rho_{NO_3_NH_4}$ est la vitesse de la réduction de nitrate en ammonium ($gN/m^3/j$)

$q_{NO3_NH4,red}$ est le taux maximal de réduction de nitrate en ammonium ($gN/gO_2/j$)

S_{NO_3} et S_{NH_4} sont les concentrations en NO_3^- et en NH_4^+, respectivement (gN/m^3)

$K_{NO_3,red}$ est la constante de demi-saturation en NO_3^- pour la réduction de nitrate en ammonium (gN/m^3)

$K_{I,NH_4,red}$ est la constante d'inhibition en NH_4^+ pour la réduction de nitrate en ammonium (gN/m^3)

X_{OHO} est la concentration en biomasse hétérotrophe (gO_2/m^3)

4.4.4. Calibration et validation du modèle en post-dénitrification

Sept variables en sortie liées à la qualité de l'eau post-dénitrifiée ont été choisies pour faire l'objet de la calibration : NO_3^-, NO_2^-, DCO, DCO soluble, MES, NH_4^+ et PO_4^{3-}. Ces variables correspondent à celles mesurées en sortie des files de traitement de la station Seine Centre pour évaluer et surveiller la performance de traitement de la post-dénitrification. Parmi ces variables, la concentration en MES en sortie est estimée à partir la DCO particulaire simulée. En plus des variables liées à la qualité en sortie de post-dénitrification, le facteur d'émission en N_2O a été également pris en compte. Cette fois-ci, ce facteur représente le rapport entre la quantité de N_2O en sortie (dans la phase liquide) et la quantité de NO_3^- enlevée pendant la dénitrification (Bollon *et al.*, 2016a).

4.4.4.1. Analyse de sensibilité globale

De manière similaire au travail effectué sur la nitrification, la calibration du modèle en post-dénitrification commence par l'analyse de sensibilité globale en appliquant la simulation Monte-Carlo. Comme la dénitrification dans les biofiltres post-dénitrifiants est réalisée par la biomasse hétérotrophe, les paramètres liés à l'activité de la biomasse autotrophe ne sont pas inclus dans l'analyse. Le Tableau A2.9 dans l'Annexe 2 résume les paramètres choisis pour l'analyse et leur espace d'échantillonnage correspondant. La méthode LHS a été également appliquée pour effectuer l'échantillonnage des valeurs de paramètres (Saltelli *et al.*, 2007). Trois séries de simulation Monte-Carlo ont été réalisés en parallèle, chacune effectuant 100 échantillonnages de paramètres. Le nombre total de combinaisons (n=300) est autour de 5 fois le nombre de paramètres choisis pour l'analyse (N=54). Le mode de simulation (régime permanent de 30,5 jours) et la méthode utilisée pour réaliser la régression multilinéaire entre les paramètres choisis et les variables à calibrer sont similaires à ceux de la calibration du modèle en nitrification. Selon les résultats d'analyse, tel que montré au Tableau 4.13, la plupart des coefficients de détermination obtenus par l'analyse de sensibilité globale sont inférieurs à 0,6, ce qui signifie que la relation entre les variations des variables et les changements des valeurs de paramètres est relativement faible.

Tableau 4.13 Coefficients de détermination (R^2) obtenus par l'analyse de sensibilité globale pour le modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20%-50% des valeurs par défaut).

Variables en sortie	Coefficients de détermination (R^2)
NO_3^-	0,48
NO_2^-	0,47
DCOs	0,44
DCO	0,44
MES	0,53
NH_4^+	0,86
Orthophosphates	0,92
Facteurs d'émission du N_2O	0,54

Comme ce qui peut être observé à la Figure 4.21, une grande partie des concentrations simulées en NO_2^- en sortie simulées sont proche de 0 mgN/L. Cette observation signifie que pour la plupart des combinaisons des valeurs de paramètres testées, le modèle produit toujours les mêmes résultats pour le NO_2^- en sortie. Dans ce cas-ci, la régression multilinéaire ne peut pas trouver de bons coefficients de régression illustrant la variation des nitrites en sortie en fonction des changements des valeurs de paramètres. Pour rappel, le coefficient de régression est l'indicateur qui représente l'importance de l'influence d'un paramètre pour les variables en sortie. Ce problème de faibles coefficients de détermination est probablement lié aux espaces d'échantillonnage choisis pour certains paramètres qui sont relativement larges (±50% des valeurs par défaut) et peuvent conduire à des résultats extrêmement faibles ou élevés.

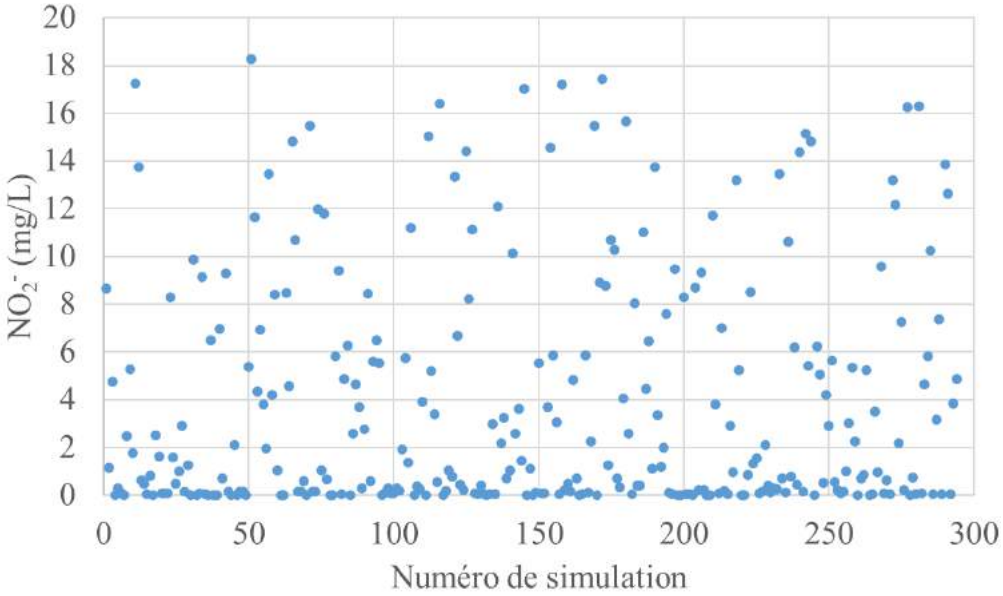


Figure 4.21 Résultats obtenus par simulation Monte-Carlo pour le nitrite en sortie du modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20%-50% des valeurs par défaut).

Afin d'augmenter la fiabilité de la régression multilinéaire, l'analyse de sensibilité globale a été refaite en fixant les espaces d'échantillonnage à ± 20% des valeurs par défaut pour tous les paramètres choisis. Tel que montré au Tableau 4.14, cette fois-ci, les coefficients de détermination obtenus augmentent. D'ailleurs, tel que montré à la Figure 4.22, bien que la plage de variation de la concentration en NO_2^- en sortie diminue, moins de résultats extrêmement faibles ont été observés par rapport au premier essai.

Tableau 4.14 Coefficients de détermination (R^2) obtenus par l'analyse de sensibilité globale pour le modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20% des valeurs par défaut).

Variables en sortie	Coefficients de détermination (R^2)
NO_3^-	0,64
NO_2^-	0,84
DCOs	0,83
DCO	0,82
MES	0,61
NH_4^+	0,94
Orthophosphates	0,98
Facteurs d'émission de N_2O	0,84

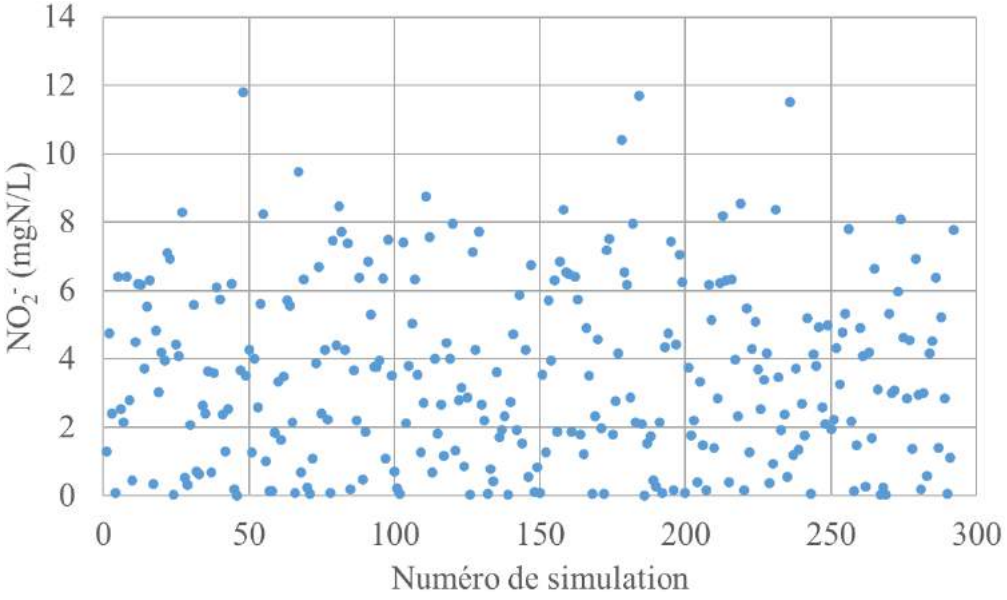


Figure 4.22 Résultats obtenus par simulation Monte-Carlo pour le nitrite en sortie du modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20% des valeurs par défaut).

Les Figures 4.23a et b montrent les résultats d'analyse de sensibilité globale obtenus pour les concentrations en NO_3^- et en NO_2^- en sortie du modèle en post-dénitrification avec les espaces d'échantillonnage fixés à ±20% des valeurs par défaut des paramètres.

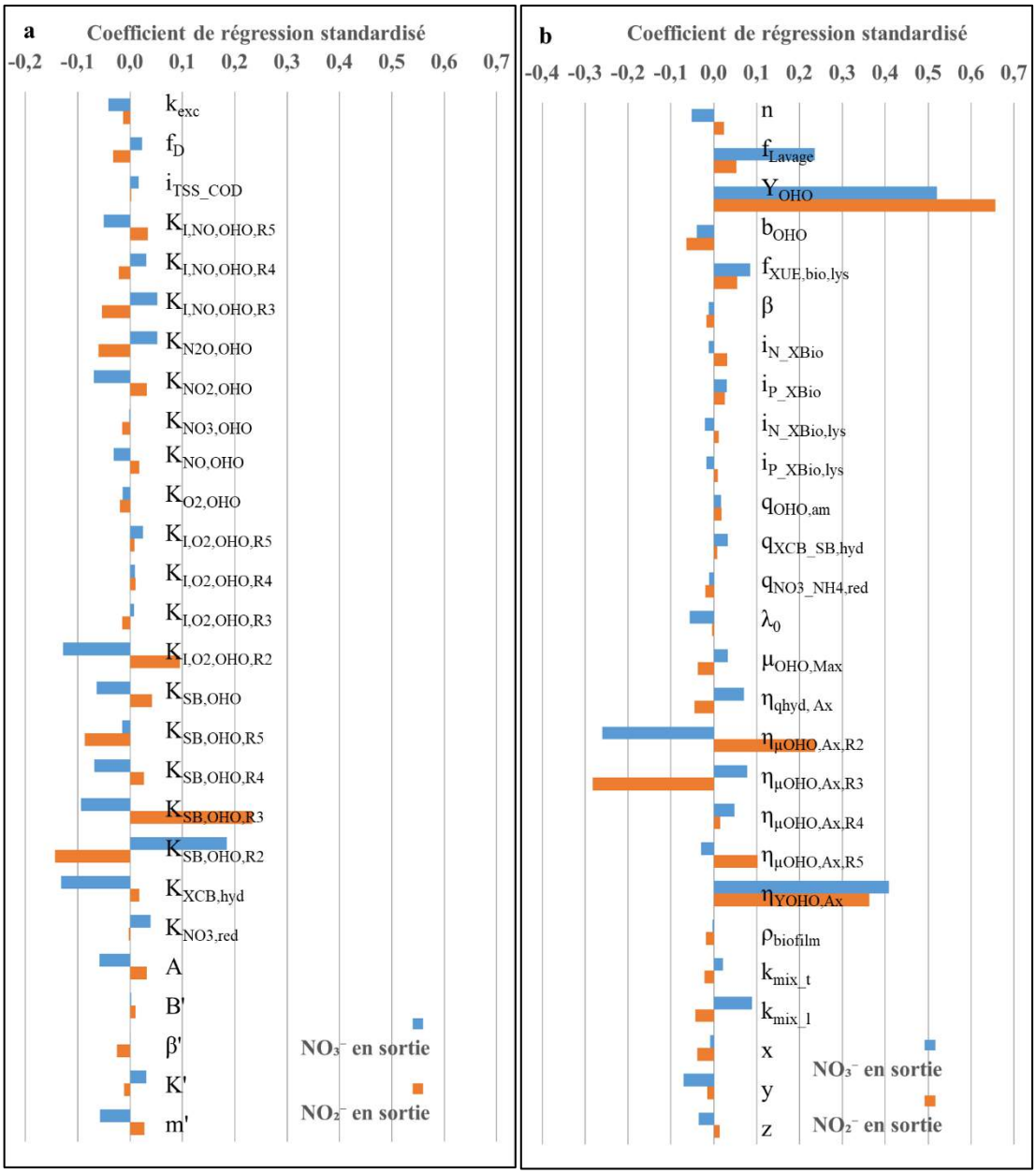


Figure 4.23 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables NO_3^- et NO_2^- en sortie du modèle en post-dénitrification. (Colonnes bleues : les nitrates en sortie ; colonnes oranges : les nitrites en sortie).

Les paramètres qui ont un impact non-négligeable (coefficient de régression absolu > 0,1 selon Bernier (2014)) trouvés pour ces deux variables sont principalement liés aux réactions de croissance de la biomasse hétérotrophe en anoxie (voir Tableau 4.15). Parmi ces paramètres, certains ont des effets opposés sur les nitrates et les nitrites en sortie, par exemple $K_{SB,OHO,R2}$, tandis que les autres comme Y_{OHO} et $\eta_{YOHO,Ax}$ produisent des effets du même sens. Ces résultats obtenus sont raisonnables. Par exemple, quand la constante de demi-saturation $K_{SB,OHO,R2}$ est

élevée, la vitesse de consommation des nitrates est globalement ralentie. Dans ce cas-ci, moins de nitrites seront produits. En revanche, comme les paramètres liés au rendement hétérotrophe (Y_{OHO} et $\eta_{YOHO,Ax}$) participent simultanément aux réactions consommant le NO_3^- et le NO_2^-, l'augmentation de ces deux paramètres peut faire diminuer en même temps les quantités des nitrates et des nitrites demandées pour la croissance hétérotrophe en anoxie. Les résultats d'analyse de sensibilité globale obtenus pour les autres variables en sortie sont disponibles à l'Annexe 2 (Voir Figures A2.6-A2.9). En général, les paramètres influents identifiés par l'analyse de sensibilité global pour chaque variable de sortie correspondent aux connaissances sur les équations et les réactions utilisées par le modèle développé.

Tableau 4.15 Paramètres qui ont un impact non-négligeable pour les nitrates et les nitrites en sortie du modèle identifiés par l'analyse de sensibilité globale (espaces d'échantillonnage fixés à ±20% des valeurs par défaut de paramètres).

Paramètre	Symbole	Unité	Coefficient de régression	
			NO_3^-	NO_2^-
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R2}$	gO_2/m^3	-0,128	0,095
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	0,185	-0,143
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	-0,094	0,234
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,520	0,657
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	-0,259	0,236
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,079	-0,282
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,408	0,362
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	F_{Lavage}	-	0,235	0,053

4.4.4.2. Calibration et validation du modèle en post-dénitrification

- **Calibration du modèle par simulation Monte-Carlo**

Comme ce qui a été fait pour le modèle en nitrification, afin d'accélérer la calibration du modèle en post-dénitrification, certaines variables en sorties sont calibrées ensemble. Quatre groupes de calibration ont été défini et calibrés dans l'ordre suivant : (1) enlèvement des nitrates et des nitrites (NO_3^-, NO_2^- et DCO soluble en sortie) ; (2) performance de filtration (MES et DCO en sortie) ; (3) consommation de l'ammonium et des orthophosphates (NH_4^+ et PO_4^{3-} en sortie) ; (4) production/consommation de N_2O (facteur d'émission du N_2O). Cet ordre est décidé pour les raisons suivantes :

(1) L'enlèvement des nitrates et des nitrites en utilisant le méthanol est la caractéristique de base des biofiltres post-dénitrifiants, les variables de sortie liées à cette caractéristique doivent être d'abord calibrées, ce qui concerne les nitrates, les nitrites et la DCO soluble en sortie.

(2) Selon les données issues de la station, la DCO filtrée en sortie représente environ 80% de la DCO totale en sortie de l'étage de post-dénitrification. Suite à la calibration du premier groupe qui inclut la DCO soluble en sortie, il soit facile de réaliser la calibration de la DCO totale en ajustant les paramètres influencent la DCO particulaire en sortie, comme, par exemple, la filtration. De plus, dans le modèle, la concentration en MES en sortie est déduite à partir de la DCO particulaire. Pour ces raisons, la DCO totale et les MES se constituent le deuxième groupe de calibration.

(3) Dans les biofiltres post-dénitrifiants, la consommation de l'ammonium et des orthophosphates est liée principalement à l'activité de dénitrification par les bactéries hétérotrophes. Comme cette activité est calibrée pour le premier groupe, il est facile de calibrer le NH_4^+ et le PO_4^{3-} en sortie. Ces deux variables de sortie se constituent le troisième groupe de calibration.

(4) Selon les résultats d'analyse de sensibilité globale, tous les paramètres influents identifiés pour le facteur d'émission du N_2O sont inclus dans le premier groupe. Cependant, comme il n'y pas de mesure du N_2O à l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre, on ne peut pas réaliser une calibration précise pour les émissions du N_2O et intégrer cette variable dans le premier groupe de calibration.

Pour les trois premiers groupes, la sélection des paramètres influent à calibrer respecte aussi l'ordre de calibration précédemment défini. Si un paramètre a été choisi pour le premier groupe de calibration, il ne sera pas pris en compte pour les groupes suivants et ainsi de suite. Dans ce cas si, comme la calibration du modèle en nitrification, trois groupes de calibration indépendants ont été formés. Pour le quatrième groupe qui est spécifique, tous les paramètres

influent pour le facteur d'émission du N_2O ont été choisis comme paramètres à ajuster. La calibration de ces quatre sera présentée dans les paragraphes suivants. Les Tableaux A2.10-A2.13 de l'Annexe 2 résument les paramètres pris en compte par chaque groupe de calibration ainsi que leurs coefficients de régression obtenus par l'analyse de sensibilité globale. Tel que présenté précédemment, les données utilisées pour la calibration du modèle en post-dénitrification sont issues de la file 3 pour les mois d'octobre et de novembre de l'année 2008 (50 jours). A cette période, deux paliers du rapport méthanol/NOx^- ont été testés sur la file 3 (palier 1 : 2,25 g/gN, 12 jours ; palier 2 : 2,45 g/gN, 38 jours).

Les trois premiers groupes de calibration, qui sont indépendants, sont calibrés par simulation Monte-Carlo. Pour chaque groupe, un échantillonnage LHS a été réalisé avec un nombre d'échantillonnage d'environ 9-10 fois le nombre de paramètres du groupe. Les variables en sortie simulées sont comparées avec les données issues des capteurs installés en sortie de la file (cas de variables NO_2^- et NO_3^-) et les mesures laboratoire sur les échantillons composites 24 heures en sortie de l'étage (cas de variables MES, DCO, DCO soluble, PO_4^{3-}, NH_4^+). La DCO soluble en sortie est comparée avec la DCO filtrée mesurée. Vu que les deux autres files fonctionnent de manière « normale », il est possible que les concentrations des variables en sortie de la file 3 soient légèrement différentes par rapport à celles mesurées en sortie de l'étage complet. Les scores statistiques ME, MAE et RMSE sont également utilisés pour évaluer les résultats de simulation et identifier la meilleure combinaison des valeurs de paramètres. Ces dernières sont ensuite ajustées manuellement au besoin afin d'affiner la performance de prédiction du modèle. Une fois un groupe calibré, les valeurs des paramètres ajustés sont fixées et la calibration du groupe suivant commence.

Pour le dernier groupe, tel que présenté précédemment, le N_2O n'est pas mesuré à l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre. Par conséquent, le facteur d'émission du N_2O est calibré en comparant les résultats simulés avec les observations issues de l'étude de Bollon *et al.* (2016a). Il est à noter que tous les paramètres influents identifiés pour ce dernier groupe ont déjà été inclus dans la calibration du premier groupe (voir Tableaux A2.10 et A 2.13 dans l'Annexe 2). Afin de ne pas influencer les performances de prédiction des variables du premier groupe qui ont déjà été calibrées avec les données de mesure directe, les paramètres du groupe production/consommation de N_2O sont ajustés de manière manuelle si nécessaire. Lorsqu'un paramètre de ce groupe a été ajusté, la performance de prédiction d'enlèvement des nitrates et des nitrites ont été vérifiée.

- **Validation du modèle**

Après la calibration, le modèle est validé avec les jeux de données issus de l'étage au complet de post-dénitrification de la station Seine Centre. Tel que présenté précédemment, deux

périodes de validation sont testées. Comme les données de capteur de NO_3^- et de NO_2^- en sortie ne sont pas disponibles, la performance de prédiction pour ces deux variables est évaluée avec les analyses laboratoire de la station sur les échantillons composites 24 heures et les données horaires de la concentration en NO_x^- issues des capteurs en sortie des trois files de traitement. Les scores statistiques ME, MAE et RMSE sont calculés pour quantifier les différences entre les résultats de simulation et les mesures.

4.4.4.3. Résultats de calibration

La Figure 4.24 montre les résultats du jour 2 à jour 20 de la période de calibration pour les concentrations en NO_3^- en sortie. La période montrée contient très peu d'événements de pluie (jour 6 et 19). Pour rappel, le changement du rapport méthanol/NO_x^- a été effectué au jour 12.

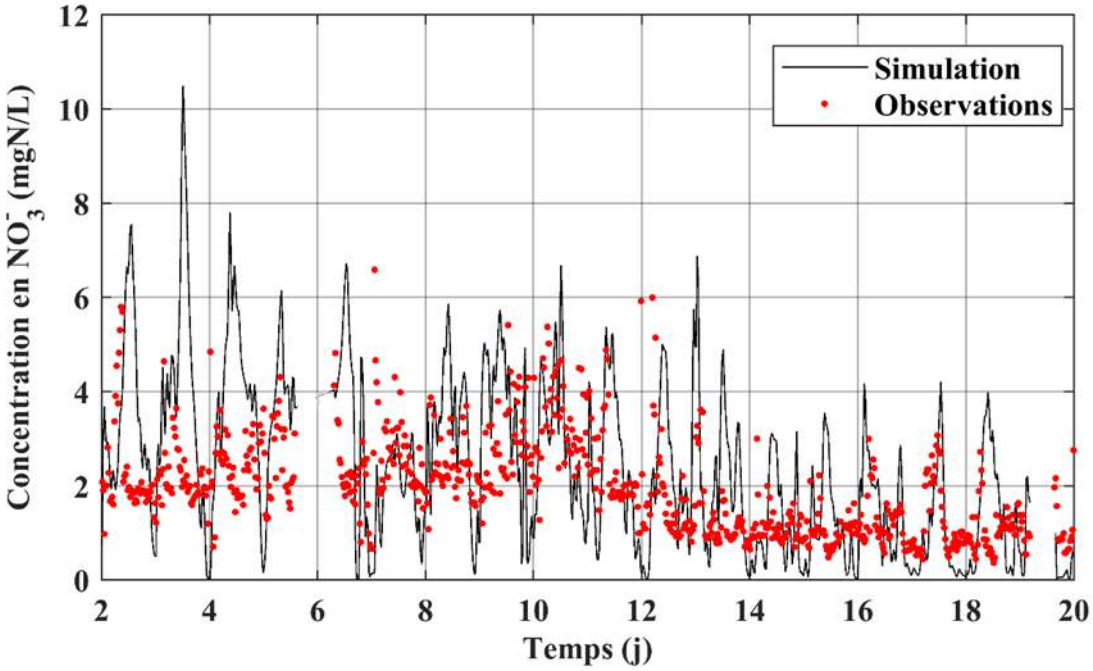


Figure 4.24 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification (jours 2-20 de la période de calibration) pour la concentration en NO_3^- en sortie de la file 3 de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).

Tel que montré à la Figure 4.24, les variations journalières du NO_3^- en sortie prédites par le modèle sont plus élevées que celles observées en sortie de la file 3, surtout pour les jours 2 à 6. Lors de cette période, les pics de NO_3^- en sortie observés dans les résultats de simulation ne sont pas observés par le capteur installé en sortie de la file 3. En revanche, la performance de prédiction est bonne entre les jours 6-12 de la période de calibration (avant le changement du rapport méthanol/NO_x^-). Pour ces jours, le niveau et les variations des nitrates en sortie sont reproduits par le modèle. La diminution de la concentration en NO_3^- après l'augmentation du rapport méthanol/NO_x^- est bien prédite par le modèle. Cependant, par rapport aux observations, il semble que le modèle a besoin d'un peu plus de temps pour s'adapter à l'augmentation du dosage de méthanol.

Selon les scores statistiques résumés au Tableau 4.16, le score ME obtenu pour la prédiction des nitrates sur toute la période de calibration est de 0,39 mgN/L, ce qui représente environ 20%-25% de la concentration moyenne observée (1,68 mgN/L). Par contre, à cause des variations fortes observées dans les résultats de simulation, les scores MAE (1,29 mgN/L) et RMSE (1,79 mgN/L) sont proches de la concentration moyenne.

Tableau 4.16 Résultats des scores statistiques obtenus pour la simulation de la période de calibration en post-dénitrification (entre octobre et novembre 2008, 50 jours).

Variable	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE
NO_3^- (mgN/L)	1,68	1906	0,39	1,29	1,79
NO_2^- (mgN/L)	1,99	1906	0,72	1,06	1,31
[1]NO_x^- (mgN/L)	3,67	1906	1,11	1,84	2,32
DCOs (mgO_2/L)	21,43	30	-0,04	2,24	3,04
DCO (mgO_2/L)	25,16	43	-1,16	3,11	4,38
MES (mg/L)	4,17	30	-1,92	2,27	2,92
PO_4^{3-} (mgP/L)	0,29	43	0,02	0,06	0,09
NH_4^+ (mgN/L)	0,46	43	0,23	0,26	0,29

[1]Le NO_x^- est calculé par la somme des nitrates et des nitrites mesurés.

Par rapport aux résultats sur les nitrates, la concentration en NO_2^- en sortie entre les jours 2-6 est bien prédite par le modèle (voir Figure 4.25). De plus grandes erreurs de prédiction sont observées entre les jours 6-12, mais la tendance de variation de ces jours est suivie par le modèle. La diminution de la concentration en NO_2^- en sortie après l'augmentation du dosage de méthanol au jour 12 est également présente dans les résultats de simulation. Cependant, par rapport aux observations, pour cette période la concentration en sortie est surestimée d'environ 0,5 mgN/L par le modèle. Le score ME obtenu pour cette variable en sortie est de 0,79 mgN/L, ce qui indique également que le modèle surestime la concentration en NO_2^- en sortie (moyenne en sortie observée : 1,99 mgN/L). Les scores MAE et RMSE obtenus sont de 1,06 mgN/L et 1,31 mgN/L, respectivement, qui représentent environ 50-60% de la valeur moyenne observée..

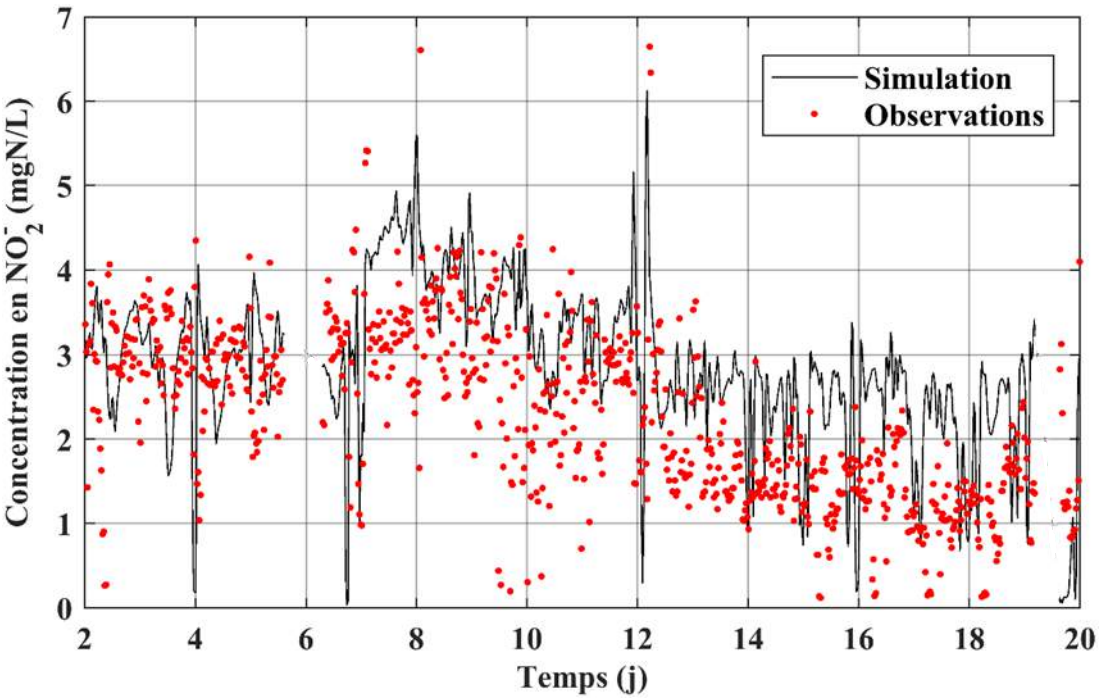


Figure 4.25 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification (jours 2-20 de la période de calibration) pour la concentration en NO_2^- en sortie de la file 3 de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).

Les augmentations des scores MAE et RMSE par rapport au ME pour les prédictions des nitrates et nitrites sont liées aussi à l'incertitude de mesure du capteur. Selon les observations de Pham *et al.* (2010), les erreurs relatives entre les mesures du capteur utilisé et celles obtenues par les kits N-NO_3^- et N-NO_2^- augmentent de 0%-20% à 30%-50% lorsque les concentrations en NO_3^- et en NO_2^- sont inférieures à 2 mgN/L. Pour la période de calibration, les concentrations en nitrates et en nitrites inférieures à 2 mgN/L représentent respectivement d'environ 70% et 50% des données totales mesurées par le capteur.

Tel que présenté précédemment, les autres variables de la qualité de l'eau en sortie simulées (DCO, DCOs, MES, PO_4^{3-} et NH_4^+) sont comparées avec les mesures journalières de l'effluent de l'étage complet au lieu de la file 3. Tel que montré à la Figure 4.26, le niveau de la concentration en DCO soluble en sortie simulé (valeur moyenne sur 24h) par le modèle correspond à celui mesuré. Tous les scores statistiques obtenus sur cette variable (voir Tableau 4.16) sont autour de 10%-15% de la concentration moyenne en sortie observée (21,4 mgO_2/L), ce qui signifie de bonnes performances de prédiction. Ces résultats indiquent que la consommation du méthanol lors de dénitrification est en général bien prédite par le modèle.

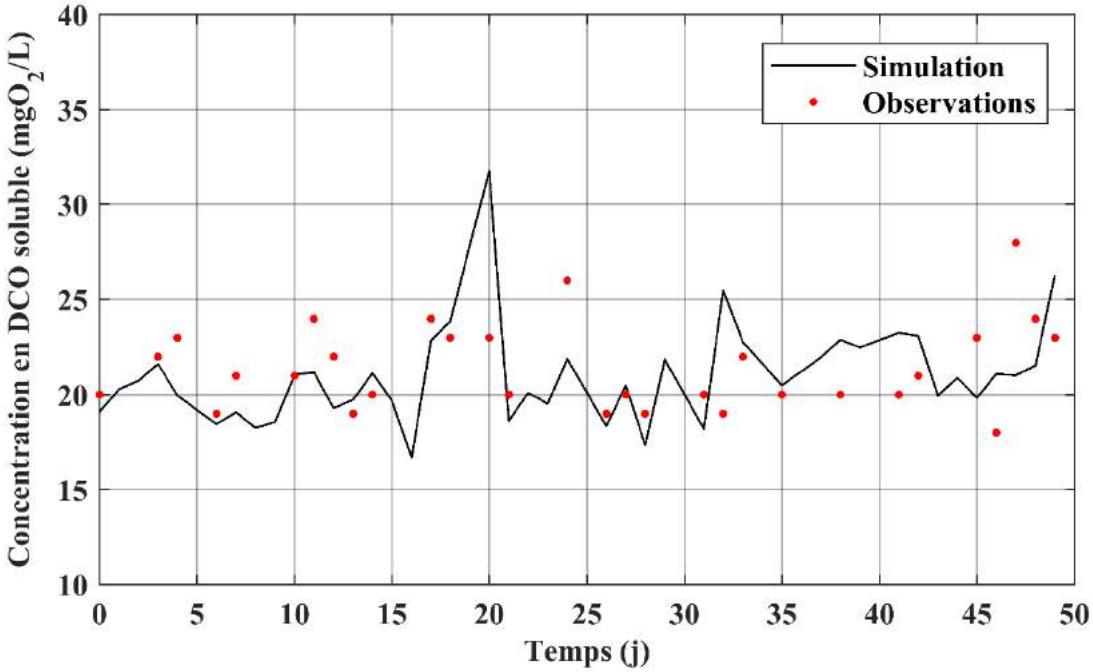


Figure 4.26 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification sur la concentration en DCO soluble en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).

Comme la DCO filtrée représente une grande partie de la DCO en sortie de l'étage (autour de 25 mgO_2/L), les scores statistiques obtenus pour la prédiction de la DCO sont également satisfaisants (voir Tableau 4.16). Car ils sont autour de 10% - 20% de la valeur moyenne observée. Les résultats de simulation de la DCO en sortie sont montrés à la Figure A2.10 dans l'Annexe 2.

Les scores statistiques obtenus pour les MES et le NH_4^+ en sortie représentent environ 50% de leurs valeurs moyennes en sortie (MES : 4,17 mg/L ; NH_4^+ : 0,46 mgN/L) (voir Tableau 4.16). Cependant, il est à noter que ces moyennes sont proches des limites de quantification de l'analyse laboratoire (MES : 2 mg/L ; NH_4^+ : 0,3 mgN/L) et les incertitudes de mesure à ces niveaux de concentrations sont relativement élevées (MES : 60% ; NH_4^+ : 40%). Dans ce cas-ci, les erreurs entre la simulation et les observations sont probablement plus liées aux incertitudes de mesure qu'à des soucis de performance de prédiction. Les résultats de simulation de ces deux variables sont montrés respectivement aux Figures A2.11 et A2.12 dans l'Annexe 2.

Tel que montrée à la Figure 4.27, la concentration en orthophosphates en sortie est aussi bien prédite par le modèle. Les erreurs de simulation se concentrent entre les jours 25-35 où la mesure des orthophosphates atteint la limite de quantification (0,1 mgP/L).

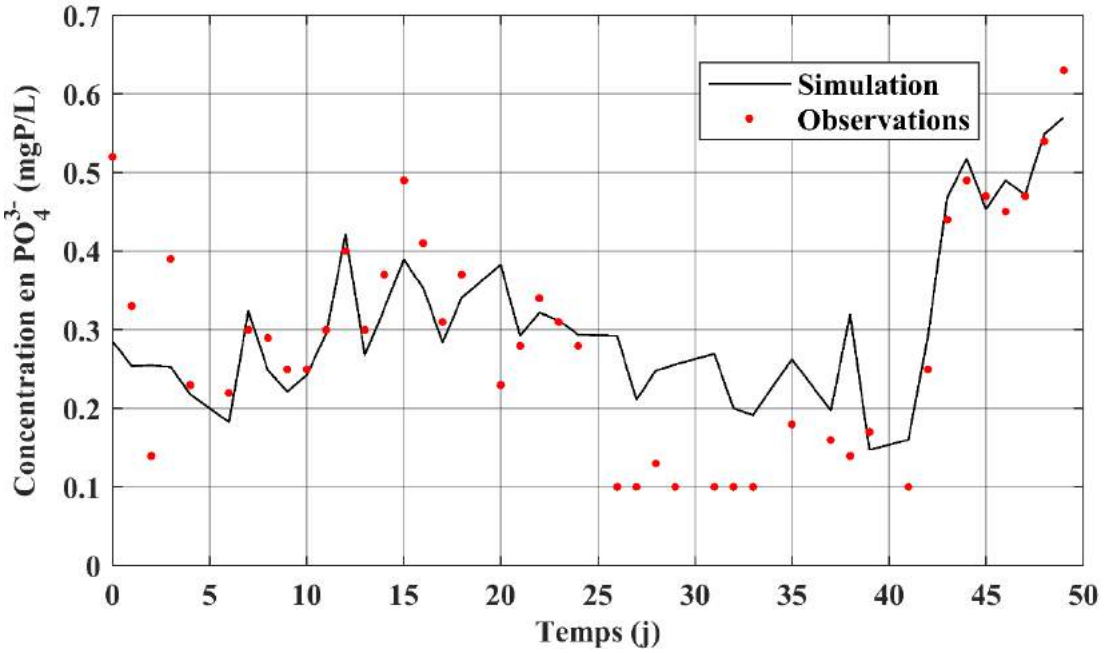


Figure 4.27 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification pour la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).

Enfin, concernant les émissions de N_2O, le facteur d'émission moyen obtenu pour les premiers 12 jours est de 0,13 ± 0,5 %, tandis que pour le deuxième palier de dosage, le facteur obtenu diminue légèrement (facteur d'émission moyen de 0,12 ± 0,2 %). Cette diminution observée est attendue puisque l'augmentation de la concentration disponible en DCO biodégradable peut diminuer les émissions de N_2O lors de la dénitrification (Kampschreur *et al.*, 2009). Les valeurs du facteur d'émission obtenues sont proches de celle observée par Bollon *et al.* (2016a) sur les biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Aval (0,11%). Les résultats de simulation de N_2O en sortie doivent être comparés avec les mesures directes sur les concentrations en N_2O en entrée et en sortie des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre ainsi que le N_2O

émis dans l'air pendant la dénitrification. Bien que le taux d'enlèvement des nitrates de ces deux stations soit proche (90%), le rapport DBO/NO_x^- appliqué par la station Seine Aval (3,4 gO_2/gN, Bollon *et al.* (2016a)) est plus élevé que celui de la file 3 de la station Seine Centre (2,25-2,5 gO_2/gN, 1g méthanol =1g DBO). Tel que mentionné précédemment, la disponibilité de la source de carbone peut influencer l'élimination de N_2O pendant la dénitrification. Une source de carbone insuffisante peut limiter la dégradation de N_2O. Deuxièmement, la concentration en nitrate en sortie de la file 3 (environ 2 mgN/L) est plus élevée que celle observée pour les biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Aval (< 1 mgN/L). L'accumulation des nitrites lors de la dénitrification peut également conduire à l'augmentation de l'émission de N_2O lors de la dénitrification (Kampschreur *et al.*, 2009). Enfin, la concentration de la biomasse hétérotrophe dans les biofiltres post-dénitrifiants peut aussi influencer le comportement de la production/dégradation de N_2O lors de la dénitrification.

4.4.4.4. Résultats de validation

- **Période d'avril à mi-septembre 2008**

Tel que présentée dans la section 4.4.2.2, la validation du modèle est réalisée sur l'étage de post-dénitrification au complet au lieu d'une file de traitement. Par rapport à la période de calibration, le débit moyen attribué aux biofiltres de la période d'avril à mi-septembre 2008 augmente d'environ 20%-25%, tandis que la concentration en NO_x^- en entrée diminue d'environ 20%, ce qui donne une charge équivalente. Les résultats de simulation de la concentration en NO_x^- en sortie obtenus pour la première période de validation (d'avril à mi-septembre 2008) sont montrés à la Figure 4.28 et comparés avec la somme des nitrates et des nitrites mesurés en sortie de l'étage. Pour rappel, la validation du modèle a été réalisée sur l'étage de post-dénitrification au complet. Tel qu'observé à la Figure 4.28, le niveau et les variations de la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage sont en général bien prédits par le modèle. Les erreurs de prédiction se situent principalement durant le mois de juillet, où la capacité de dénitrification de l'étage est légèrement surestimée. Cette surestimation du NO_x^- en sortie sera discutée dans les paragraphes suivantes.

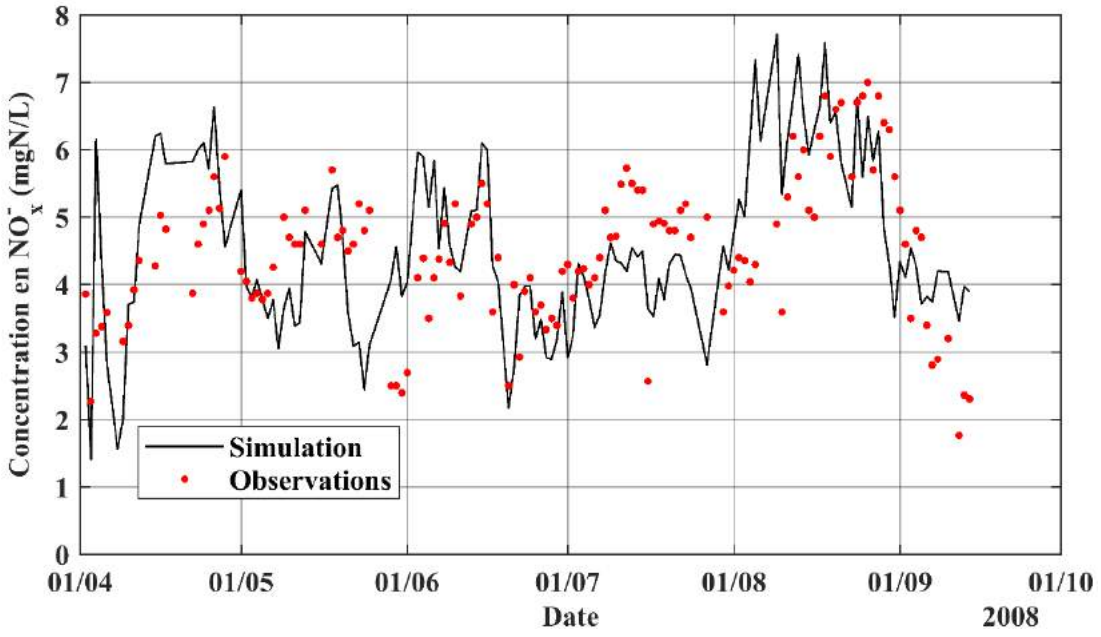


Figure 4.28 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 pourr la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations laboratoire; ligne noire : résultats de simulation).

Des résultats similaires sont obtenus en comparant les résultats de simulation avec les données horaires issues des capteurs de NO_x^- en sortie des files. Tel que montré à la Figure 4.29, les variations horaires du NO_x^- observées entre le 6 août et le 10 septembre 2008 sont bien reproduites par le modèle.

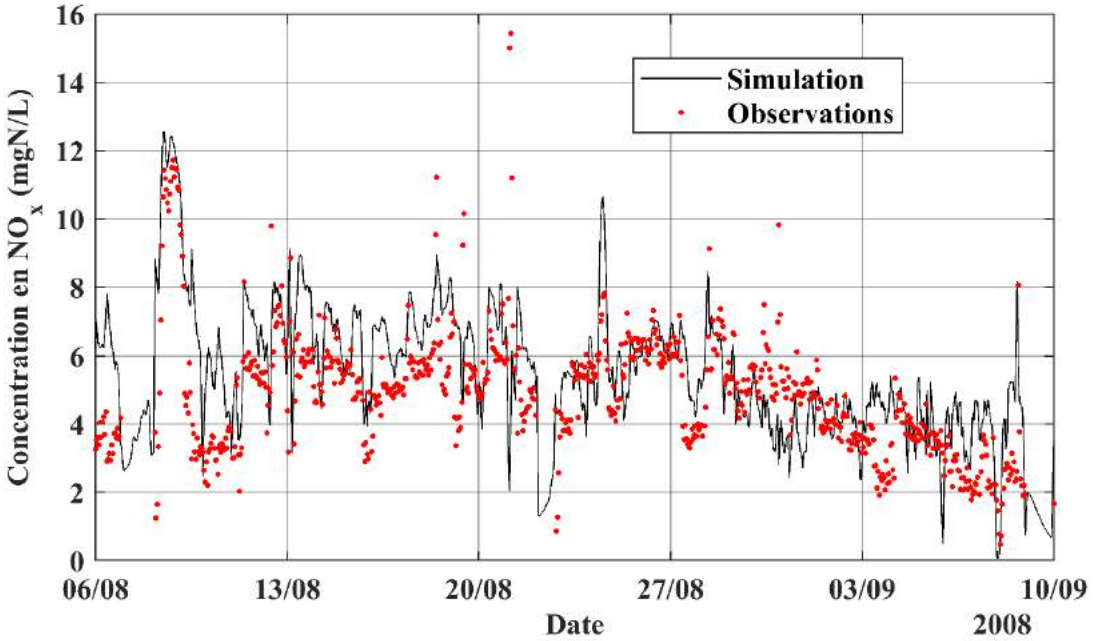


Figure 4.29 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification du 6 août au 10 septembre 2008 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations de capteurs; ligne noire : résultats de simulation).

Par rapport aux scores statistiques obtenus sur la prédiction du NO_x^- pour la période de calibration (voir Tableau 4.16), les scores obtenus pour la première période de validation sont plus faibles (voir Tableau 4.17), ce qui indique que la performance de prédiction de la validation est supérieure et que le modèle est fortement validé.

Tableau 4.17 Résultats des scores statistiques obtenus pour la simulation de la première période de validation du modèle en post-dénitrification (d'avril à mi-septembre 2008).

Variables	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE	Coefficient de Janus
NO_x^- (mgN/L)	4,03	3704	0,50	1,31	1,79	0,77
NO_3^- (mgN/L)	2,10	137	-0,03	1,21	1,57	-
NO_2^- (mgN/L)	2,44	137	0,04	0,81	0,96	-
DCOs (mgO_2/L)	22,61	92	-1,63	3,32	4,70	1,5
DCO (mgO_2/L)	27,24	137	-2,19	4,24	5,24	1,19
MES (mg/L)	4,75	92	-2,06	2,49	3,12	1,14
PO_4^{3-} (mgP/L)	0,26	137	0,09	0,11	0,15	1,6
NH_4^+ (mgN/L)	0,40	137	0,07	0,17	0,25	0,86

Les résultats de simulation pour les nitrates et les nitrites sont également tracés et comparés avec les mesures laboratoire correspondantes (voir Figures 4.30a et b). Tel que montré à la Figure 4.30a, la réduction des nitrates est sous-estimée par le modèle pour la période de mi-avril au début mai, tandis que pour le mois de juillet, la capacité de réduction est surestimée. Pour les autres mois, la concentration en NO_3^- en sortie est en général bien prédite par le modèle. Une performance de prédiction satisfaisante est observée pour la période de mi-août à mi-septembre où la diminution graduelle de la concentration en NO_3^- est bien suivie par le modèle. Le score ME obtenu pour la prédiction de NO_3^- en sortie est proche de 0 (-0,03 mgN/L).

Cependant, à cause des erreurs de prédiction pour les mois d'avril et de juillet, les scores MAE et RMSE sont supérieur à 1 mgN/L.

Une augmentation de la concentration en nitrites est observée au printemps (mois d'avril, température autour de 18°C, dosage méthanol : 2,39±0,13 gMeOH/gN), tandis qu'une diminution est plutôt observée pendant le mois de juillet (température autour de 23°C, dosage méthanol : 2,48±0,10 gMeOH/gN) (voir Figure 4.30b). Ce phénomène d'apparition/disparition des nitrites en sortie de traitement de dénitrification en fonction de la température a été observé en certaines autres études (Rocher *et al.*, 2011a; Chen *et al.*, 2017). Par contre, les résultats de simulation ne montrent pas de tendance évidente dans l'évolution des nitrites en sortie de l'étage. Comme pour le NO_3^-, le score ME pour la prédiction de NO_2^- en sortie est proche de 0 (0,04 mgN/L), tandis que les scores MAE et RMSE sont autour de 0,8-1 mgN/L.

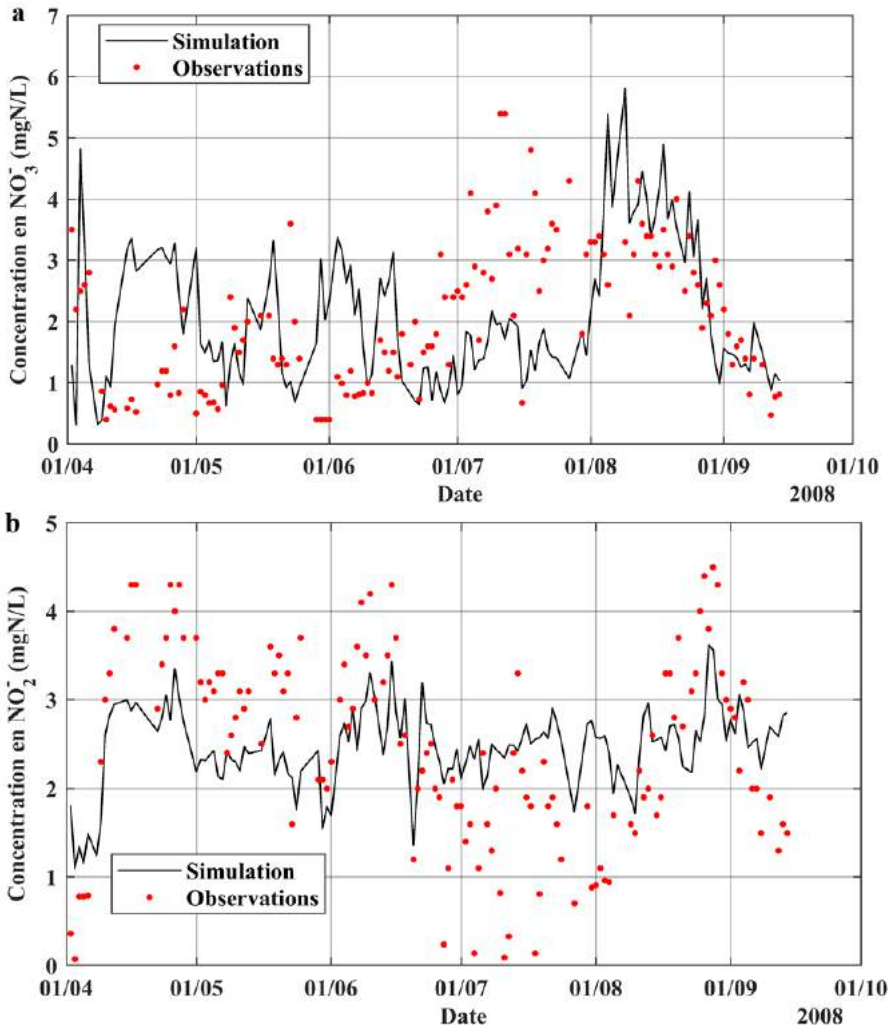


Figure 4.30 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 pour la concentration en nitrates (a) et en nitrites (b) en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).

Les réactions de dénitrification utilisées dans le modèle développé sont issues du modèle proposé par Hiatt et Grady (2008). Dans leur modèle, la procédure de dénitrification par la

biomasse hétérotrophe est illustrée par quatre étapes de réduction ($NO_3^- \rightarrow NO_2^- \rightarrow NO \rightarrow N_2O \rightarrow N_2$). Par contre, un seul coefficient de l'effet de la température sur le taux maximal de croissance hétérotrophe ($\theta_{\mu max,OHO}$) est utilisé pour toutes ces quatre étapes. Or, il a été observé que pour une température entre 10°C et 20°C, la réaction de réduction des nitrites en anoxie est plus sensible au changement de température que celle de réduction des nitrates (Ma *et al.*, 2008). L'évolution du ratio de vitesse de réduction pour les nitrates et les nitrites en fonction de la température peut donc influencer les concentrations en nitrate et nitrite en sortie. Lorsque la température est faible (cas du mois d'avril), l'activité bactérienne réduisant les nitrites est limitée par rapport à celle réduisant les nitrates, ce qui conduit à l'augmentation des nitrites en sortie. Le contraire se produit en été (cas du mois de juillet). Dans cette saison estivale, la vitesse de consommation de la DCO biodégradable est accélérée dans les biofiltres à cause de l'augmentation de la vitesse de croissance lors de la réduction des nitrites. Dans ce cas-ci, bien que le modèle puisse en général bien reproduire la concentration en NO_x^- en sortie, il est difficile voire impossible de suivre les variations saisonnières spécifiques aux nitrates et nitrites avec un seul coefficient de l'effet de la température. Une voie possible d'améliorer la performance de prédiction du modèle sur ces variations est d'attribuer des coefficients de l'effet de la température spécifiques pour les réactions de réduction des nitrates et des nitrites en anoxie. Ces coefficients peuvent être estimés en s'appuyant sur les mesures expérimentales sur le taux d'enlèvement des nitrates et des nitrites en anoxie dans les pilotes de biofiltres sous différentes températures d'incubation (Mokhayeri *et al.*, 2006; Ma *et al.*, 2008).

Comme pour la calibration, la concentration de la DCO soluble en sortie est également bien prédite par le modèle pour la première période de validation (voir Figure A4.13). Tous les scores statistiques obtenus pour la prédiction de cette variable (voir Tableau 4.17) sont inférieurs à 25% de la valeur moyenne observée en sortie de procédé (21,6 mgO_2/L, incertitude de mesure 40%), ce qui signifie une bonne performance de prédiction du modèle. Les constats sont similaires pour la DCO totale en sortie de la première période de validation (voir Tableau 4.17 et Figure A2.14 dans l'Annexe 2).

La concentration en PO_4^{3-} en sortie est bien prédite par le modèle pour la plupart des jours de la première période de validation (voir Figure A4.15 dans l'Annexe 2). Comme pour la simulation de calibration, des surestimations des orthophosphates en sortie sont observées lorsque la concentration en PO_4^{3-} mesurée est autour de 0,1 mgP/L (limite de la quantification). Pour les prédictions des MES et du NH_4^+, les niveaux de ces deux variables observées en sortie peuvent être prédits par le modèle, comme pour les résultats de calibration. Cependant, à cause des limites de quantification et d'incertitudes de mesure élevées, les variations observées ne peuvent pas vraiment être reproduites par le modèle (voir Figures A2.16-17 dans l'Annexe 2).

Selon le Tableau 4.17, les coefficients de Janus obtenus pour toutes les variables en sortie sont inférieurs à 2, ce qui confirme une validation réussite du modèle pour la période de mi-avril à mi-septembre.

- **Période de février à mi-avril 2016**

Tel que présenté dans la section 4.4.2.2, par rapport à la première période de validation, le débit moyen traité par les biofiltres pour la période de février à mi-avril 2016 diminue d'environ 25%, tandis que le rapport méthanol/NO_x^- augmente d'environ 15%. De plus, pour cette deuxième période, on observe que les trois files de biofiltres fonctionnent en alternance, ce qui est différent par rapport au mode d'exploitation des biofiltres pour la période d'avril à mi-septembre 2008

La Figure 4.31 montre les résultats de prédiction de la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage pour la deuxième période de validation (de février à mi-avril 2016) et les mesures de la station (somme des nitrites et nitrates mesurés). Tel que montré à la Figure 4.31, pour la période du 14 au 25 février le niveau et les variations de NO_x^- sont en général bien suivis par le modèle. Par contre, pour les jours au début février et entre le 28 février et le 27 mars, la capacité de dénitrification est surestimée par le modèle. Une erreur de prédiction autour de 2-3 mgN/L entre les résultats de simulation et les mesures en sortie de l'étage est observée. Un comportement similaire a également été observé pour les simulations des nitrates et des nitrites en sortie (voir Figures A2.18 et A2.19 dans l'Annexe 2).

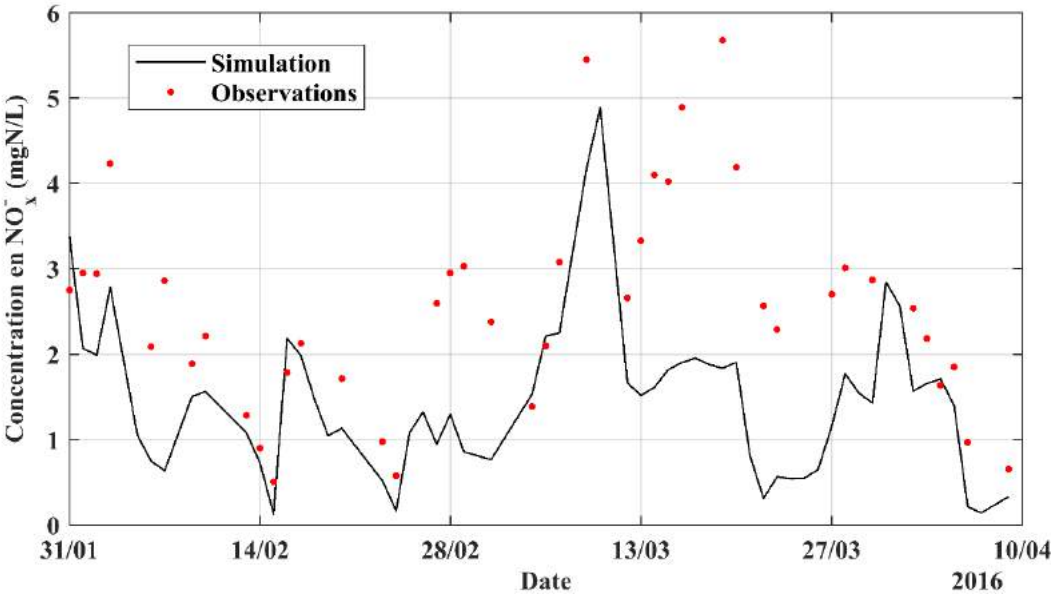


Figure 4.31 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations laboratoire; ligne noire : résultats de simulation).

Comme pour la première période de validation, les résultats de simulation du NO_x^- en sortie sont comparés avec les données de capteur (voir Figure 4.32). Encore une fois, des sous-estimations de la concentration en NO_x^- en sortie ont été observées pour les jours au début de février et entre le 28 février et le 27 mars. Tel que montré à la Figure 4.32, ces surestimations sont présentes principalement lorsqu'il y a des pics de concentration en NO_x^- (> 4mgN/L). En revanche, pour les observations entre 0-4 mgN/L, le modèle est capable de les suivre.

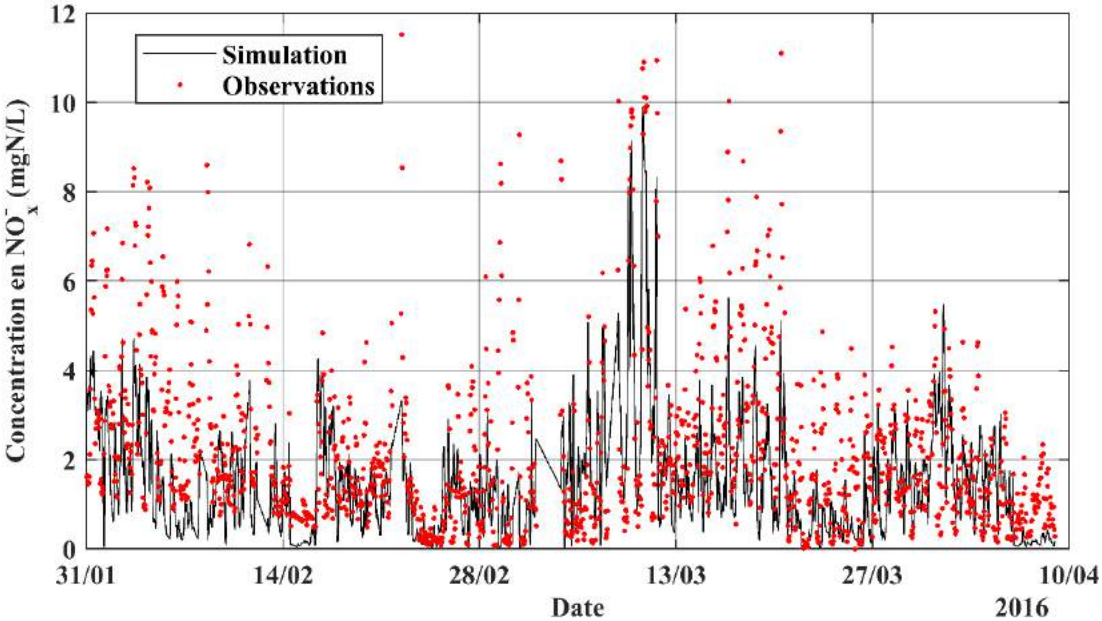


Figure 4.32 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations de capteurs; ligne noire : résultats de simulation).

A cause des surestimations de la capacité de dénitrification, le score ME obtenu pour la concentration en NO_x^- en sortie de la deuxième période de validation est négatif (-0,69 mgN/L, voir Tableau 4.18). Les scores MAE et RMSE obtenus (MAE : 1,22 mgN/L et RMSE : 1,73 mgN/L) pour la prédiction du NO_x^- sont proches de ceux de la première période de validation (MAE : 1,31 mgN/L et RMSE : 1,79 mgN/L). Cependant, comme la concentration moyenne en NO_X^- en sortie de la deuxième période (2,17 mgN/L) est plus faible que celle de la première (4,03 mgN/L), les erreurs relatives de la prédiction sont plus élevées.

Tableau 4.18 Résultats des scores statistiques obtenus pour la deuxième période de validation du modèle en post-dénitrification (de fin-janvier à mi-avril 2016).

Variables	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE	Coefficient de Janus
NO_x^- (mgN/L)	2,17	1537	-0,69	1,22	1,73	0,74
NO_3^- (mgN/L)	0,94	41	-0,50	0,60	0,72	-
NO_2^- (mgN/L)	1,65	41	-0,61	0,68	0,84	-
DCOs (mgO_2/L)	21,21	41	0,89	2,60	3,20	1,05
DCO (mgO_2/L)	21,75	41	2,20	2,90	3,56	0,81
MES (mg/L)	2,37	25	-0,97	1,01	1,41	0,48
PO_4^{3-} (mgP/L)	0,12	41	0,19	0,19	0,23	2,5
NH_4^+ (mgN/L)	0,31	41	0,24	0,24	0,30	1,03

Après avoir comparé en détail les résultats de simulation avec les données de capteurs de chaque file de traitement de l'étage de post-dénitrification, la source des surestimations de l'enlèvement de NO_x^- a été identifiée. Tel que montré à la Figure 4.33a, la concentration en NO_x^- en sortie de la file 1 est en général plus élevée et beaucoup plus variée que celles des files 2 et 3 (voir Figures 4.34b et c).

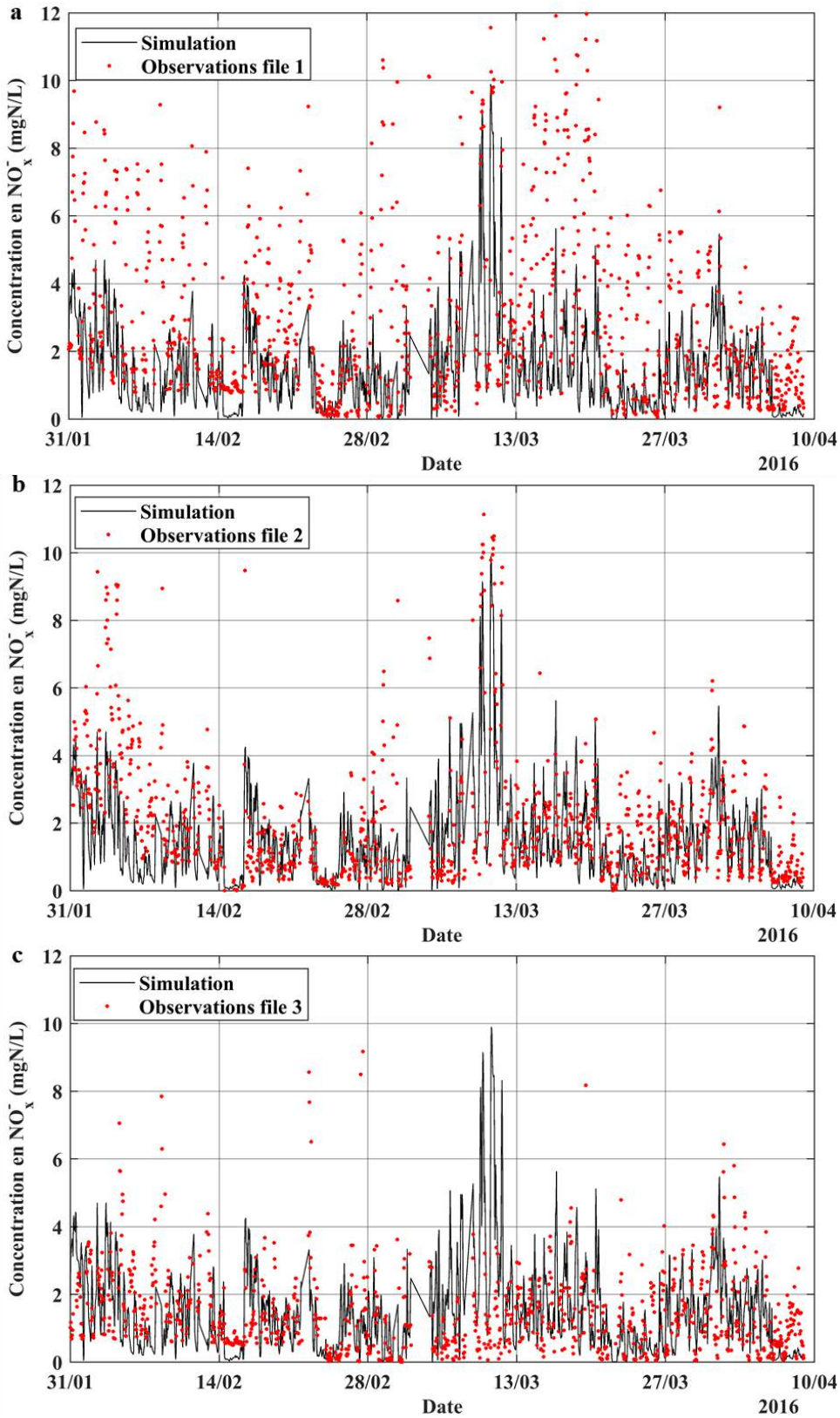


Figure 4.33 Comparaisons entre la simulation de validation de février à mi-avril 2016 avec le NO_x^- en sortie de la file 1(a), 2(b) et 3(c) (points rouges : observations; ligne noire : simulation).

Les pics de NO_x^- observés à la Figure 4.32, qui ne sont pas reproduits par le modèle, sont principalement liés au comportement particulier de la file 1 qui impacte fortement le résultat de

dénitrification de l'étage complet (voir Figure 4.33a). En revanche, tel que montrés aux Figures 4.33b et c, les performances des files 2 et 3, qui se ressemblent, sont en générale bien reproduites par le modèle simulant le comportement global de l'étage.

Les différences entre la simulation de validation et les données de capteurs de NO_x^- en sortie de chaque file sont calculées et résumés au Tableau 4.19. Par rapport à la file 1, les valeurs de MAE et RMSE de la file 2 et 3 sont de 40% à 50% plus faibles. La concentration moyenne en NO_x^- en sortie de la file 1 est d'environ 1-1,5 mgN/L supérieure à celles en sortie des files 2 et 3, représentant 50%-70% de la moyenne des trois files (2,17 mgN/L). Les différences entre les trois files de traitement sont moins évidentes pour la première période de validation, parce qu'elles représentent d'environ 30% de la valeur moyenne des files (autour de 4 mgN/L).

Tableau 4.19 Différences entre les concentrations en NO_x^- en sortie des trois files de traitement et la simulation de validation.

Variables	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE
NO_x^- file 1 (mgN/L)	2,96	1158	-1,45	1,89	2,79
NO_x^- file 2 (mgN/L)	2,00	1131	-0,54	1,12	1,69
NO_x^- file 3 (mgN/L)	1,44	1088	-0,10	1,05	1,54

Selon les données d'opération de la deuxième période de validation, le débit d'eau et le rapport méthanol/NO_x^- utilisé pour la file 1 est similaire aux files 2 et 3. Les pics de concentration en NO_x^- importants observés en sortie de la file 1 ne sont donc pas liés aux différences des conditions d'exploitation des trois files (vitesse de filtration, charge volumique, etc.). Comme la concentration en NO_x^- en sortie de chaque biofiltre post-dénitrifiant n'est pas mesurée sur le site, il est donc difficile à identifier les biofiltres de la file 1 qui produisent les pics de NO_x^- et trouver des explications raisonnables sur le comportement particulier de la file 1. Vu que le modèle représente la performance moyenne des trois files par un seul biofiltre en supposant que les biofiltres soient opérés de manière identique et auraient des performances de dénitrification similaire, il est donc difficile de bien simuler la qualité des eaux en sortie de l'étage lorsque la performance d'une file est très différente par rapport aux deux autres. Comme la concentration en NO_x^- simulée par le modèle est proche de celles en sortie des files 2 et 3, on considère que la performance de prédiction du modèle sur le NO_x^- en sortie est satisfaisante.

La DCO soluble et la DCO totale en sortie sont bien prédites par le modèle (voir Figures A2.20 et A2.21 dans l'Annexe 2). Les scores statistiques de ces deux variables sont autour de 10-15% de la moyenne observée en sortie de l'étage de post-dénitrification (voir le Tableau 4.16). Bien que le rapport méthanol/NO_x^- appliqué pour la deuxième période de validation (2,83 g/gN) soit plus élevé que ceux de la première validation (2,46 g/gN) et de la calibration (2,25-2,45 g/gN), les concentrations moyennes en DCO soluble mesurées en sortie de l'étage de ces trois périodes

sont proches (autour de 21 mgO_2/L). Ceci suggère que le méthanol injecté est tout autant consommé en 2016 que pendant les autres périodes étudiées.

Pour les autres variables en sortie (MES, PO_4^{3-} et NH_4^+), les concentrations observées sont faibles (voir Tableau 4.16) et proches de leur limite de quantification (voir Figures A2.22-24 de l'Annexe 2). Selon le Tableau 4.16, à l'exception du PO_4^{3-}, les coefficients de Janus obtenus sont inférieurs à 2, ce qui indique que le modèle est validé avec succès pour la deuxième période de validation.

4.4.4.5. Paramètres calibrés

Les paramètres ajustés durant la calibration sont résumés au Tableau 4.20. Les autres paramètres du modèle sont restés à leur valeur par défaut. Parmi les paramètres ajustés, les constantes de demi-saturation en DCO soluble biodégradable en anoxie ($K_{SB,OHO,R2-R5}$) et les facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en consommant les différentes formes de l'azote oxydé sont modifiées par rapport à leur valeur par défaut. Le rendement de la biomasse hétérotrophe en anoxie ($Y_{OHO}*\eta_{YOHO,Ax}$) est également réduit de 0,6 à 0,49 gO_2/gO_2. En effet, les valeurs par défaut de ces paramètres sont principalement issues du modèle d'ASM1 (Henze *et al.*, 2000b) et d'ASMN (Hiatt et Grady, 2008), qui considèrent une biomasse hétérotrophe dégradant les matières organiques présentes dans les eaux usées. Par contre, les bactéries méthylotrophes (*Hyphomicrobium* spp), qui sont dominantes dans les biofiltres post-dénitrifiants alimentés avec du méthanol, peuvent avoir un comportement de dénitrification différent de celui considéré par le modèle ASM1 et ASMN. Dans ce cas-ci, les valeurs des paramètres liés aux réactions de dénitrification doivent être modifiées afin de les adapter au comportement de dénitrification de la biomasse méthylotrophe. Les changements de la constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable et le rendement hétérotrophe en anoxie ont été également mentionnées par certaines études de modélisation pour les procédés de dénitrification sur méthanol (Takács *et al.*, 2007; de Barbadillo *et al.*, 2009; Bernier *et al.*, 2014a). Cependant, il est à noter que comme on fait la calibration du modèle sous une condition anoxie, il probable que les méthylotrophes aient aussi un comportement différent des hétérotrophes classiques en aérobie. Dans ce cas-ci, il est probable qu'il faudrait aussi toucher des autres paramètres. En plus des paramètres des réactions biologiques, comme ce qui a été fait en nitrification, les paramètres liés à la filtration des particules (β, λ_0 et y) ont été fortement modifiés durant la calibration.

Tableau 4.20 Paramètres calibrés pour le modèle en post-dénitrification.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur par défaut	Valeur calibrée
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB,OHO,R5}$	gO_2/m^3	40	29,6
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	20	24,6
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	20	28
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	20	10,5
Constante de demi-saturation en DCO particulaire biodégradable pour la vitesse d'hydrolyse	$K_{XCB,hyd}$	gO_2/gO_2	0,03	0,024
Constante de demi-saturation en NO_3^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO3,OHO}$	gN/m^3	0,2	0,4
Constante de semi-saturation en NH_4^+ pour la biomasse hétérotrophe	$K_{NH4,OHO}$	gN/m^3	0,05	0,035
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,333	0,284
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	0,6	0,684
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,15	0,135
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,67	0,72
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,62	0,66
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	6	5,72
Facteur de réduction de la vitesse croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	0,28	0,16
Facteur de réduction de la vitesse croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,16	0,13
Facteur de réduction de la vitesse croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant NO	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,35	0,45
Facteur de réduction de la vitesse croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant N_2O	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5}$	-	0,35	0,40

Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,9	0,72
Fraction de la biomasse transformée en DCO inerte lors de la mort bactérienne	$f_{XUE,bio,lys}$	-	0,08	0,09
Quantité d'azote dans les produits de la mort bactérienne	$i_{N_XBio,lys}$	gN/gO_2	0,06	0,067
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,08	0,079
Taux de réduction du nitrate en ammonium	$q_{NO3_NH4,red}$	1/j	0,08	0,06
Taux d'échange de média pendant le traitement	k_{mix_t}	1/j	2	1,56
Facteur d'empilement du média	β	-	5	1,36
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,945	0,57
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	133600	108582
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	1,88	0,63

4.4.5. Conclusion et perspectives pour les travaux de la modélisation des biofiltres post-dénitrifiants

Le modèle de biofiltration précédemment développé a été utilisé pour simuler le fonctionnement de l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre, avec certaines modifications anticipées selon la littérature. L'ajout de méthanol comme source de carbone a été pris en compte dans le modèle. Une calibration du modèle par simulation Monte-Carlo a été réalisée sur la file 3 de l'étage. Cette dernière était l'objet d'étude sur l'impact du dosage de méthanol injecté sur les nitrates et les nitrites en sortie. Les données récoltées de la période d'étude (environ 50 jours) ont été utilisées pour calibrer le modèle. Le modèle calibré a ensuite été testé pour simuler la performance de traitement de l'étage de post-dénitrification au complet sur deux périodes de validation assez différentes. Certaines données intensives, comme le débit, le dosage de méthanol et les concentrations en NO_x^-, sont inclues dans les jeux de données de calibration et de validation du modèle. Les autres données utilisées sont issues de mesures sur les échantillons composites de 24h.

Le modèle peut en général bien prédire le niveau et les variations de la concentration en NO_x^- en sortie des biofiltres post-dénitrifiants sous différents niveaux de dosage de méthanol. Par contre, tel que montré aux résultats de simulation de la première période de validation, la variation saisonnière des nitrites en sortie d'étage ne peut pas être bien reproduite par le modèle. Ce problème de prédiction est probablement lié à la sensibilité au changement de la température entre les différentes réactions de dénitrification. Une voie d'amélioration du modèle sur ce problème de prédiction a été proposée. Il s'agit d'attribuer les coefficients d'effet de la température aux réactions de dénitrification correspondantes. Pour la deuxième période de validation, les différences entre la simulation et les observations augmentent lorsque les performances de dénitrification entre les files sont très différentes. Les émissions de N_2O lors de la post-dénitrification sont calibrées sur des données issues de la littérature. Tel qu'expliqué précédemment, les résultats obtenus doivent être vérifiés lorsqu'une mesure du N_2O présent dans l'air et dans le liquide en entrée et en sortie des biofiltres post-dénitrification sera disponible. Les coefficients de Janus obtenus pour les deux périodes de validation sont en général inférieurs à 2, ce qui indique une validation réussite du modèle.

Tel que mentionné au début de ce sous-chapitre, le modèle en post-dénitrification sera utilisé pour simuler le procédé de la station Seine Aval (Biofor®). Considérant les différences en termes de dimensionnement des biofiltres post-dénitrifiants de ces deux stations, une vérification de la justesse des simulations devra être faite lorsque les biofiltres de post-dénitrification de la station Seine Aval seront réhabilités, suivi d'une recalibration si nécessaire.

Enfin, le modèle développé peut être utilisé comme un outil pour tester différents modes de commande d'injection de méthanol. Pour réaliser ce genre de test, le modèle doit être capable de bien prédire la concentration en NO_x^- en sortie au pas de temps court en fonction du dosage méthanol utilisé. Cette capacité a déjà été démontré dans ce travail de modélisation.

4.5.Modélisation de la pré-dénitrification par biofiltration

Cette section présente les travaux réalisés sur la modélisation des biofiltres pré-dénitrifiants en utilisant le modèle de biofiltration développé. Tel qu'expliqué au Chapitre 3 sur la stratégie de construction du modèle filière, à cause de problèmes de représentativité des mesures sur les biofiltres pré-dénitrifiants de la station Seine Aval, le travail de modélisation a été réalisé sur le procédé de la station Seine Grésillons (SEG) utilisant des biofiltres de type Biostyr®. La procédure appliquée pour la calibration et la validation du modèle en pré-dénitrification est similaire à celle effectuée pour les modèles en nitrification et en post-dénitrification précédemment présentée.

4.5.1. Description de la station et du procédé modélisé

La station Seine Grésillons (SEG) est située à Triel-sur-Seine, dans le département des Yvelines (78). Cette station a une capacité de traitement de 300 000 m³/j correspondant à un équivalent-habitant d'environ 1,2 millions de personnes. Les eaux usées en entrée de la station passent d'abord par un dégrillage suivi d'un dessablage-déshuilage. Les eaux prétraitées sont envoyées vers les six décanteurs lamellaires physico-chimiques de types Delreb® (Saur). Du $FeCl_3$ et du polymère sont utilisés pour réaliser la coagulation et la floculation. Les eaux décantées sont ensuite traitées par deux files de traitement en parallèle (SEG1 et SEG2). Chacune est composée de 3 étages de biofiltration qui sont en configuration « DAM-AV » (Dénitrification en amont et en aval) (voir Figure 4.34). Enfin, avant d'être rejetées dans la Seine, les eaux en sortie des deux files de biofiltration peuvent être traitées par quatre clarificateurs (Delreb®) afin de réaliser une déphosphatation tertiaire. Cette étape facultative est réalisée uniquement en été en temps normal.

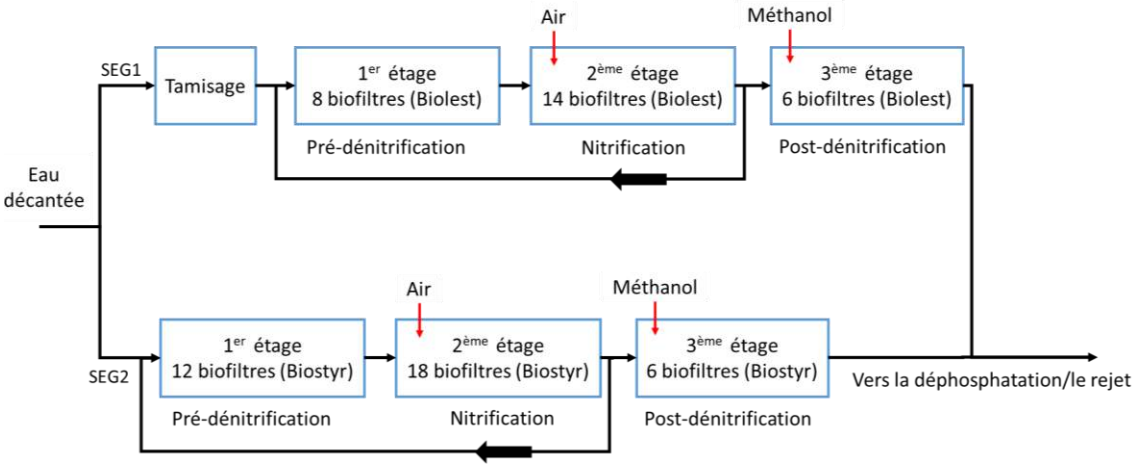


Figure 4.34 Configurations de traitement des files SEG1 et SEG2 de la station Seine Grésillons.

Environ 70% des eaux décantées sont traitées par la file SEG2 en utilisant uniquement des biofiltres de type Biostyr® (voir Figure 4.34). L'étage de pré-dénitrification de cette file, qui est l'objet de la modélisation, possède 12 biofiltres. Le lit de garnissage de chaque biofiltre possède

une surface de 173 m^2 et une hauteur de 3,5 m (soit un volume d'environ 605 m^3). Le média des biofiltres est fabriqué en polystyrène avec un diamètre de 4,5 mm. La pré-dénitrification de la file SEG2 est réalisée sans injection de carbone exogène. Le débit d'eau nitrifiée recirculée vers l'étage de pré-dénitrification représente environ 40-50% de l'eau décantée en entrée de l'étage.

4.5.2. Description des jeux de données et du mode de fractionnement utilisés

4.5.2.1. Jeux de données pour la calibration et la validation du modèle

La période choisie pour la calibration-validation du modèle en pré-dénitrification était de février 2015 à la fin janvier 2016. Suite à des échanges avec les exploitants du SIAAP sur le fonctionnement de la station, c'est la période la plus récente possible où le débit traité par Seine Grésillons correspond à sa capacité nominale (environ 300 000 m^3/j) et le fonctionnement de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 est « normal ». Le plan initial pour ce travail de modélisation était de calibrer le modèle sur la période de février à la fin d'août 2015 (7 mois) et ensuite le valider en utilisant les données des cinq mois suivants. Cependant, comme il y avait des soucis sur certaines données de mesure issues de la station de février à la fin de mai 2015, la période de calibration a été raccourcie par rapport au plan initial. Elle a seulement inclus les jours de juin à la fin d'août 2015 (90 jours au total).

Comme la qualité de l'eau en entrée de l'étage (mélange des eaux décantées et nitrifiées) n'est pas directement mesurée, les valeurs journalières de débits et de concentrations pour les eaux décantées et nitrifiées sont récoltées pour calculer la moyenne pondérée des concentrations en polluants en entrée de pré-dénitrification. Les données de concentration récupérées sont issues des mesures au laboratoire sur des échantillons composites 24 heures prélevés, et incluent la DCO, la DCO filtrée, la DBO_5, les MES, le NH_4^+, le NO_3^-, le NO_2^-, les orthophosphates et l'alcalinité. En plus de ces données, la température des eaux en sortie de l'étage de pré-dénitrification ainsi que le nombre de biofiltres actifs sont également récoltés sur une base journalière. Le Tableau 4.21 résume les conditions d'exploitation principales de l'étage pour la période de calibration.

La validation du modèle, qui n'est pas modifiée par rapport au plan initial illustré au début de la section 4.5.2.1, est réalisée sur une période de 150 jours de septembre 2015 à la fin de janvier 2016. Les types de données récoltées pour établir les jeux de données de validation du modèle sont identiques à ceux de la calibration. Les conditions d'exploitation principales de la période de validation sont résumées au Tableau 4.22. Par rapport à la calibration, le débit moyen traité par les biofiltres pré-dénitrifiants de la période de validation augmente d'environ 15%, à cause de l'augmentation du taux de recirculation de l'eau nitrifiée de 40% à 47% (voir Tableaux 4.21

et 4.22). Ce changement du taux de recirculation fait aussi augmenter la concentration en NO_x^- en entrée. Bien que la charge en NO_x^- de la période de validation augmente, le rapport DBO_5/NO_x^- de cette période (3,8 mgO_2/mgN) est plus élevé qu'en calibration (3,2 mgO_2/mgN). Ceci indique que la biodégradabilité de l'eau en entrée de l'étage est légèrement supérieure pour la période de validation.

Tableau 4.21 Conditions d'exploitation principales de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 pour la période de calibration (juin à fin-août 2015).

Conditions d'exploitation	N	Moyenne	Ecart-type
Débit moyen par filtre (m^3/j)	91	28900	4559
NO_3^- en entrée (mgN/L)	67	7,27	0,70
NO_2^- en entrée (mgN/L)	67	0,56	0,18
DCO (mgO_2/L)	67	82,5	22,2
DBO_5 (mgO_2/L)	68	25,3	8,5
Rapport DCO/NO_x^- (mgO_2/mgN)	67	10,6	2,8
Rapport DBO_5/NO_x^- (mgO_2/mgN)	67	3,2	1,10
Taux de recirculation de l'eau nitrifiée (%)	91	40,3	8,9
Température (°C)	66	18,0	2,7

Tableau 4.22 Conditions d'exploitation principales de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 pour la période de validation (septembre 2015 à fin-janvier 2016).

Conditions d'exploitation	N	Moyenne	Ecart-type
Débit moyen par filtre (m^3/j)	150	32903	2401
NO_3^- en entrée (mgN/L)	103	8,34	0,89
NO_2^- en entrée (mgN/L)	103	0,49	0,15
DCO (mgO_2/L)	103	94,4	14,8
DBO_5 (mgO_2/L)	105	33,3	5,9
Rapport DCO/NO_x^- (mgO_2/mgN)	103	10,7	1,3
Rapport DBO_5/NO_x^- (mgO_2/mgN)	103	3,8	0,55
Taux de recirculation de l'eau nitrifiée (%)	150	47,3	10,9
Température (°C)	104	17,3	2,3

4.5.2.2. Modèle de fractionnement utilisé

Le modèle de fractionnement de la DCO à l'affluent du modèle en pré-dénitrification est similaire à celui du modèle en post-dénitrification précédemment présenté (voir Figure 4.20). Les valeurs des paramètres de fractionnement sont fixées selon les considérations suivantes :

1) Comme l'eau en entrée de l'étage de pré-dénitrification est le mélange de l'eau décantée et l'eau nitrifiée recirculée, le fractionnement de la DCO de ces deux types d'eau est d'abord réalisé. Le fractionnement de l'eau décantée est basé sur l'étude de Bachis *et al.* (2015) sur le fractionnement de l'eau brute avant et après le

traitement CEPT, condition similaire à la station Seine Grésillons. La fraction de la DCO soluble biodégradable (S_B) dans la DCO soluble de l'eau décantée est fixée à 68% (fraction S_U=32%), tandis que la DCO particulaire biodégradable (X_{CB}) représente 72% de la DCO particulaire (fraction X_U=28%, sans considérant la fraction de la biomasse). Comme il n'y pas de mesure ni valeur de référence disponible sur le fractionnement de l'eau nitrifiée en sortie de biofiltration, l'eau en sortie de la nitrification est considérée non-biodégradable. Dans ce cas-ci, la fraction de S_B dans la DCO soluble de l'eau nitrifiée est fixée à 0% (fraction S_U=100%). De même, la fraction de X_{CB} dans la DCO particulaire est considérée comme nulle (fraction X_U=100%). Il est à noter que selon le modèle pour la nitrification en biofiltration, la X_{CB} en sortie simulée est d'environ 3-5 mg/L (50% de la DCO particulaire en sortie). Ce faible niveau de X_{CB} présente dans l'eau nitrifiée a un effet mineur pour la pré-dénitrification.

2) Avec le fractionnement de la DCO déterminé pour l'eau décantée et l'eau nitrifiée, le fractionnement pour l'affluent de l'étage de pré-dénitrification est calculé à partir des valeurs moyennes de la DCO et la DCO soluble mesurées pour ces deux types de l'eau ainsi que le taux de recirculation effectué à la station (autour de 44%).
3) La valeur f_{SB_DCOs} est fixée à 60% selon les résultats de calcul (voir Tableau 4.23). Les fractions de X_{CB} (f_{XCB_DCOx}) et de X_U dans la DCO particulaire dans l'affluent de l'étage obtenues par le calcul sont de 70% et de 30%, respectivement. Ces deux fractions sont légèrement ajustées afin de prendre en compte la présence de la biomasse dans les particules en entrée. Tel que montré au Tableau 4.23, la valeur de f_{XCB_DCOx} est fixée à 65%, tandis que celle de $f_{Biomasse_DCOx}$ utilisée est de 10%.
4) Enfin, 10% de la DCO inerte dans l'affluent est supposée d'origine de la mortalité de biomasse.

Tableau 4.23 Valeurs de paramètres du fractionnement de la DCO en entrée pour le modèle en pré-dénitrification.

Paramètres de fractionnement	Symbole	Valeur
Fraction de la DCO soluble biodégradable dans la DCO soluble en entrée	f_{SB_DCOs}	60%
Fraction de la DCO particulaire biodégradable dans la DCO particulaire en entrée	f_{XCB_DCOx}	65%
Fraction de la biomasse dans la DCO particulaire en entrée	$f_{Biomasse_DCOx}$	10%
Fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	$f_{XOHO_Biomasse}$	90%
Fraction de la biomasse AOB dans la biomasse autotrophe	f_{AOB_XBA}	50%
Fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particule inerte en entrée	$f_{XU,E_DCOinerte}$	10%

Le fractionnement des composants d'azote biodégradable ($X_{CB,N}$ et $S_{B,N}$) du modèle est également réalisé de manière similaire au modèle en post-dénitrification. La concentration en NH_2OH en entrée, qui ne participe pas aux réactions de dénitrification, considérées par le modèle, est fixée à 0,008 mgN/L. Afin d'estimer le N_2O en entrée de pré-dénitrification, la concentration en sortie de décantation primaire est d'abord fixée à 0 mgN/L en supposant que le prétraitement et la décantation primaire ne produisent pas de N_2O (Kampschreur *et al.*, 2009). La valeur en sortie de l'étage de nitrification est estimée à partir de la quantité d'ammonium nitrifié (Bollon *et al.*, 2016b). Le flux d'ammonium journalier est multiplié par un facteur de production constant (2,65%) afin de décider le flux du N_2O en sortie de l'étage de nitrification. La concentration en N_2O estimée en entrée de l'étage de pré-dénitrification est autour de 0,1 mgN/L (moyenne : 0,13±0,03 mgN/L, N=240). Enfin, la concentration en NO en entrée de l'étage, qui n'est pas mesurée, est fixée à une valeur faible (0,002 mgN/L).

4.5.3. Calibration et validation du modèle en pré-dénitrification

Huit variables concernant la qualité de l'eau en sortie de l'étage de pré-dénitrification sont choisies pour la calibration : NO_3^-, NO_2^-, DCO, DCO soluble, MES, NH_4^+, NTK et PO_4^{3-}. Comme ce qui a été fait pour le modèle en post-dénitrification, la concentration en MES en sortie est estimée à partir de la DCO particulaire simulée. Le N_2O en sortie de traitement n'est pas retenu pour la calibration. En effet, aucune mesure de référence faite au SIAAP ou sur ce genre de procédé ailleurs, n'a pu être trouvée.

4.5.3.1. Analyse de sensibilité globale

Comme ce qui a été fait précédemment, une analyse de sensibilité globale par simulation Monte-Carlo a été réalisée. Les paramètres choisis pour l'analyse (N=52) sont identiques à ceux retenus en post-dénitrification (voir Tableau A2.14 dans l'Annexe A2), à une exception près. En effet, en pré-dénitrification, la concentration en ammonium est suffisamment élevée pour ne pas limiter les réactions biologiques. La réduction des nitrates en ammonium n'est donc pas considérée dans le modèle en pré-dénitrification (en fixant le taux de réduction à 0 j^{-1}). Comme ce qui a été fait pour les modèles en nitrification et en post-dénitrification, le nombre de combinaisons LHS (N=270) sur l'espace de paramètres est supérieur à 5 fois le nombre de paramètres (N=52) choisis. Les Figure 4.35a et b montrent les résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables en NO_2^- et en NO_3^- en sortie.

En raison des similarités sur la nature du traitement en pré-dénitrification et en post-dénitrification, la plupart des paramètres influents identifiés par l'analyse de sensibilité globale du modèle pour le NO_3^- et le NO_2^- en sortie sont similaires à ceux trouvés par celle effectuée pour le modèle en post-dénitrification. Quelques exceptions sont à noter. D'abord, le taux d'hydrolyse de la DCO biodégradable particulaire ($q_{XCB_SB,hyd}$), non-retenu en post-dénitrification, est identifié comme un paramètre influent (coefficient de régression absolu > 0,1) pour les deux variables. La même chose est observée pour les paramètres liés à la dégradation du NO pour le NO_2^- en sortie. Il s'agit de la constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie ($K_{NO,\ OHO}$), de la constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie ($K_{I,NO,OHO,R4}$) et du facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant NO ($\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$).

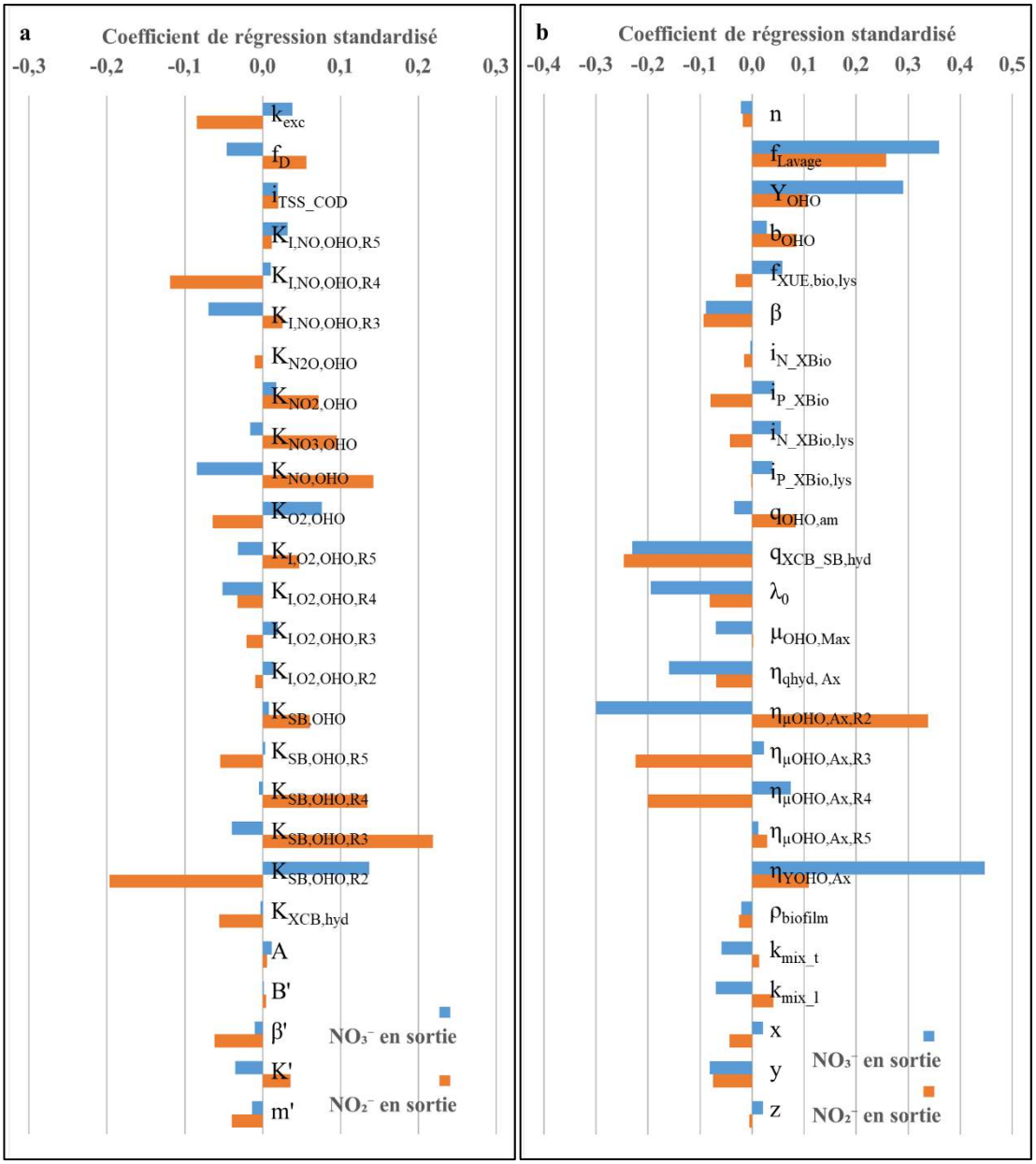


Figure 4.35 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables NO_3^- et NO_2^- en sortie du modèle en pré-dénitrification. (Colonnes bleues : NO_3^- en sortie ; colonnes oranges : NO_2^- en sortie).

Ces différences sont liées aux conditions d'exploitation de ces deux procédés modélisés. Premièrement, pour l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre, l'affluent (eau nitrifiée) est très peu biodégradable (DBO_5 inférieure à 5 mgO_2/L) et contient très peu de particules (MES autour de 10 mg/L). La dénitrification de cet étage est donc influencée principalement par la quantité de méthanol injecté. Dans ce cas-ci, l'hydrolyse de la DCO particulaire biodégradable n'influence pas beaucoup les sorties du modèle. En revanche, l'étage de pré-dénitrification utilise principalement la DCO biodégradable (S_B et X_{CB}) présente dans l'eau décantée comme source de carbone. Le fractionnement de la DCO de l'affluent utilisé produit une concentration estimée en S_B autour de 25-30 mgO_2/L, ce qui est plus faible que

celle en entrée de post-dénitrification après l'injection du méthanol (autour de 90 mgO_2/L). En revanche, la concentration estimée en DCO biodégradable particulaire (X_{CB} autour de 30-40 mgO_2/L) est plus élevée que celle en entrée des biofiltres post-dénitrifiants (autour de 2 mgO_2/L). La performance de la dénitrification dépend donc non-seulement de la concentration en S_B présent dans l'affluent, mais aussi de la capacité d'hydrolyse de la X_{CB} filtrée.

Deuxièmement, étant donné la faible concentration en S_B, la vitesse de dégradation du NO peut être limitée dans le modèle en pré-dénitrification (la valeur par défaut du $K_{SB,OHO,R4}$ est de 20 mgO_2/L). Selon les réactions de la dénitrification hétérotrophe utilisées, qui sont issues du modèle proposé par Hiatt et Grady (2008), le NO a un effet inhibiteur sur la dégradation du NO_2^- (voir Tableaux A2.5 et A2.6). Dans ce cas-ci, en modifiant les valeurs des paramètres liés à la dénitrification du NO en anoxie ($K_{NO,\ OHO}$, $K_{I,NO,OHO,R4}$ et $\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$), l'importance de son effet d'inhibition sur la dégradation du NO_2^- dans le modèle peut également être affectée.

Les résultats obtenus pour les autres variables en sortie et les coefficients de détermination correspondants sont fournis à l'Annexe 2 (voir les Figures A2.25-A2.28). La plupart des coefficients de détermination obtenus sont supérieurs à 0,8 (voir Tableau A2.15).

4.5.3.2. Calibration et validation du modèle en pré-dénitrification par simulation Monte-Carlo

En fonction des résultats de l'analyse de sensibilité et des connaissances sur le modèle développé, les variables à calibrer sont divisées en deux groupes de calibration indépendants. Le premier groupe sert à calibrer l'enlèvement des nitrates et des nitrites et la filtration. En considérant que la performance de dénitrification influence aussi la DCO en sortie de l'étage, en plus du NO_3^-, du NO_2^- et des MES, ce groupe comprend également les variables de la DCO et de la DCO soluble. Le deuxième groupe se concentre sur la calibration de l'assimilation de l'azote et du phosphore. Les variables en sortie NH_4^+, NTK et PO_4^{3-} sont inclues dans ce deuxième groupe. Les Tableaux A2.16 et A2.17 dans l'Annexe 2 résument respectivement les paramètres pris en compte par ces deux groupes de calibration ainsi que les coefficients de régression correspondants obtenus par l'analyse de sensibilité globale précédemment présentée.

La calibration commence par le premier groupe avec les données issues de la période de juin à fin-août de l'année 2015. Comme pour la calibration du modèle en nitrification et en post-dénitrification, une simulation Monte-Carlo est réalisée successivement pour ces deux groupes. Pour chaque groupe, le nombre d'échantillonnages LHS réalisé est autour de 5 fois le nombre de paramètres du groupe. Pour le premier groupe 120 simulations ont été effectuées (22 paramètres), tandis que 15 simulations ont été faites pour le deuxième groupe (3 paramètres). Les résultats de simulation sont comparés avec les observations en sortie de l'étage de pré-

dénitrification. Encore une fois, les scores statistiques ME, MAE et RMSE sont calculés pour aider à identifier la meilleure combinaison des valeurs de paramètres. Les valeurs de paramètres identifiées sont ensuite ajustées manuellement au besoin afin d'améliorer la performance de prédiction du modèle. Après la calibration, le modèle calibré est validé avec les données de la période de septembre 2015 à la fin de janvier 2016. Les scores statistiques sont également calculés.

4.5.3.3. Résultats de calibration

La Figure 4.36 montre les résultats de calibration du modèle sur la concentration en NO_3^- en sortie de l'étage de pré-dénitrification. Tel que montré à cette figure, le niveau du NO_3^- en sortie simulé correspond en moyenne à celui observé à l'étage de pré-dénitrification. Cependant, la plupart des variations observées ne sont pas bien reproduites par le modèle, par exemple les jours au début du mois de juillet et ceux au début d'août. Ces déviations font augmenter les scores MAE (0,95 mgN/L) et RMSE (1,15 mgN/L) par rapport au ME obtenu (-0,1 mN/L) (voir Tableau 4.24).

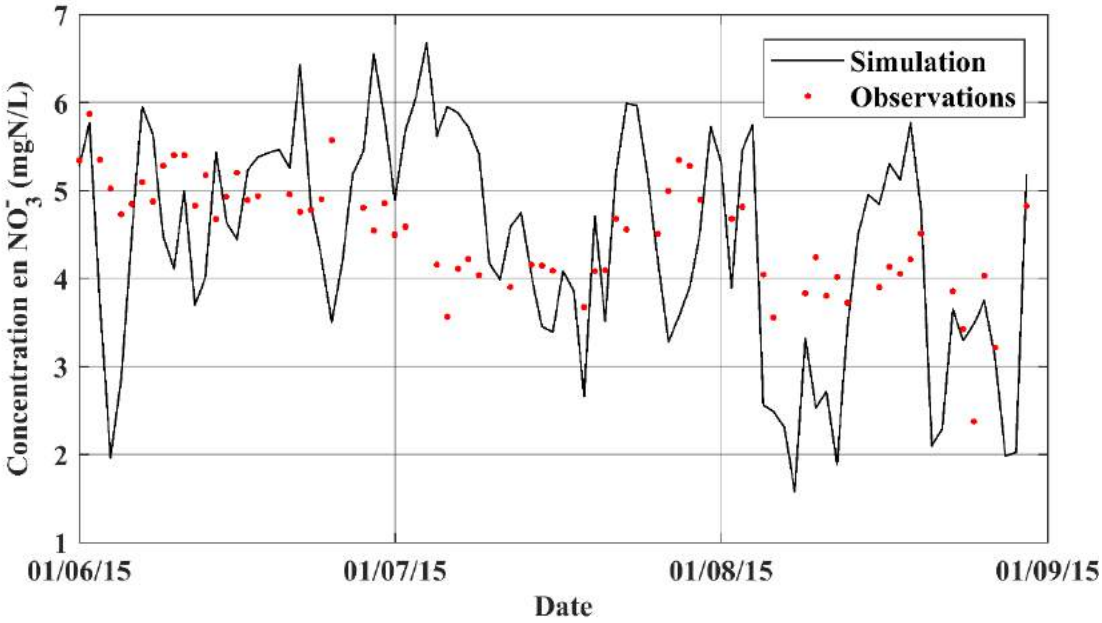


Figure 4.36 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NO_3^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Tel que mentionné précédemment, comme il n'y a pas de méthanol injecté sur l'étage de la station Seine Grésillons, la performance de dénitrification des biofiltres dépend de la concentration en DCO biodégradable (soluble et particulaire) en entrée de l'étage. Dans le modèle, la concentration en S_B et en X_{CB} sont estimées à partir du fractionnement considéré pour la DCO en entrée de l'étage (mélange de l'eau décantée et de l'eau nitrifiée). Sans analyse du fractionnement de l'eau décantée et de l'eau nitrifiée quotidiens, les estimations de la concentration de ces deux variables en entrée du modèle ne sont peut-être pas assez précises. En effet, la fraction de la DCO qui est biodégradable en entrée de l'étage peut être différente d'un jour à l'autre, tandis que le fractionnement utilise des fractions fixées à cause du manque des caractérisations fréquentes. De plus, pour les jours où la mesure de la DCO filtrée n'est pas disponible, la DCO soluble en entrée est estimée à partir de la DCO totale et du ratio moyen DCO filtrée/DCO totale observé (0,52 ± 0,08), ce qui aggrave l'imprécision sur l'estimation la DCO biodégradable en entrée de l'étage. En plus du fractionnement de la DCO, les incertitudes

de mesure sur site de la DCO sont élevées (25% pour la DCO supérieure à 60 mgO_2/L et 50% pour la gamme entre 40-60 mgO_2/L). Selon les coefficients stœchiométriques appliqués par le modèle, pour réduire 1 mgN/L de nitrate en diazote, environ 8,5 gO_2/L de S_B est demandée, ce qui est plus faible que les incertitudes des mesures de la DCO. Toutes ces imprécisions et incertitudes sur les estimations des composants biodégradables peuvent donc influencer la performance de prédiction de la concentration en NO_3^- en sortie de l'étage.

Tableau 4.24 Résultats des scores statistiques obtenus pour la calibration du modèle en pré-dénitrification (de juin à fin-août 2015, 90 jours).

Variables	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE
NO_3^- (mgN/L)	4,53	65	-0,10	0,95	1,15
NO_2^- (mgN/L)	0,25	65	0,04	0,06	0,07
DCO (mgO_2/L)	35,88	65	-0,21	8,90	12,16
DCOs (mgO_2/L)	25,69	65	-1,08	6,46	8,22
MES (mg/L)	8,40	65	0,45	3,15	4,34
PO_4^{3-} (mgP/L)	0,74	65	0,07	0,07	0,08
NTK (mgN/L)	17,08	65	1,20	1,35	1,63
NH_4^+ (mgN/L)	15,53	65	0,56	0,94	1,23

Tel que montré à la Figure 4.37, pour les jours entre juin et mi-juillet, le niveau des nitrites en sortie est surestimé d'environ 0,05-0,1 mgN/L. En revanche, le niveau du NO_2^- en sortie prédit par le modèle pour la deuxième moitié de la période de calibration (de mi-juillet à fin d'août) est plutôt correcte. Tel que résumé au Tableau 4.24, les scores statistiques obtenus sur cette variable en sortie pour la période de calibration représentent environ 15-25% de la concentration moyenne observée (0,25 mgN/L).

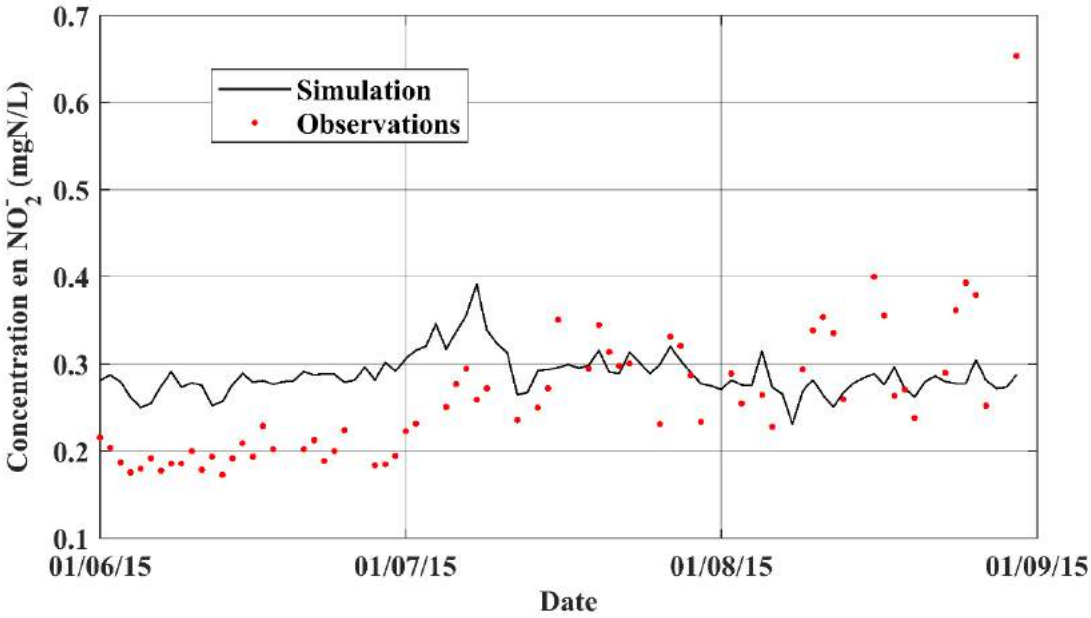


Figure 4.37 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NO_2^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

La valeur identifiée par calibration pour la constante de demi-saturation du NO_2^- pour la croissance de la biomasse hétérotrophe en anoxie à partir du NO_2^- ($K_{NO2,OHO}$) est de 0,2 mgN/L, ce qui correspond à la valeur par défaut (Hiatt et Grady, 2008). Tel que montré à la figure, la concentration en nitrite mesurée est proche cette valeur. Pendant la calibration, l'impact du paramètre $K_{NO2,OHO}$ sur la prédiction des nitrites en sortie a été vérifié. Tel que montré à la Figure 4.38, en réduisant la valeur $K_{NO2,OHO}$ de 0.2 à 0.16 mgN/L, le modèle peut bien prédire le niveau du NO_2^- en sortie de juin à mi-juillet 2015. Cependant, pour le reste de la période, la concentration en nitrite est sous-estimée. La situation inverse est observée quand la valeur de $K_{NO2,OHO}$ est augmentée. Plusieurs essais d'ajustements ont été faits pour améliorer la prédiction du NO_2^-, mais il n'était pas possible de trouver une bonne combinaison de valeurs de paramètres qui permet de bien reproduire le changement du niveau de nitrite au début de juillet. Les informations d'exploitation disponibles sur l'étage de pré-dénitrification ne permettent toutefois pas d'expliquer cette variation du NO_2^- en sortie.

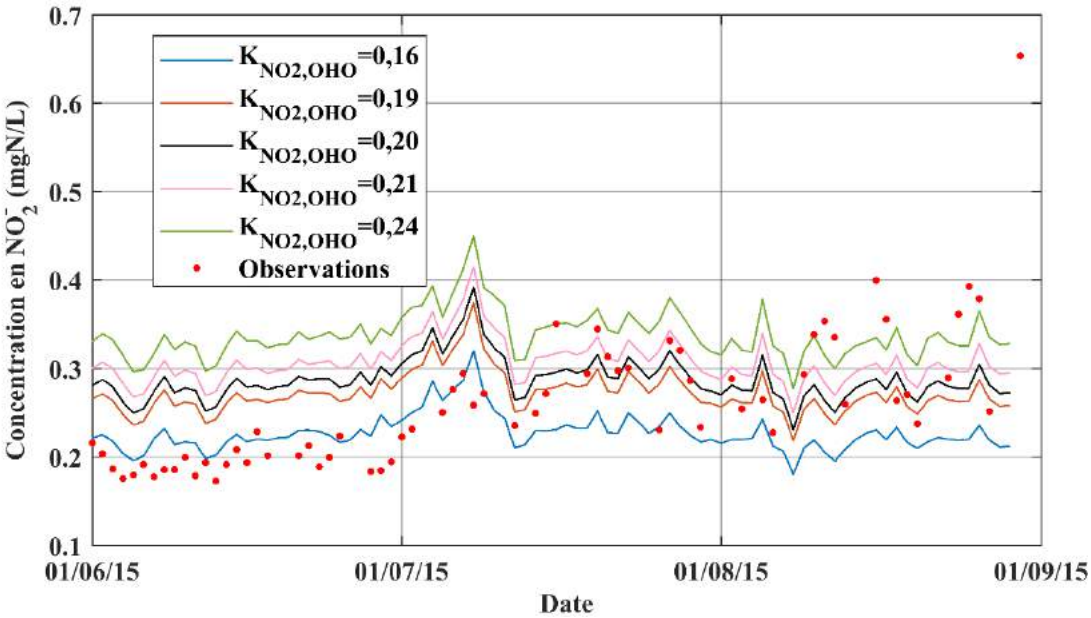


Figure 4.38 Résultats de simulation obtenus avec différentes valeurs du paramètre $K_{NO2,OHO}$ (lignes : simulations; points rouges: observations).

Tel que montré à la Figure 4.39, le niveau moyen de la concentration en DCO observée en sortie de l'étage de pré-dénitrification est bien prédit par le modèle. Les erreurs de prédiction se trouvent principalement à la fin de juillet et le début d'août 2015.

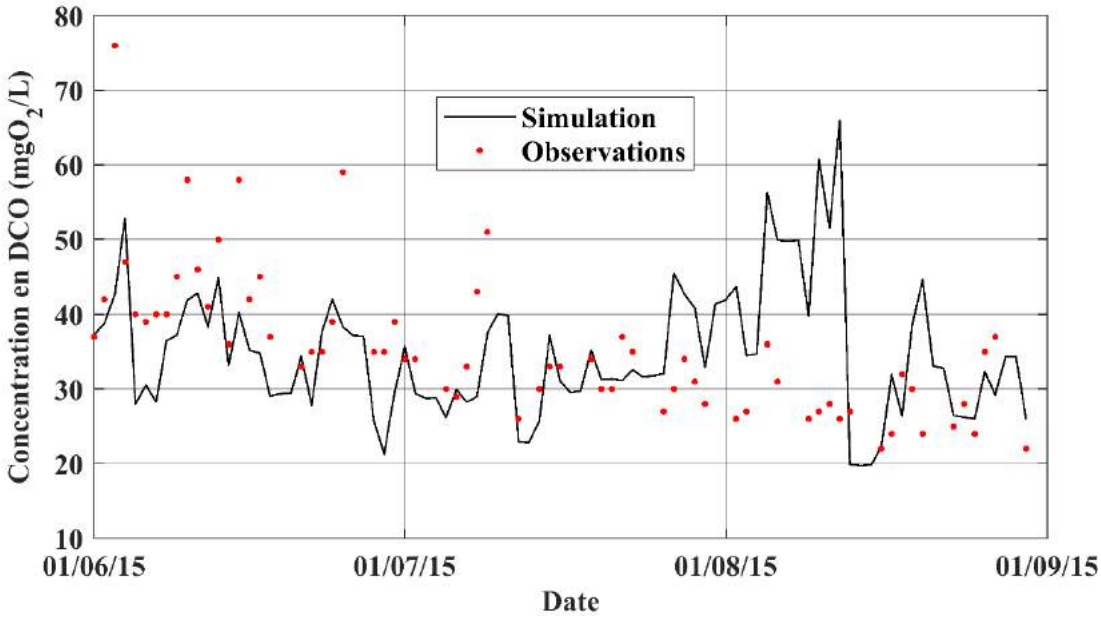


Figure 4.39 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en DCO en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Ces erreurs sont liées à la surestimation de la DCO soluble en sortie pour ces jours (voir Figure 4.40). Pour cette période, la DCO en entrée de l'étage de pré-dénitrification est élevée (autour de 130-140 mgO_2/L), ce qui fait augmenter la concentration en DCO soluble en entrée estimée pour certains jours où la DCO filtrée en entrée de l'étage n'a pas été mesurée (autour de 50-70 mgO_2/L). Cependant, il est possible que la concentration en DCO soluble réelle de ces jours soit plus faible que celle estimée. De plus, la concentration en DCO biodégradable particulaire (X_{CB}) présente dans l'affluent de ces jours peut aussi être surestimée. Dans ce cas-ci, le modèle prédit que la DCO biodégradable soluble issue de l'hydrolyse de X_{CB} n'est pas toute consommée par la biomasse et sort de l'étage de pré-dénitrification. Ces surestimations peuvent donc conduire à la surestimation de la DCO soluble et totale en sortie. Elles causent aussi des sous-estimations des nitrates en sortie de l'étage pour cette période (voir Figure 4.36). Les scores ME obtenus pour la prédiction de la DCO et la DCO soluble sont proches de 0 (voir Tableau 4.24), tandis que le MAE et RMSE sont autour de 25-35% des valeurs moyennes observées en sortie de l'étage. Ces scores sont proches de l'incertitude de mesure de la DCO en laboratoire (35% pour la gamme 6-40 mgO_2/L) pour le site.

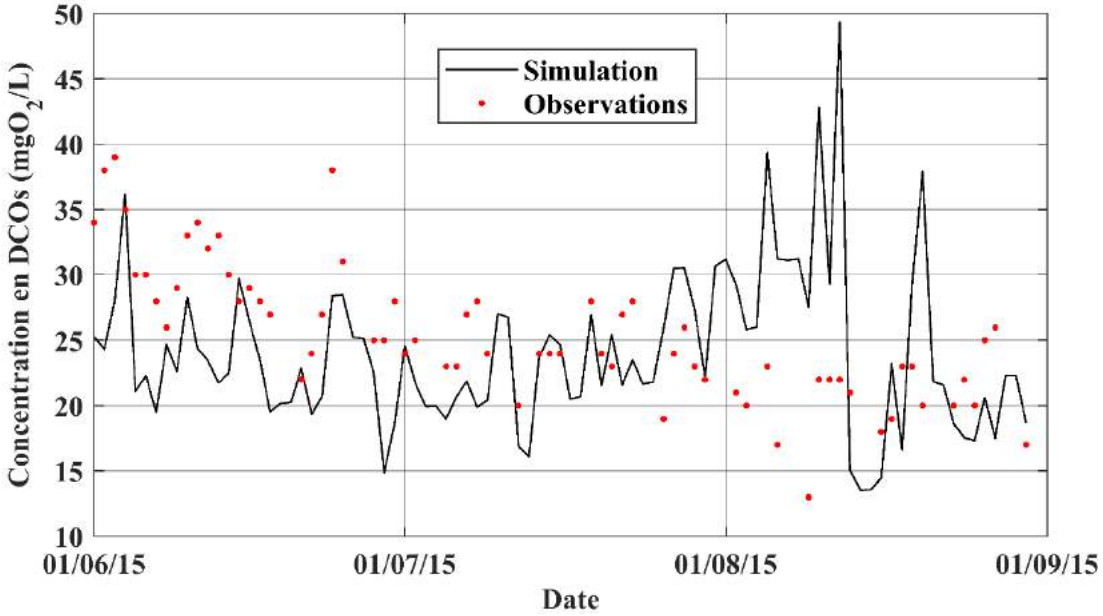


Figure 4.40 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en DCO soluble en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Le niveau des MES simulé en sortie de l'étage correspond à celui observé à la station (voir Figure 4.41). Le score ME obtenu est proche de 0 mg/L (0,45 mg/L) (voir Tableau 4.24). Le MAE (3,15 mg/L) et le RMSE (4,34 mg/L) obtenus pour cette variable sont relativement élevés par rapport à la moyenne observée (8,40 mg/L). Cependant, tel qu'expliqué lors de la discussion des résultats obtenus du modèle en post-dénitrification, l'incertitude de mesure de la concentration en MES sur site est élevée (50%) pour la gamme de MES entre 2 et 6 mg/L.

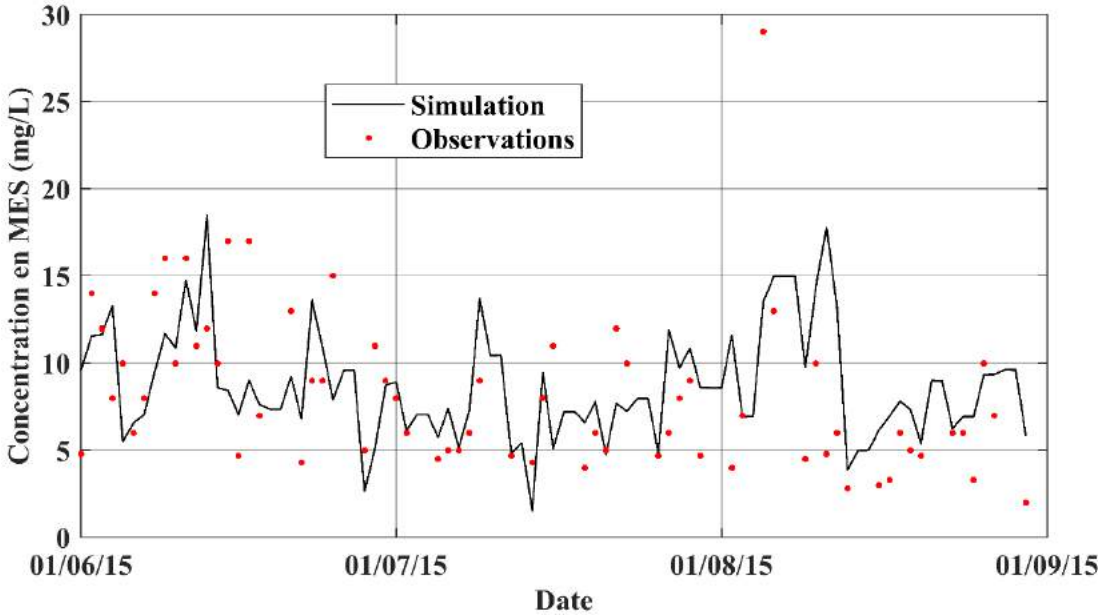


Figure 4.41 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en MES en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Concernant la simulation de la consommation des orthophosphates, du NH_4^+ et du NTK lors de la pré-dénitrification, tel que montré à la Figure 4.42, l'augmentation des PO_4^{3-} au début de la période de calibration et la baisse à la fin d'août sont bien simulées. La variation en sortie du mois de juillet 2015 est aussi bien prédite par le modèle, mais le niveau est légèrement sous-estimé d'environ 0,1 mgP/L.

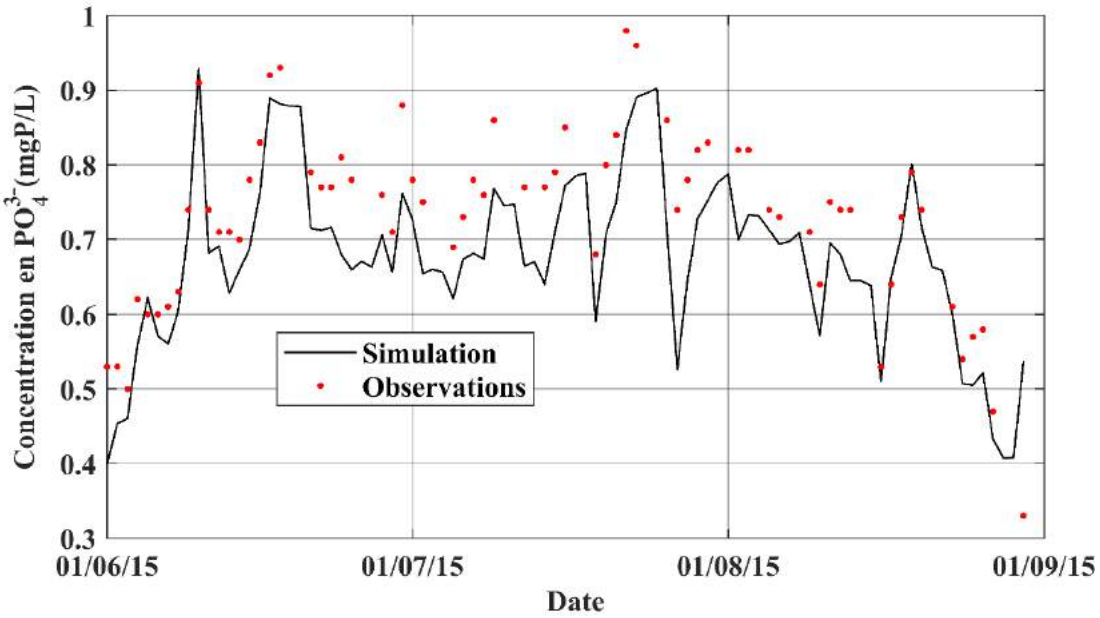


Figure 4.42 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en PO_4^{3-} en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

La concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de pré-dénitrification est également bien prédite par le modèle (voir Figure 4.43). L'évolution décroissante du NH_4^+ pendant les deux premiers mois de la période de calibration est bien simulé par le modèle calibré. On remarque aussi que la dynamique journalière du NH_4^+ est bien représentée par le modèle. De plus, comme l'ammonium (moyenne observée : 15,53 mgN/L) représente une grande portion du NTK en sortie (moyenne observée 17,08 mgN/L) de l'étage, les résultats obtenus sur la prédiction de la concentration en NTK en sortie correspondent aux observations de la station (voir Figure A2.29 dans l'Annexe 2).

Tous les scores statistiques obtenus pour les variables en sortie liées à la consommation du PO_4^{3-}, du NH_4^+ et du NTK lors de la pré-dénitrification (Tableau 4.24) sont autour de 5-10% des valeurs moyennes observées, ce qui signifient de bonnes performances de prédiction du modèle pour ces trois variables de sortie.

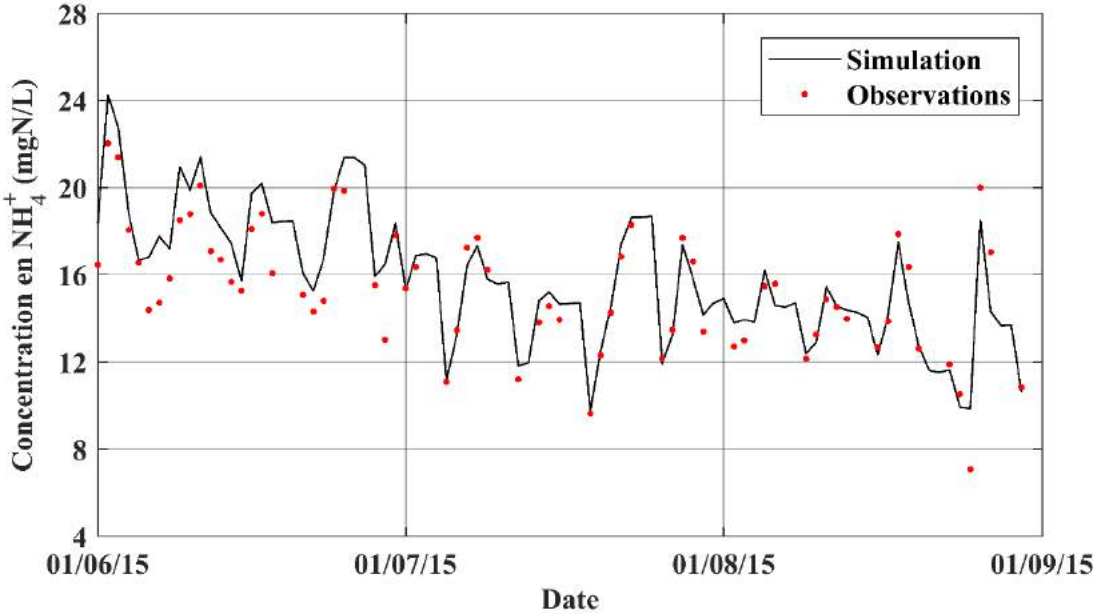


Figure 4.43 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NH_4^+ en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

4.5.3.4. Résultats de validation

La Figure 4.44 montre la concentration en NO_3^- simulée en sortie de l'étage pour la période de validation. Pour les deux premiers mois de la période de validation (septembre et octobre 2015), la capacité de dénitrification de l'étage est sous-estimée par rapport aux observations. En revanche, pour la période de novembre 2015 à fin-janvier 2016, le niveau prédit pour la concentration en NO_3^- est plutôt correct, mais les résultats oscillent trop autour des valeurs observées.

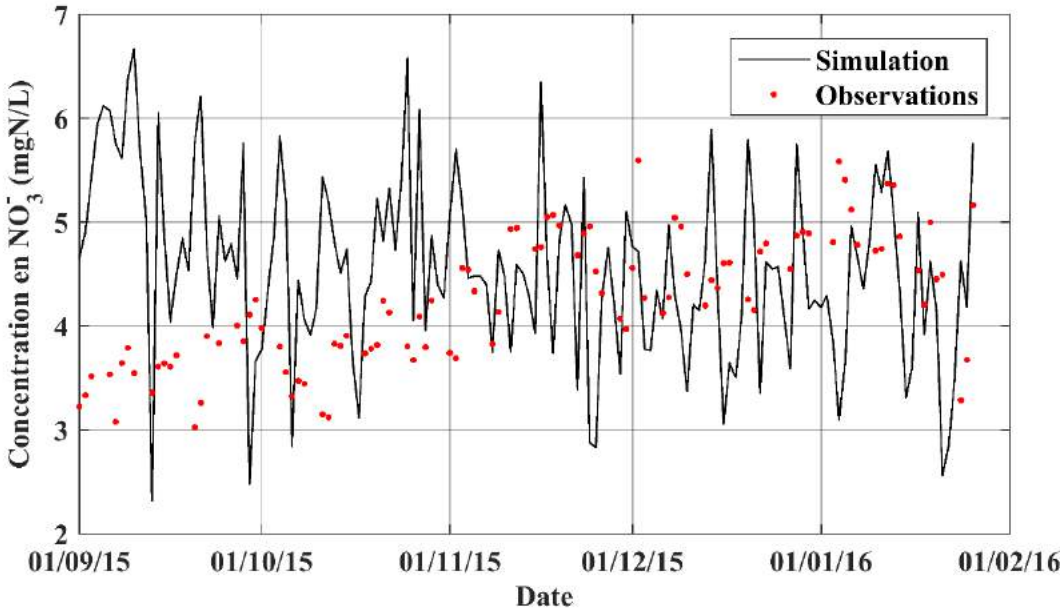


Figure 4.44 Résultats de validation en pré-dénitrification sur la concentration en NO_3^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Une analyse supplémentaire sur les conditions d'exploitation de l'étage de pré-dénitrification pour la période de calibration et de validation a été réalisée afin d'identifier les raisons derrière les déviations de la prédiction du NO_3^- en sortie pour les deux premiers mois. Tel que montré à la Figure 4.45, la concentration en NO_3^- en entrée de l'étage diminue graduellement de 8 à 6 mgN/L durant la période de calibration (de juin à fin d'août 2015). Cette tendance est également présente en sortie. Il en résulte un taux d'enlèvement des nitrates autour de 30 à 40%, sauf à la fin de la période de calibration où ce taux dépasse 50%. Pour la période de validation (de septembre 2015 à fin-janvier 2016), la concentration en NO_3^- en entrée augmente par rapport à la période de calibration (8-10 mgN/L). Pour les deux premiers mois de la période de validation, le taux d'enlèvement des nitrates est autour de 50-60% comme ce qui a été observé à la fin de la période de calibration, tandis qu'entre novembre 2015 et janvier 2016, le taux varie principalement entre 35-50%.

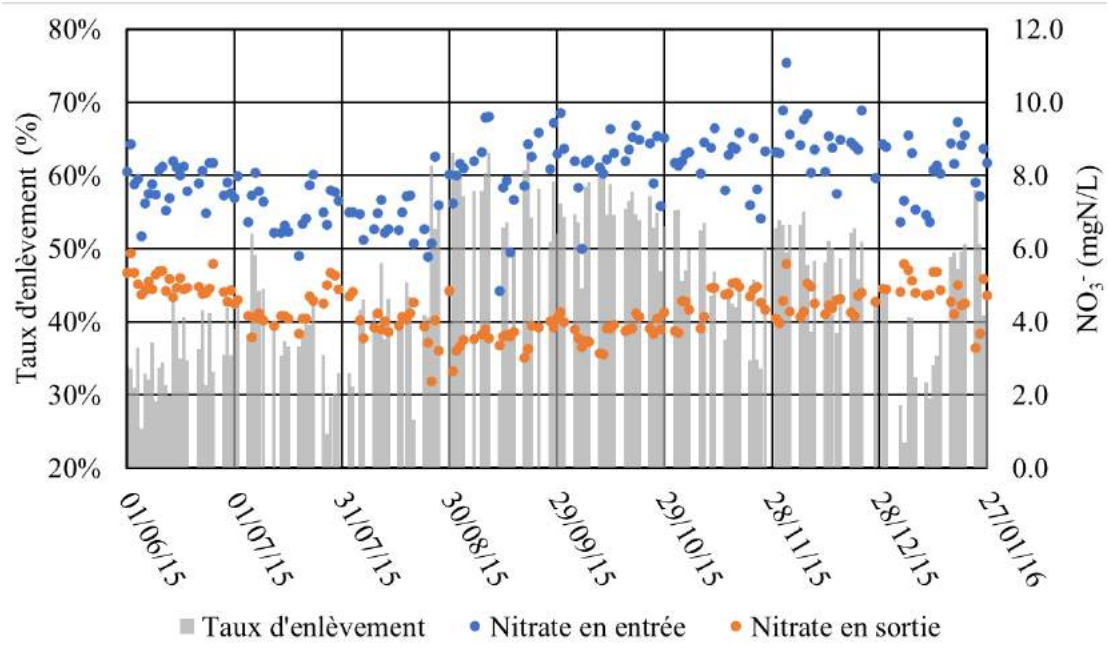


Figure 4.45 Evolution de la performance de dénitrification de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016 (colonne grise : taux d'enlèvement du NO_3^- ; points bleus : concentration en NO_3^- en entrée ; points oranges : concentration en NO_3^- en sortie).

L'augmentation du taux d'enlèvement de la période de validation peut être partiellement expliquée par l'évolution de la biodégradabilité de l'eau en entrée de l'étage. Tel que montré à la Figure 4.46, par rapport à la période de calibration, le ratio DBO_5/NO_x^- en entrée de la période de validation augmente légèrement, ce qui améliore la réduction des nitrates.

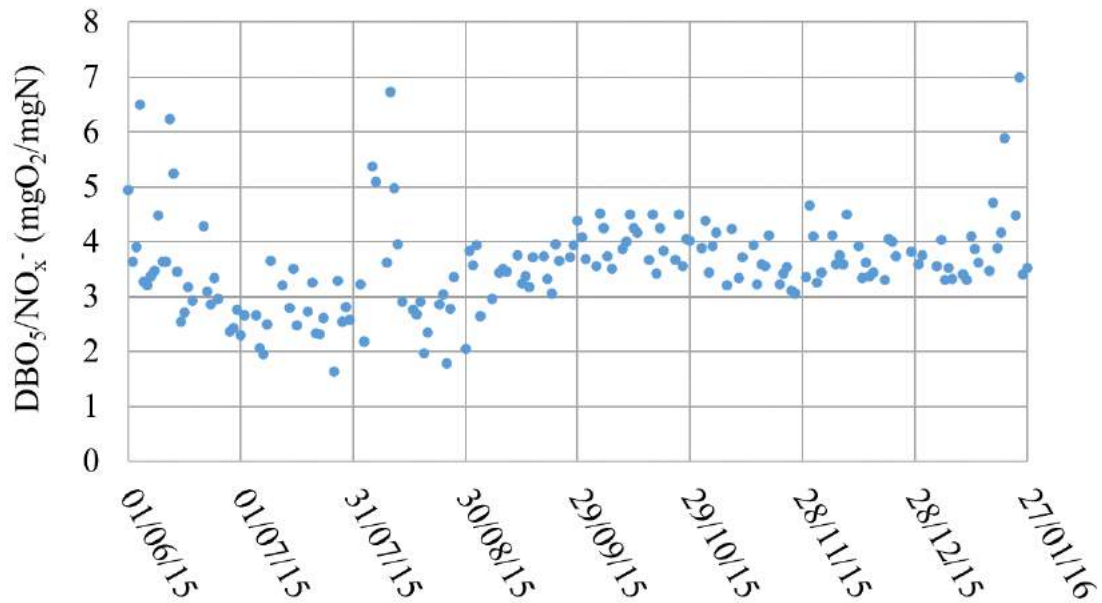


Figure 4.46 Evolution du ratio DBO_5/NO_x^- en entrée de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016.

En plus de l'effet de la biodégradabilité de l'eau en entrée, la fréquence de lavage des biofiltres peut également influencer la capacité de traitement des biofiltres (de Barbadillo *et al.*, 2010).

La Figure 4.47 montre la fréquence de lavage des biofiltres pré-dénitrifiants en vigueur sur SEG2 pour la période de calibration-validation du modèle. Cette fréquence est estimée en divisant le nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs par le nombre de lavages effectués par jour. La fréquence de lavage est autour de 1-1,1 j^{-1} pour la majorité de la période étudiée, ce qui correspond à la valeur considérée dans le modèle en pré-dénitrification. Une diminution de la fréquence de lavage est observée sur site pour le mois d'août. Cette diminution pourrait mener à une accumulation de la biomasse sur le média.

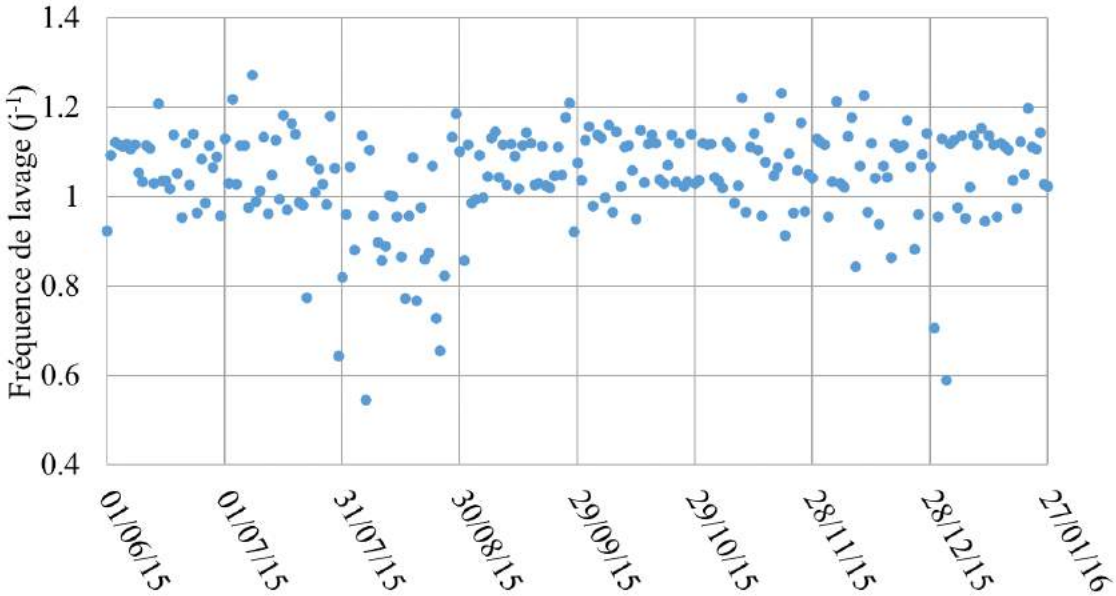


Figure 4.47 Fréquence de lavage des biofiltres pré-dénitrifiants de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016.

L'augmentation du temps de traitement des biofiltres entre deux lavages permet à la biomasse d'hydrolyser et consommer davantage de DCO particulaire biodégradable provenant de l'affluent ou de la lyse bactérienne (Morgenroth *et al.*, 2002; Rother et Cornel, 2007). Ceci favorise aussi l'accumulation de la biomasse dans les biofiltres. Dans ce cas-ci, bien que la fréquence de lavage ré-augmente au mois de septembre 2015, la biomasse supplémentaire accumulée n'est que progressivement enlevée du média. L'augmentation du rapport DBO_5/NO_x^- au même moment fait augmenter la capacité de dénitrification. Cependant, vue que la fréquence de lavage de septembre à novembre 2015 est presque toujours entre 1-1,1 j^{-1}, la capacité de dénitrification de l'étage réduit graduellement (voir Figure 4.45).

Pour le modèle en pré-dénitrification développé et calibré, la fréquence de lavage et la fraction d'enlèvement du biofilm pendant le lavage (f_{Lavage}) sont fixés à 1 j^{-1} et 0,55, respectivement. Il est à noter que l'objectif de modélisation des biofiltres pré-dénitrifiants ne focalise pas sur la commande de lavage et on n'a pas essayé de calibrer ces valeurs. De plus, lors du développement du modèle, on a observé que la simulation des effets de lavage des biofiltres ralentit beaucoup le calcul. L'évolution de la fréquence de lavage n'est donc pas prise en

compte par le modèle. Pour cette raison, la variation de la capacité de la dénitrification des deux premiers mois de la période de validation ne peut pas être bien reproduite par le modèle. Ceci résulte en une augmentation très légère des scores MAE et RMSE pour les nitrates en sortie (voir Tableau 4.25) en validation (MAE : 1,05 mgN/L, RMSE : 1,30 mgN/L, moyenne observée : 4,22 mgN/L) par rapport à ceux obtenus en calibration (MAE : 0,95 mgN/L, RMSE : 1,15 mgN/L, moyenne observée : 4,53 mgN/L).

Tableau 4.25 Résultats des scores statistiques obtenus pour la validation du modèle en pré-dénitrification (de septembre 2015 à fin-janvier 2016, 150 jours).

Variables	Moyenne en sortie	Nombre d'observations	ME	MAE	RMSE	Janus
NO_3^- (mgN/L)	4,22	104	0,41	1,05	1,30	1,13
NO_2^- (mgN/L)	0,26	104	0,02	0,07	0,10	1,42
DCO (mgO_2/L)	39,26	104	-0,86	4,39	6,51	0,53
DCOs (mgO_2/L)	28,61	104	-2,72	3,66	4,81	0,58
MES (mg/L)	7,85	104	2,16	2,81	3,49	0,80
PO_4^{3-} (mgP/L)	0,61	104	-0,005	0,04	0,05	0,62
NTK (mgN/L)	19,36	104	1,69	1,80	2,26	1,39
NH_4^+ (mgN/L)	17,39	104	1,11	1,30	1,58	1,28

Concernant la prédiction de la concentration en NO_2^- en sortie, le niveau de cette variable simulé par le modèle correspond à celui observé en moyenne en sortie de l'étage de pré-dénitrification (voir Figure 4.48). Cependant, les variations lentes du NO_2^- d'octobre 2015 à fin-décembre ne sont pas reproduites par le modèle. Bien que le score ME obtenu pour la validation soit proche de 0 mgN/L, le MAE (0,07 mgN/L) et le RMSE (0,10 mgN/L) de cette période représentent autour de 30%-40% de la moyenne observée en sortie de l'étage (0,26 mgN/L) (voir Tableau 4.25). Tel qu'expliqué pour la calibration, avec les informations d'exploitation disponibles, il est difficile à identifier la raison pour expliquer les variations avec faibles amplitudes observées sur les nitrites en sortie.

Les coefficients de Janus obtenus pour la prédiction des nitrates et nitrites en sortie des biofiltres pré-dénitrifiants sont tous les deux inférieurs à 2 (voir Tableau 4.25), ce qui signifie que le modèle est validé pour ces deux variables en sortie.

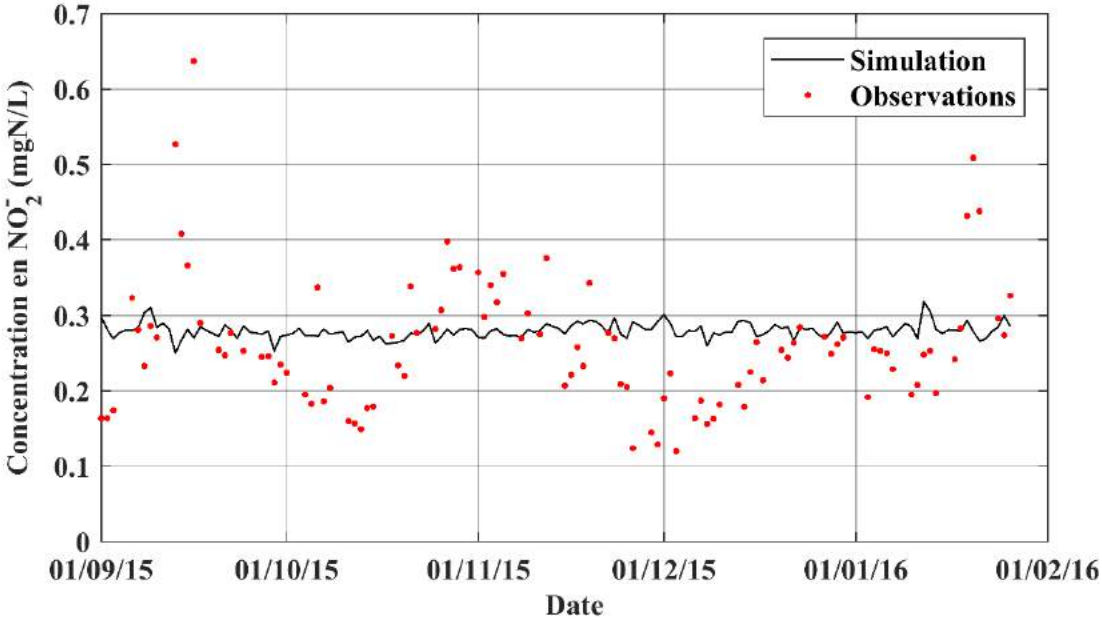


Figure 4.48 Résultats de validation en pré-dénitrification sur la concentration en NO_2^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Les Figures 4.49 et 4.50 montrent respectivement les résultats de simulation des concentrations en DCO et en DCO soluble en sortie de l'étage pour la période de validation. En général, les niveaux de ces deux variables simulées en sortie correspondent aux observations. Tel que montré à la Figure 4.49, certaines observations de la DCO en sortie qui dépassent au-dessus de 50 mgO_2/L ne peuvent pas être reproduites par le modèle. Pour la prédiction de la DCO soluble, des sous-estimations légères ont été observées pour le mois de décembre 2015 (voir Figure 4.50).

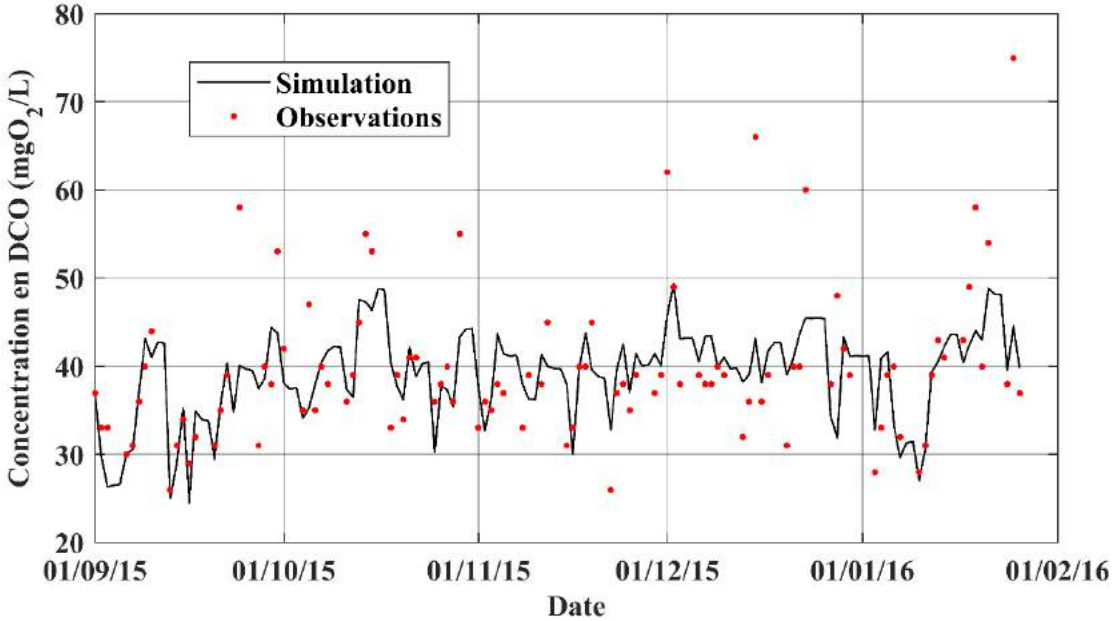


Figure 4.49 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en DCO en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

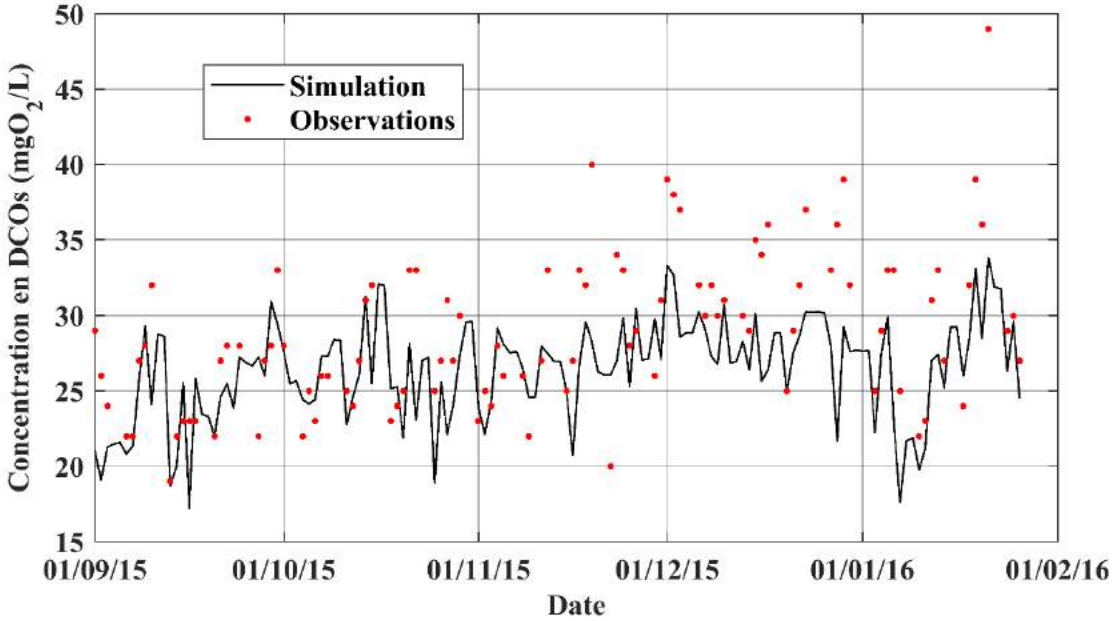


Figure 4.50 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en DCOs en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Bien qu'il existe des erreurs de prédiction, le MAE et le RMSE obtenus en validation sont plus faibles qu'en calibration (voir Tableau 4.24), et représentent environ 10-20% des moyennes observées en sortie de l'étage (voir Tableau 4.25). Dans ce cas-ci, on considère que la performance du modèle sur la prédiction de la DCO et de la DCO soluble est très satisfaisante.

Concernant la prédiction de la performance de filtration de l'étage de la période de validation, le niveau des MES en sortie prédit est correct (voir Figure A2.30 dans l'Annexe 2). Par contre, tel que discuté sur les résultats de calibration, à cause de l'incertitude élevée sur la mesure des MES à faible concentration, les scores statistiques (ME, MAE et RMSE) obtenus représentent environ 30%-50% de la concentration moyenne en MES observé (7,8 mgN/L) (voir Tableau 4.25).

Comme ce qui a été observé sur les résultats de calibration, la performance de prédiction du modèle sur la consommation du PO_4^{3-}, du NH_4^+ et du NTK est satisfaisante (voir Figure 4.51 et Figures 2.31-2.32 dans l'Annexe 2).

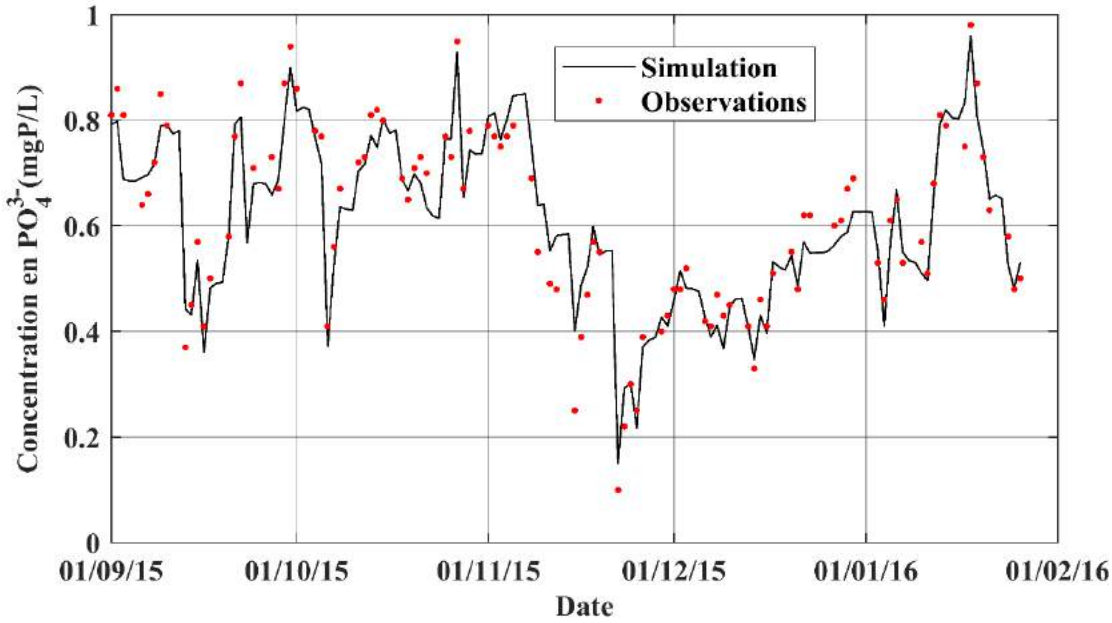


Figure 4.51 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en PO_4^{3-} en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Selon les scores statistiques résumés au Tableau 4.23, les erreurs relatives de prédiction de ces trois variables en sortie sont faibles (<15%) et les coefficients de Janus sont inférieurs à 1.5. Le modèle peut être considéré valide.

4.5.3.5. Paramètres calibrés

La liste des paramètres ajustés lors de la calibration est résumée au Tableau 4.26. Les autres paramètres du modèle sont restés à leur valeur par défaut. La plupart des valeurs des paramètres ajustés sont proches de celles par défaut trouvées dans la littérature. Les paramètres qui ont été

modifiés beaucoup, comme, par exemple, les paramètres $K_{SB,OHO,R2-R4}$, sont liés principalement aux réactions de dénitrification hétérotrophe. Pour rappel, ces réactions et les valeurs des paramètres sont prises du modèle ASMN développé par Hiatt et Grady (2008). Cependant, le procédé modélisé (pré-dénitrification par biofiltration) et les conditions d'exploitation sont différents par rapport à ceux considérés par Hiatt et Grady (2008) (réacteurs de boues activées traitant des retours fortement chargés en azote). Dans ce cas-ci, les caractéristiques de l'eau en entrée et de la biomasse hétérotrophe dans les biofiltres pré-dénitrifiants seront différentes de celles considérées par le modèle original, d'où le besoin de modifier certains paramètres de manière relativement importante. Les paramètres i_{P_XBio} et $i_{P_XBio,lys}$ ont été diminués d'environ 50% par rapport aux valeurs par défaut (0,01 gP/gO_2). Il est à noter que l'enlèvement du PO_4^{3-} dans le modèle ne se fait que par assimilation biologique, les autres réactions biologiques qui peuveut influencer la concentration des orthophosphates comme, par exemple la dégradation du phosphore organique, ne sont pas considérées. Enfin, afin d'ajuster le niveau des MES simulées, les deux paramètres liés à la filtration (β et λ_0) ont été modifiés de manière importante.

Tableau 4.26 Paramètres calibrés pour le modèle en pré-dénitrification.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur par défaut	Valeur calibrée
Constante de demi-saturation en substrat soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	20	28,6
Constante de demi-saturation en substrat soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	20	13,8
Constante de demi-saturation en substrat soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	20	17,7
Constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO,OHO}$	gN/m^3	0,05	0,053
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant NO en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R4}$	gN/m^3	0,3	0,31
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,333	0,339
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	0,6	0,59
Fraction de biofilm enlevé pendant lavage	f_{Lavage}	-	0,5	0,55
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,67	0,72
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,62	0,7
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	6	5,18
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,16	0,14
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,35	0,47
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,9	0,87
Facteur de réduction du taux d'hydrolyse en anoxie	$\eta_{qhyd,\ Ax}$	-	0,4	0,47
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,08	0,075
Taux d'hydrolyse	$q_{XCB_SB,hyd}$	1/j	3	2,5
Facteur d'empilement du média	β	-	5,7	2,89
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,945	0,6
Constante empirique y dans l'équation du coefficient de filtration	y	-	1	0,83
Quantité d'azote dans la biomasse	i_{N_XBio}	gN/gO_2	0,086	0,098
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	0,01	0,0055

Quantité de phosphore dans les produits de la mort bactérienne	$i_{P_XBio,lys}$	gP/gO_2	0,01	0,006

4.5.4. Conclusions et perspectives pour les travaux de la modélisation des biofiltres pré-dénitrifiants

Le modèle de biofiltration développé a été calibré et validé sur l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de la station Seine Grésillons. Les données d'exploitation de l'étage de la période de juin 2015 à la fin de janvier 2016 ont été récoltées à cette fin. Comme ce qui a été fait pour le modèle en nitrification et en post-dénitrification, une analyse de sensibilité globale a été d'abord réalisée à l'aide d'une simulation Monte-Carlo afin d'identifier les paramètres influents. Deux groupes indépendants de paramètres à calibrer ont été identifiés. La calibration du modèle est réalisée avec les données de la période de juin 2015 à fin-août 2015 en appliquant la méthode de simulation Monte-Carlo. Le modèle a ensuite été validé avec les données de septembre 2015 à la fin janvier 2016. Selon les résultats obtenus, les niveaux de polluants en sortie de l'étage prédits par le modèle sont en général corrects. Les coefficients de Janus obtenus sont inférieurs à 1,5, ce qui indique que la validation du modèle est réussie.

Les erreurs de prédiction entre les résultats de simulation et les observations ont été analysées. Pour la concentration en NO_3^- en sortie, les erreurs de prédiction sont liées aux incertitudes de mesure de la DCO, à la précision du fractionnement de la DCO ainsi qu'à l'évolution de la fréquence de lavage des biofiltres. Concernant le nitrite en sortie, les variations avec faible amplitude observées ne pourraient pas être reproduites par le modèle. Ces variations sont actuellement difficiles à expliquer avec les informations d'exploitation disponibles. Certaines pistes d'amélioration du modèle en pré-dénitrification peuvent être proposées suites aux différents constats réalisés au cours de la présentation des résultats :

1) La qualité de prédiction des nitrates en sortie est influencée par la précision du fractionnement de la DCO de l'eau en entrée de pré-dénitrification. Le suivi du fractionnement de la DCO de l'eau en entrée de l'étage de pré-dénitrification peut donc être envisagée afin de mieux connaitre les caractéristiques de l'affluent. Les techniques expérimentales liées à la mesure de la biodégradabilité comme la respirométrie et l'Oxitop® peuvent être appliquées pour aider à réaliser le fractionnement (Spanjers et Vanrolleghem, 2016). Considérant que le fractionnement de la DCO en entrée de l'étage peut évoluer dans le temps, on propose de réaliser chaque mois une ou deux analyses du fractionnement avec ces techniques de mesures. De plus, considérant que la biodégradabilité de l'eau nitrifiée est beaucoup plus faible que l'eau décantée et le taux de recirculation peut influencer la concentration des composants biodégradable (S_B et X_{CB}), ces techniques devraient dans un premier temps être appliquées sur l'eau décantée envoyée à l'étage.

2) L'évolution de la fréquence de lavage semble également influencer la capacité de dénitrification de l'étage. Actuellement, la fréquence de lavage et la fraction d'enlèvement du biofilm pendant le lavage sont fixées dans le modèle. Il serait intéressant d'étudier et d'ajouter au modèle le lien entre le taux d'enlèvement et la fréquence de lavage pour pouvoir tenir compte de l'effet de changement de la fréquence de lavage sur la performance de traitement des biofiltres.
3) Contrairement à la nitrification et la post-dénitrification, aucune mesure de production/consommation du N_2O n'est disponible pour la calibration du modèle en pré-dénitrification. À l'état actuel, la concentration moyenne du N_2O en sortie pour les deux périodes simulées est de 0,08 mgN/L (±0,008 mgN/L). Considérant le niveau du N_2O en entrée estimée (autour de 0,1 mgN/L), le taux d'enlèvement prédit par le modèle est d'environ 20%. Ces résultats devraient idéalement être vérifiés en réalisant des campagnes de mesure du N_2O en entrée et en sortie de l'étage de pré-dénitrification dans les sorties liquides et gazeux (Bollon *et al.*, 2016a; Mottelet *et al.*, 2020).
4) Le modèle est calibré et validé avec les données de mesure sur des échantillons composites 24 heures. Cependant, pour aider au développement de stratégies de contrôle-commande des procédés de traitement, le modèle doit idéalement avoir démontré ses capacités à simuler les phénomènes plus rapides (à l'échelle horaire ou minute). Dans ce cas-ci, des campagnes de mesure avec sonde pour le débit d'eau et les concentrations en DCO et en NO_x^- en entrée et en sortie doivent être réalisées, afin de vérifier et valider la performance de prédiction du modèle.
5) Pour augmenter le flux de nitrate éliminé en pré-dénitrification sur SEG2, la diminution de l'efficacité de la décantation primaire en réduisant l'injection du $FeCl_3$ pourrait être envisagée afin d'apporter plus de DCO biodégradable à la dénitrification. Un équilibre doit toutefois être conservé entre l'augmentation du flux dénitrifié et l'accélération du colmatage des biofiltres due au flux de MES filtrés supplémentaire. Afin de pouvoir prendre en compte cette contrainte supplémentaire, des équations calculant la perte de charge peuvent être ajoutées au modèle afin d'estimer le niveau de colmatage des biofiltres (Bernier *et al.*, 2014a).

Enfin, rappelons que le modèle en pré-dénitrification calibré et validé sur la station Seine Grésillons sera utilisé pour simuler le procédé de la station Seine Aval. Bien que les dimensions des biofiltres Biostyr® de ces deux stations soient identiques, il faut tenir compte du fait que du méthanol est injecté à Seine Aval, ce qui n'est pas le cas à Seine Grésillons. Tel que mentionné lors de la présentation du travail de la modélisation des biofiltres post-dénitrifiants, la biomasse méthylotrophe a un comportement différent des hétérotrophes « classiques ». Un réajustement des paramètres liés aux réactions biologiques risque d'être nécessaire dans le futur pour bien

adapter le modèle aux biofiltres pré-dénitrifiants de la station Seine Aval.

4.6. Conclusion générale sur la modélisation de traitement par biofiltration et perspectives

En se basant sur le modèle SimBio, un modèle de biofiltration a été développé. Par rapport au modèle original, des modifications concernant les phénomènes de transport des composants et les réactions biologiques ont été apportées. Pour décrire plus finement le transport des composants entre les différents compartiments, plus de couches du biofilm ont été prises en compte par le modèle. De plus, une couche limite avec une épaisseur variable a été considérée, ce qui remplace celle fixée du modèle original. Pour simuler les émissions du N_2O lors du traitement biologique, les réactions liées à la production/dégradation biologique du N_2O ainsi qu'une phase gazeuse ont été ajoutées dans le modèle. L'estimation de la consommation d'énergie liée au pompage et à l'aération ont également été intégrés dans le modèle. Ces modifications étendent la capacité du modèle de biofiltration.

En accord avec la stratégie de construction du modèle filière de biofiltration de la station Seine Aval présentée au Chapitre 3, le modèle développé a été utilisé pour simuler les procédés de traitement par biofiltration des stations Seine Aval (nitrification), Seine Centre (post-dénitrification) et Seine Grésillons (pré-dénitrification). A l'aide de simulation Monte-Carlo, les modèles sont calibrés et validés avec des jeux de données intensifs et long-terme issus des stations. Selon les résultats obtenus, les modèles peuvent en général prédire correctement la qualité de l'eau en sortie des procédés de biofiltration. La plupart de coefficients de Janus obtenus sont inférieurs à 2, ce qui signifie une validation réussie des modèles. La qualité de prédiction n'a pas été dégradée après le remplacement des données mesurées en débit d'air injectées par celles issues de l'algorithme de commande d'aération sur le procédé à SAV dans le modèle. Les résultats d'estimation de l'énergie consommée par le pompage et l'aération de cet étage correspondent également avec les observations, confirmant la qualité du travail de modélisation.

Les erreurs entre les résultats de simulation et les observations ont été analysés. On observe que la prédiction des nitrites en sortie n'est pas toujours satisfaisante pour ces trois modèles de biofiltration. Cette intermédiaire de la nitrification et la dénitrification est difficile à prédire. On trouve que le problème de simulation de l'assimilation des orthophosphates ainsi que certaines lacunes dans la conceptualisation issue du modèle ASMN sont les sources qui peuvent probablement causer des erreurs de prédiction des nitrites en sortie. On trouve aussi que l'incertitude du fractionnement d'influent peut conduire à des erreurs de prédiction des modèles.

Des pistes d'amélioration du modèle de biofiltration ont été également proposées et discutées. Pour résoudre les erreurs de prédiction des nitrites en sortie, on propose de réaliser des

campagnes de mesure sur le lit de média et d'étudier l'influence de la température sur les réactions de dénitrification. On suggère aussi de réaliser des mesures de fractionnement de la DCO d'influent en entrée des procédés de biofiltration, surtout pour les biofiltres pré-dénitrifiants, afin d'améliorer le modèle du fractionnement. Enfin, des campagnes de mesure des émissions du N_2O issues des biofiltres pré-dénitrifiants sont également proposées.

Tel qu'expliqué au Chapitres 3, certaines différences existent entre les procédés modélisés (post et pré-dénitrification) et ceux de la station Seine Aval, en termes de dimensions et de conditions d'exploitation. Une adaptation et éventuellement une recalibration des modèles pourra donc être nécessaire lorsque davantage de données valides de suivi seront disponibles sur Seine Aval. En plus du couplage des modèles de procédés de biofiltration individuels, les règles de contrôle-commande des procédés de biofiltration correspondants doivent également être considérés et intégrés afin de construire le modèle filière. Ce travail sera le sujet du Chapitre 6.

Références

Alferes, J. et Vanrolleghem, P. A. (2016). Efficient automated quality assessment: Dealing with faulty on-line water quality sensors. *AI Communications, 29*(6), 701-709.

Anthonisen, A. C., Loehr, R. C., Prakasam, T. B. S., & Srinath, E. G. (1976). Inhibition of nitrification by ammonia and nitrous acid. *Journal of Water Pollution Control Federation, 48*(5), 835-852.

Azimi, S. et Rocher, V. (2017). Energy consumption reduction in a waste water treatment plant. *Water Practice and Technology, 12*(1), 104-116.

Bachis, G., Maruéjouls, T., Tik, S., Amerlinck, Y., Melcer, H., Nopens, I., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2015). Modelling and characterization of primary settlers in view of whole plant and resource recovery modelling. *Water Science & Technology, 72*(12), 2251-2261.

Benedetti, L., Claeys, F., Nopens, I., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Assessing the convergence of LHS Monte Carlo simulations of wastewater treatment models. *Water Science & Technology, 63*(10), 2219-2224.

Bernier, J. (2014). *Modélisation Simultanée de l'Enlèvment des Nutriments et de l'Evolution de la Perte de Charge en Biofiltration des Eaux Usées.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Bollon, J., Filali, A., Fayolle, Y., Guerin, S., Rocher, V., & Gillot, S. (2016a). Full-scale post denitrifying biofilters: Sinks of dissolved N_2O? *Science of the Total Environment, 563-564*, 320-328.

Bollon, J., Filali, A., Fayolle, Y., Guerin, S., Rocher, V., & Gillot, S. (2016b). N_2O emissions from full-scale nitrifying biofilters. *Water Research, 102*, 41-51.

Boltz, J. P., Morgenroth, E., Brockmann, D., Bott, C., Gellner, W. J., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Systematic evaluation of biofilm models for engineering practice: Components and critical assumptions. . *Water Science & Technology, 64*(4), 930-944.

Bourrel, S., Dochain, D., Babary, J. P., & Queinnec, I. (2000). Modelling, identification and control of a denitrifying biofilter. *Journal of Process Control, 10*, 73-91.

Brun, R., Kühni, M., Siegrist, H., Gujer, W., & Reichert, P. (2002). Pratical identifiability of ASM2d parameters-Systematic selection and tuning of parameter subsets. *Water Research, 36*(16), 4113-4127.

Chen, D., Chen, X., Huang, X., He, S., & Huang, J. (2017). Controlling denitrification accompanied with nitrite accumulation at the sediment-water interface. *Ecological Engineering, 100*, 194-198.

Christiansen, P., Hollesen, L., & Harremoës, P. (1995). Liquid film diffusion on reaction rate in submerged biofilters. *Water Research, 29*(3), 947-952.

Corominas, L., Rieger, L., Takács, I., Ekama, G., Hauduc, H., Vanrolleghem, P. A., Oehmen, A., Gernaey, K. V., van loosdrecht, M. C. M., & Comeau, Y. (2010). New framework for standardized notation in wastewater treatment modelling. *Water Science & Technology, 61*(4), 841-857.

Council of the European Communities. (2000). Directive 2000/60/EC of the European Parliament and of the Council of 23 October 2000 establishing a framework for community action in the field of water policy. *Official Journal of the European Communities, L327 22/12/2000*, 1-72.

de Barbadillo, C., Sabherwal, B., Shaw, A., & Schauer, P. (2009). Application and comparison of dynamic models to assess impact of loading variations on performance of denitrification filters. *Water Science & Technology, 60*(7), 1721-1729.

de Barbadillo, C., Rogalla, F., Tarallo, S., & Boltz, J. P. (2010). Factors Affecting the Design and Operation of Biologically Active Filters. In *Proceedings of the WEF/IWA Biofilm Reactor Technology Conference 2010*. Portland, Oregon, États-Unis, 15-18 août, 2010.

De Keyser, W., Amerlinck, Y., Urchegui, G., Harding, T., Maere, T., & Nopens, I. (2014). Detailed dynamic pumping energy models for optimization and control of wastewater applications. *Journal of Water and Climate Change, 5*(3), 299-314.

Dochain, D. et Vanrolleghem, P. A. (2001). *Dynamical Modelling & Estimation in Wastewater Treatment Processes*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Ekama, G. A. et Wentzel, M. C. (2008a). Nitrogen removal. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Fiat, J., Filali, A., Fayolle, Y., Bernier, J., Rocher, V., Sperandio, M., & Gillot, S. (2019). Considering the plug-flow behavior of the gas phase in nitrifying BAF models significantly improves the prediction of N_2O emissions. *Water Research, 156*, 337-346.

Gernaey, K. V., Nopens, I., Vrecko, D., Alex, J., & Dudley, J. (2006). *An updated proposal for including further detail in the BSM2 PE calculation*. Internal BSM2 Task Group document. IWA, Londres, Royaume-Uni.

Gernaey, K. V., Jeppsson, U., Vanrolleghem, P. A., & Copp, J. B. (2014). *Benchmarking of Control Strategies for Wastewater Treatment Plants*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Gillot, S., Kies, F., Amiel, C., Roustan, M., & Héduit, A. (2005). Application of the off-gas method to the measurement of oxygen transfer in biofilters. *Chemical Engineering Science, 60*(22), 6336-6345.

Hauduc, H., Neumann, M. B., Muschalla, D., Gamerith, V., Gillot, S., & Vanrolleghem, P. A. (2015b). Efficiency criteria for environmental model quality assessment: A review and its application to wastewater treatment. *Environmental Modelling & Software, 68*, 196-204.

Hellinga, C., Vanrolleghem, P. A., van Loosdrecht, M. C. M., & Heijnen, J. J. (1996). The potential of off-gas analyses for monitoring wastewater treatment plants. *Water Science & Technology, 33*(1), 13-23.

Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosdrecht, M. C. M. (2000b). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Hiatt, W. C. et Grady, C. P. L. J. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification, and denitrification. *Water Environment Research, 80*(11), 2145-2156.

Hidaka, T. et Tsuno, H. (2004). Development of a biological filtration model applied for advanced treatment of sewage. *Water Research, 38*(2), 335-346.

Horner, R. M. W., Jarvis, R. J., & Mackie, R. I. (1986). Deep bed filtration: A new look at the basic equations. *Water Research, 20*(2), 215-220.

Ives, K. J. (1970). Rapid filtration. *Water Research, 4*(3), 201-223.

Kampschreur, M. J., Temmink, H., Kleerebezem, R., Jetten, M. S., & van Loosdrecht, M. C. M. (2009). Nitrous oxide emission during wastewater treatment. *Water Research, 43*(17), 4093-4103.

Ma, J., Peng, Y., Wang, L., & Wang, S. (2008). Effet of temperature on denitrification and profiles of pH during the process (Article en chinois). *China Environmental Science, 28*(11), 1004-1008.

Mackie, R. I. et Bai, R. (1993). The role of particle size distribution in the performance and modelling of filtration. *Water Science & Technology, 27*(10), 19-34.

Mannina, G., Cosenza, A., Vanrolleghem, P. A., & Viviani, G. (2011). A practical protocol for calibration of nutrient removal wastewater treatment models. *Journal of Hydroinformatics, 13*(4), 575-595.

McDowell-Boyer, L. M., Hunt, J. R., & Sitar, N. (1986). Particle transport through porous media. *Water Resources Research, 22*(13), 1901-1921.

Mokhayeri, Y., Nichols, A., Murthy, S., Riffat, R., Dold, P., & Takács, I. (2006). Examining the influence of substrates and temperature on maximum specific growth rate of

denitrifiers. *Water Science & Technology, 54*(8), 155-162.

Morgenroth, E., Kommedal, R., & Harremoës, P. (2002). Processes and modeling of hydrolysis of particulate organic matter in aerobic wastewater treatment - a review. *Water Science & Technology, 45*(6), 25-40.

Morgenroth, E. (2008b). Modelling biofilms. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modelling and Design* (pp. 457-492). IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Mottelet, S., Filali, A., Guerin, S., Rocher, V., Azimi, S., & Pauss, A. (2020). Mesure en ligne des concentrations d'ions nitrites et nitrates pour l'optimisation de la dénitrification et la réduction de la production de protoxyde d'azote. *Techniques Sciences Méthodes, 6*, 23-32.

Munz, C. et Roberts, P. V. (1988). Gas- and liquid-phase mass transfer restances of organic compound during mechanical surface aeration. *Water Research, 23*(5), 589-601.

Ohashi, H., Sugawara, T., Kikuchi, K.-I., & Konno, H. (1981). Correlation of liquid-side mass transfer coefficient for single particles and fixed beds. *Journal of Chemical Engineering of Japan, 14*(6), 433-438.

Pham, H. N., Mottelet, S., Schoefs, O., Pauss, A., Rocher, V., Paffoni, C., Meunier, F., Guerin, S., & Azimi, S. (2010). Estimation simultanée et en ligne de nitrates et nitrites par identification spectrale UV en traitement des eaux usées. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 335*, 61-69.

Pocquet, M., Wu, Z., Queinnec, I., & Sperandio, M. (2016). A two pathway model for N_2O emissions by ammonium oxidizing bacteria supported by the NO/N_2O variation. *Water Research, 88*, 948-959.

Rieger, L., Gillot, S., Langergraber, G., Ohtsuki, T., Shaw, A., Takács, I., & Winkler, S. (2012). *Guidelines for Using Activated Sludge Models*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Rittmann, B. E., Boltz, J. P., Brockmann, D., Daigger, G. T., Morgenroth, E., Sørensen, K. H., Takács, I., van Loosdrecht, M. C. M., & Vanrolleghem, P. A. (2018). A framework for good biofilm reactor modeling practice (GBRMP). *Water Science & Technology, 77*(5), 1149-1164.

Rocher, V., Paffoni, C., Goncalves, A., Briand, C., & Azimi, S. (2011a). Conditions d'apparition des nitrites lors de la dénitrification des eaux usées 1. Importance de la charge azotée appliquée. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 344*, 92-96.

Rocher, V., Paffoni, C., Goncalves, A., Rechdaoui, S., Azimi, S., & Pauss, A. (2011b). Conditions d'apparition des nitrites lors de la dénitrification des eaux usées par biofiltration 2. Importance des apports en substrat carboné. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 344*, 97-105.

Rother, E. et Cornel, P. (2007). Potentials and limits of a pre-denitrification/nitrification biofilter configuration for advanced municipal wastewater treatment. *Water Science & Technology, 55*(8-9), 115-123.

Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., & Tarantola, S. (2007). *Global Sensitivity Analysis. The Primer*. John Wiley & Sons, Chichester, Royaume-Uni.

Sander, R. (2015b). Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent. *Atmospheric, Chemistry and Physics, 15*(8), 4399-4981.

Séguret, F. et Racault, Y. (1998). Hydraodynamic behaviour of a full-scale submerged biofilter and its possible influence on performances. In *Proceedings of the 19th Binnial conference of the International Association on Water Quality*. Vancouver, Canada, 21-26, Juin, 1998.

Sin, G., De Pauw, D. J. W., Weijers, S., & Vanrolleghem, P. A. (2008a). Developing a framework for continuous use of models in daily management and operation of WWTPs: A life cycle approach. *Water Science & Technology, 57*(9), 1301-1307.

Sin, G., De Pauw, D. J. W., Weijers, S., & Vanrolleghem, P. A. (2008b). An efficient approach to automate the manual trial and error calibration of activated sludge models.

Biotechnology and Bioengineering, 100(3), 516-528.

Sin, G., Gernaey, K. V., Neumann, M. B., van Loosdrecht, M. C. M., & Gujer, W. (2011). Global sensitivity analysis in wastewater treatment plant model applications: Prioritizing sources of uncertainty. *Water Research, 45*(2), 639-651.

Spanjers, H. et Vanrolleghem, P. A. (2016). Respirometry. In M. C. M. van Loosdrecht, P. H. Nielsen, C. M. Lopez-Vazquez, & D. Brdjanovic (Eds.), *Experimental Methods in Wastewater Treatement*. IWA publishing, Londres, Royaume-Uni.

Takács, I., O'Shaugnessy, M., Murthy, S., Brian, K., Shirodkar, N., & Katehis, D. (2007). Design of denitrification systems using methanol. In *Proceedings of the WEF-IWA Specialized Conference "Nutrient Removal 2007: State of the Art"*. Baltimore, Maryland, États-Unis, 4-7, Mars, 2007.

Torres Zúñiga, I., Queinnec, I., & Vande Wouwer, A. (2012). Observer-based output feedback linearizing control strategy for a nitrification-denitrification biofilter. *Chemical Engineering Journal, 191*, 243-255.

Vanhooren, H. (2002). *Modelling for Optimisation of Biofilm Wastewater Treatment Processes: A Complexity Compromise.* (Thèse de Doctorat). Ghent University, Ghent, Belgique.

Vigne, E. (2007). *Étude et Modélisation Dynamique d'un Procédé par Biofiltration en Nitrification Tertiaire.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Vigne, E., Choubert, J. M., Canler, J. P., Héduit, A., Sorensen, K., & Lessard, P. (2010). A biofiltration model for tertiary nitrification of municipal wastewaters. *Water Research, 44*(15), 4399-4410.

Wanner, O., Eberl, H. J., Morgenroth, E., Noguera, D. R., Picioreanu, C., Rittmann, B. E., & van Loosdrecht, M. C. M. (2006). *Mathematical Modeling of Biofilms*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Wu, Y., Chen, Q., & Liu, S. (2005). *Fans and Compressors (livre en chinois)*. Tsinghua University Press, Beijing, Chine.

Chapitre 5 Modélisation de la décantation primaire et de la clarification tertiaire

Ce chapitre présente en détails le travail de modélisation de la décantation primaire et de la clarification tertiaire réalisé dans le cadre de cette thèse, en cinq parties. La première partie illustre les étapes principales de modélisation mises en place pour ces deux procédés (construction, calibration et validation). La deuxième partie se concentre sur la construction du modèle de décantation (clarification) lamellaire physico-chimique à partir du modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016). Les troisième et quatrième parties présentent les méthodes ainsi que les résultats obtenus pour la calibration-validation du modèle, respectivement pour la décantation primaire et la clarification tertiaire. La dernière partie apporte une conclusion sur ces résultats et les perspectives sur les travaux de modélisation réalisés.

5.1. Étapes principales de modélisation

La Figure 5.1 illustre la procédure générale de modélisation pour les étapes de traitement de décantation primaire et clarification tertiaire. Tel que mentionné par la stratégie de modélisation dans le Chapitre 3, ces deux procédés de la station Seine Aval ne sont pas encore mis en route. Ces travaux ont donc été réalisés sur les ouvrages installés dans la station Seine Centre (pour la décantation primaire) et la station Seine Amont (pour la clarification tertiaire). La première étape consiste au choix du modèle de décantation et à son implantation, si nécessaire, dans le logiciel WEST. Dans ce cas-ci, le modèle de base est celui développé par Bernier *et al.* (2016). Pour rappel, ce modèle original est basé sur le modèle de Takács *et al.* (1991) et prend en compte le phénomène de la floculation de DCO soluble ainsi que la précipitation chimique des orthophospates. Il a déjà été calibré et validé sur le procédé de décantation primaire de la station Seine Centre dans le passé. Ce modèle a donc d'abord été programmé dans le logiciel WEST®. Il a ensuite été légèrement modifié afin d'intégrer les effets de la dose de coagulant sur les caractéristiques de décantation des particules (vitesse de chute moyenne et fraction de particules non-décantables). Cette modification lui permet d'être plus réaliste que le modèle original sur l'enlèvement des MES à faibles doses de coagulant injectées.

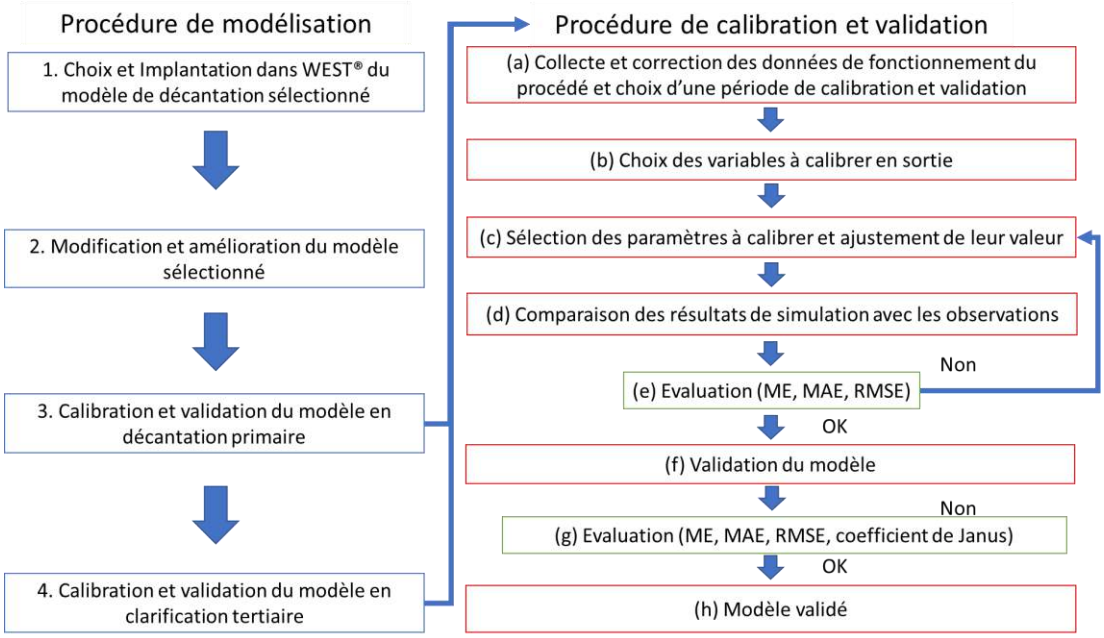


Figure 5.1 Procédure générale de modélisation et de calibration-validation utilisée pour la décantation primaire et la clarification tertiaire.

Le modèle développé a d'abord été utilisé pour simuler le fonctionnement du procédé de traitement primaire. Afin d'évaluer les changements de la performance de prédiction du modèle apportés par les modifications, les jeux de données utilisés pour la calibration-validation du modèle développé étaient identiques à ceux du modèle original. Ces données ont été collectées sur la station Seine Centre pour les années 2000 à 2008. Une autre raison de se limiter à cette période est qu'à partir de l'année 2010, la mesure de la DCO filtrée en entrée et en sortie du procédé simulé n'a pas été effectuée, ce qui ne permet pas d'évaluer la performance de prédiction du modèle sur l'enlèvement de ce type de polluant sous l'effet de la coagulation/floculation. Comme le modèle développé ne contient pas beaucoup de paramètres, et leur effet sur les variables de sortie simulées peut être simplement déduit à partir des équations utilisées, la calibration des paramètres est donc réalisée en se basant sur les connaissances du modèle plutôt qu'à partir des résultats d'une analyse de sensibilité globale. La première moitié du jeu de données (1650 jours, de janvier 2000 à juillet 2004) est utilisée pour la calibration. Des tests de validation ont été lancés après la calibration du modèle sur la deuxième moitié du jeu (1579 jours, de juillet 2004 à novembre 2008). Les critères d'évaluation précédemment utilisés pour la modélisation de la biofiltration dans le chapitre 4 (ME, MAE, RMSE et coefficient de Janus) ont également été appliqués pour évaluer les performances de prédiction obtenues. Le modèle a ensuite été utilisé pour simuler le procédé de clarification tertiaire, en appliquant une procédure de calibration-validation similaire à celle utilisée pour la décantation primaire. Des jeux de données recueillis sur la station Seine Amont (de janvier 2016 à mai 2017) ont été utilisés dans ce cas-ci.

5.2. Description du modèle utilisé

5.2.1. SimDec-Modèle original

Développé dans le logiciel Matlab®/Simulink® (MathWorks), le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016) est composé de trois blocs : le bloc de description de l'affluent, le bloc représentant les cuves de coagulation/floculation et le bloc représentant le décanteur lamellaire (voir Figure 5.2).

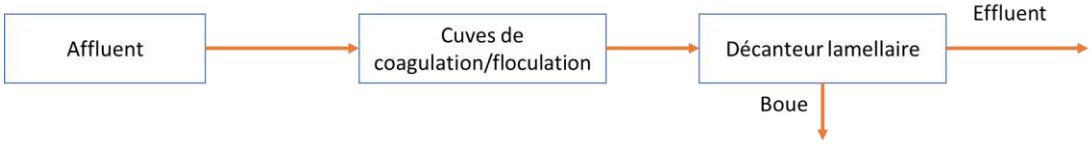


Figure 5.2 Structure générale du modèle SimDec.

a. Bloc de description de l'affluent

Le bloc de description de l'affluent sert à réaliser le fractionnement de l'eau usée en entrée du modèle par rapport aux variables considérées dans le modèle et celles mesurées sur le procédé réel qui est simulé. De manière similaire au modèle développé par Gernaey *et al.* (2001), les variables du modèle ASM1 (Henze *et al.*, 2000b) sont considérées par le modèle SimDec. Cette conceptualisation permet de faciliter la connexion entre la sortie du modèle de décantation primaire et les modèles de traitement biologique décrivant les procédés situés en aval. De plus, l'inclusion des variables de l'ASM1 permet aussi d'intégrer des réactions affectant les variables de composant soluble dans le modèle, telle que la coagulation/floculation de la DCO soluble en DCO particulaire ou la précipitation des orthophosphates avec le coagulant (voir la section suivante). En plus des variables issues de l'ASM1, le modèle SimDec considère aussi les particules inorganiques dans l'affluent à traiter (X_{ii}) afin de mieux estimer les particules en sortie de traitement. Comme il s'agit d'un modèle développé pour la décantation lamellaire physico-chimique, il intègre également trois composants issus du modèle d'ASM2d qui sont liés aux réactions d'enlèvement des orthophosphates : les orthophospates (S_{PO}), le précipité $Fe(OH)_3$ (X_{MeOH}) issu de l'hydrolyse du chlorure ferrique à son contact avec l'eau et le précipité (X_{MeP}) issu de la complexation entre l'hydroxyde de fer et le PO_4^{3-} se produisant pendant le traitement. Considérant que le coagulant $FeCl_3$ peut hydrolyser rapidement dans l'eau (Bratby, 2016), dans le bloc de description de l'affluent, la totalité du $FeCl_3$ injecté est considérée être immédiatement et directement transformée en $Fe(OH)_3$. Une mole de $FeCl_3$ ajoutée produit donc une mole de $Fe(OH)_3$ (voir Eq 5.1). La formation du précipité X_{MeP} est quant à elle réalisée dans le bloc représentant les cuves de coagulation et de floculation. Sa concentration est simplement considérée nulle dans l'affluent.

Eq 5.1 $$FeCl_3 + 3H_2O \rightarrow Fe(OH)_3 + 3Cl^- + 3H^+$$

b. Bloc représentant les cuves de coagulation/floculation

Le bloc représentant les cuves de coagulation/floculation est un réacteur complètement mélangé au sein duquel sont simulées les réactions chimiques liées à la complexation entre le $Fe(OH)_3$ et les orthophosphates et à la coagulation-floculation de la DCO soluble. Tel que mentionné dans la revue littérature (voir section 2.1.3.2), le processus de coagulation/floculation se déroule souvent sur site en deux étapes, dans deux cuves séparées placées en série. Ce bloc fusionne donc ces deux étapes aux fins de simplification du modèle (Bernier et Rocher, 2014). Trois hypothèses simplificatrices sont utilisées. Premièrement, les réactions de complexation entre le $Fe(OH)_3$ et les orthophosphates sont rapides et n'ont lieu que dans les cuves de coagulation/floculation. Cette hypothèse n'est pas strictement correcte, car selon les résultats de jar-tests réalisés par Szabó *et al.* (2008) présenté au Chapitre 2 (section 2.1.3.2), il existe une période de déphosphatation lente qui peut durer plusieurs heures jusqu'à quelques jours après l'ajout des sels métalliques. Dans ce-cas ci, la complexation peut également avoir lieu dans le décanteur lamellaire. Cependant, considérant que la plupart des phosphates sont éliminés dans quelques minutes après l'ajout des sels métalliques (Szabó *et al.*, 2008) et que le temps de séjour hydraulique des décanteurs à simuler est court (environ 30 minutes), cette hypothèse est quand même raisonnable. Deuxièmement, seul le coagulant ($FeCl_3$) est considéré être responsable des effets de la coagulation-floculation sur les composants solubles et particulaires. L'impact du polymère n'est pas pris en compte du fait que le dosage de polymère sur le procédé simulé (décanteurs primaires de la station Seine Centre) est presque constant, et que son effet est très difficile à observer sur site. Troisièmement, la vitesse de mélange dans les cuves de coagulation et de floculation est considérée stable et donc elle n'influence pas les cinétiques de coagulation-floculation.

Dans le bloc représentant les cuves de coagulation/floculation, trois réactions sont considérées. La première réaction est inspirée du modèle de Gernaey *et al.* (2001) et concerne la coagulation des deux fractions représentant la DCO soluble dans l'ASM1 (S_s et S_I) en DCO particulaire (X_s et X_I). Ce phénomène est illustré par des cinétiques de premier ordre (voir Eq 5.2 et 5.3). La constante cinétique de coagulation k (1/j) est considérée identique pour Ss et Si, par manque d'informations spécifiques pour calibrer les deux réactions de manière individuelle.

Eq 5.2 $$\frac{dS}{dt} = \frac{Q_{Affluent}(S_0 - S)}{V_{Cuve}} - k_{Coagulation}S$$

Eq 5.3 $$\frac{dX}{dt} = \frac{Q_{Affluent}(X_0 - X)}{V_{Cuve}} + k_{Coagulation}X$$

où
S et X sont les concentrations en DCO soluble et DCO particulaire dans la cuve de

coagulation/floculation respectivement (gO_2/m^3)
S_0 et X_0 sont les concentrations en DCO soluble et DCO particulaire en entrée de la cuve de coagulation/floculation respectivement (gO_2/m^3).
$Q_{Affluent}$ est le débit en entrée de la cuve de coagulation/floculation (m^3/j)
V_{Cuve} est le volume de la cuve de coagulation/floculation considéré (m^3)
$k_{Coagulation}$ est la constante cinétique de coagulation (1/j)

Les deuxième et troisième réactions illustrent respectivement la formation et la dissolution du précipité produit par la complexation entre le $Fe(OH)_3$ (X_{MeOH}) et les orthophosphates (voir Eq 5.4). La forme principale du précipité (X_{MeP}) considéré être produit par cette réaction est tirée des travaux de Fytianos *et al.* (1998), qui considéraient un ratio de 2,5 moles de fer par mole de PO_4^{3-} en présence d'un excès de chlorure ferrique (ratio molaire Fe/P supérieur à 1). La forme moyenne $Fe_\alpha PO_4(OH)_{(3(\alpha-1))}$ est utilisée par le modèle SimDec, pour garder une possibilité d'adapter le ratio Fe/P dans le précipité produit au travers du coefficient alpha en fonction des observations sur site. Les cinétiques (voir Eq 5.5 et 5.6) utilisées pour les réactions de la formation et dissolution du précipité sont similaires à celles du modèle ASM2d (Henze *et al.*, 2000b).

Eq 5.4 $$\alpha * Fe(OH)_3 + PO_4^{3-} + 3H^+ \leftrightarrow Fe_\alpha PO_4(OH)_{3(\alpha-1)} + 3H_2O$$

Eq 5.5 $$r_{Formation} = k_{formation}[PO_4^{3-}][Fe(OH)_3]$$

Eq 5.6 $$r_{Dissociation} = k_{Dissociation}\left[Fe_\alpha PO_4(OH)_{3(\alpha-1)}\right]$$

où
$k_{Formation}$ ($m^3/g.j$) et $k_{Disssociation}$ (1/j) sont les constantes cinétiques des réactions.
$[PO_4^{3-}]$ est la concentration en orthophosphates (gP/m^3)
$[Fe(OH)_3]$ est la concentration en $Fe(OH)_3$ (g/m^3)
$[Fe_\alpha PO_4(OH)_{(3(\alpha-1))}]$ est la concentration en précipité formé (g/m^3)

Finalement, le changement d'alcalinité causé par l'hydrolyse du $FeCl_3$ et la précipitation du PO_4^{3-} a également été pris en compte et calculé en fonction des vitesses de chaque réaction et des équivalences stœchiométriques en ions OH^-.

c. Bloc représentant le décanteur lamellaire

Basé sur le modèle de Takács *et al.* (1991), le bloc représentant le décanteur lamellaire du modèle SimDec divise le décanteur en dix couches horizontales homogènes. L'effluent traité sort de la couche de surverse (Couche 1), tandis que les particules décantées sont soutirées de la couche « plancher » (Couche 10). L'eau à décanter entre par défaut dans la cinquième couche. Le transport des composants solubles est considéré se produire uniquement par advection (voir Eq 5.7 à Eq 5.11), de manière similaire au modèle proposé par Gernaey *et al.* (2001).

Eq 5.7 $$\frac{dS_{1-4}}{dt} = \frac{Q_{Surverse}(S_{2-5} - S_{1-4})}{V}$$

Eq 5.8 $$\frac{dS_5}{dt} = \frac{Q_{Affluent}(S_{Affluent} - S_5)}{V}$$

Eq 5.9 $$\frac{dS_{6-10}}{dt} = \frac{Q_{soutirage}(S_{5-9} - S_{6-10})}{V}$$

Eq 5.10 $$Q_{Surverse} = Q_{Affluent} - Q_{soutirage}$$

Eq 5.11 $$V = V_{décanteur}/10$$

où
S est la concentration d'un composant soluble quelconque (g/m^3)
V est le volume d'une couche du bassin de décantation lamellaire (m^3)
$V_{décanteur}$ est le volume de décanteur lamellaire (m^3)
$Q_{Surverse}$ est le débit d'eau en sortie de décanteur (m^3/j)
$Q_{Affluent}$ est le débit d'eau en entrée de décanteur (m^3/j)
$Q_{Soutirage}$ est le débit de soutirage de boue (m^3/j)

Le transport des composants particulaires inclut quant à lui à la fois l'effet de l'advection et celui de la décantation (Takács *et al.*, 1991; Gernaey *et al.*, 2001) (voir Eq 5.12 à Eq 5.17).

Eq 5.12 $$\frac{dX_1}{dt} = \frac{Q_{Surverse}(X_2 - X_1)}{V} - \frac{AJ_1}{V}$$

Eq 5.13 $$\frac{dX_{2-4}}{dt} = \frac{Q_{Surverse}(X_{3-5} - X_{2-4})}{V} + \frac{A(J_{1-3} - J_{2-4})}{V}$$

Eq 5.14 $$\frac{dX_5}{dt} = \frac{Q_{Affluent}(X_{Affluent} - X_5)}{V} + \frac{A(J_4 - J_5)}{V}$$

Eq 5.15 $$\frac{dX_{6-9}}{dt} = \frac{Q_{Soutirage}(X_{5-8} - X_{6-9})}{V} + \frac{A(J_{5-8} - J_{6-9})}{V}$$

Eq 5.16 $$\frac{dX_{10}}{dt} = \frac{Q_{Soutirage}(X_9 - X_{10})}{V} + \frac{AJ_9}{V}$$

Eq 5.17 $$J_j = v_j * X_j, (j = 1 - 9)$$

où
X_j est la concentration d'un composant particulaire quelconque dans la couche j (g/m^3)
A est la surface d'une couche (m^2)
J_j est le flux de particules décantées issu de la couche j vers la couche j+1 (g/m^3.j)
v_j est la vitesse de chute des particules dans la couche j (m/j)

Afin de prendre en compte l'augmentation de la surface totale de décantation grâce à l'installation de lamelles, la surface de chaque couche (A) est considérée égale à la somme de la surface projetée des lamelles et de la surface au sol de décanteur. Pour maintenir un volume et un temps de séjour hydraulique correct dans le décanteur lamellaire, sa hauteur (H) est diminuée de la même ampleur (voir Eq 5.18) (Bernier et Rocher, 2014).

Eq 5.18 $$H = \frac{V_{décanteur}}{A}$$

Concernant la vitesse de chute des particules, le modèle SimDec n'utilise pas l'équation du modèle de Takács *et al.* (1991) décrivant la vitesse de chute en fonction de la concentration en particules dans chaque couche. En effet, cette équation est proposée pour simuler la vitesse de chute des particules dans les décanteurs secondaires où le régime freiné est le régime de décantation dominant (Crittenden *et al.*, 2012). En considérant le fait que le régime discret et le régime floculant sont les régimes principaux présents dans les bassins de décantation primaire au lieu du régime freiné (Crittenden *et al.*, 2012), une vitesse moyenne constante en fonction de type de particules (organiques et inorganiques) est appliquée par le modèle SimDec. Dans le modèle, la vitesse de chute moyenne pour les particules organiques ($v_{organique}$) est considérée inférieure à celle des particules inorganiques (X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH} - $v_{inorganique}$). Cette différence permet d'illustrer l'augmentation du rapport DCO/MES entre l'affluent et l'effluent. De manière similaire au modèle de Takács *et al.* (1991), lorsque la concentration en particules d'une couche est inférieure à celle des particules non-décantables calculée à l'entrée du bloc de décantation, les vitesses de chute de cette couche deviennent nulles. Une fraction constante (f_{ns}) est utilisée pour estimer la concentration en particules non-décantables en entrée (voir Eq 5.19).

Eq 5.19 $$Si\ \sum X_j > \left(\sum X_{Affluent} * f_{ns}\right),\ v_{organique,j} = v_0, v_{inorganique,j} = v_0 * Am_{XII}$$

$$Sinon, v_{organique,j} = v_{inorganique,j} = 0\ , (j = 1 - 9)$$

où
X_j est la concentration d'un composant particulaire quelconque dans la couche j (g/m^3)
$X_{Affluent}$ est la concentration d'un composant particulaire quelconque en entrée de bloc de décantation lamellaire (g/m^3)
f_{ns} est la fraction de particules non-décantables en entrée de décanteur (%)
$v_{organique,j}$ et $v_{inorganique,j}$ sont les vitesses de chute moyenne pour les particules organiques et inorganiques respectivement (m/j)
Am_{XII} est le facteur d'amplification de la vitesse de chute pour les particules inorganiques (-)
v_0 est la vitesse moyenne de chute pour les particules (m/j)

Pour calculer la concentration en particules présente dans chaque couche, un facteur de conversion ($f_{MES-DCO}$) est utilisé afin de transférer la concentration en DCOx vers une concentration en MES correspondante. La concentration en MES totales peut donc être calculée de la manière suivante (voir Eq 5.20) :

Eq 5.20 $$\sum X_j = f_{MES-DCO} * DCO_{x,j} + X_{II,j} + X_{MeOH,j} + X_{MeP,j}$$

où
$f_{MES-DCO}$ est le facteur de conversion de la DCO particulaire en MES (g/gO_2)

Il est à noter que le concept de modélisation proposé par Takács *et al.* (1991), qui illustre le décanteur en plusieurs couches discrètes, est la façon standard de modélisation des décanteurs par les professionnels de l'eau et a déjà été appliqué avec succès pour simuler les décanteurs réels (primaire/secondaire) sous condition d'exploitation « normale ». Les inconvénients principaux de ce concept sont que premièrement il ne peut pas bien reproduire la performance d'un décanteur qui fonctionne sous conditions d'exploitation extrême (par exemple évènement de tempête). Deuxièmement, la performance de prédiction du modèle est influencée par le choix de nombre de couches (Cadet *et al.*, 2015). Des modèles plus sophistiqués visant à convaincre ces inconvénients peuvent être trouvés dans la littérature. En général, ces modèles illustrent le mouvement des composants dans le décanteur de manière continue à l'aide d' équations aux dérivées partielles (Cadet *et al.*, 2015; Valentin *et al.*, 2020). Cependant, ces équations sont difficiles à résoudre par les simulateurs ordinaires. De plus, les études mentionnées ne montrent pas la performance de prédiction de ce type de modèle sous conditions dynamiques. Considérant que le modèle à développer dans le cadre de cette thèse vise à simuler le fonctionnement « normal » des décanteurs sous conditions dynamiques, le concept de Takács *et al.* (1991) utilisé par le modèle SimDec a été conservé pour construire le modèle de décanteur lamellaire physico-chimique (voir la section suivante).

5.2.2. Améliorations apportées au modèle

Le modèle SimDec a d'abord été implanté dans le logiciel WEST® (DHI) dans sa forme originale, avant d'être ensuite légèrement modifié. Les modifications apportées se concentrent sur le bloc de description de l'affluent et le bloc représentant décanteur lamellaire. Le bloc représentant les cuves de coagulation/floculation ainsi que les équations qu'il contient restent pour le moment identiques à celui du modèle original de Bernier *et al.* (2016). La structure générale du modèle développé dans le logiciel WEST® est montrée par la Figure 5.3.

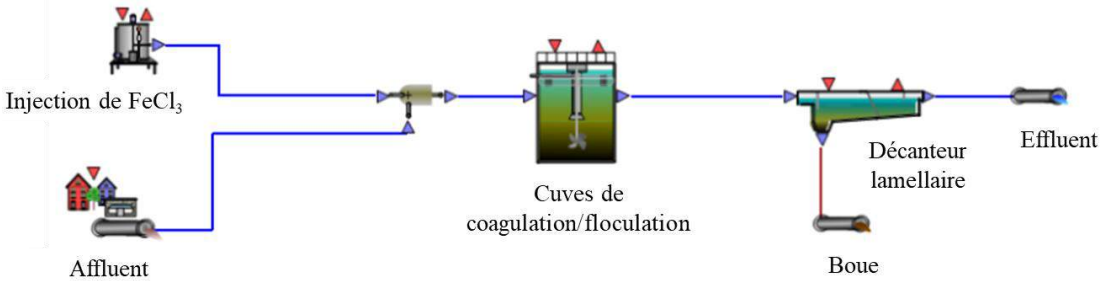


Figure 5.3 Structure générale du modèle développé dans logiciel WEST®.

a. Modification du bloc de description de l'affluent

Afin de faciliter l'intégration de la commande d'injection de réactifs, le bloc d'affluent est d'abord séparé en deux. Le premier bloc (nommé Affluent en Figure 5.3) est similaire à celui du modèle original et sert à fractionner l'affluent par rapport aux variables utilisées et aux mesures disponibles. Le deuxième bloc (nommé Injection de $FeCl_3$ en Figure 5.3) est un bloc d'injection de réactif qui traduit les quantités de $FeCl_3$ injectées en flux équivalents en $Fe(OH)_3$. Le composant X_{MeOH} utilisé dans le modèle original est conservé pour représenter le $Fe(OH)_3$. Similaire au modèle SimDec, une mole de $FeCl_3$ ajoutée produit donc une mole de $Fe(OH)_3$.

Dans le cadre de cette thèse, le modèle biologique utilisé pour simuler la biofiltration en aval de la décantation primaire est une version de l'ASM1 modifiée comportant plusieurs ajouts de réactions et variables (voir Chapitre 4). Ces variables ont été intégrées dans le modèle en remplacement de celles considérées par le modèle SimDec original. Cette modification permet de faciliter la connexion entre les différents modèles de procédé individuels. Les variables X_{II} et X_{MeP} sont conservées dans le modèle développé. Similaire au modèle SimDec, la concentration en X_{II} est estimée à partir de la concentration en particules mesurée (voir la section 5.3 et 5.4) et la concentration en X_{MeP} est considérée nulle dans l'affluent.

Comme les modèles de biofiltration ne considèrent pas les variables particulaires inorganiques utilisés par le modèle de décantation primaire et de clarification tertiaire (X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH}), pour établir le modèle filière de la biofiltration, une adaptation doit être réalisée entre les données en entrée et en sortie de différents modèles de procédé individuel. Cette adaptation sera présentée en détails dans le Chapitre 6.

b. Modification du bloc représentant le décanteur lamellaire

Pour le bloc représentant le décanteur lamellaire, les modifications apportées au modèle original portent sur la fraction de particules non-décantables en entrée de décanteur lamellaire (f_{ns}), et sur la vitesse moyenne de chute des particules (v_0). Contrairement au modèle original, qui utilise des valeurs constantes pour ces deux paramètres, leur variation en fonction du dosage de $FeCl_3$ a été prise en compte et ajoutée au modèle développé. Cette modification est réalisée selon les travaux de Tik et Vanrolleghem (2017), qui ont étudié et simulé les effets d'une injection d'alun sur ces deux paramètres de décantation dans un modèle de décantation physico-chimique primaire. Pour rappel, leur modèle est aussi basé sur celui de Gernaey *et al.* (2001). Selon les observations de jar-tests, la relation entre le dosage d'alun et la fraction de particules non-décantables en entrée de décanteur est exprimée par une fonction sigmoïdale. Une fonction similaire est utilisée pour illustrer l'effet d'alun sur la vitesse de chute de particules dans chaque couche de décanteur considérée. Selon les auteurs, cette intégration permet d'améliorer la performance de prédiction du modèle lorsque le dosage de réactifs est variable, et donc de permettre d'étudier la commande d'injection de réactifs avec le modèle.

Comme les nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques de la station Seine Aval ne sont pas encore construits, il y a donc un intérêt d'appliquer l'approche de Tik et Vanrolleghem (2017) dans le modèle développé afin d'aider à prévoir la performance de traitement et à développer la stratégie de commande pour l'injection de réactifs. De plus, lors de la construction du modèle SimDec, il n'y avait pas d'étude expérimentale fournissant des informations sur la variation de la vitesse de chute en fonction de dosage de $FeCl_3$ utilisé. Comme la station Seine Aval subit de fortes variations de charge (journalière et saisonnière), le traitement primaire devra être en mesure d'adapter ses performances de décantation pour éviter un encrassement accéléré des biofiltres en fortes charges, et laisser passer un minimum de DCO biodégradable endogène (DCO biodégradable présente dans l'eau décantée) pour pré-dénitrifier correctement en faible charge. La dose de coagulant risque donc d'être beaucoup plus variable que sur d'autres stations du SIAAP qui n'appliquent pas la pré-dénitrification (par exemple la station Seine Centre), notamment si la ligne de biofiltration est équipée d'une décantation tertiaire (qui permet de diminuer la dose de chlorure ferrique en primaire sans trop impacter l'enlèvement du phosphore sur la station) (voir Chapitre 3). Un modèle qui ne prend pas en compte cette variation sera donc peu utile. Pour apporter cette conceptualisation dans le modèle original, deux séries de résultats expérimentaux acquis par la direction innovation (DI) du SIAAP sur les eaux brutes de Seine Aval et de Seine Centre ont été utilisées.

Premièrement, l'évolution de la fraction non-décantable des particules en entrée de décanteur a été construite à partir des résultats d'une étude de Mèche et Goncalves (2013), portant sur

l'effet de la dose de $FeCl_3$ sur les eaux brutes de la station Seine Aval (voir Figure 5.4). Cette étude a consisté à réaliser plusieurs jar-tests sur des eaux récoltées à différentes périodes pour mesurer le taux de MES décantées à diverses doses de $FeCl_3$ injectées (gamme étudiée de 0-60 g/m^3, polymère anionique fixé à 0,5 g/m^3). Ces résultats avaient déjà été utilisés pour estimer la valeur par défaut du paramètre f_{ns} du modèle original en assimilant la mesure d'efficacité d'enlèvement des MES en jar-test à la fraction décantable en entrée comme ce qui a été fait par Tik et Vanrolleghem (2017), mais en ne considérant que la valeur maximale observée. En réalité, la condition hydraulique et de floculation du jar-test est plus stable que celle de décanteur réel Le taux d'enlèvement observé en jar-test peut donc être différent de la fraction décantable au niveau de décanteur (Peric *et al.*, 2008). Cependant, pour une dose de $FeCl_3$ élevée (par exemple 30 g/m^3), l'efficacité d'enlèvement des MES obtenus par jar-test est proche à celle observée dans la station (voir les discussions suivantes).

La Figure 5.4 présente les résultats obtenus sur les taux d'enlèvement de MES aux différentes doses évaluées (Mèche et Goncalves, 2013). Pour les dosages de $FeCl_3$ entre 0-20 g/m^3, le taux d'enlèvement augmente rapidement en fonction de la dose utilisée, passant de 50 à 90% d'efficacité environ. Cependant, lorsque le dosage de $FeCl_3$ dépasse 20 g/m^3, un plateau d'efficacité est atteint autour de 90%, qui représente la fraction maximale de particules décantables dans les eaux brutes. Cette efficacité est similaire à celle observée sur le traitement primaire de la station Seine Centre des années 2000-2008 avec une dose de $FeCl_3$ autour de 30 g/m^3 (moyenne : 32,7 g/m^3).

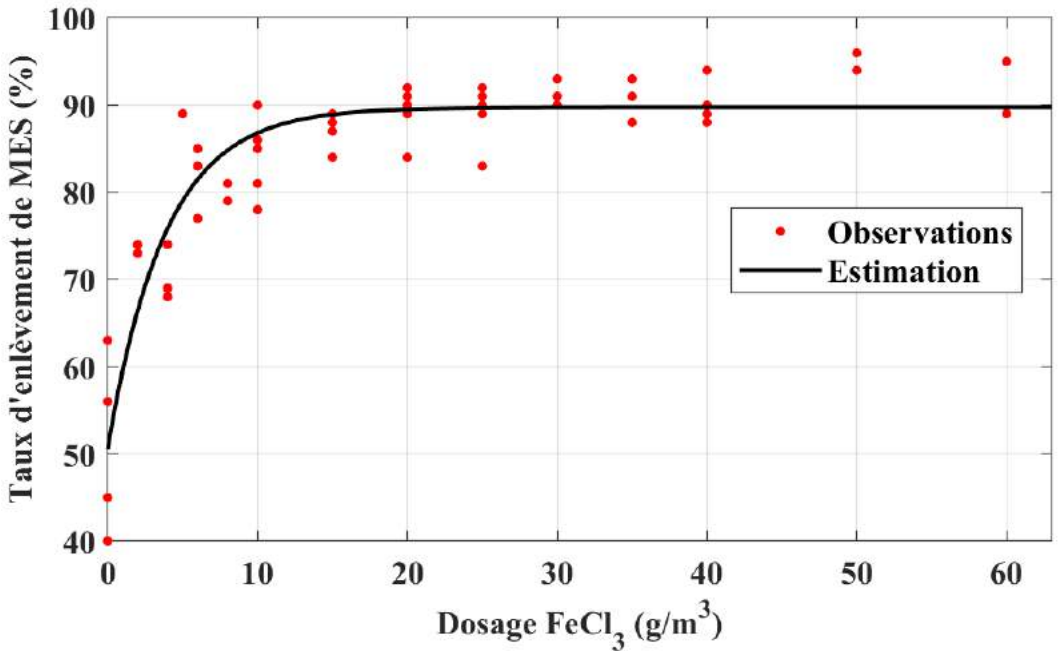


Figure 5.4 Taux de MES décantées en fonction du dosage de $FeCl_3$ lors d'essais jar-tests réalisés sur les eaux brutes de la station Seine Aval)(Mèche et Goncalves, 2013) et courbe d'estimation correspondante (points rouges : observations, ligne noire : courbe d'estimation.

L'effet de $FeCl_3$ sur l'efficacité d'enlèvement de particules est différent à celui d'alun observé par Tik et Vanrolleghem (2017), qui indique que pour une dose d'alun inférieure à 25 g/m^3, il n'y pas d'effet évident sur le taux d'enlèvement de particules. Pour cette raison, une équation exponentielle au lieu de celle sigmoïdale utilisée par Tik et Vanrolleghem (2017) a été proposée afin de relier l'efficacité de la décantation en fonction de la dose de $FeCl_3$ injectée (voir Eq 5.21). Les valeurs des paramètres dans l'équation Eq 5.21 sont estimées par la méthode de moindres carrés non-linéaires disponible dans la « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab® (MathWorks). Les résultats d'estimation ainsi que la précision d'estimation sont résumés au Tableau 5.1. La courbe correspondant à l'équation d'estimation est tracée en ligne noire à la Figure 5.4. Selon les résultats d'estimation, la fraction de MES décantables maximale estimée est de 89,3%, ce qui est proche du plateau d'efficacité (90%) observé en jar-tests. Le coefficient de détermination ajusté (R^2 ajusté, 0,83) et RMSE (5,2%) indiquent que la précision d'estimation est satisfaisante.

Eq 5.21 $$E = f_{s,max} * \left(1 - \alpha_1 e^{-\beta_1 * [FeCl_3]}\right) \quad (FeCl_3 \geq 0\ g/m^3)$$

où
E est le taux de MES décantées (%)
$f_{s,max}$ est la fraction de MES décantables maximale (%)
α_1 est la perte de taux des MES décantées en absence de $FeCl_3$ (-)
β_1 est le facteur illustrant l'effet de la concentration en $FeCl_3$ sur le taux des MES (m^3/g)

Tableau 5.1 Résultats d'estimation des paramètres de l'équation Eq 5.21 obtenus par le « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab®.

Résultats d'estimation	
Equation	$E = f_{s,max} * \left(1 - \alpha_1 e^{-\beta_1 * [FeCl_3]}\right)$
Nombre d'observations	56
Nombre de paramètres	3
$f_{s,\ max}$	89,3%
α_1	0,4354 (-)
β_1	0,2592 (m^3/g)
Précision d'estimation	
SSE (somme des erreurs au carré)	1450
R^2	0,8415
R^2 ajusté	0,8355
RMSE	5,2 %

Avec l'équation Eq 5.22, la fraction de MES non-décantables dans l'affluent en fonction de la dose de $FeCl_3$ peut donc être estimée.

Eq 5.22 $$f_{ns} = 1 - E = 100\% - \left(100\% - f_{ns,min}\right) * \left(1 - \alpha_1 e^{-\beta_1 * [FeCl_3]}\right)$$
$$avec\ f_{s,max} = 100\% - f_{ns,\min}$$

où
f_{ns} est la fraction de particules non-décantables dans l'affluent calculée et utilisée dans le modèle (variable, %)
$f_{ns,min}$ est la fraction minimale de particules non-décantables dans l'affluent (paramètre, 10,7%)

Concernant la description de l'évolution de la vitesse moyenne de chute des MES, les résultats de mesures ViCAs réalisées sur les eaux brutes de la station Seine Centre en 2018 sous différentes doses de $FeCl_3$ (0, 10, 20 et 30 g/m^3) ont été utilisés. Ces eaux ont des caractéristiques similaires à celles de la station Seine Aval (principalement résidentiel, urbain dense). Tel que présenté dans le Chapitre 2 (section 2.1.3.1), la mesure ViCAs est une méthode qui vise à analyser la distribution des vitesses de chute des particules en décantant un échantillon dans une colonne sous condition statique. A chaque intervalle de temps prédéterminé, les particules décantées sur une coupelle installée en dessous de la colonne sont récupérées. Leur masse est mesurée afin de tracer la courbe de la distribution des vitesses de chute des particules (Chebbo et Gromaire, 2009). Le protocole utilisé pour la campagne en 2018 est légèrement différent à celui de Chebbo et Gromaire (2009), afin d'adapter la mesure à la condition de décantation physico-chimique. Premièrement, avant la décantation dans la colonne de ViCAs, les eaux brutes sont coagulées (doses de $FeCl_3$: 10, 20 et 30 g/m^3, agitation à 200 rpm pour 2 minutes) et ensuite floculées (dose de polymère anionique : 0,8 g/m^3, agitation à 200 rpm pour 5 minutes). Deuxièmement, considérant que la vitesse de chute de particules augmente après l'ajout de réactifs, une colonne plus haute (1 m) que celle indiquée (0,6 m) dans le protocole original est utilisée. En revanche, cette dernière est utilisée pour mesurer la vitesse de chute pour les eaux brutes sans ajout de réactifs (sans $FeCl_3$ ni polymère) pendant la campagne. Troisièmement, au début de décantation, la fréquence de changement de coupelle en dessous de colonnes pour les échantillons coagulés et floculés est plus élevée que celle pour les échantillons sans ajout de réactifs (voir Tableau 5.2). Ceci permet de mesurer plus finement la distribution des particules ayant des vitesses de chute élevées.

Tableau 5.2 Les intervalles de temps prédéfinis pour changer les coupelles pendant les essais de ViCAs en fonction du type d'échantillon testé.

Type d'échantillon	Intervalles de temps prédéfinis pour changer les coupelles
Eau brute sans ajout de réactifs	1 min, 2 min, 4 min, 8 min, 16 min, 32 min, 60 min, 2 h, 4 h
Eau brute coagulée et floculée	30 sec, 1 min, 1,5 min, 2 min, 2,5 min, 3 min, 4 min, 5 min, 8 min, 16 min, 32 min, 60 min, 2 h, 4 h

Tel qu'illustré à la Figure 5.5a à la page suivante, sans ajout de réactifs, la plupart des particules (environ 70%-80%) dans l'eau brute ont une vitesse de chute inférieure à 100 m/j (4,17 m/h). Très peu de particules (<5%) possèdent une vitesse supérieure à 1000 m/j (41,77 m/h). L'injection de $FeCl_3$ et de polymère anionique a un effet important sur la distribution des vitesses de chute des particules (voir Figure 5.5b-d à la page suivante). Avec une dose de $FeCl_3$ de 10 g/m^3, la fraction de particules ayant une vitesse de chute inférieure à 100 m/j (4,17 m/h) diminue de 70%-80% à 10%-20% (Figure 5.5b). De plus, environ 30% de particules ont une vitesse supérieure à 1000 m/j (41,77 m/h). Lorsque le dosage de $FeCl_3$ augmente à 20 g/m^3 (Figure 5.5c), la fraction de particules possédant une vitesse supérieure à 1000 m/j (41,77 m/h) augmente encore plus, d'environ 30% à environ 40%. La fraction des particules avec vitesse de chute faible (100 m/j, 4,17 m/h) diminue encore légèrement. Enfin, par rapport aux résultats obtenus à la dose de 20 g/m^3, très peu d'évolution sur les distributions des vitesses de chute ont été observée pour la dose de $FeCl_3$ de 30 g/m^3 (voir Figure 5.5d), ce qui signifie qu'il existe probablement une limitation d'effet de $FeCl_3$ sur la vitesse de chute de particule.

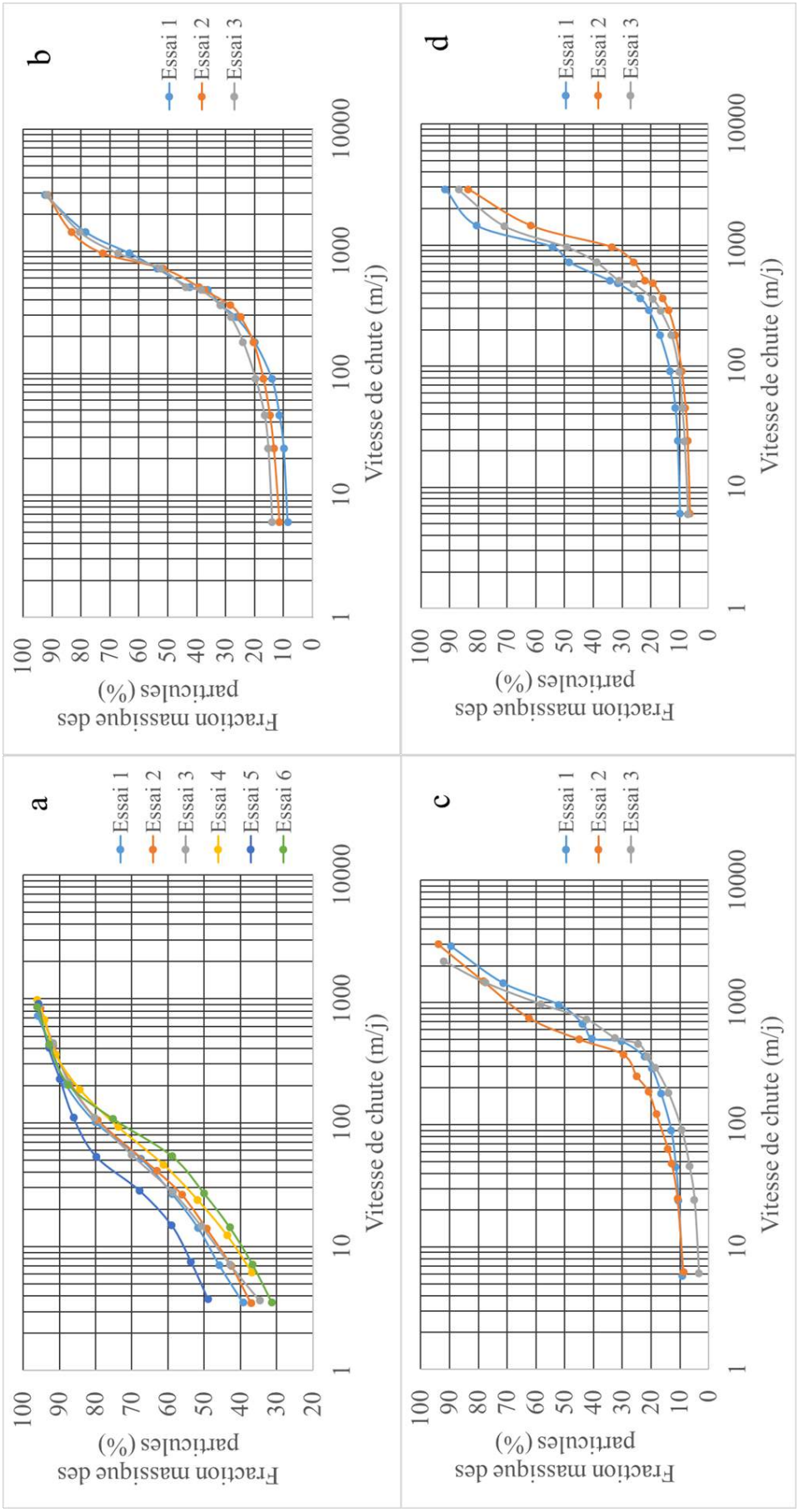


Figure 5.5 Résultats des essais de ViCAs sur les eaux brutes de la station Seine Centre obtenus par la direction innovation du SIAAP (chaque essai correspond à une mesure de ViCAs sur un échantillon de l'eau brute). a. Sans $FeCl_3$ et polymère et avec dose de chlorure ferrique de b. 10 g/m^3 c. 20 g/m^3 d. 30 g/m^3.

Comme il existe toujours une fraction de particules restant dans la colonne de ViCAs après la dernière récupération de coupelle et la vitesse de chute de ces particules ne peut pas être précisément mesurée, la vitesse moyenne de chute des particules dans l'échantillon est donc difficile à calculer directement. Pour cette raison, la vitesse moyenne de chute est estimée à partir de la vitesse de chute supérieure à 50% de particules (la vitesse médiane de chute). Cette dernière est calculée en interpolant les deux points expérimentaux adjacents à 50% de particules. Tel qu'illustré à la Figure 5.6 à la page suivante, l'effet d'un passage d'une dose de 0 à 10 g/m^3 de $FeCl_3$ sur l'augmentation de la vitesse de chute moyenne est beaucoup plus forte que celle pour un passage de 10 à 30 g/m^3. Bien que les résultats de mesures ViCAs disponibles montrent bien la tendance de l'évolution de la vitesse de chute en fonction de la dose de $FeCl_3$ et la Figure 5.6 indique que l'augmentation de la vitesse de chute moyenne n'est pas proportionnelle à la dose utilisée, à cause d'un manque de données expérimentales pour les dosages faibles, il reste difficile d'établir avec certitude de la forme de l'équation devant servir à estimer la vitesse moyenne de chute. Avec les résultats actuellement obtenus, on suppose que l'effet de $FeCl_3$ sur la vitesse de chute moyenne est similaire à celui sur l'efficacité d'enlèvement de particules précédemment observée en jar-tests. Pour cette raison, comme ce qui a été fait par Tik et Vanrolleghem (2017), la forme d'équation proposée ici (voir Eq 5.23) pour estimer la vitesse de chute moyenne en fonction de la dose de $FeCl_3$ est identique à celle estimant l'efficacité d'enlèvement des MES (voir Eq 5.21) avec différents paramètres considérés. Cette équation pourra être améliorée ou même éventuellement être modifiée lorsque davantage de résultats de ViCAs seront disponibles. Par exemple, tel que présenté au Chapitre 2, Bachis *et al.* (2015) proposent de fractionner des particules selon leur vitesse de chute obtenue par les mesures de ViCAs afin de mieux décrire le comportement de la décantation des particules. Cependant, considérant qu'un tel modèle doit inclure les différentes fractions de la DCO particulaire, l'application de cette proposition est relativement complexe.

La « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab® a également été utilisée pour estimer les valeurs des paramètres de l'équation Eq 5.23 (voir le Tableau 5.3). La courbe d'estimation issue de cette équation et les observations des mesures ViCAs sont montrées à la Figure 5.6.

Eq 5.23 $$v_0 = v_{max} * \left(1 - \alpha_2 e^{-\beta_2 * [FeCl_3]}\right)$$

où
v_0 est la vitesse moyenne de chute des particules (m/j).
α_2 est la perte de la vitesse de chute en absence de $FeCl_3$ (-)
β_2 est le facteur illustrant l'effet de la concentration en $FeCl_3$ sur la vitesse de chute (m^3/g).
v_{max} est le maximum de la vitesse moyenne de chute (m/j).

En fin, contrairement au modèle original, la vitesse moyenne de chute des particules organiques est identique à celle des particules inorganiques dans le modèle développé.

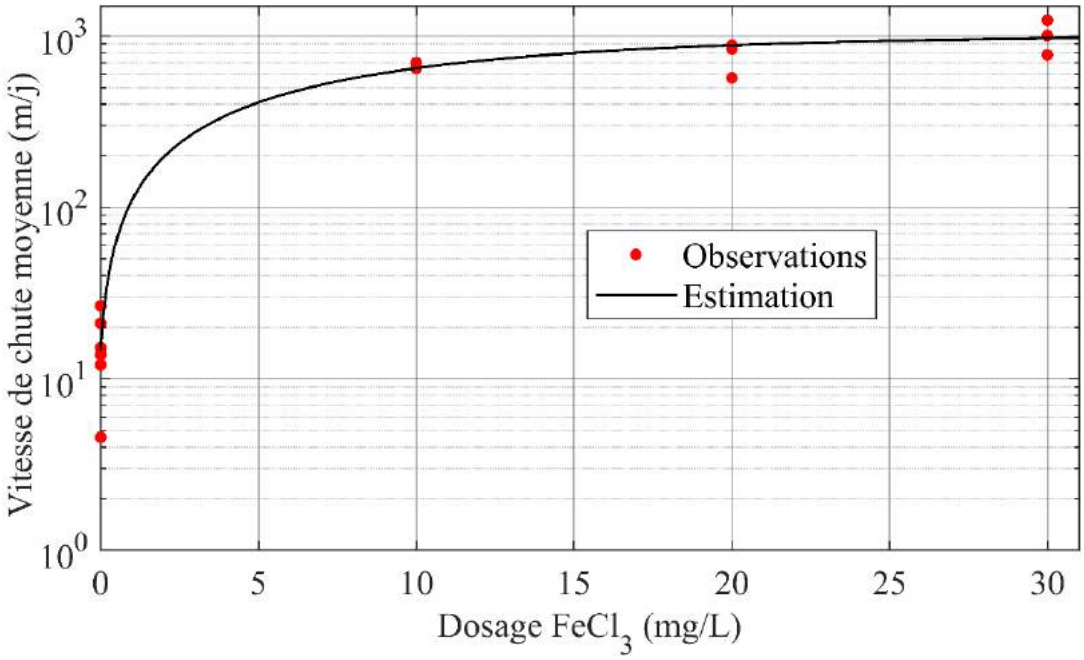


Figure 5.6 Vitesse de chute moyenne de particules obtenue à partir des mesures de ViCAs en fonction de la dose de $FeCl_3$ utilisée et la courbe d'estimation issue de la « Curve Fitting Toolbox ». (points rouges : observations, ligne noire : courbe d'estimation)

Tableau 5.3 Résultats d'estimation des paramètres de l'équation Eq 5.23 obtenus par la « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab®.

Résultats d'estimation	
Equation	$v_0 = v_{max} * \left(1 - \alpha_2 e^{-\beta_2 * [FeCl_3]}\right)$
Nombre d'observations	15
Nombre de paramètres	3
v_{max}	1026 m/j (42,75 m/h)
α_2	0,9852 (-)
β_2	0,09916 (m^3/g)
Précision d'estimation	
SSE (somme des erreurs au carré)	77930
R^2	0,9706
R^2 ajusté	0,9657
RMSE	80,59 (m/j)

5.3. Modélisation de la décantation primaire de la station Seine Centre

5.3.1. Procédé modélisé

Le modèle développé a d'abord été utilisé pour simuler le traitement primaire de la station Seine Centre. Le fonctionnement global de cette station a pour rappel été présenté au Chapitre 4 en lien avec le travail de modélisation de la post-dénitrification par biofiltration. L'étage de décantation primaire de cette station contient neuf décanteurs identiques de type Densadeg® (Degrémont Technologies, voir Figure 5.7). L'affluent entre d'abord dans deux cuves de mélange rapide (75 m^3 chacune) où le chlorure ferrique est injecté. Il est ensuite envoyé vers un bassin de floculation (373 m^3) pour y être mis en contact et mélangé avec le polymère ajouté pour réaliser la maturation des flocs. Après la coagulation et la floculation, l'eau est traitée par le bassin de décantation d'une surface de 225 m^2 (1640 m^3) qui possède une zone de lamelles fournissant une surface projetée totale de 1512 m^2. Ce type de décanteur permet en théorie de recirculer une partie des boues retirées en bas du bassin de décantation vers le bassin de floculation afin d'améliorer cette dernière. Cette option n'est cependant pas utilisée à la station Seine Centre.

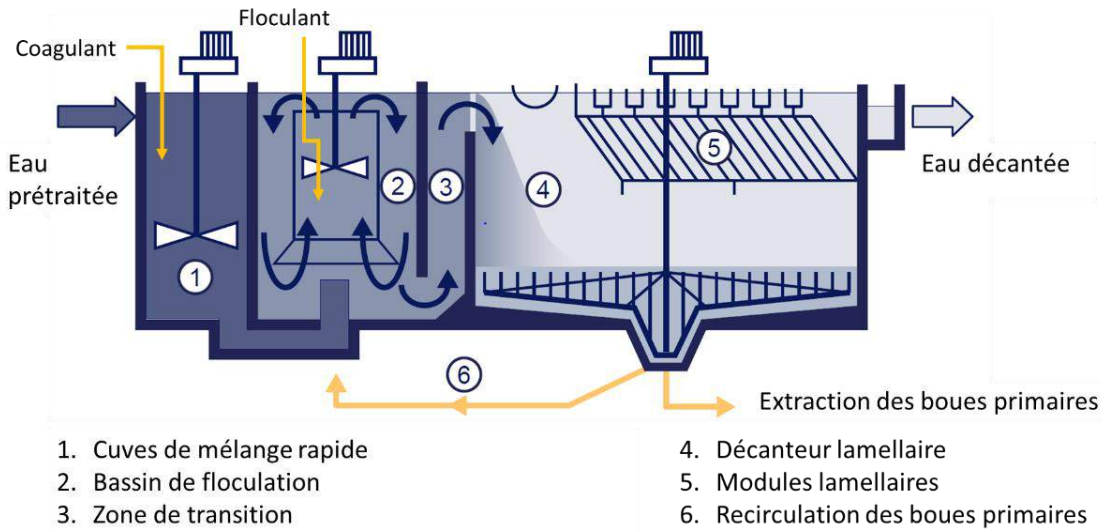


Figure 5.7 Schéma de fonctionnement d'un décanteur lamellaire physico-chimique de type Densadeg® (Degrémont Technologies) (adaptée de Suez (2015)).

Pendant le traitement, le nombre de décanteurs en service est déterminé en fonction du débit à traiter en entrée, afin de stabiliser autant que possible le temps de séjour hydraulique pour chaque décanteur. Les doses de réactifs à ajouter étaient, pour la période étudiée, estimées en se basant sur les essais en jar-tests effectués par les agents de la station et la concentration en MES en sortie à atteindre (inférieur à 50 mg/L).

5.3.2. Description des jeux de données et du modèle de fractionnement utilisés

Les données d'exploitation des décanteurs primaires utilisées pour calibrer et valider le modèle développé sont identiques à celles utilisées lors de la construction du modèle SimDec à l'origine. Ils comprennent les résultats d'analyse en laboratoire de la station sur des échantillons composites 24h prélevés en entrée et en sortie de procédé et les données d'exploitation de procédé (débit en entrée, nombre de décanteurs en service, dosage de $FeCl_3$ et débit de soutirage des boues) pour les années 2000 à 2008. Le tableau 5.4 résume les conditions d'exploitation principales pour les décanteurs primaires de la station Seine Centre. La dose de $FeCl_3$ moyenne utilisé pour la période de calibration/validation est relativement élevée (32,7±6,0 g/m^3). Selon les observations des jar-tests et des mesures ViCAs précédemment présentées ainsi que les équations Eq 5.22 et Eq 5.23, une dose de $FeCl_3$ à ce niveau peut conduire à une fraction de particules non-décantables qui est très faible et proche à la $f_{ns,\,min}$ estimée (10,7%, voir Eq 5.22) et une vitesse moyenne de chute de particules élevée près de la $V_{0,\,max}$ estimée (42,75 m/h, voir Eq 5.23).

Tableau 5.4 Conditions d'exploitation principales des décanteurs lamellaires physico-chimiques de la station Seine Centre de 2000 à 2008.

Conditions d'exploitation	Nombre d'observations	Moyenne	Ecart-type
Débit moyen par décanteur (m^3/j)	2910	78736	7575
DCO (mgO$_2$/L)	2929	347,8	88,0
MES (mg/L)	2929	206,5	59,2
DCO filtrée (mgO$_2$/L)	2021	117,4	32,2
PO_4^{3-} (mgP/L)	2910	2,5	0,6
Dosage $FeCl_3$ (g/m^3)	2930	32,7	6,0

A partir des mesures disponibles, le fractionnement de l'affluent a été construit et intégré dans le bloc d'affluent du modèle. La concentration en matières organiques particulaires (DCOx) dans l'affluent est estimée en calculant la différence entre DCO et DCO soluble (DCOs) (voir Figure 5.8 et Tableau 5.5 à la page suivante). Cette dernière est considérée égale à la mesure de la DCO filtrée en entrée. La concentration en particules inorganiques (X_{ii}) en entrée de procédé est estimée en se basant sur la concentration en matières en suspension à l'aide d'un paramètre de fraction (f_{xii}) (voir Eq 5.24). Cette fraction est calculée à partir du rapport MVeS/MES en entrée de traitement primaire de la station (autour de 0,25 g X_{ii}/g MES selon Bernier et Rocher (2014))

Eq 5.24 $$X_{ii} = f_{xii} * MES$$

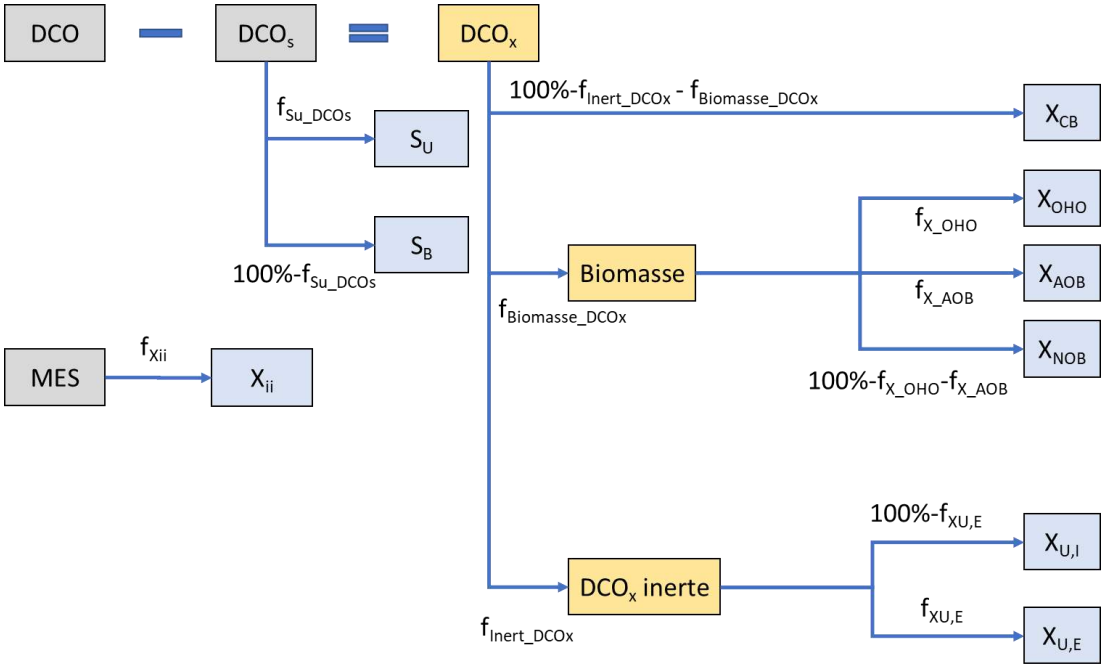


Figure 5.8 Estimation des composants de DCO et de particules à partir des mesures en entrée de procédé (blocs en gris : les mesures en entrée, blocs en jaune : variables intermédiaires, blocs en bleu : variables en entrée du modèle).

Tel que présenté dans la section 2.1.3.2 sur le principe de la décantation physico-chimique, la coagulation-floculation permet d'améliorer largement l'enlèvement des colloïdes présents dans les eaux usées. Pour simuler l'influence de l'ajout des coagulants et des floculants sur ce genre de particule, il vaut mieux considérer la fraction colloïdale pour le fractionnement de la DCO (Drewnowski et Makinia, 2014; Drewnowski *et al.*, 2020). Cependant, comme il manque d'informations sur la distribution de la taille des particules en entrée et en sortie des décanteurs, il est difficile d'estimer la fraction des particules colloïdales (0.001-1µm) avant et après le traitement. De plus, dans le cadre de la thèse, on n'a pas réalisé une étude de fractionnement sur l'eau usée en entrée de la station Seine Centre avec différentes méthodes physico-chimiques et biologiques (Drewnowski et Makinia, 2014). Il est donc difficile de mettre en lien la fraction colloïdale et les variables d'état utilisées dans le modèle, comme, par exemple X_{CB} et $X_{U,I}$. Pour ces raisons, la fraction colloïdale n'a pas été considérée pour le fractionnement de la DCO appliqué pour le modèle.

Il est à noter aussi que le modèle SimDec ne prend pas en compte la présence de biomasse dans l'affluent. Cependant, des phénomènes biologiques comme l'hydrolyse des matières organiques peuvent avoir lieu au niveau de la décantation primaire (Gernaey *et al.*, 2001). Ces phénomènes sont liés à la présence de la biomasse dans l'eau en entrée des décanteurs primaires. Pour cette raison, la fraction de biomasse dans la DCO particulaire en entrée ($f_{Biomasse_DCOx}$) est considérée par le modèle développé. La valeur de cette fraction est fixée à 1% pour ne pas trop influencer

les valeurs du fractionnement des autres composants issues du modèle SimDec. Cette valeur reste à vérifier par des mesures respirométriques afin de mieux caractériser la composition de l'eau en entrée des décanteurs (Choubert *et al.*, 2010).

Tableau 5.5 Les paramètres de fractionnement utilisés pour la DCO et les MES en entrée de procédé.

Paramètres de fractionnement	Symbole	Valeur
La fraction de la DCO soluble non-biodégradable dans la DCO soluble en entrée	f_{Su_DCOs}	20%[a]
La fraction de la biomasse dans la DCO particulaire en entrée	$f_{Biomasse_DCOx}$	1%
La fraction de la DCO particulaire inerte dans la DCO particulaire en entrée	f_{Inert_DCOx}	20%[a]
La fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	f_{X_OHO}	99%
La fraction de la biomasse AOB dans la biomasse en entrée	f_{X_AOB}	0,5%
La fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particule inerte en entrée	$f_{XU,E}$	5%
La fraction des particules inorganiques dans les particules totales en entrée	f_{Xii}	25%[a]

[a] Valeurs issues du modèle SimDec (Bernier et Rocher, 2014).

Pour les autres variables, les concentrations en S_{NH4}, S_{NO3}, S_{NO2}, S_{Alk} et S_{PO} en entrée sont utilisées directement celles mesurées à l'entrée de procédé. Les concentrations des variables d'azote organique biodégradables ($S_{B,N}$ et $X_{CB,N}$) en entrée sont déduites à partir des concentrations en NTK et NH_4^+ mesurées, des concentrations en biomasse et en DCOx inerte estimées et de la concentration en S_{NH2OH} en entrée (voir Eq 5.25). Cette dernière est fixée à une valeur par défaut (0,0001 mgN/L) comme les autres variables solubles (S_{N2O}, S_{N2}, S_{NO} et S_{DO}) qui ne sont pas mesurées en entrée de procédé, pour éviter les erreurs numériques de calcul. Les concentrations en X_{MeOH} et en X_{MeP} sont fixées à 0 mg/L. Enfin, comme le transfert gaz-liquide n'est pas intégré dans le modèle de décantation physico-chimique, les flux des variables gazeuses (G_{O2}, G_{CO2}, G_{N2}, G_{NO} et G_{N2O}) sont considérés nuls en entrée.

Eq 5.25 $$S_{B,N} + X_{CB,N} = NTK - S_{NH4} - S_{NH2OH} - i_{N_{XCB}} * Biomasse - i_{N_{inerte}} * DCO_X\ inerte$$

$$avec\ X_{CB,N}/(S_{B,N} + X_{CB,N}) = 0{,}65;$$

$$Biomasse = f_{Biomasse_DCOx} * DCOx;$$

$$DCOx\ inerte = f_{inerte_DCOx} * DCOx$$

où
i_{N_XCB} est la quantité d'azote dans la biomasse (gN/gDCO).
i_{N_inerte} est la quantité d'azote dans les DCO particulaires inertes (gN/gDCO).

5.3.3. Calibration du modèle

La calibration a été réalisée pour cinq variables en sortie de traitement : MES, DCO, DCO soluble (DCO filtrée), PO_4^{3-} et alcalinité sur la première moitié du jeu de données (1650 jours, de janvier 2000 à juillet 2004). Les valeurs par défaut des paramètres sont résumées au Tableau 5.6. Une simulation a été d'abord réalisée avec tous les paramètres à leur valeur par défaut issue du modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016). Les scores statistiques (ME et MAE) décrivant l'erreur de prédiction sont calculés et comparés avec ceux obtenus par le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016) pour évaluer les changements de la performance de la prédiction du modèle apportés par les modifications présentées dans la section 5.2.

Tableau 5.6 Valeurs par défaut des paramètres pour le modèle de décantation primaire.

Paramètre	Symbole	Valeur par défaut	Unité
Maximum de la vitesse moyenne de chute	v_{max}	1026[a]	m/j
Fraction minimum de particules non-décantables en entrée de décanteur	$f_{ns,\ min}$	10,7[a]	%
Constante de coagulation de la DCOs	k	68[b]	1/j
Constante de précipitation du PO_4^{3-}	$k_{formation}$	400[b]	$m^3/g/j$
Constante de dissociation de $Fe_aPO_4(OH)_{3(a-1)}$	$k_{dissociation}$	0[b]	1/j
Produit final de précipitation $Fe_aPO_4(OH)_{3(a-1)}$	a	2,3[b]	-
Facteur de conversion de la DCO particulaire en MES	$f_{MES-DCO}$	0,75[b]	g/gO_2
Perte de taux d'enlèvement en absence de $FeCl_3$	α_1	0,4354[a]	-
Constante β_1	β_1	0,2592 [a]	m^3/g
Perte de la vitesse de chute en absence de $FeCl_3$	α_2	0,9852 [a]	-
Constante β_2	β_2	0,09916 [a]	m^3/g

[a] Voir Tableau 5.1 et 5.3.
[b] Valeurs issues du modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016).

Les résultats de scores statistiques obtenus sur tout le jeu de données de calibration (voir le Tableau 5.7 à la page suivante) avec les valeurs par défaut des paramètres pour les MES, la DCOs, le PO_4^{3-} et l'alcalinité en sortie de décantation sont proches de ceux du modèle SimDec de référence. Cette performance similaire est attendue. En effet, premièrement, les équations liées à la coagulation de la DCO soluble et la précipitation de phosphates dans le bloc représentant les cuves de coagulation/floculation ont été conservées dans le modèle développé. Deuxièmement, la valeur de la fraction de particules non-décantables (10,7 %) estimée par le

modèle développé est proche de celle du modèle d'origine (12,6%). Par contre, la vitesse moyenne de chute des MES estimée à partir des mesures ViCAs (environ 1000 m/j, 41,7 m/h) est largement plus élevée que celle considérée par le modèle SimDec (92 m/j, 3,8 m/h). Ceci semble indiquer qu'à doses de chlorure ferrique élevées, c'est le paramètre « fraction de particules non-décantables » qui dicte les concentrations en MES en sortie. Similaire au modèle SimBio, le score ME de la prédiction de la concentration en orthophosphates (0,13 mgP/L) est élevé et représente environ 30% de la concentration moyenne observée en sortie. Cette déviation est liée plutôt à la résolution et le changement de la limite de quantification des orthophosphates en sortie de procédé (qui va être présenté et discuté en détails plus loin dans cette section) au lieu de la performance de prédiction du modèle.

Tableau 5.7 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de calibration du modèle développé avec les valeurs par défaut des paramètres et les scores obtenus par le modèle SimDec pour la même période de simulation.

Scores statistiques	MES	DCO	DCOs	PO_4^{3-}	Alcalinité
Moyenne en sortie (mg/L)	25,7	114,9	79,6	0,34	294,2
Nombre d'observations	1484	1486	1022	1488	1021
ME (mg/L)	0,2	-7,5	3,2	-0,06	23,2
[a] ME SimDec (mg/L)	0,2	-1,8	3,3	-0,1	18,0
MAE (mg/L)	7,0	17,1	12,2	0,13	25,6
[a] MAE SimDec (mg/L)	7,7	16,3	12,1	0,1	21,6
RMSE (mg/L)	8,8	22,4	16,1	0,18	33,0

[a] Scores obtenus par le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016).

Le résultat obtenu pour le score d'erreur moyenne (ME) sur la DCO (voir Tableau 5.7) indique que la concentration en sortie est légèrement sous-estimée par rapport au modèle SimDec. Basé sur les expériences acquises lors du développement du modèle, les paramètres $f_{ns,\,min}$ et $f_{MES\text{-}DCO}$ qui influencent la prédiction de la DCO et des MES en sortie, ont été légèrement ajustés manuellement afin d'améliorer la performance de prédiction en diminuant le biais moyen du modèle. Les valeurs ajustées sont résumées au Tableau 5.8. Les scores statistiques obtenus après ces ajustements seront présentés et discutés plus loin dans cette section.

Tableau 5.8 Valeurs avant et après ajustement des paramètres pour améliorer la performance de prédiction du modèle développé sur la DCO en sortie de décanteur.

Paramètre	Symbole	Valeur par défaut	Valeur ajustée
Fraction minimum de particules non-décantables (-)	$f_{ns,\,min}$	10,7%	12,0%
Equivalence MES-DCOx (g/gDCO)	$f_{MES\text{-}DCO}$	0,75	0,68

Les résultats de prédiction des jours 500-1500 sur l'enlèvement de matières organiques (DCO et DCOs) du modèle développé après l'ajustement des paramètres sont montrés à la Figure 5.9 et à la Figure 5.10, respectivement. Afin de montrer plus clairement la performance de prédiction du modèle sur un jeu de données long-terme (1650 jours), seulement les résultats des jours 500-1500 (de mai 2001 à février 2004) sont tracés. Tel qu'illustré sur ces figures, le modèle développé parvient en général à bien reproduire le niveau et les variations majeures observées des concentrations en matières organiques en sortie des décanteurs primaires. La performance de prédiction des autres jours de la période de calibration sur ces deux variables en sortie est aussi satisfaisante.

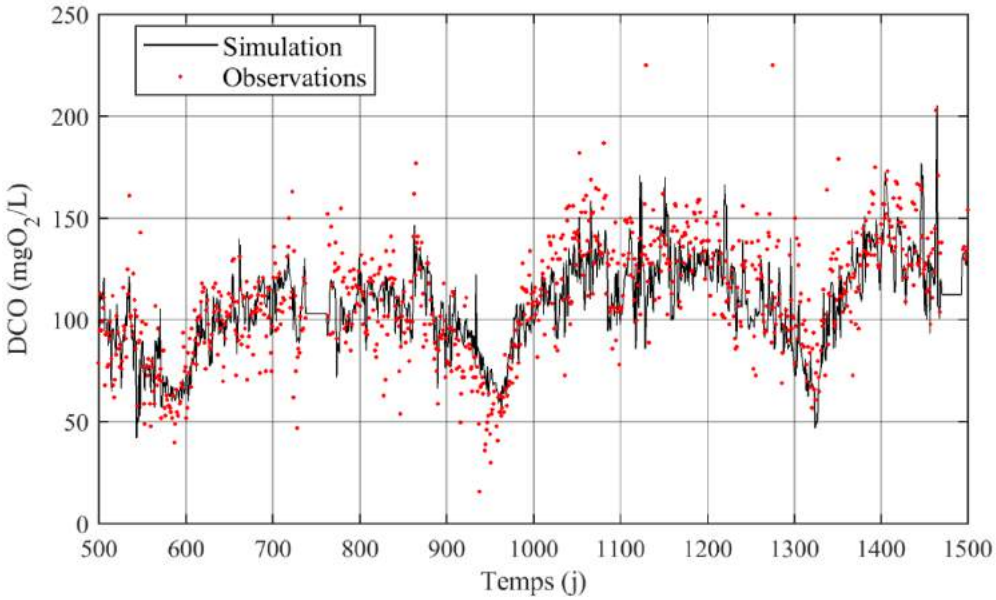


Figure 5.9 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire.

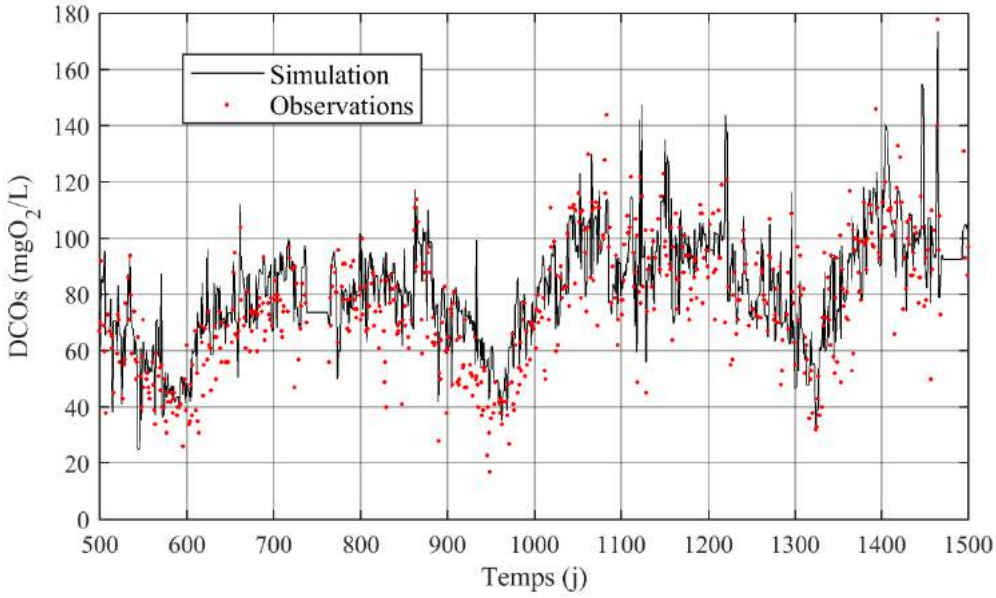


Figure 5.10 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en DCOs en sortie de la décantation primaire.

Le modèle surestime la DCOs en sortie pour les jours 900-950 (de mi-juin 2002 à mi-août 2002), ce qui influence donc également la prédiction de DCO pour ces jours. Cette surestimation indique que la vitesse de coagulation de la DCO soluble peut être plus forte que celle estimée, ce qui n'a pas pu être prédit avec une constante cinétique fixée. Cependant, la DCO soluble en sortie des deux autres périodes estivales autour des jours 500-600 et des jours 1250-1350 est bien prédite par le modèle (voir Figure 5.10). Selon les données d'exploitation du procédé, la DCO filtrée en entrée de ces deux périodes diminuent de 120 mgO_2/L à 60 mgO_2/L, ce qui est similaire à celle observée pour la période des jours 900-950. La dose de $FeCl_3$ utilisée pour la période des jours 500-600 est autour de 40-45 mg/L, ce qui est proche de celle des jours 900-950, tandis que pour les jours 1250-1350, une dose plus faible (autour de 30-35 mg/L) a été appliquée. Ces informations d'exploitation signifient que les erreurs de prédiction des jours 900-950 ne sont pas causées par la variation de la dose de $FeCl_3$, mais plutôt liées à la variation de la nature des matières organiques solubles dans l'affluent. Certaines études ont déjà indiqué que les matières organiques hydrophobes, qui contiennent des charges négatives à leur surface et possèdent des masses molaires élevées, peuvent être enlevées plus efficacement par la coagulation/floculation que les matières organiques hydrophiles (Zhao *et al.*, 2013; Ghernaout, 2014). Bien que le ratio hydrophile/hydrophobe de la matière organique soluble de l'eau usée peut être estimé à l'aide de la chromatographie en phase liquide à haute performance et la spectroscopie ultraviolet-visible (Zhao *et al.*, 2013), le développement de l'équation illustrant la relation entre le cinétique de coagulation/floculation de la matière organique et le ratio estimé reste difficile à réaliser.

La Figure 5.11 présente les résultats de calibration du modèle développé pour les MES en sortie de décantation pour la période des jours 500-1500. Tel qu'illustré par cette figure, le niveau de la concentration moyenne en MES en sortie de procédé peut être bien prédit par le modèle. Cependant, certaines variations et les concentrations particulièrement faibles (inférieures 20 mg/L) ou élevées (supérieures à 40 mg/L) observées en sortie de procédé ne sont pas bien reproduites par le modèle développé. Ce problème de prédiction a été également observé dans les résultats de simulation du modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016). Pour les résultats des jours 600-700 où la concentration en MES est surestimée, la DCO et la DCOs en sortie sont bien prédites par le modèle (voir Figure 5.9 et 5.10). Les erreurs de la prédiction de la concentration en MES en sortie pour cette période sont donc probablement liées à une surestimation de la fraction de particules inorganiques dans l'influent de traitement primaire pour cette période. Les MES et la DCO totale en sortie ont été toutes les deux sous-estimées pour les jours 1050-1100, ce qui suggère qu'il y a probablement une sous-estimation de la fraction de particules non-décantables en entrée de décanteurs à ce moment. Similaire à la prédiction de la DCO soluble en sortie, en l'absence d'informations quotidiennes sur le fractionnement précis des

particules non-décantables et inorganiques dans l'affluent, il est difficile à prédire l'efficacité de traitement lorsque la composition et la nature de MES en entrée varient beaucoup. Par exemple, en temps de pluie, les particules accumulées dans les réseaux de transport des eaux usées en temps sec peuvent être re-suspendues à cause de forts débits (Verbanck, 1995a), ce qui peut influencer la composition des particules présentes dans l'eau brute de la station (Chebbo et Bachoc, 1992; Martin et Vanrolleghem, 2014). La performance de traitement primaire peut alors être influencée. En pratique, la fraction de particules non-décantables peut être estimée à l'aide de jar-test, tandis que la fraction de particules inorganiques peut être déterminée en mesurant le ratio MVeS/MES (matières volatiles en suspension/matière en suspension)(Rieger *et al.*, 2012).

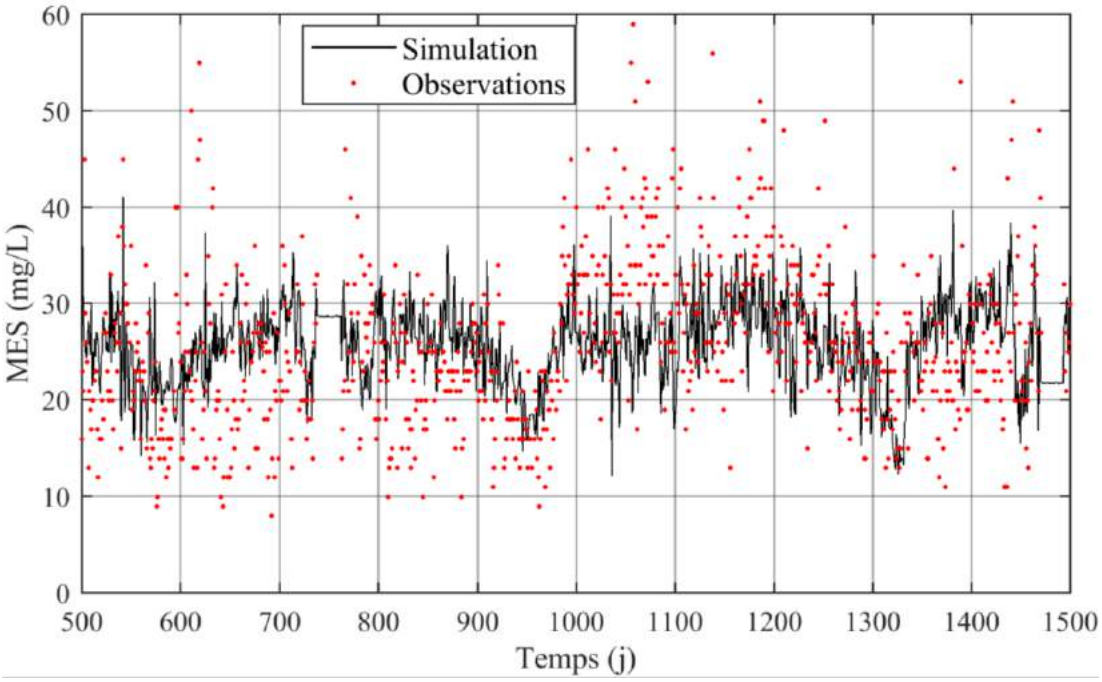


Figure 5.11 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en MES en sortie de la décantation primaire.

La Figure 5.12 (à la page suivante) montre les résultats partiels de simulation sur l'enlèvement de PO_4^{3-} de la période de calibration. La période choisie à montrer dans ce cas-ci (jours 200-1200, de mi-juillet 2000 à mi-avril 2003) est différente à celle de la DCO, la DCOs et les MES. Il faut noter que, à partir du jour 700, la limite de quantification pour la mesure en laboratoire des orthophosphates en sortie de procédé a visiblement été augmentée, passant de 0,1 à 0,25 mgP/L. Ceci fait en sorte que la majorité des mesures réalisées sur site se trouvent à ou sous la limite de quantification. Or, la plupart des résultats de simulation obtenus indiquent une concentration inférieure à 0,25 mgP/L. D'ailleurs, la résolution des résultats d'analyse n'est pas très bonne. Pour ces raisons, les résultats de la période des jours 1200-1650 sont peu intéressants à afficher pour montrer et discuter la performance de prédiction du modèle. Tel qu'illustré à la Figure 5.12 le modèle développé simule bien le niveau des phosphates en sortie entre les jours

200 et 700. Les variations de phosphates en sortie pendant les deux périodes de pics observés autour des jours 250-500, ont été bien suivies par le modèle. Ces deux périodes de pics sont liées à une augmentation importante de la concentration des orthophosphates en entrée. Quelques surestimations ont été toutefois observées, qui sont probablement dues à l'utilisation d'une seule forme chimique pour illustrer le précipité formé par la complexation entre le $Fe(OH)_3$ et les orthophosphates. Selon El Samrani *et al.* (2004) et Szabó *et al.* (2008), cette forme chimique peut varier en fonction du rapport molaire entre le fer dosé et la concentration en orthophosphates dans l'eau brute (ratio Fe/P initial). Cependant, comme la plupart des résultats de simulation sont situés en dessous de la limite de quantification, il est difficile avec les données récoltées sur site d'étudier en détails l'effet de la variation du ratio Fe/P initial sur le changement de la forme finale moyenne du précipité formé.

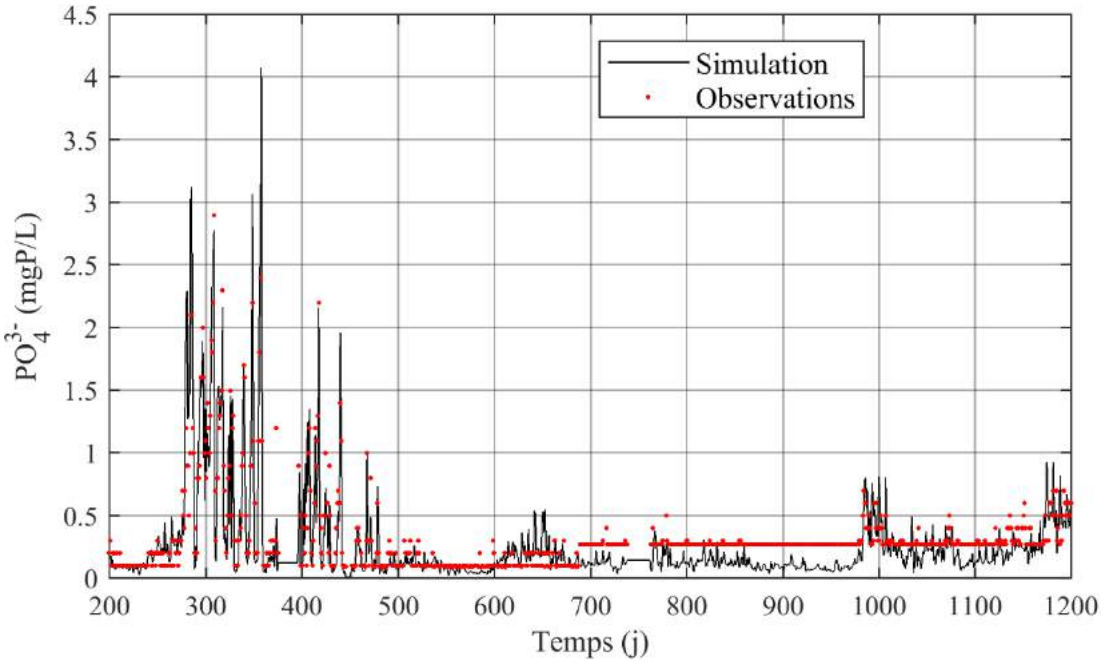


Figure 5.12 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mi-juillet 2000 à mi-avril 2003 (jours 200-1200) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la décantation primaire.

Les scores statistiques après l'ajustement des paramètres présentés au Tableau 5.8 ont été recalculés et résumés au Tableau 5.9. Par rapport aux scores obtenus avec les valeurs par défaut des paramètres (voir le Tableau 5.7), l'erreur moyenne (ME) pour la prédiction de la DCO a été réduite de -7,5 à -4,6 mgO_2/L. Le score ME pour la prédiction des MES en sortie a été légèrement augmenté (de 0,2 mg/L à 1,2 mg/L) mais reste acceptable par rapport à la moyenne observée en sortie de procédé (25,7 mg/L). Tel que mentionné précédemment, à cause de la résolution d'analyse et du changement de la limite de la quantification des orthophosphates en sortie, il est difficile à évaluer la performance de prédiction du modèle pour cette variable en se basant sur les scores statistiques. À l'exception des orthophosphates, les scores ME obtenus pour les variables en sortie sont inférieurs à 10% de la moyenne observée, ce qui signifie que

le biais général entre les résultats de simulation et les observations en sortie de procédé est faible. Les valeurs des scores MAE et RMSE rapportées à la moyenne des observations sont elles aussi relativement faibles pour la DCO, la DCOs et l'alcalinité (autour de 20%). À cause des erreurs de prédiction sur les observations particulièrement faibles ou élevées de la concentration en MES en sortie de décantation, le score RMSE (9 mg/L) pour cette variable représente environ 30% de la concentration moyenne (25,7 mg/L). Considérant que ces erreurs de prédiction sur cette variable en sortie sont probablement liées à un manque de caractérisation quotidienne de l'affluent concernant la fraction des particules non-décantables et celles inorganiques sous différentes conditions d'exploitation, comme, par exemple, temps sec et temps de pluie, ce résultat est quand même satisfaisant.

Tableau 5.9 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de calibration du modèle développé avec les paramètres ajustés et les scores obtenus par le modèle SimDec pour la même période de simulation.

Scores statistiques	MES	DCO	DCOs	PO_4^{3-}	Alcalinité
Moyenne en sortie (mg/L)	25,7	114,9	79,6	0,34	294,2
Nombre d'observations	1484	1486	1022	1488	1021
ME (mg/L)	1,4	-4,6	3,2	-0,06	23,2
[a] ME SimDec (mg/L)	0,2	-1,8	3,3	-0,1	18,0
MAE (mg/L)	7,2	16,2	12,2	0,13	25,6
[a] MAE SimDec (mg/L)	7,7	16,3	12,1	0,1	21,6
RMSE (mg/L)	9,0	21,5	16,1	0,18	33,0

[a] Scores obtenus par le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016).

Pour les deux paramètres ajustés (voir le Tableau 5.8), la valeur de $f_{ns,\,min}$ augmente de 10,7% à 12%, ce qui permet de réduire le biais général de la prédiction sur la concentration en DCO en sortie. Pour rappel, la valeur (10,7%) est obtenue en fonction des résultats en jar-tests sur les eaux brutes de la station Seine Aval au lieu de celles de la station Seine Centre. Cette augmentation est donc probablement liée aux différences mineures sur les caractéristiques de décantation des eaux brutes entre ces deux stations. L'augmentation de la valeur de $f_{ns,min}$ influence la performance de la prédiction de la concentration en MES en sortie. La valeur du facteur de conversion de la DCOx à MES ($f_{MES\text{-}DCO}$) a été légèrement diminuée de 0,75 g/gO_2 à 0,68 g/gO_2.

5.3.4. Validation du modèle

Suite à la calibration du modèle développé, la deuxième moitié du jeu de données (jours 1651 à 3229, de juillet 2004 à novembre 2008) est simulée pour l'étape de validation. La Figure 5.13 et la Figure 5.14 montrent respectivement les résultats de simulation pour la DCO et la DCOs en sortie de procédé. Encore une fois, aux fins de clarté, seulement la période des jours 2000-3000 (de fin juin 2005 à mi-mars 2008) est présentée sur les figures.

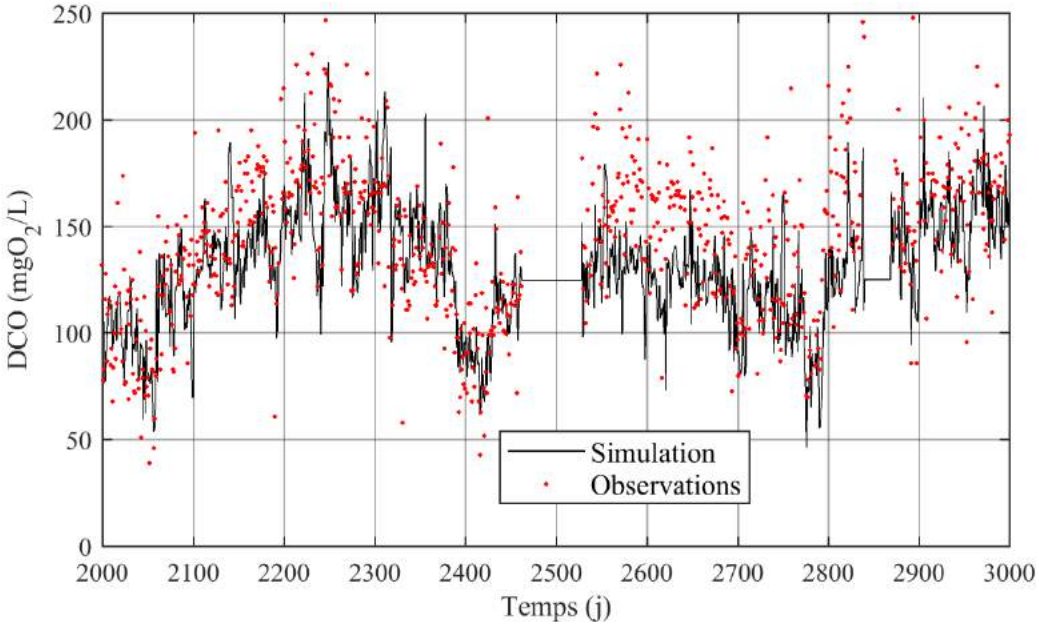


Figure 5.13 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire.

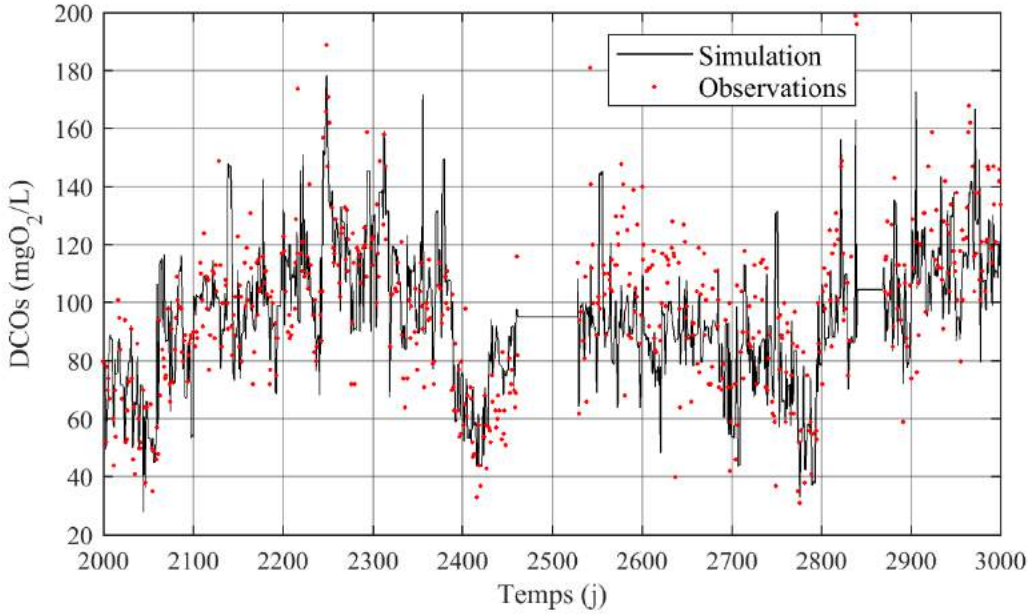


Figure 5.14 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en DCOs en sortie de la décantation primaire.

Comme c'était déjà le cas pour la période de calibration, les variations de ces deux variables en sortie sont bien reproduites par le modèle. Les erreurs de prédiction se trouvent principalement aux jours 2550-2700. Selon les données d'exploitation, pour cette période, la différence entre la DCO soluble en entrée et en sortie de procédé est faible par rapport aux autres jours simulés, ce qui signifie que la DCO soluble est probablement moins coagulée. Vu qu'il n'y pas de variation de la dose de $FeCl_3$ injectée pour cette période, cette diminution de l'efficacité de coagulation est probablement liée à un changement de la nature de la matière organique dissous dans l'affluent tel que discuté précédemment pour la période de calibration.

Par rapport à la période de calibration, la concentration en MES en sortie de procédé est plus stable. La plupart des mesures se situent en effet entre 20 et 40 mg/L (voir Figure 5.15). Il en résulte donc que le niveau et les variations des MES en sortie de procédé sont mieux reproduites par le modèle que la période de calibration.

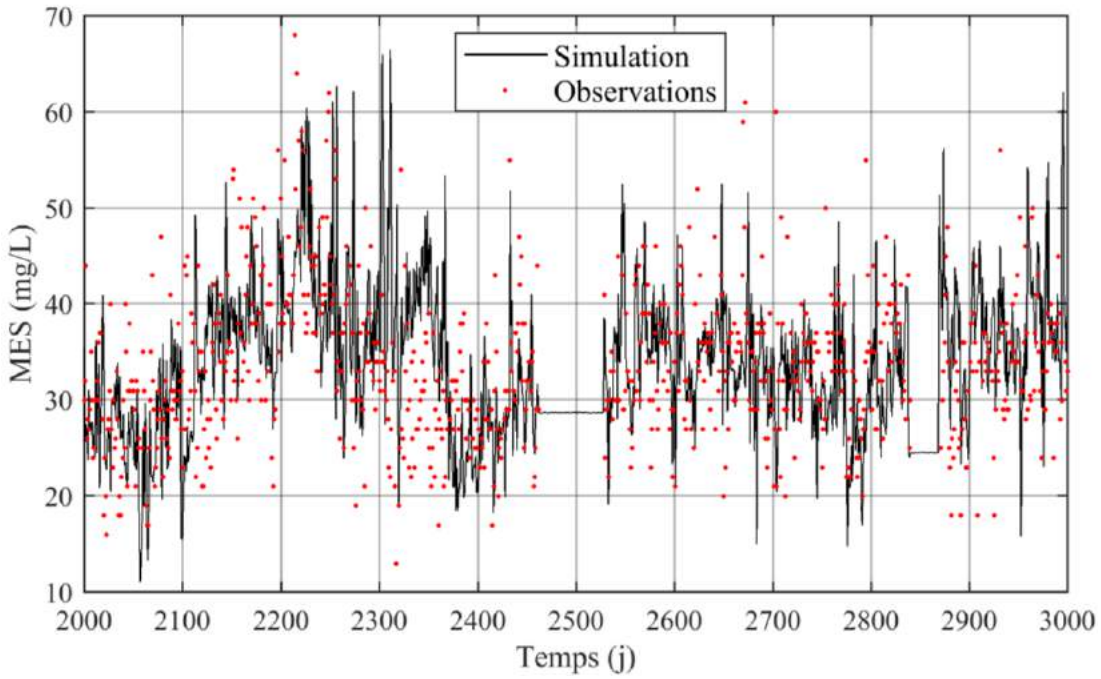


Figure 5.15 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en MES en sortie de la décantation primaire.

L'erreur principale sur la prédiction des MES en sortie est observée entre les jours 2300 et 2400. Etant donné que la DCO et la DCOs sont correctement simulées pour cette période, la surestimation des MES en sortie pour cette période est probablement liée à une évolution ponctuelle de la fraction des particules non-organiques dans l'affluent. Tel que expliqué pour la prédiction des MES en sortie de la période de calibration, ce type de variation ne peut pas être prédite sans caractérisation fine quotidienne pour les particules dans les eaux brutes de la station.

La Figure 5.16 montre les résultats de validation des jours 2000 à 3000 pour les orthophosphates en sortie des décanteurs primaires. Par rapport aux mesures de la période de calibration (0,34

mgP/L en moyenne), les concentrations en orthophosphates observées en sortie de procédé sont plus élevées (0,55 mgP/L en moyenne), ce qui est lié à l'augmentation de la charge d'orthophosphates en entrée d'une valeur moyenne de 0,18 tP/j à 0,22 tP/j (voir Figure A3.1 dans l'Annexe 3) et la diminution légère de la dose de $FeCl_3$ utilisée d'environ 35 g/m^3 à 30 g/m^3 (voir Figure A3.2 dans l'Annexe 3). Le rapport Fe/P initial utilisé par la station pour la période de validation est ainsi plus stable que celui de la calibration qui varie principalement entre 1-3 mole/mole (voir Figure A3.3 dans l'Annexe 3). Cette fois-ci, la majorité des résultats de simulation est supérieur à la limite de quantification, ce qui permet donc d'évaluer plus précisément la performance de prédiction. Tel qu'illustré à la Figure 5.16, les variations des phosphates en sortie sont bien reproduites par le modèle. De manière similaire à ce qui avait été observé sur les résultats de simulation autour des jours 250-500 de la période de calibration, une certaine surestimation est parfois présente en validation, comme par exemple autour du jour 2300.

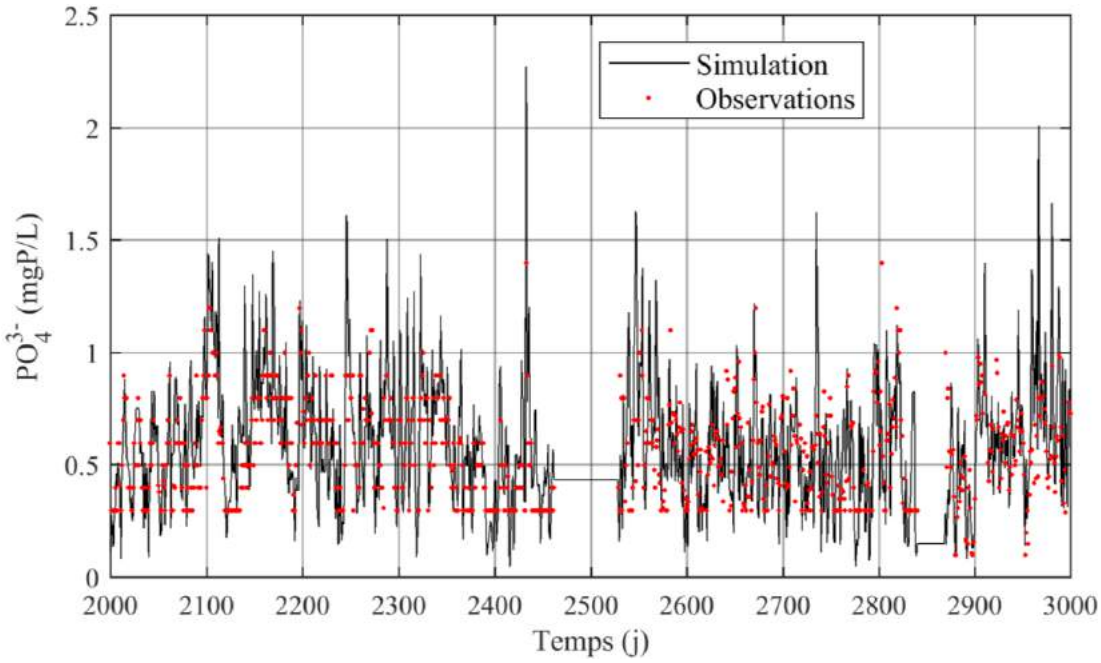


Figure 5.16 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la décantation primaire (résolution de la mesure de pour les jours 2000-2500 était de 0,1 mgP/L).

Pour étudier la relation entre le rapport de Fe/P initial utilisé et les résultats surestimés pour les pics de phosphates, les variations de ce rapport pour la période allant du jour 2000 à 2400 ont été tracées (voir Figure 5.17 à la page suivante). Tel qu'illustré à la Figure 5.17, la majorité des surestimations de PO_4^{3-} apparait lorsque le rapport Fe/P initial diminue à environ 1,5 mole Fe/mole P (voir les parties encadrées en rouge à la Figure 5.17), ce qui indique que le rapport Fe/P du précipité formé puisse être plus faible que celui considéré par le modèle (2,3).

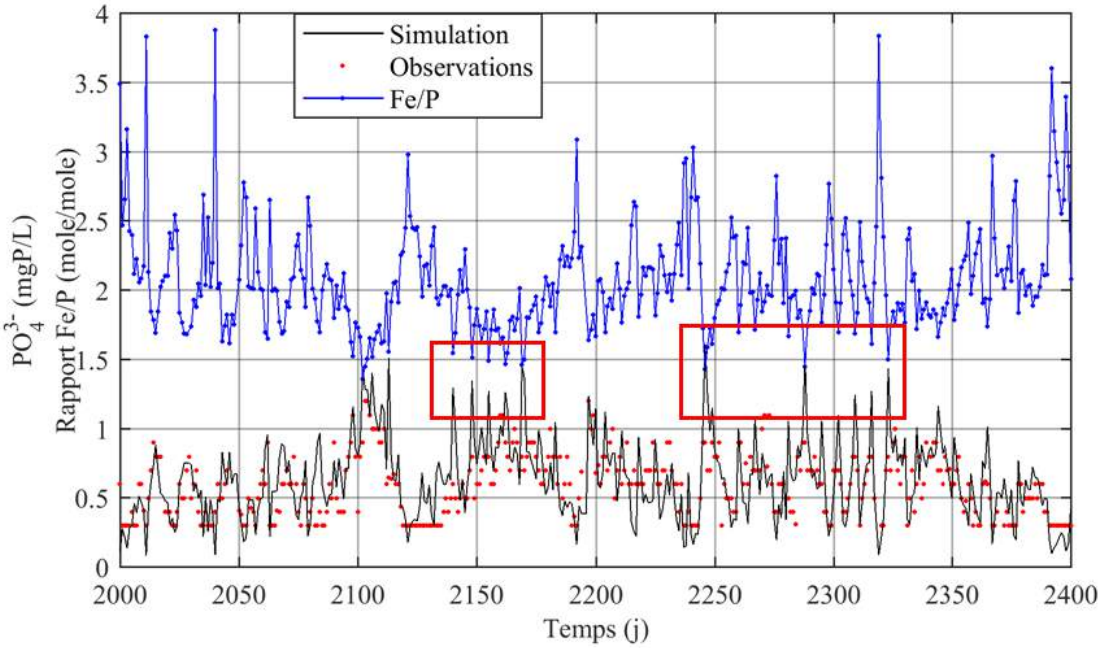


Figure 5.17 Résultats de validation de fin juin 2005 à fin juillet 2006 (jours 2000-2400) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie et le rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la décantation primaire de la station Seine Centre.

Afin de voir si le mode de la présence de ces surestimations durant la calibration est identique à celui observée pour la période de validation, une figure similaire à la Figure 5.17 a été également tracée pour les jours 280-360 de la période de calibration (période où il existe des surestimations de PO_4^{3-} en sortie). Tel qu'illustré à la Figure 5.18 à la page suivante, similaire aux jours 2000-2400 de la période de validation, la majorité des surestimations de PO_4^{3-} est observé lorsque le rapport Fe/P diminue près ou en dessous de 1,5 (mole Fe/mole P) (voir les parties encadrées en rouge à la Figure 5.18). De plus, quand le rapport est autour de 1 (mole Fe/mole P), le PO_4^{3-} en sortie est largement surestimé par le modèle (0,5-2 mgP/L). Ces observations correspondent aux résultats de l'étude de Szabó *et al.* (2008) qui observent que le rapport Métal/P dans le précipité augmente en fonction du rapport Métal/P initial utilisé.

Pour améliorer la prédiction des orthophosphates en sortie, une valeur seuil du Fe/P initial peut être considérée. Lorsque le Fe/P utilisé est inférieur à ce seuil, la forme du précipité qui est considéré dans le modèle sera changée. Une autre possibilité d'amélioration est de développer une équation estimant la forme du précipité considéré en fonction du ratio Fe/P utilisé. Pour connaitre l'évolution de la forme de précipité en fonction du ratio Fe/P, des essais en jar-tests doivent être réalisés sur les échantillons de la solution des phosphates ou des eaux usées (Szabó *et al.*, 2008). La forme de précipité peut être estimée en mesurant la concentration en PO_4^{3-} et en fer avant et après les essais ou en analysant directement la « boue » produite (Smith *et al.*, 2008). Les résultats obtenus peuvent alors aider à identifier le seuil de changement ou à développer l'équation d'estimation.

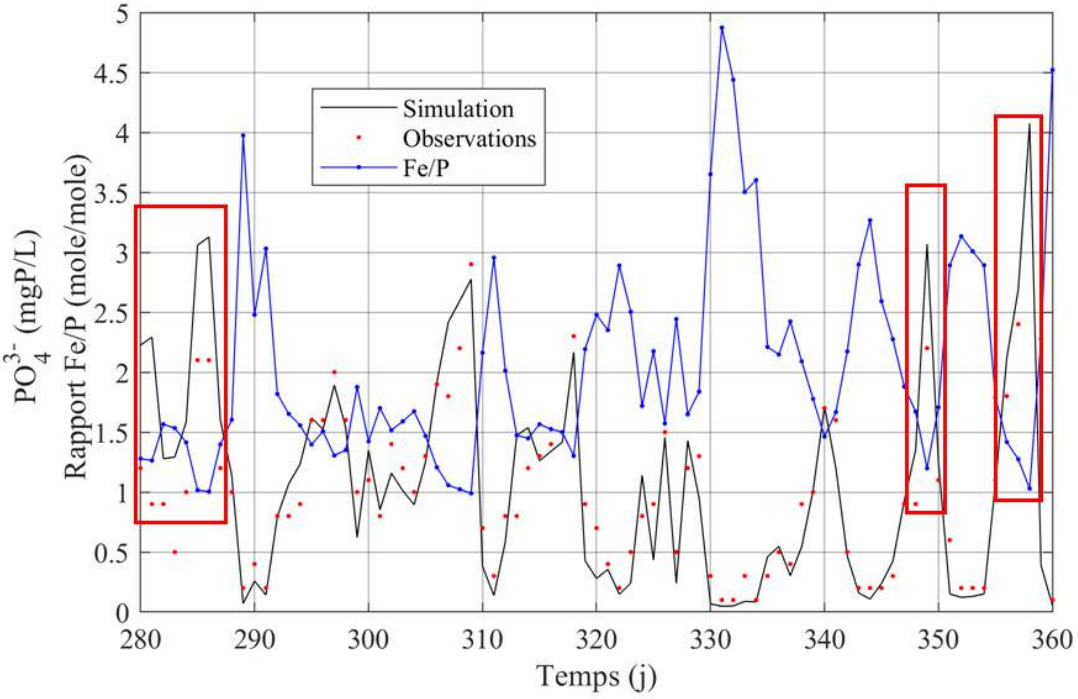


Figure 5.18 Résultats de calibration d'octobre à décembre 2000 (jours 280-360) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie et le rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la décantation primaire de la station Seine Centre.

Les scores statistiques pour la période de validation sont aussi calculés et résumés au Tableau 5.10. Les scores obtenus sont proches de ceux du modèle SimDec de référence. Par rapport aux scores obtenus pour la période de calibration (voir le Tableau 5.7), les performances de prédiction pour la DCOs, l'alcalinité et les MES sont similaires. Les scores pour la DCO en sortie sont plus élevés (scores de la calibration, MAE : 16,2 mgO_2/L, RMSE : 21,5 mgO_2/L, moyenne en sortie :114,9 mgO_2/L), mais restent autour de 10% à 20% par rapport à la moyenne observée.

Tableau 5.10 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de validation du modèle développé et les scores obtenus par le modèle SimDec pour la même période de simulation.

Scores statistiques	MES	DCO	DCOs	PO_4^{3-}	Alcalinité
Moyenne en sortie (mg/L)	32,5	141,6	96,1	0,55	314,1
Nombre d'observations	1376	1386	963	1395	965
ME (mg/L)	0,39	-12,1	-1,0	0,01	13,5
[a] ME SimDec (mg/L)	-1,4	-8,4	-1,0	0	11,1
MAE (mg/L)	6,8	23,4	15,1	0,17	17,9
[a] MAE SimDec (mg/L)	7,8	22,6	15,1	0,2	16,1
RMSE (mg/L)	8,7	30,1	20,2	0,22	28,0
Coefficient de Janus (-)	0,97	1,4	1,25	1,22	0,84

[a] Scores obtenus par le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016).

Les scores pour le PO_4^{3-} en sortie ont quant à eux été améliorés (scores de la calibration, MAE : 0,13 mgP/L, RMSE : 0,18 mgP/L, moyenne en sortie : 0,34 mgP/L), en grande partie grâce à

l'augmentation des valeurs observées causée par la diminution du dosage de chlorure ferrique et de l'augmentation de la charge en orthophosphates en entrée entre les deux périodes. Afin d'évaluer la qualité de la validation du modèle, les coefficients de Janus ont été calculés. Pour chacune des variables, ils sont proches de 1 (entre 0,84-1,4), ce qui confirme que la performance de prédiction du modèle pour la période de validation n'est pas significativement différente de celle pour la période de calibration (Sin *et al.*, 2008b). Dans ce cas-ci, on peut considérer que la validation du modèle est réussie.

5.3.5. Tests de scénario

Les résultats de calibration-validation montrent que le modèle développé peut bien simuler la performance des décanteurs primaires fonctionnant avec des doses de $FeCl_3$ élevées (>30 g/m^3). Cependant, à ce niveau de $FeCl_3$, les variables comme la vitesse de chute moyenne et la fraction de particules non-décantables déduites par le modèle développé sont stables et proche de celles utilisées par le modèle original. Les impacts sur la performance de prédiction du modèle apportés par les modifications présentées dans la section 5.2 ne sont donc pas évidents. Comme précédemment mentionné, en 2022, la station Seine Aval aura un procédé de clarification tertiaire (voir Chapitre 3 section 3.1.3). Les phosphates non-traités à l'étape de traitement primaire de la station pourront être d'abord assimilés par les biomasses dans les trois étages de biofiltration et ce qui reste peut finalement être traité par la clarification tertiaire. D'ailleurs, le traitement primaire de la station Seine Aval doit prendre en compte en même temps le taux d'enlèvement de particules et la quantité de la DCO biodégradable envoyée vers les biofiltres pré-dénitrifiants et les bioréacteurs à membrane. Dans ce cas, du point de vue d'économiser les réactifs et d'assurer le fonctionnement des traitements biologiques, la stratégie d'injection de $FeCl_3$ sera probablement différente et plus flexible par rapport à celle de la station Seine Centre. Les modifications et les améliorations apportées servent à extrapoler le domaine d'utilisation du modèle original et arriver à prendre en compte l'effet de plus faibles doses de coagulant sur l'enlèvement des MES et des orthophosphates. Il est donc intéressant de tester des baisses de doses pour voir si le modèle réagit comme prévu. Pour ce faire, trois tests de scénario ont été réalisés pour le modèle développé en diminuant respectivement 50% (scénario 1), 70% (scénario 2) et 85% (scénario 3) de dosage de $FeCl_3$ utilisé pour la période de calibration. Considérant le débit moyen traité par décanteur (autour de 79 000 m^3/j), la capacité de traitement de la station Seine Centre (240 000 m^3/j) ainsi que le prix du chlorure ferrique (141.5 €HT/t), une diminution de 50% de la dose de $FeCl_3$ injecté permet d'économiser environ 600 euros par jour. Les résultats de simulation obtenus pour ces trois scénarios ainsi que ceux issus de la calibration du modèle sont résumés au Tableau 5.11.

Tableau 5.11 Résultats moyens des sorties modèles pour les MES, la DCO, la DCOs et le PO_4^{3-} pour les scénarios tests réalisés sur la période de calibration.

Tests de scénario	Dosage de $FeCl_3$	MES	DCO	DCOs	PO_4^{3-}
Unité	g/m^3	mg/L	mgO_2/L	mgO_2/L	mgP/L
Moyenne en sortie	35,2	25,7	114,9	79,6	0,34
Nombre d'observations	1504	1376	1386	963	1395
Calibration	35,2	27,2	110,3	82,8	0,28
Scénario 1 (50%)	17,6	26,8	111,5	82,8	1,02
Scénario 2 (70%)	10,6	30,9	116,7	82,8	1,52
Scénario 3 (85%)	5,3	45,3	133,4	82,8	1,93

Selon les résultats obtenus, les MES et la DCO en sortie de la décantation primaire ne sont pas beaucoup influencées par la diminution du dosage de $FeCl_3$ de 35,2 g/m^3 à 10,6 g/m^3. Ces comportements du modèle sont attendus, parce que pour une dose de $FeCl_3$ de 10,6 g/m^3, la fraction de particules non-décantables (14,5%) déduite de l'équation Eq 5.22 reste proche à celle de 35,2 g/m^3 (12%) et la vitesse moyenne à ce niveau de $FeCl_3$ est élevée selon l'équation Eq 5.23 (environ 600 m/j, 28 m/h). Comme, selon les équations Eq 5.22 et Eq 5.23, la réduction de 50% de $FeCl_3$ n'impacte pas beaucoup la fraction de particules non-décantables et la vitesse de chute, la diminution légère sur les MES en sortie pour le scénario 1 est liée à la réduction de la quantité de X_{MeP} et X_{MeOH} en entrée du bloc de décanteur lamellaire. Contrairement aux scénarios 1 et 2 qui ne montrent pas beaucoup d'évolution de l'enlèvement des MES et de la DCO par rapport aux résultats de calibration, la concentration en MES en sortie simulée par le modèle pour le scénario 3 augmente d'environ 50% par rapport à celle de la période de calibration. La concentration en DCO en sortie simulée pour ce scénario augmente aussi d'environ 20%. Les résultats d'estimation des MES en sortie de ces trois scénarios correspondent aux observations en jar-tests sur les eaux brutes de la station Seine Aval (Mèche et Goncalves, 2013). Tel que présenté précédemment, les résultats de ces jar-tests montrent que le taux d'enlèvement de MES évolue beaucoup lorsque le dosage de $FeCl_3$ augmente de 0 à 10 g/m^3, tandis que pour les doses supérieures à 15 g/m^3 un plateau d'efficacité autour de 90% est observé (voir Figure 5.4).

Concernant les orthophosphates, la concentration moyenne estimée par le modèle pour les trois scénarios est de 1,02, 1,52 et 1,93 mgP/L respectivement. Ces concentrations sont beaucoup plus élevées que celles observées sur la station (0,34 mgP/L) avec le fort dosage qui y est utilisé. Ces résultats de simulation indiquent que par rapport au traitement de particules, le traitement de phosphates est plus sensible au changement de dosage de $FeCl_3$ pour la plage de dose entre 10 à 35 g/m^3. Cette différence a été également observée dans l'étude de Mèche et Goncalves (2013) citée précédemment. Selon les résultats des essais de jar-tests montrés à la Figure 5.19 (voir la page suivante), pour les doses de $FeCl_3$ entre 0 et 40 g/m^3, le taux d'enlèvement de PO_4^{3-} augmente avec la dose de $FeCl_3$ utilisée et il atteint un plateau d'efficacité de presque 100% lorsque la dose de $FeCl_3$ utilisée est supérieure à 45 g/m^3. Cette tendance d'évolution est différente par rapport à celle de MES observée sur les mêmes essais de jar-tests (voir Figure 5.4). Bien que les taux moyens d'enlèvement de PO_4^{3-} estimés pour les trois scénarios soient proche de ceux observés par Mèche et Goncalves (2013) en jar-tests (voir Figure 5.19), ces taux estimés sont probablement inférieurs à la réalité, car certaines surestimations de PO_4^{3-} en sortie ont déjà été observées sur les résultats de calibration et de validation lorsque le ratio molaire Fe/P initial est faible (voir les discussions sur les Figures 5.17 et 5.18 dans la section 5.3.4).

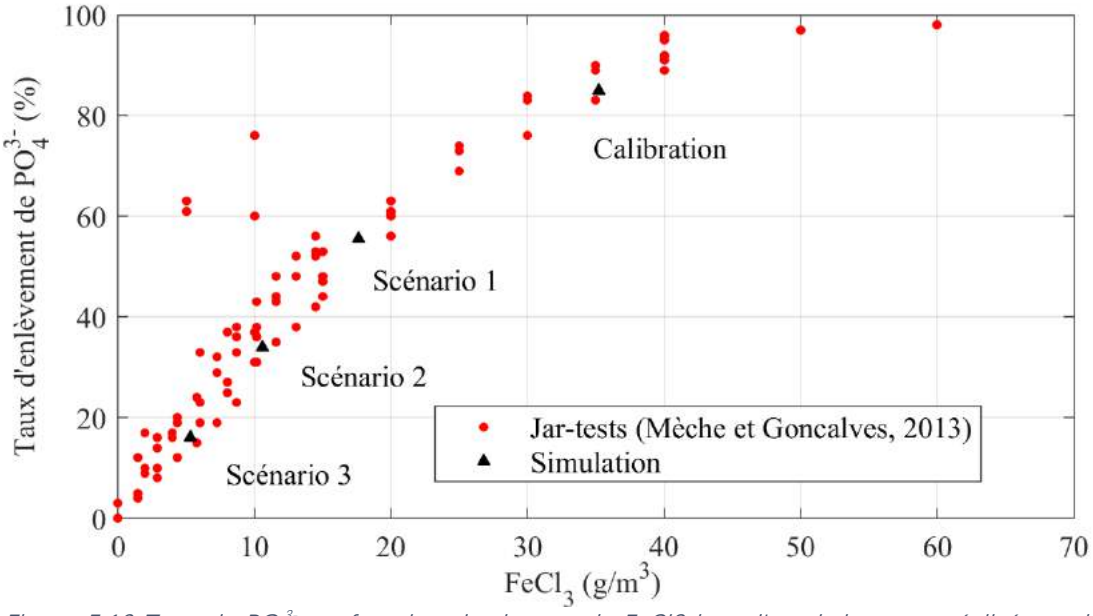


Figure 5.19 Taux de PO_4^{3-} en fonction du dosage de FeCl3 lors d'essais jar-tests réalisés sur les eaux brutes de la station Seine Aval (Mèche et Goncalves, 2013) et résultats de simulation obtenus pour la période de calibration et les tests de scénario (points rouges : observations des essais jar-tests, triangles noirs : Résultats de simulation).

Les résultats de tests de scénario sur l'enlèvement des particules et des orthophosphates indiquent que les hypothèses et les modifications apportées pour extrapoler les performances du modèle à faibles doses de $FeCl_3$ ont un poids important sur le comportement du modèle.

Dans le modèle développé, l'effet de la dose de $FeCl_3$ injectée sur la coagulation-floculation de la DCO soluble n'est pas pris en compte. Pour cette raison, la DCO soluble en sortie n'est pas affectée par les scénarios d'injection diminuée. Bien que le modèle montre une bonne performance de prédiction sur la DCO soluble pour les périodes de calibration et validation, cette approche de modélisation issue du modèle SimDec reste à vérifier pour des faibles dosages de $FeCl_3$. En effet, le type et la dose de coagulant ainsi que la condition de coagulation (pH et température) peuvent influencer l'efficacité de coagulation de la matière organique soluble (Crittenden *et al.*, 2012). En plus de ces facteurs, l'efficacité de coagulation peut aussi être impactée par la nature de la matière organique soluble. Tel que discuté précédemment, en général, la fraction de la matière organique soluble hydrophobe est plus facilement à enlever comparé à la fraction hydrophile (Sharp *et al.*, 2006).

En supposant que la décantation primaire de la station Seine Aval en 2022 ait la même efficacité que celle de la station Seine Centre, et que les résultats des tests de scénario correspondent à la réalité du procédé, un dosage de $FeCl_3$ autour de 15-25 g/m^3 pourrait être utilisé pour les décanteurs primaires de la station Seine Aval alimentant la filière biofiltration. Cette plage serait optimale afin d'assurer l'enlèvement maximal des particules et de réaliser un traitement partiel des orthophosphates. Les orthophosphates non-assimilés par la biomasse des biofiltres seraient

finalement éliminés par les clarificateurs tertiaires avec un dosage de $FeCl_3$ variant en fonction de la consigne de phosphate en sortie imposée. Cette hypothèse sera retenue pour la construction du modèle de la filière de biofiltration et sera expliquée en détails aux chapitres 6 et 7.

5.3.6. Conclusions et perspectives d'amélioration du modèle

Basé sur le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016), un modèle de décantation lamellaire physico-chimique a été développé et appliqué pour simuler la performance des décanteurs primaires. Par rapport au modèle original, les impacts de dosage $FeCl_3$ sur la vitesse de chute des particules et la fraction des particules non-décantables dans l'influent ont été considérés par le modèle développé. Ils sont décrits par les équations construites à partir des résultats des mesures de ViCAs et des jar-tests issus de la Direction Innovation du SIAAP. Le modèle développé est calibré et validé sur le procédé de décantation primaire de la station Seine Centre en utilisant les mêmes jeux de données que Bernier *et al.* (2016) utilisées pour le développement du modèle SimDec. Selon les résultats obtenus, le modèle développé peut en générale très bien prédire les performances de décantation primaire de la station, ce qui signifie que les modifications apportées au modèle original n'influencent pas sa bonne performance de prédiction. Selon les coefficients de Janus, les performances de prédiction du modèle pour la période de validation sont proches de celles pour la période de calibration, ce qui indique que la validation du modèle est réussie.

Certaines erreurs ont été observées dans les résultats de simulation. Pour la DCO et les MES en sortie de traitement, ces erreurs sont probablement liées aux variations ponctuelles de la nature de l'affluent, qui influencent les paramètres du modèle utilisés pour la décrire comme la fraction des particules non-organiques, la fraction des particules non-décantables et la constante de vitesse de coagulation de la DCO soluble. Ces variations ponctuelles sont difficiles à prédire sans informations supplémentaires comme les mesures quotidiennes du ratio MVeS/MES et du ratio hydrophile/hydrophobe de la matière organique soluble dans l'affluent. Tel que discuté précédemment sur les résultats de calibration du modèle, les événements de pluie peuventt influencer la composition des particules en entrée de la station. Dans ce cas-ci, afin de mieux prédire la DCO et les MES en sortie, il faut relier les fractions de la DCO ainsi que le rapport MVeS/MES avec les données de débit en entrée de la station ou la pluviométrie (Martin et Vanrolleghem, 2014).

Pour la prédiction de l'enlèvement des orthophosphates, la principale erreur observée est la surestimation de PO_4^{3-} en sortie lorsque le rapport molaire Fe/P initial diminue à environ 1-1,5 mole/mole. Tel que discuté précédemment, cette surestimation est probablement liée à la forme de précipité utilisée. Cette dernière est considérée constante par le modèle au lieu d'être vairée en fonction des conditions d'opération. L'intégration d'un seuil de changement ou d'une équation d'estimation de la forme de précipité en fonction du rapport Fe/P initial à l'aide des essais de jar-tests est proposée pour améliorer la performance de prédiction de l'enlèvement des orthophosphates.

L'équation reliant la vitesse de chute moyenne à la dose de chlorure ferrique injectée développée dans le cadre de ce travail pourrait aussi être améliorée. En effet, cette équation est obtenue en se basant sur très peu de données expérimentales (seulement quatre dosages de $FeCl_3$ ont été testés). Tel que montré par les tests de scénario, avec les modifications et les améliorations apportées, le comportement du modèle varie beaucoup à faible dose de $FeCl_3$. Il est donc intéressant de compléter les mesures ViCAs sur les doses de $FeCl_3$ faibles (par exemple 0-10 g/m^3) afin de vérifier ou éventuellement améliorer les hypothèses et les équations développées pour cette plage de dosage. De plus, bien que la vitesse de chute moyenne estimée par le modèle développé soit capable d'estimer la performance d'enlèvement des particules par voie physico-chimique, tel que montré par les mesures de ViCAs, les particules peuvent être fractionnées en fonction de leur vitesse de chute. Cette conceptualisation peut aussi être intégrée dans le modèle avec les mesures ViCAs pour les doses de $FeCl_3$ faible, ce qui permet de caractériser plus finement les particules dans l'affluent et l'effluent de traitement (Tik *et al.*, 2016). Ce genre d'informations peut bénéficier les opérations ou la modélisation des procédés en aval du traitement primaire, par exemple l'estimation de l'encrassement de la biofiltration à partir de la fraction des particules (Maruéjouls *et al.*, 2014; Tik *et al.*, 2015). Elle peut être modélisée plus précisément en appliquant le concept de la distribution des vitesses de chute de particules (Tik *et al.*, 2016).

Des tests de scénario sur les effets d'une diminution du dosage de $FeCl_3$ ont été réalisés avec le modèle développé. Selon les résultats obtenus, le modèle prédit que la performance d'enlèvement des MES de traitement primaire peut être maintenue lorsque le dosage de $FeCl_3$ injecté est diminué de 50% par rapport à celui appliqué à la station. Cette diminution correspond à une diminution du coût de traitement d'environ 600 euros par jour. Les tests montrent aussi que la tendance d'évolution de l'enlèvement des MES est différente à celle de l'enlèvement des orthophosphates pour la dose $FeCl_3$ entre 10-35 g/m^3. Cette différence est aussi observée par Mèche et Goncalves (2013) sur leurs essais de jar-tests de l'eau brute de la station Seine Aval. Ces résultats indiquent qu'une stratégie flexible d'injection de $FeCl_3$ pour la décantation primaire peut être proposée lorsque la station est équipée de clarificateurs tertiaires. Pour faciliter le développement et l'application des stratégies de commande de l'injection de $FeCl_3$, la performance de prédiction du modèle doit être testée si possible avec des jeux de données de campagnes de mesures issus des sondes installées dans le procédé (Tik et Vanrolleghem, 2017).

En plus de l'enlèvement des MES et des orthophosphates, la quantité de la DCO biodégradable contenue dans l'eau décantée est importante pour les procédés de traitement biologiques situés en aval du traitement primaire, tel que l'étage de pré-dénitrification par biofiltration de la station Seine Aval. Une bonne exploitation de la décantation primaire doit prendre en compte non-seulement d'éviter l'encrassement rapide des biofiltres, mais aussi d'apporter de la DCO

biodégradable afin d'assurer le traitement biologique et d'économiser la source de carobone exogène (par exemple le méthanol). Cependant, l'influence du dosage de $FeCl_3$ sur la DCO biodégradable est actuellement moins étudiée : seulement l'étude de Bachis *et al.* (2015) indique que le rapport de S_U/S_B dans l'eau usée augmente après le traitement de la décantation physico-chimique. A l'état actuel, le modèle développé considère que toutes les variables composant la DCO particulaire possèdent la même vitesse de chute, et il utilise une constante cinétique unique pour simuler la coagulation-floculation des deux variables composant la DCO soluble. Afin de mieux prédire la biodégradabilité des eaux en sortie de la décantation primaire, ces simplifications doivent être vérifiées et éventuellement ajustées à l'aide des techniques de mesure de la biodégradabilité, comme, par exemple, la respirométrie (Spanjers et Vanrolleghem, 2016). Avec ces techniques, les fractionnements de la DCO dans les échantillons des eaux brutes et des eaux brutes coagulées/floculées (avec différentes doses de $FeCl_3$) peuvent être estimés (Bachis *et al.*, 2015). Les résultats obtenus permettent d'aider à étudier l'impact de $FeCl_3$ sur la biodégradabilité de l'eau en sortie de la décantation physico-chimique et donc d'améliorer les hypothèses utilisées par le modèle développé.

Finalement, tel que mentionné précédemment par rapport au fractionnement de la DCO d'affluent, comme la méthode de décantation physico-chimique améliore principalement l'enlèvment des particules colloïdales, il vaut mieux considérer l'évolution de la fraction de la DCO colloïdale avant et après le traitement. Dans ce cas-ci, la mesure de la distribution de la taille des particules en entrée et en sortie du traitement primaire ainsi que les méthodes de fractionnement physico-chimiques et biologiques doivent être appliquées, afin de faciliter l'intégration de la fraction colloïdale dans le modèle (Drewnowski et Makinia, 2014; Drewnowski *et al.*, 2020).

En général, selon les résultats de calibration-validation du modèle ainsi que ceux des tests de scénario, la performance de prédiction du modèle développé est attendue et satisfaisante. Les points de vérification et d'amélioration discutés précédemment pourront être réalisés pendant l'application du modèle sur le vrai procédé de la station Seine Aval qui sera mis en route en 2022.

5.4. Modélisation de la clarification tertiaire de la station Seine Amont

5.4.1. Description du procédé modélisé

Suite au travail réalisé sur les décanteurs primaires de la station Seine Centre, le modèle développé a été utilisé pour simuler l'unité de clarification tertiaire de la station Seine Amont (SAM), aussi récemment appelée Seine Valenton. Cette station a une capacité de traitement de 600 000 m^3/j. Après le prétraitement (dégrillage et dessablage), l'eau est traitée par deux files de traitement, chacune ayant une capacité de 300 000 m^3/j (voir Figure 5.20). Les eaux entrant dans la file Valenton 1 sont traitées d'abord par quatre décanteurs primaires conventionnels (volume total de 41 040 m^3) suivis par quatre bassins biologiques de boues activées. Chaque bassin contient une zone anoxie, une zone aérée et une zone de dégazage. Le volume total de ces quatre bassins est de 126 000 m^3. L'eau en sortie d'un bassin biologique est traitée par deux décanteurs secondaires identiques avec un volume total de 18 820 m^3 et une surface totale de 4244 m^2.

Quatre clarificateurs tertiaires se situent en aval des décanteurs secondaires afin d'éliminer les pollutions phosphorées et finaliser au besoin l'abattement des MES. Ces quatre clarificateurs Actiflo® (Véolia), ont chacun deux zones d'entrée identiques. Chaque zone d'entrée est suivie par trois compartiments successifs. Le premier compartiment est une cuve de mélange rapide de 160 m^3 dans lequel le $FeCl_3$ est injecté et mélangé avec l'affluent. L'eau à traiter entre ensuite dans le deuxième compartiment qui est aussi une cuve de mélange rapide avec une taille identique à celle de la première. Cette seconde cuve sert à l'injection des polymères. L'eau contenant les réactifs entre par la suite dans le troisième compartiment, qui est une cuve de floculation de 768 m^3 servant à la maturation des flocs. Les eaux à traiter issues de ces deux zones d'entrée se réunissent enfin dans le bassin de décantation lamellaire, qui a un volume total de 1600 m^3 et une surface apparente de 225 m^2. La surface totale projetée est de 2150 m^2. En temps de pluie, les clarificateurs peuvent servir comme décanteurs primaires afin de renforcer le traitement primaire de la station. La capacité de traitement de la station peut donc augmenter jusqu'à 1 500 000 m^3/j. Le nombre de décanteurs utilisés est fixé en fonction du débit à traiter et de la capacité de traitement de chaque clarificateur. Selon les données de fonctionnement des années 2016-2017, en temps sec, normalement un ou deux clarificateurs sont en service. En temps de pluie, c'est plutôt trois ou quatre clarificateurs qui fonctionnent. Tel qu'expliqué précédemment au chapitre 2, du microsable peut également être injecté durant le traitement pour améliorer la floculation des particules et augmenter la vitesse de chute des flocs formés. Cependant, les données d'exploitation de la station Seine Amont des années 2016-2017 indiquent qu'il n'avait pas de microsable utilisé pendant le traitement.

La file Valenton 2 contient deux décanteurs primaires conventionnels de mêmes dimensions

que ceux de la file Valenton 1. Ces deux décanteurs sont suivis par quatre bassins biologiques qui ont un volume total de 242 000 m^3. Chaque bassin biologique est divisé en cinq zones de traitement : zone endogène, zone anaérobie, zone anoxie, zone aérée et zone de dégazage. Comme pour la file Valenton 1, huit décanteurs secondaires sont installés en aval des bassins biologiques, pour un volume total de 84 480 m^3 et une surface totale de 5280 m^2. Comme les orthophosphates sont traités de manière biologique dans les zones anaérobie et aérobie des bassins biologiques de la file Valenton 2, cette dernière n'est pas équipée de clarificateurs tertiaires.

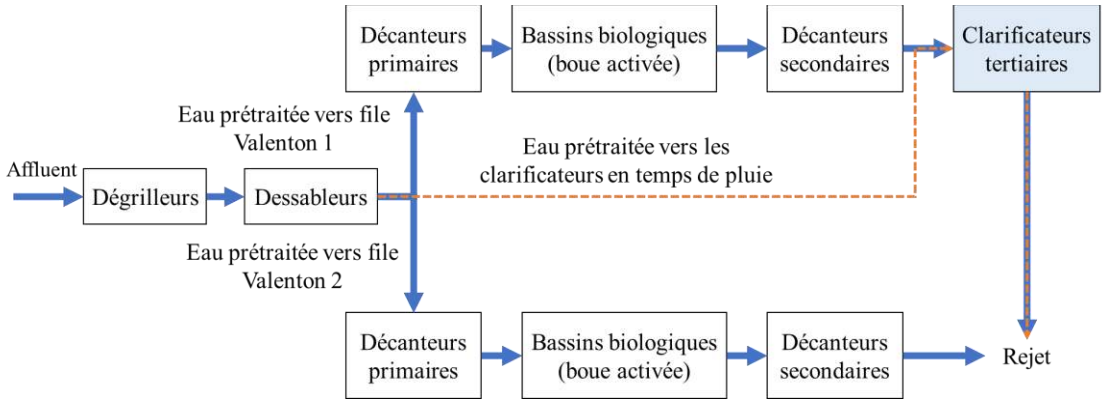


Figure 5.20 Configuration de traitement de la station Seine Amont (bloc en bleu: procédé modélisé).

5.4.2. Description des jeux de données et du modèle de fractionnement utilisé

Pour mener à bien cette étape du travail, les données d'exploitation des clarificateurs de SAM en configuration de traitement tertiaire en temps sec de janvier 2016 à mai 2017 sont collectées pour calibrer et valider le modèle développé. Bien qu'en temps de pluie, un certain nombre des clarificateurs peut aussi fonctionner en mode tertiaire, par exemple deux en primaire et deux en tertiaire, il est difficile avec les données disponibles d'identifier individuellement le mode de fonctionnement de chaque décanteur en temps de pluie. Pour cette raison, seules les données récoltées lors des journées où les clarificateurs ont fonctionné strictement en configuration de temps sec sont utilisées. Les données collectées peuvent être divisées en deux catégories. La première catégorie consiste en données journalières de mesure de la qualité de l'eau en entrée et en sortie du procédé. Les données en entrée incluent les concentrations en DCO, MES, NTK, NH_4^+, NO_3^- et PO_4^{3-} mesurées en laboratoire de la station sur des échantillons composites 24h prélevés en sortie du traitement secondaire. Les données en sortie comprennent les mesures journalières (échantillons composites 24h) des concentrations en MES et PO_4^{3-}. La deuxième catégorie de données sont les informations d'opération de chaque clarificateur, incluant le débit horaire d'eau en entrée et la durée de fonctionnement ainsi que le débit journalier de $FeCl_3$ injecté. Le tableau 5.12 résume les jeux de données principaux utilisés pour alimenter le modèle.

Tableau 5.12 Conditions d'exploitation principales des clarificateurs tertiaires de la station Seine Amont sur la période étudiée (janvier 2016 – mai 2017).

Conditions d'exploitation	Nombre d'observations	Moyenne	Ecart-type
Débit moyen (m^3/j)	326	120 472	20 407
DCO (mgO_2/L)	326	32,0	5,8
MES (mg/L)	326	11,3	3,4
PO_4^{3-} (mgP/L)	326	3,4	0,47
Dosage moyen de $FeCl_3$ (g/m^3)	326	47,8	7,2

La quantité de données qui était disponible et utilisée pour alimenter le modèle en décantation primaire étant largement supérieure à ce qui est disponible ici, le fractionnement de la DCO de l'affluent de la clarification tertiaire est modifié. Premièrement, comme la DCO soluble n'est pas mesurée, la DCO particulaire en entrée est estimée en fonction de la concentration en MES (voir Figure 5.21). Deuxièmement, le fractionnement de la DCO particulaire et de la DCO soluble a été modifié afin de correspondre à l'eau en sortie de traitement secondaire. Elle est normalement très peu biodégradable. Pour cette raison, par rapport au modèle de décantation primaire, les fractions de biomasse et des DCO inertes (particulaire et soluble) ont été augmentées, tandis que celles des DCO biodégradables ont été diminuées (voir Tableau 5.5 et Tableau *5.13*). Similaire au modèle de décantation primaire, les concentrations en entrée des autres composants sont estimées à partir des données mesurées ou fixées aux valeurs par défaut lorsque les mesures ne sont pas disponibles.

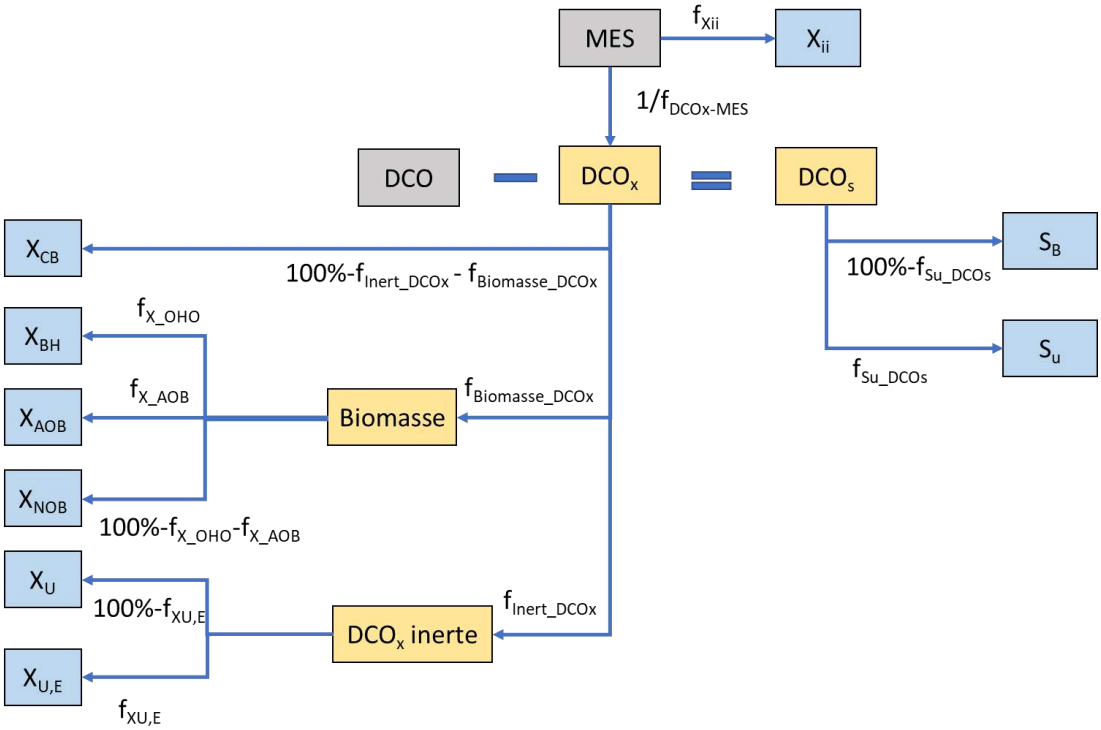


Figure 5.21 Estimation des composants de DCO et de particules à partir des mesures en entrée de procédé (blocs en gris : les mesures en entrée, blocs en jaune : variables intermédiaires, blocs en bleu : variables en entrée du modèle).

Il est à noter que les valeurs des paramètres du fractionnement de la DCO particulaire n'influencent pas les résultats finaux, car tous les composants particulaires sont considérés de décanter avec la même vitesse de chute. Cependant, afin de construire un modèle précis, ces valeurs utilisées doivent être vérifiées lorsque les mesures sont disponibles. Par exemple, la fraction de la biomasse dans la DCO particulaire en entrée ($f_{Biomasse_DCOx}$) peut être estimée selon le rapport entre la concentration de biomasse (en mgMVeS/L) et la concentration des matières volatiles en suspension dans le réacteur de boue activée. La concentration de la biomasse peut être estimée à partir de l'âge de boue appliquée à la station, la charge en entrée et en sortie ainsi que les paramètres liés aux activités biologiques comme le rendement et la taux de mortalité bactérienne (Ekama et Wentzel, 2008a; b).

Tableau 5.13 Les paramètres de fractionnement utilisés pour la DCO et les MES en entrée de clarification tertiaire.

Paramètres de fraction	Symbole	Valeur
La fraction de la DCO soluble non-biodégradable dans la DCO soluble en entrée	f_{Su_DCOs}	80%
La fraction de la biomasse dans la DCO particulaire en entrée	$f_{Biomasse_DCOx}$	10%
La fraction de la DCO particulaire inerte dans la DCO particulaire en entrée	f_{Inert_DCOx}	70%
La fraction de la biomasse hétérotrophe dans la biomasse en entrée	f_{X_OHO}	90%
La fraction de la biomasse AOB dans la biomasse en entrée	f_{X_AOB}	5%
La fraction des particules inertes issues de la mortalité de biomasse dans la DCO particulairee inerte en entrée	$f_{XU,E}$	50%
La fraction des particules inorganiques dans les particules totales en entrée	f_{Xii}	25%
Le facteur de conversion de la DCO particulaire aux MES	$f_{MES\text{-}DCO}$	0,75

5.4.3. Calibration du modèle

La calibration est dans ce cas-ci réalisée sur les MES et le PO_4^{3-} en sortie du procédé sur les jeux de données de l'année 2016. Certaines valeurs par défaut des paramètres du modèle ont été modifiées par rapport à ce qui a été utilisé en décantation primaire, afin d'adapter ceux-ci aux conditions de fonctionnement différentes du traitement tertiaire. Premièrement, l'effet de la dose de $FeCl_3$ injectée sur la vitesse de chute des particules en sortie de traitement secondaire n'a pas été étudiée par les équipes du SIAAP, et très peu d'information peut être trouvée sur le sujet dans la littérature. Une vitesse de chute moyenne constante de 172,8 m/j (7,2 m/h) est utilisée comme valeur par défaut pour illustrer la décantation des particules. Cette vitesse correspond à la vitesse de chute des particules organiques provenant des boues activées (Water Environment Federation, 2005c) qui sont des particules de nature proche à celle attendue de l'effluent de la décantation secondaire sur la station Seine Amont. Cependant, cette valeur de vitesse de chute moyenne reste à vérifier par des mesures de ViCAs sur les particules en sortie des décanteurs secondaires de la station, parce que premièrement la référence n'indique pas sur quel type d'eau (en sortie de boue activée ou en sortie du décanteur secondaire) cette vitesse est obtenue. Et elle est plutôt dans la gamme de vitesses de chute de particules (0,5-10 m/h) trouvées dans la littérature sur l'étude de décantation des clarificateurs secondaires (Vanderhasselt *et al.*, 1999a; 1999b). Deuxièmement, l'impact de $FeCl_3$ sur la vitesse de chute des particules organiques comme la biomasse n'est pas pris en compte. Enfin, les précipités produits par les réactions entre les orthophosphates et le $FeCl_3$ ainsi que les hydroxydes de fer formés peuvent avoir des vitesses de chute différentes par rapport aux particules organiques (Water Environment Federation, 2005c). L'impact de cette différence sur la vitesse de chute moyenne des particules dans le clarificateur tertiaire n'est pas actuellement considéré par le modèle.

Deuxièmement, une fraction constante de 10% est utilisée pour les particules non-décantables dans l'affluent. Cette valeur est issue de l'étude d'Adin (1999) sur la relation entre la dose de réactifs utilisés et le taux d'enlèvement des MES dans un effluent secondaire. Selon cette étude, pour un dosage de $FeCl_3$ dans la gamme de à 30-50 g/m^3, le taux d'enlèvement des MES (taille supérieure à 2 µm) est autour de 80%-100%.

Les schémas considérés pour la précipitation des orthophosphates avec le $Fe(OH)_3$ et la coagulation-floculation de la DCO soluble sont similaires à ceux utilisés pour le traitement primaire. Pour cette raison, les valeurs par défaut des paramètres de ces deux réactions (k, $k_{formation}$, $k_{dissociation}$ et a) utilisées pour la calibration du modèle en décantation primaire sont conservées ici (voir le Tableau 5.14 à la page suivante).

La calibration est d'abord réalisée sur l'enlèvement des MES et ensuite sur le PO_4^{3-} en sortie.

Les scores statistiques ME, MAE et RMSE sont utilisés pour évaluer quantitativement la qualité de prédiction du modèle (voir le Tableau 5.15).

Tableau 5.14 Valeurs par défaut des paramètres considérées pour le modèle de clarification tertiaire.

Paramètre	Symbole	Valeur par défaut	Unité
Vitesse moyenne de chute	v_0	172,8	m/j
Fraction de particules non-décantables en entrée	f_{ns}	10	%
Constante cinétique de coagulation de la DCOs	k	68	1/j
Constante cinétique de précipitation du PO_4^{3-}	$k_{formation}$	400	$m^3/g/j$
Constante cinétique de dissociation de $Fe_aPO_4(OH)_{3(a-1)}$	$k_{dissociation}$	0^a	1/j
Produit final de précipitation $Fe_aPO_4(OH)_{3(a-1)}$	a	2,3	-
Facteur de conversion de la DCO particulaire aux MES	$f_{MES-DCO}$	0,75	g/gO_2

Tableau 5.15 Scores statistiques pour la simulation de la clarification tertiaire pour la période de calibration (jours 0-360 de l'année 2016)

Scores statistiques	MES	$P-PO_4^{3-}$
Moyenne en sortie observée (mg/L)	6,94	0,5
Nombre d'observations	201	233
ME (mg/L)	-0,06	-0,09
MAE (mg/L)	1,78	0,17
RMSE (mg/L)	2,28	0,21

La Figure 5.22 montre les résultats de prédiction des concentrations en MES en sortie de traitement tertiaire de la période de calibration (année 2016). Comme il y avait beaucoup de jours de temps de pluie au début de l'année (qui ne sont pas simulés), seulement les résultats de simulation des jours 80-360 sont tracés dans la Figure 5.22. Tel qu'illustré sur cette figure et par la valeur du score ME associé au

Tableau *5.15*, le niveau de MES simulé est proche de celui observé en sortie de la clarification tertiaire sur site. Cependant, la variation des MES mesurées en sortie de procédé est plus forte que celle prédite par le modèle. Pour cette raison, les résultats pour le MAE et le RMSE dépassent 20% de la concentration moyenne observée pour la période de calibration. Une incertitude de mesure relativement élevée (50%) sur l'analyse sur site est toutefois présente pour les concentrations proches de la limite de quantification (2 mg/L). Dans ce cas-ci, les variations de MES en sortie peuvent autant consister en une incertitude de mesure élevée qu'en des tendances réelles. Il est donc difficile à bien reproduire la tendance de MES en sortie de procédé par le modèle.

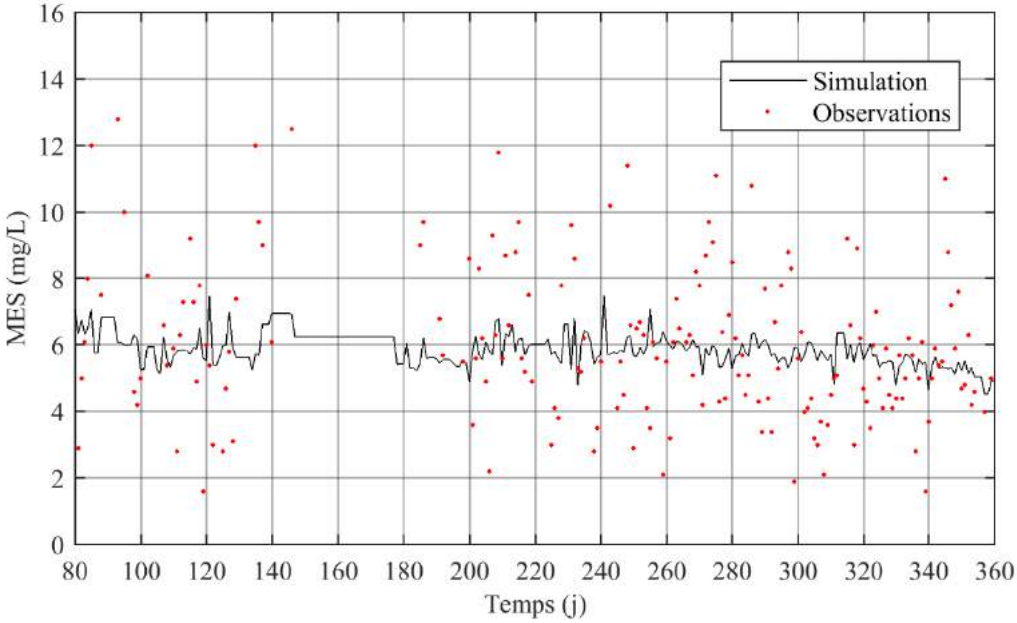


Figure 5.22 Résultats de calibration des jours 80-360 de l'année 2016 sur la concentration en MES en sortie de la clarification tertiaire.

Tel que montré à la Figure 5.23, la résolution de mesure du PO_4^{3-} en sortie de procédé est relativement faible (0,1 mgP/L), ce qui ne permet pas d'évaluer précisément la performance de prédiction du modèle par les scores statistiques. Selon les résultats obtenus, le PO_4^{3-} est bien simulé au début (jours 80-140) et à la fin (jour 280-360) de la période de calibration, tandis que certaines sous-estimations sont observées entre le jour 180 et le jour 260.

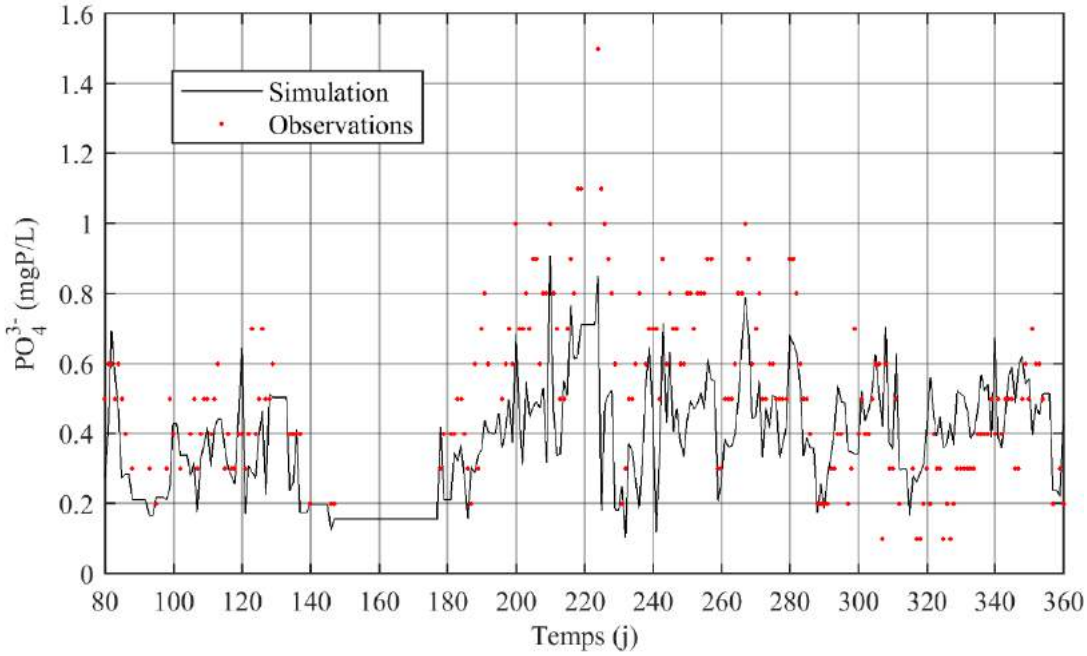


Figure 5.23 Résultats de calibration des jours 80-360 de l'année 2016 sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la clarification tertiaire.

Afin d'analyser la source de ces erreurs de simulation, une étude des charges entrantes et des concentrations en chlorure ferrique injectées a été réalisée. Tel qu'illustré à la Figure 5.24, le

taux d'enlèvement du PO_4^{3-} des jours 180-280 était situé principalement entre 75% et 85% ce qui est légèrement faible par rapport aux autres jours de la période de calibration (85% - 95%). La charge de PO_4^{3-} en entrée (voir la Figure 5.25 à la page suivante) était relativement stable (404±60 kg/j pour la période de calibration). Le rapport molaire Fe/P utilisé pour les jours 80-360 est tracé pour voir s'il y a un changement d'injection de $FeCl_3$ (voir la Figure 5.26 à la page suivante). Le rapport Fe/P moyen utilisé pour les jours 80-140 (3,24±0,55 mole/mole) est légèrement supérieur à celui des jours 180-360 (2,87±0,43 mole/mole). Cependant, cette différence ne peut pas expliquer les déviations observées dans les résultats de simulation, puisque les jours 280-360 sont soumis à un rapport Fe/P similaire à celui des jours 180-280, mais sont associés à un taux de traitement qui est généralement plus élevé que pour ces derniers. Avec les informations et mesures disponibles, il est difficile d'identifier la raison de la diminution du taux d'enlèvement et d'essayer d'apporter des modifications au modèle afin d'améliorer ses performances de prédiction.

Par rapport aux valeurs par défaut des paramètres résumées au Tableau 5.14, seule la valeur de $k_{formation}$ a été ajustée de 400 (m^3/g.j) à 58 (m^3/g.j) lors de la calibration. Pour rappel, la valeur par défaut de ce paramètre (400 m^3/g/j) est issue du modèle de décantation primaire précédement calibré. Cet ajustement est lié à la différence en volume du bassin de floculation des procédés modélisés (373 m^3 pour la décantation primaire et 1536 m^3 pour la clarification tertiaire).

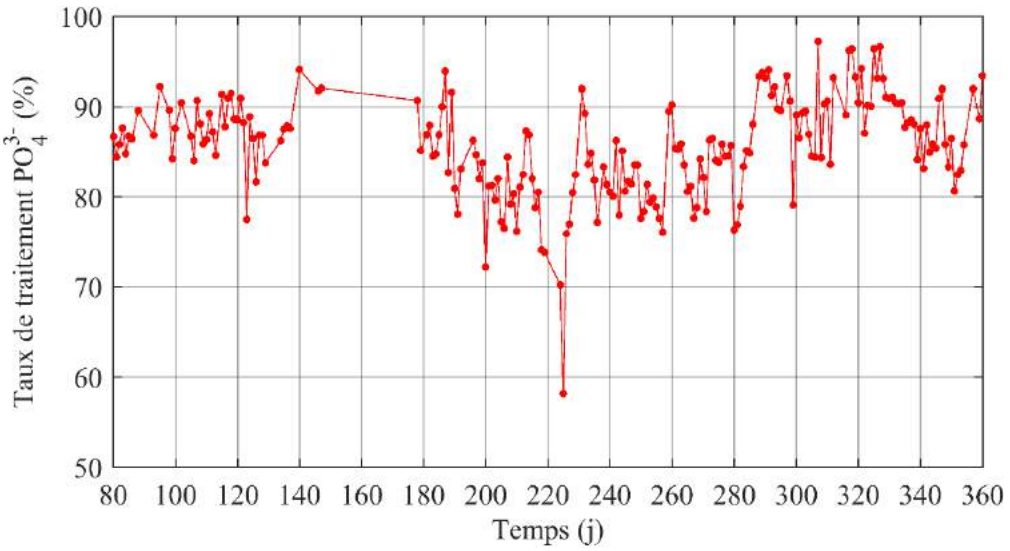


Figure 5.24 Taux de traitement de PO_4^{3-} observé sur la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (année 2016) de la période de calibration.

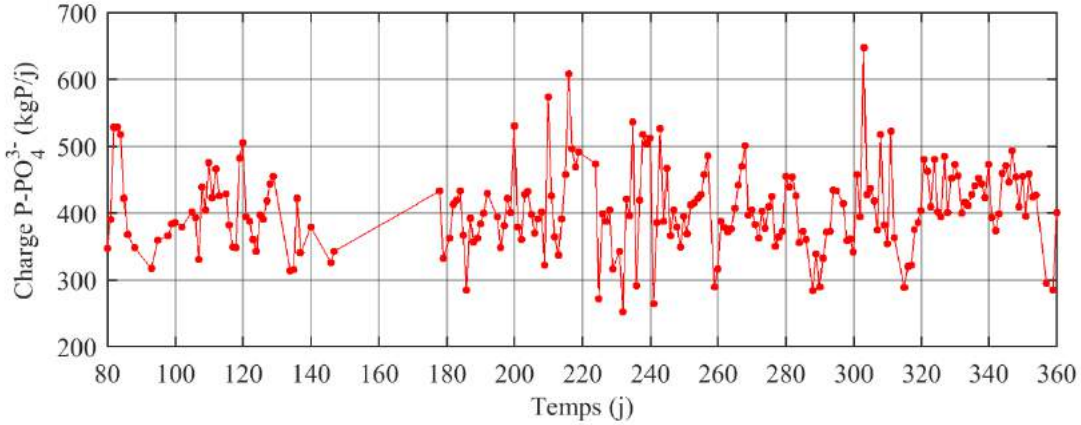


Figure 5.25 Charge en PO_4^{3-} en entrée de la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (années) de la période de calibration.

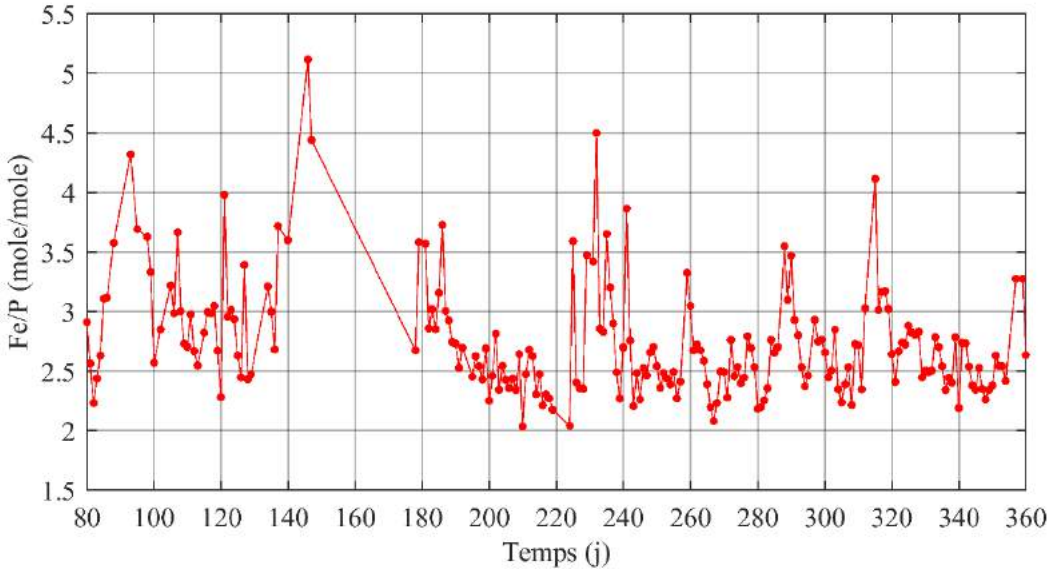


Figure 5.26 Rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (année 2016) de la période de calibration.

5.4.4. Validation du modèle

La validation du modèle a été réalisée sur la période de janvier à mai de l'année 2017 (jours 0-130) durant laquelle les données de la durée de fonctionnement des clarificateurs sont encore disponibles. La Figure 5.27 montre les résultats de simulation allant du jour 40 au jour 130 de la période de validation (où la plupart des jours sont en temps sec) pour la prédiction en MES en sortie de procédé. De manière similaire aux résultats obtenus sur la période de calibration, à cause de l'incertitude de mesure relativement élevée à faible concentration en MES, le niveau de concentration simulé est proche de celui observé sur site, mais les variations ne peuvent pas être bien reproduites. Les scores statistiques obtenus pour la prédiction des MES pour la période validation (voir le Tableau 5.16) sont similaires à ceux de la période de calibration (voir le Tableau *5.15*).

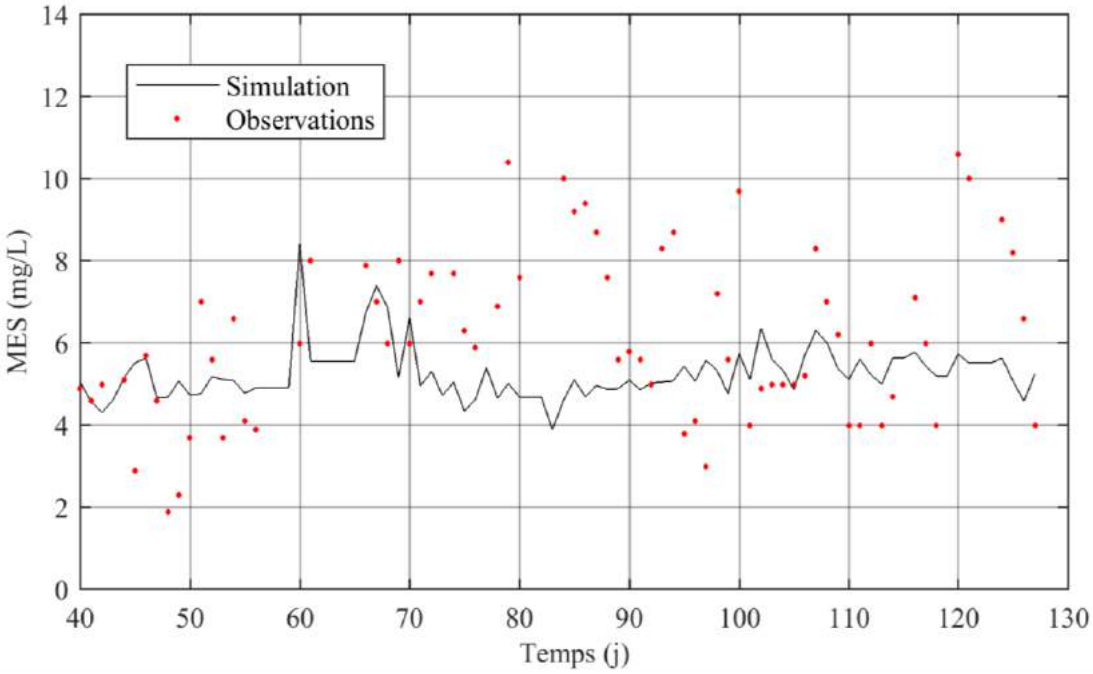


Figure 5.27 Résultats de validation des jours 40-130 sur la concentration en MES en sortie de la clarification tertiaire.

Tableau 5.16 Scores statistiques pour la simulation de la clarification tertiaire pour la période de validation de janvier à mai 2017 (jours 0-130).

Scores statistiques	MES	$P\text{-}PO_4^{3-}$
Moyenne en sortie observée (mg/L)	6,08	0,48
Nombre d'observations	82	87
ME (mg/L)	-0,82	0,09
MAE (mg/L)	1,64	0,14
RMSE (mg/L)	2,11	0,17
Coefficient de Janus	0,92	0,80

La Figure 5.28 présente les résultats de validation du modèle sur les concentrations en PO_4^{3-} en sortie de traitement. Tel qu'illustré, les tendances observées sur le PO_4^{3-} sont bien suivies par le modèle. Cependant, l'enlèvement du PO_4^{3-} pour les jours 80-100 est légèrement sous-estimé, ce qui est probablement lié à une diminution légère du rapport Fe/P utilisé pour cette période (voir Figure 5.29). Les résultats des scores statistiques obtenus pour la prédiction de PO_4^{3-} sont similaires à ceux obtenus lors de la calibration. Encore une fois, à cause de la résolution de la mesure analytique sur site, les résultats de prédiction pour la période de validation ne peuvent pas être précisément évalués par les scores statistiques. Les coefficients de Janus obtenus pour la prédiction des MES et du PO_4^{3-} sont tous les deux proches de 1, ce qui indique que la validation du modèle pour la prédiction de ces deux variables de sortie est réussie.

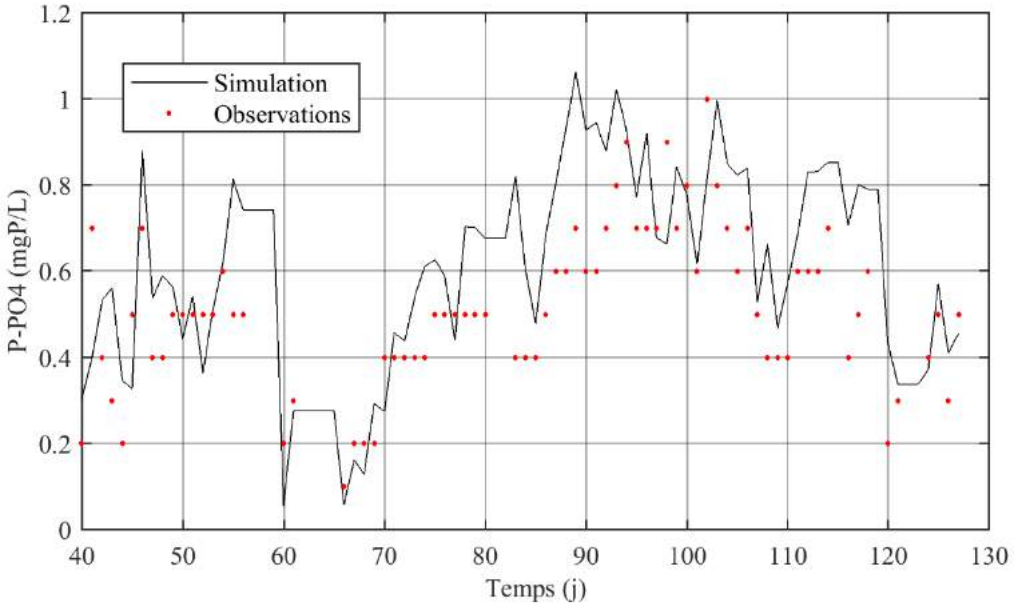


Figure 5.28 Résultats de validation des jours 40-130 sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de clarification tertiaire.

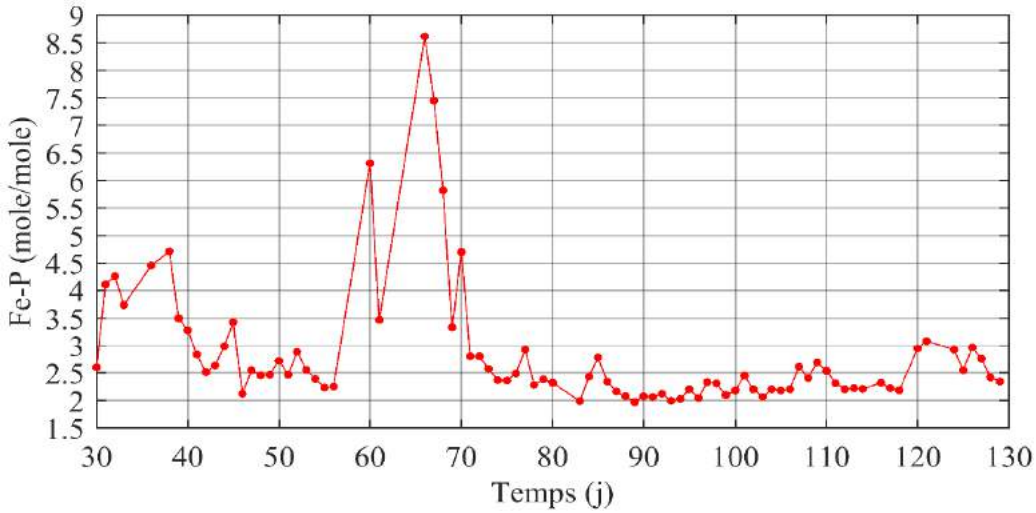


Figure 5.29 Rapport molaire Fe/P initial utilisé par la clarification tertiaire pour les jours 30-130 de la période de validation.

5.4.5. Conclusions et perspectives d'amélioration du modèle

Le modèle développé pour la décantation primaire physico-chimique a été utilisé pour simuler le procédé de clarification tertiaire de la station Seine Amont. A cause du manque de données de mesure ainsi que les informations sur le fonctionnement des clarificateurs, la calibration-validation du modèle n'est réalisée que sur les données en temps sec et s'est uniquement concentrée sur les MES et le PO_4^{3-} en sortie de traitement. Avec un ajustement d'une seule valeur de paramètre, le modèle calibré peut généralement bien prédire les niveaux des variables de sortie du procédé. Les performances de prédiction du modèle pour la période de validation sont proches de celles pour la période de calibration. Les coefficients de Janus obtenus confirment la validation réussie du modèle. Les scores MAE et RMSE obtenus sont relativement élevés par rapport aux valeurs moyennes observées, ce qui est principalement lié à l'incertitude élevée et au manque de résolution de la mesure.

Tout comme ce qui avait été observé lors de la modélisation de la décantation primaire, certaines variations en PO_4^{3-} en sortie ne peuvent pas être bien reproduites par le modèle en utilisant une seule forme moyenne de précipité produit, malgré les variations dans le rapport Fe/P utilisé en entrée de procédé. Ceci pourra être amélioré en intégrant l'évolution de la forme de précipité en fonction de la condition d'opération (rapport Fe/P initial utilisé) comme un seuil de changement ou une équation d'estimation similaire à ceux proposés pour la modélisation de la décantation primaire. Tel que discuté précédemment, ces propositions doivent être vérifiées et complétées avec des essais de jar-tests sur les eaux en sortie de décanteur secondaires. En plus de cette amélioration potentielle, un autre amélioration possible des prédiction des orthophosphates en sortie consiste en mieux considérer la complexité de la précipitation chimique des orthophosphates, et d'intégrer un modèle de précipitation avec multiple-étapes de réaction/adsorption comme le modèle proposé par Hauduc *et al.* (2015a). De plus, tel que discuté précédemment, l'ajout de $FeCl_3$ peut augmenter la vitesse de chute des particules. Le fer-phosphate-hydroxyde formé et le hydroxyde de fer peuvent avoir des vitesses de chute différentes que celles des particules organiques. On peut anticiper des valeurs différentes de la vitesse de chute et de la fraction des particules non-décantables à être utilisées par le modèle, mais tout ça doit d'abord être vérifié en appliquant la mesure de ViCAs et le jar-test.

Avec les données actuellement disponibles sur le site, la performance globale de prédiction du modèle est satisfaisante. Considérant la qualité et l'incertitude des mesures, il est difficile à ajuster plus finement les valeurs de paramètres afin d'améliorer la performance de prédiction du modèle. D'ailleurs, le modèle a seulement été calibré et validé avec les données d'exploitation issues des jours de temps sec, et sa performance de prédiction pour le traitement

tertiaire en temps de pluie doit encore être vérifiée. Un travail de recalibration avec des mesures plus précises et complètes sera nécessaire lorsque le modèle sera appliqué sur le procédé de clarification tertiaire de la station Seine Aval qui fonctionnera en 2022. Enfin, comme indiqué pour la modélisation de la décantation primaire, afin de développer et optimiser la stratégie d'injection des réactifs, la performance de prédiction du modèle doit aussi être vérifiée avec les données de mesures à pas de temps plus court, si possible.

5.5.Conclusion générale et perspectives

Le modèle développé, calibré et validé pour le procédé de décantation lamellaire physico-chimique a été utilisé avec succès pour simuler la décantation primaire de la station Seine Centre et la clarification tertiaire de la station Seine Amont. Ces travaux de modélisation fournissent une base pour établir le modèle filière globale de la station Seine Aval après sa modernisation en 2022. Bien que certaines erreurs de prédiction soient observées entre les données d'observation et les résultats de simulation, les modèles calibrés et validés permettent de bien prédire la performance de traitement de ces deux procédés. Plusieurs pistes d'amélioration du modèle ont pu être identifiées et proposées. Notamment, des expériences laboratoire ont été suggérées afin de vérifier et modifier les concepts de la décantation et de la déphosphatation utilisées par le modèle. Comme la mise en route des nouveaux décanteurs lamellaires physico-chimiques et le passage des clarificateurs en configuration tertiaire est prévue pour 2022 sur la station Seine Aval, une adaptation et éventuellement une recalibration des modèles pourra être nécessaire à partir du travail et des résultats actuels.

Références

Adin, A. (1999). Particle characteristics: A key factor in effluent treatment and reuse. *Water Science & Technology, 40*(4-5), 67-74.

Bachis, G., Maruéjouls, T., Tik, S., Amerlinck, Y., Melcer, H., Nopens, I., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2015). Modelling and characterization of primary settlers in view of whole plant and resource recovery modelling. *Water Science & Technology, 72*(12), 2251-2261.

Bernier, J. et Rocher, V. (2014). *Modélisation de la Décantation Physico-chimique Lamellaire sur les STEPs du SIAAP*. Rapport de Recherche. MOCOPEE, Colombes, France.

Bernier, J., Guérin, S., Azimi, S., Rocher, V., & Lessard, P. (2016). Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 391*, 75-82.

Bratby, J. (2016). *Coagulation and Flocculation in Water and Wastewater Treatment*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Cadet, C., Martins, V. D. S., & Dochain, D. (2015). Dynamic modelling of clarifier-thickeners for the control of wastewater treatment plants: A critical analysis. In *Proceedings of the 19th International Conference on System Theory, Control and Computing (ICSTCC)*. Cheile Gradistei, Romanie, 14-16, Octobre, 2015.

Chebbo, G. et Bachoc, A. (1992). Characterization of suspended solids in urban wet weather discharges. *Water Science & Technology, 25*(8), 171-179.

Chebbo, G. et Gromaire, M. C. (2009). VICAS—An operating protocol to measure the distributions of suspended solid settling velocities within urban drainage samples. *Journal of Environmental Engineering, 135*(9), 768-775.

Choubert, J. M., Drulhe, C., Beline, F., & Gillot, S. (2010). Techniques de fractionnement de la matière organique des déchets liquides pour la modélisation des bioprocédés. *Techniques de l'Ingénieur, 4*(10), 98-01-98-15.

Crittenden, J. C., Trussell, R. R., Hand, D. W., Howe, K. J., & Tchobanoglous, G. (2012). *Water Treatment: Principles and Design* (3rd ed.). John Wiley & Sons, Hoboken, New Jersey, États-Unis.

Drewnowski, J. et Makinia, J. (2014). The role of biodegradable particulate and colloidal organic compounds in biological nutrient removal activated sludge systems. *International Journal of Environmental Science and Technology, 11*, 1973-1988.

Drewnowski, J., Szeląg, B., Xie, L., Lu, X., Ganesapillai, M., Deb, C. K., Szulżyk-Cieplak, J., & Łagód, G. (2020). The Influence of COD Fraction Forms and Molecules Size on Hydrolysis Process Developed by Comparative OUR Studies in Activated Sludge Modelling. *Molecules, 25*(4), 929-945.

Ekama, G. A. et Wentzel, M. C. (2008a). Nitrogen removal. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Ekama, G. A. et Wentzel, M. C. (2008b). Organic matter removal. In M. Henze, M. C. M. van Loosdrecht, G. A. Ekama, & D. Brdjanovic (Eds.), *Biological Wastewater Treatment: Principles, Modeling and Design*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

El Samrani, A. G., Lartiges, B. S., Montargès-Pelletier, E., Kazpard, V., Barrès, O., & Ghanbaja, J. (2004). Clarification of municipal sewage with ferric chloride: The nature of coagulant species. *Water Research, 38*, 756-768.

Fytianos, K., Voudrias, E., & Raikos, N. (1998). Modelling of phosphorus removal from aqueous and wastewater samples using ferric iron. *Environmental Pollution, 101*(1), 123-130.

Gernaey, K. V., Vanrolleghem, P. A., & Lessard, P. (2001). Modeling of a reactive primary clarifier. *Water Science & Technology, 43*(7), 73-81.

Ghernaout, D. (2014). The hydrophilic/hydrophobic ratio vs. dissolved organics removal by coagulation – A review. *Journal of King Saud University - Science, 26*(3), 169-180.

Hauduc, H., Takacs, I., Smith, S., Szabo, A., Murthy, S., Daigger, G. T., & Spérandio, M.

(2015a). A dynamic physicochemical model for chemical phosphorus removal. *Water Research, 73*, 157-170.

Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosdrecht, M. C. M. (2000b). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Martin, C. et Vanrolleghem, P. A. (2014). Analysing, completing and generating influent data for WWTP modelling: A critical review. *Envrionmental Modelling & Software, 60*, 188-201.

Maruéjouls, T., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2014). Impact of particle property distribution on hydrolysis rates in integrated wastewater modelling. In *Proceedings of the 13th International Conference on Urban Drainage (13ICUD)*. Sarawak, Malaysia,September 7-12 2014.

Mèche, P. et Goncalves, A. (2013). *Effet de la Dose de Fer sur la Sédimentation des MES : Essais en Jar-tests sur des Eaux Brutes de SAV*. Rapport Interne du SIAAP. Direction Innovation, SIAAP, Colombes, France.

Peric, M., Riffat, R., Murthy, S. N., Neupane, D. R., & Cassel, A. (2008). Development of a laboratory clarifier test to predict full scale primary clarifier performance. *International Journal of Environmental Research, 2*(2), 103-110.

Rieger, L., Gillot, S., Langergraber, G., Ohtsuki, T., Shaw, A., Takács, I., & Winkler, S. (2012). *Guidelines for Using Activated Sludge Models*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Sharp, E. L., Javis, P., Parsons, S. A., & Jefferson, B. (2006). Impact of fractional character on the coagulation of NOM. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 286*(1-3), 104-111.

Sin, G., De Pauw, D. J. W., Weijers, S., & Vanrolleghem, P. A. (2008b). An efficient approach to automate the manual trial and error calibration of activated sludge models. *Biotechnology and Bioengineering, 100*(3), 516-528.

Smith, S., Takács, I., Murthy, S., Daigger, G. T., & Szabó, A. (2008). Phosphate complexation model and its implications for chemical phosphorus removal. *Water Environment Research, 80*(5), 428-438.

Spanjers, H. et Vanrolleghem, P. A. (2016). Respirometry. In M. C. M. van Loosdrecht, P. H. Nielsen, C. M. Lopez-Vazquez, & D. Brdjanovic (Eds.), *Experimental Methods in Wastewater Treatement*. IWA publishing, Londres, Royaume-Uni.

Suez. (2015). Densadeg-Lamellar settling sludge thickening. Extrait de http://www.suez.com/-/meida/suez-global/files/publication-docs/pdf-english/m-eaux-usees/densadeg_p-ep-015-en.pdf

Szabó, A., Takács, I., Murthy, S., Daigger, G. T., Licskó, I., & Smith, S. (2008). Significance of design and operational variables in chemical phosphorus removal. *Water Environment Research, 80*(5), 407-416.

Takács, I., Patry, G. G., & Nolasco, D. (1991). A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research, 25*(10), 1263-1271.

Tik, S., Maruéjouls, T., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2015). Water quality-based control evaluation by means of an integrated urban wastewater model. In *Proceedings of the 10th International Conference on Urban Drainage Modelling (UDM2015)*. Mont-Sainte-Anne, Québec, Canada, 20-23, Septembre, 2015.

Tik, S., Bachis, G., Maruéjouls, T., Charette, S., Lessard, P., & Vanrolleghem, P. A. (2016). A CEPT model based on particle settling velocity distributions. In *Proceedings of the IWA Particle Separation Conference (PS 2016)*. Oslo, Norvège, 22-24, Juin, 2016.

Tik, S. et Vanrolleghem, P. A. (2017). Chemically enhancing primary clarifiers: Model-based development of a dosing controller and full-scale implementation. *Water Science & Technology, 75*(5-6), 1185-1193.

Valentin, C., Dochain, D., Jallut, C., & Martins, V. D. S. (2020). Representation of a continuous settling tank by hybrid partial differential non-linear equations for control design. In *Proceedings of the World congress IFAC 2020*. Berlin, Allemagne, 12-17, Juillet, 2020.

Vanderhasselt, A., Fuchs, A., Vanrolleghem, P. A., Staudinger, G., & Verstraete, W. (1999a).

Monitoring of the effects of additives on sludge separation properties by using sensors. *Water Environment Research, 71*(3), 355-362.

Vanderhasselt, A., De Clercq, B., Vanderhaegen, B., Vanrolleghem, P. A., & Verstraete, W. (1999b). On-line control of polymer addition to prevent massive sludge washout. *Journal of Environmental Engineering, 125*(11), 1014-1021.

Verbanck, M. A. (1995a). Capturing and releasing settleable solids — The significance of dense undercurrents in combined sewer flows. *Water Science & Technology, 31*(7), 85-93.

Water Environment Federation. (2005c). Tertiary clarifier design concepts and considerations. In *Clarifier Design: WEF Manual of Practice No. FD-8* (2rd ed., pp. 211-301). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Zhao, Q., Zhong, H., Wang, K., Wei, L., Liu, J., & Liu, Y. (2013). Removal and transformation of organic matters in domestic wastewater during lab-scale chemically enhanced primary treatment and a trickling filter treatment. *Journal of Environmental Sciences, 25*(1), 59-68.

Chapitre 6 Construction du modèle de la filière biofiltration de la station Seine Aval

Ce chapitre présente en détails le travail de construction du modèle de la filière biofiltration de la station Seine Aval. La première partie de ce chapitre décrit la connexion des modèles des procédés individuels en fonction des configurations de traitement de la filière de biofiltration prévues en 2022 (voir section 3.1.3). Tel qu'expliqué au Chapitre 3 (voir section 3.2.2), afin que le modèle filière puisse réagir et s'adapter de lui-même aux variations de débit et concentration à l'affluent et en fonction des consignes de traitement demandées en sortie de chaque procédé, les règles de commande des procédés comme la distribution des eaux et l'ajout des réactifs doivent aussi être intégrées dans le modèle filière. Les concepts derrière les commandes utilisées sur site et les détails de leur intégration dans le modèle filière sont également présentés dans cette partie.

Etant donné que le modèle filière sera utilisé comme un outil pour optimiser le traitement de la station Seine Aval, il doit également prendre en compte l'évaluation des coûts et des impacts environnementaux de traitement de la filière biofiltration. La deuxième partie du chapitre présente donc les concepts et hypothèses et les modes de calcul mis en place dans le modèle filière à cette fin. Enfin, la dernière partie du chapitre apporte une conclusion sur le travail de construction du modèle filière et sur les perspectives d'utilisation du modèle.

6.1. Construction du modèle filière et intégration des commandes en fonction des configurations de traitement de la station prévues en 2022

Le modèle filière construit dans le cadre de cette thèse consiste en trois parties indépendantes. La première partie représente le traitement primaire en amont des trois étages de biofiltration (bloc « Traitement primaire » dans la Figure 6.1). Cette partie du modèle est alimentée par les données caractérisant les eaux prétraitées de la station (bloc « Données des eaux prétraitées » dans la Figure 6.1) et simule le fonctionnement des décanteurs lamellaires physico-chimiques en se basant sur le modèle de décantation primaire précédemment développé (voir sous-chapitre 5.3). La deuxième partie du modèle simule la performance de traitement par biofiltration (bloc « Traitement par biofiltration » dans la Figure 6.1). Le modèle de biofiltration présenté au Chapitre 4 est utilisé dans ce cas-ci. Enfin, la troisième partie du modèle représente le traitement tertiaire en aval des trois étages de biofiltration qui est basé sur le modèle de clarification tertiaire précédemment construit (bloc « Traitement tertiaire » dans la Figure 6.1) (voir sous-chapitre 5.4). Pour chaque partie, des commandes sont intégrés, qui seront présentés plus loin dans cette section.

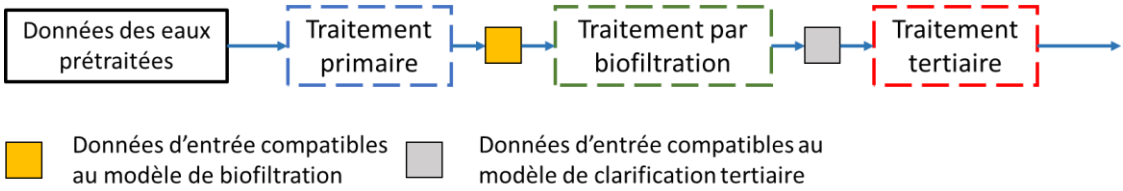


Figure 6.1 Schéma global du modèle de la filière biofiltration construit.

Tel que mentionné au Chapitre 5 (section 5.2.2), les variables particulaires inorganiques X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH} utilisées par le modèle de décantation primaire et de clarification tertiaire ne sont pas prises en compte par les modèles de biofiltration. Les résultats de simulation en sortie de la première partie du modèle filière ne peuvent donc pas être directement utilisés par les modèles de biofiltration qui suivent. Dans ce cas-ci, les résultats en sortie de traitement primaire de la filière sont convertis en données d'entrée compatibles aux modèles de biofiltration (bloc en jaune dans la Figure 6.1). Les concentrations en particules inorganiques en sortie ($X_{II,dec}$, $X_{MeP,dec}$ et $X_{MeOH,dec}$) sont transformées en X_I pour conserver la concentration totale en particules dans l'affluent de la biofiltration (voir Eq 6.1). Comme les eaux décantées en sortie de traitement primaire sont principalement traitées par l'étage de pré-dénitrification, pour assurer la prédiction de particules en sortie de l'étage, la valeur du facteur de conversion MES-DCO_x (0,75 mgMES/mgO_2) utilisée par l'équation Eq 6.1 correspond au ratio MES/DCO_x utilisé pour la sortie du modèle en pré-dénitrification.

Eq 6.1 $$X_{I,biof} = X_{I,dec} + {(X_{II,dec} + X_{MeP,dec} + X_{MeOH,dec})}/{0,75}$$

où
$X_{I,biof}$ est la concentration de la variable X_I en entrée de la partie de traitement par biofiltration (gO_2/m^3)
$X_{I,\,dec}$, $X_{MeP,dec}$, $X_{II,\,dec}$ et $X_{MeOH,\,dec}$ sont les concentrations des variables X_I, X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH} en sortie de traitement primaire, respectivement (g/m^3)

Cette méthode de conversion n'est pas strictement correcte, puisqu'elle augmente la DCO totale en entrée du modèle de biofiltration. Cependant, selon des tests de simulation effectués lors de la construction du modèle filière, cette augmentation (environ 10 mgO_2/L, 10% de la DCO totale) a des effets mineurs sur les résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de la filière. Premièrement, ces variables sont converties en DCO particulaire inerte qui n'a pas d'influence directe sur les vitesses de conversion biologique pour le modèle de biofiltration. Deuxièmement, la plupart des particules dans l'eau décantée est retenue par les trois étages de biofiltration. L'impact de l'augmentation de la DCO particulaire dans l'eau décantée sur la prédiction de la DCO en sortie de traitement par biofiltration est donc faible. En plus de la qualité de l'eau en sortie de la filière, la matière volatile en suspension dans les boues issues de la biofiltration pourrait être estimée. Même si elle n'est pas actuellement considérée par le modèle filière, elle pourrait également être impactée par cette méthode de conversion.

Pour la même raison, les résultats de simulation en sortie de la biofiltration ne sont pas compatibles avec le modèle de traitement tertiaire, puisqu'ils ne contiennent pas les variables de particules inorganiques X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH}. Dans ce cas-ci, les résultats de simulation en sortie de la partie du traitement par biofiltration sont convertis en données d'entrée compatibles pour la clarification tertiaire (bloc en gris dans la Figure 6.1). En supposant qu'après le traitement par les trois étages de biofiltration, la concentration en MES en entrée des décanteurs tertiaires soit faible, les concentrations des variables X_{II}, X_{MeP} et X_{MeOH} en entrée du traitement tertiaire sont fixées à 0 g/m^3.

6.1.1. Adaptation et intégration du modèle de décantation primaire dans le modèle filière

- **Bloc de description d'affluent**

La Figure 6.2 montre la structure générale de la partie de traitement primaire construite pour le modèle filière. Le bloc « Affluent » montré à la figure n'est pas modifié par rapport à celui utilisé par le modèle de décantation primaire présentée au Chapitre 5 (voir section 5.2.2).

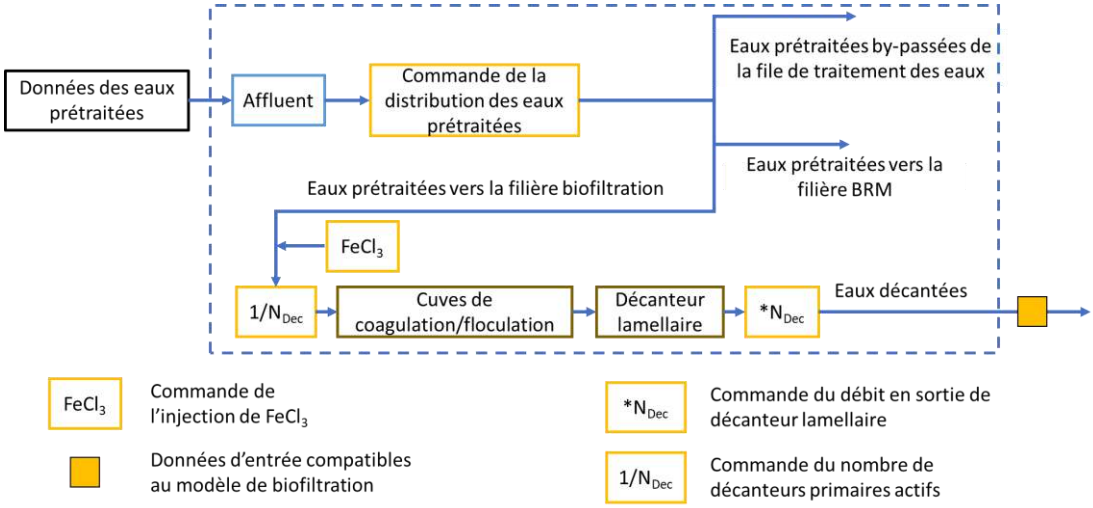


Figure 6.2 Structure de la partie de traitement primaire du modèle filière.

- **Commande de la distribution des eaux prétraitées**

Un bloc représentant le mode de répartition des eaux prétraitées sur les différentes filières de la station est ajouté directement après le bloc de description d'affluent. Cette commande distribue les eaux prétraitées vers les deux filières (BRM et biofiltration) de traitement de la station Seine Aval. Il décide également s'il y aura besoin de contourner une partie de l'eau prétraitée pour la file de traitement des eaux et de l'envoyer directement vers le rejet de la station. Le Tableau 6.1 présente les règles de distribution suivies par cette commande. Ces règles proviennent des modes de traitement primaire de la station prévus après sa modernisation en 2022 et de la consigne de débit instantané pour la filière BRM actuellement utilisée sur site (voir Tableau 3.1 dans le Chapitre 3).

Tableau 6.1 Règles de distribution de l'eau prétraitée entre les filières BRM et biofiltration et le by-pass de la station.

Débit en sortie de prétraitement ($Q_{pré}$) (m^3/s)	**Débit pour la filière BRM (m^3/s)**	**Débit pour la filière biofiltration (m^3/s)**	**By-pass (m^3/s)**
$0<Q_{pré}<7$	1	$Q_{pré}$ - 1	0
$7\leq Q_{pré}<10$	1,5	$Q_{pré}$ - 1,5	0
$10\leq Q_{pré}<14$	2	$Q_{pré}$ - 2	0
$14\leq Q_{pré}<18$	2,5	$Q_{pré}$ - 2,5	0
$18\leq Q_{pré}<21$	3	$Q_{pré}$ - 3	0
$21\leq Q_{pré}<25$	3,5	$Q_{pré}$ - 3,5	0
$25\leq Q_{pré}\leq 55$	4	$Q_{pré}$ - 4	0
$55<Q_{pré}<=57$	2*	$Q_{pré}$ - 2	0
$57<Q_{pré}$	2	55	$Q_{pré}$ - 57

** Selon le mode de traitement en temps de pluie prévu en 2022, quand le débit en entrée de la station dépasse 55 m^3/s, tous les décanteurs primaires sont utilisés pour la filière biofiltration, le débit vers la filière BRM est donc réduit à 2 m^3/s.*

- **Commande d'injection de chlorure ferrique pour le traitement primaire**

Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.3), les futurs décanteurs primaires de Seine Aval sont des décanteurs lamellaires physico-chimiques. Comme la nature du procédé commercial exact de ces décanteurs n'était pas connue lors de la construction du modèle, il est supposé que les dimensions des nouveaux décanteurs soient identiques à celles des clarificateurs tertiaires (Actiflo®) actuellement utilisés en traitement primaire de la station Seine Aval. Il est à noter que la technologie Actiflo® peut utiliser le microsable comme lest pour alourdir les flocs formés. Cependant, comme le modèle de décantation primaire est développé basé sur les décanteurs lamellaires physico-chimiques (station Seine Centre, Densadeg®) qui n'appliquent pas le microsable et la condition d'utilisation de ce lest pour les décanteurs futurs n'est pas encore connue, l'injection du microsable n'est pas considérée par le modèle filière. D'ailleurs, lors du développement du modèle de décantation primaire, l'impact du polymère n'est pas pris en compte du fait que le dosage de polymère sur les décanteurs de la station Seine Centre est presque constant, et que son effet est très difficile à observer sur site. Comme les clarificateurs Actiflo® actuellement utilisés en traitement primaire appliquent aussi un dosage constant (0,8 g/m^3) et les règles sur l'injection de polymère en 2022 pour les nouveaux décanteurs ne sont pas encore disponibles, l'injection du polymère n'est donc pas prise en compte par le modèle filière.

On suppose aussi que le coagulant utilisé dans les nouveaux décanteurs est le chlorure ferrique comme les clarificateurs tertiaires. Un bloc d'injection de chlorure ferrique est donc intégré (voir bloc « $FeCl_3$ » à la Figure 6.2). Comme les règles d'injection de coagulant pour les décanteurs primaires prévus en 2022 ne sont pas encore connues, une règle simple a été attribuée à cette commande pour estimer le flux de chlorure ferrique à injecter (voir Eq 6.2). Le taux de chlorure ferrique dans l'équation Eq 6.2 est un paramètre qui peut être modifié par

l'utilisateur du modèle. Le flux de $FeCl_3$ calculé en sortie de la commande est converti en flux équivalent en $Fe(OH)_3$ représenté par le composant X_{MeOH}.

Eq 6.2 $$M_{FeCl_3,pri} = Taux_{FeCl_3,pri} \times Q_{biofiltration}$$

où
$M_{FeCl3,pri}$ est le flux de $FeCl_3$ injecté dans les décanteurs primaires de la filière de biofiltration (g/j)
$Taux_{FeCl3,pri}$ est le taux de $FeCl_3$ défini par l'utilisateur du modèle ($gFeCl_3/m^3$)
$Q_{biofiltration}$ est le débit d'eau prétraitée envoyé vers la filière de biofiltration (m^3/j)

- **Commande du nombre de décanteurs primaires actifs**

Après l'injection de chlorure ferrique, les eaux à traiter par les décanteurs primaires entrent dans une commande estimant le nombre de décanteurs actifs (bloc « $1/N_{Dec}$ » dans la Figure 6.2) dont la sortie alimente la filière de biofiltration. Pour rappel, le modèle de décantation primaire développé représente la performance de traitement de l'étage entier par un seul décanteur. Pour cette raison, le débit d'eau entrant doit être divisé par le nombre de décanteurs actifs calculé par la commande. En revanche, les données de concentrations des composants ne sont pas modifiées. Encore une fois, comme les nouveaux décanteurs ne sont pas encore installés, seules les informations suivantes étaient disponibles dans le cadre de la thèse (voir section 3.1.3) :

1) En temps sec (débit d'eau prétraitée ≤ 30 m^3/s), 15 décanteurs alimentent la filière biofiltration.

2) En temps de pluie, les 9 clarificateurs tertiaires peuvent servir au traitement primaire pour la filière biofiltration.

3) Les 5 décanteurs attribués à la filière BRM en temps sec peuvent également traiter les eaux prétraitées envoyées à la filière de biofiltration en temps de pluie lorsque le débit en sortie de prétraitement dépasse 55 m^3/s.

En se basant sur ces informations, des hypothèses ont été faites pour établir les règles de commande du nombre de décanteurs actifs pour le traitement primaire de la filière biofiltration (voir Tableau 6.2) :

1) Trois gammes de débit pour la filière biofiltration sont considérées, chacune correspond à un nombre de décanteurs total attribués à la filière. Peu importe la gamme de débit, 2 décanteurs sont considérés en maintenance et ne peuvent donc pas être activés.

2) Pour la première gamme de débit (0-26 m^3/s), le nombre de décanteurs actifs augmente en fonction du débit attribué à la filière et le débit maximum traité par un décanteur est limité à 2 m^3/s. Dans ce cas-ci, 13 décanteurs (15-2) seront actifs lorsque le débit

attribué à la filière biofiltration atteint 26 m^3/s (débit maximum prévu pour la filière de temps sec). Pour les deux autres gammes, les nombres de décanteurs actifs sont fixés à 22 (24-2) et 27 (29-2), respectivement. Ces deux nombres de décanteurs considérés correspondent aux situations où les clarificateurs tertiaires (n=9) et les décanteurs primaires (n=5) de la filière BRM sont attribués au traitement primaire pour la filière biofiltration en temps de pluie.

Tableau 6.2 Règles d'estimation du nombre du décanteurs primaires actifs pour la filière biofiltration développée pour le modèle filière.

Débit attribué à la filière biofiltration ($Q_{biofiltration}$) (m^3/s)	$0<Q_{bio} \leq 26$	$26<Q_{bio} \leq 51$	$51<Q_{bio} \leq 55$
Mode des clarificateurs tertiaires (N=9)	Tertiaire	Primaire	Primaire
Nombre de décanteurs primaires attribués à la filière BRM	5	5	0
Nombre de décanteurs primaires attribués à la filière biofiltration	15	24 (15+9)	29 (15+9+5)
Nombre de décanteurs primaires considérés en maintenance	2	2	2
Nombre de décanteurs primaires actifs estimés	$\lfloor Q_{bio}/2 \rfloor$	22	27

- **Blocs représentants les cuves de coagulation/floculation et le décanteur lamellaire**

Les dimensions physiques des différentes étapes du traitement ont été modifiées dans ce bloc par rapport au modèle calibré sur Seine Centre. Le volume de la cuve de coagulation a été modifié de 373 m^3 à 1600 m^3 afin d'adapter à la taille des décanteurs primaires supposés être utilisés dans la station en 2022.

La surface et la hauteur de décantation ont été modifiées (surface : de 1512 m^2 à 2375 m^2 ; hauteur : de 1,08 m à 0,6737 m). Hormis ces changements de dimensions, la fraction minimum de particules non-décantables en entrée de décanteur ($f_{ns,min}$) et l'équivalence MES-DCOx ($f_{MES-DCO}$) sont remises aux valeurs par défaut ($f_{ns,mis}$: 10,7% et $f_{MES-DCO}$: 0,75). Ces valeurs étaient issues de mesures jar-tests effectuées sur les eaux en entrée de traitement primaire de la station Seine Aval avant la modernisation (voir sections 5.2.2 et 5.3.3).

En sortie du bloc de décanteur lamellaire, un bloc supplémentaire (bloc « $*N_{Dec}$ » dans la Figure 6.2) à été ajouté qui sert simplement à multiplier le débit d'eau en sortie du bloc de décanteur avec le nombre de décanteurs primaires actifs contrôlé. Il assure donc le bilan de débit d'eau envoyé vers la partie de traitement par biofiltration. Pour rappel, le débit de l'eau prétraitée envoyé au traitement primaire de la filière biofiltration est divisé par le nombre de décanteurs actifs estimés dans le bloc « $1/N_{Dec}$ » précédemment mentionné. Les données des concentrations des composants en sortie ne sont pas changées par le bloc.

6.1.2. Adaptation des modèles de biofiltration pour les intégrer dans le modèle filière

Tel que montré à la Figure 6.3, le traitement par biofiltration consiste en trois sous-parties, chacune décrivant le fonctionnement d'un étage de biofiltration de la station Seine Aval. Ces sous-parties se connectent en série en fonction de l'ordre de traitement des eaux de la station : l'étage de pré-dénitrification, l'étage de nitrification et l'étage de post-dénitrification.

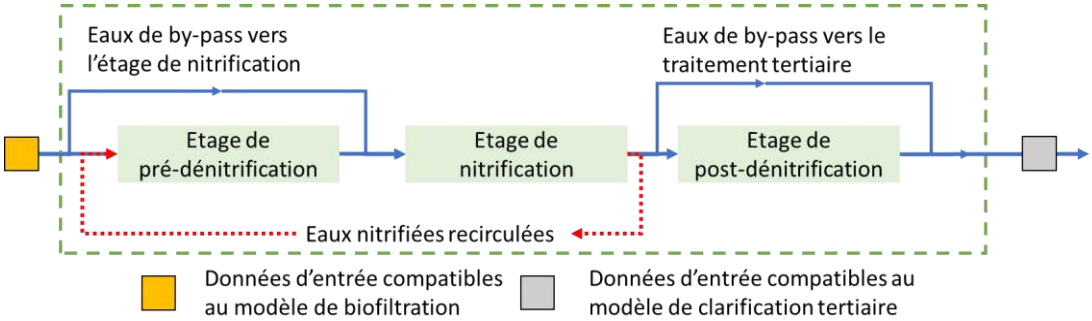


Figure 6.3 Structure générale de traitement par biofiltration du modèle filière.

6.1.2.1. Etage de pré-dénitrification

- **Bloc des eaux de retours en tête de l'étage de pré-dénitrification**

Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.2), en plus de l'eau nitrifiée et de l'eau décantée, l'étage de pré-dénitrification traite aussi les eaux issues du traitement des boues et la sortie de traitement des eaux de lavage des biofiltres pré-dénitrifiants. Ces différents retours en tête de l'étage de pré-dénitrification sont décrits par un bloc ajouté en tête de l'étage de pré-dénitrification (bloc « Retours pré-dénit » dans la Figure 6.4). Ce bloc réalise le fractionnement par rapport aux mesures disponibles pour les retours et aux variables des composants considérés par les modèles de biofiltration.

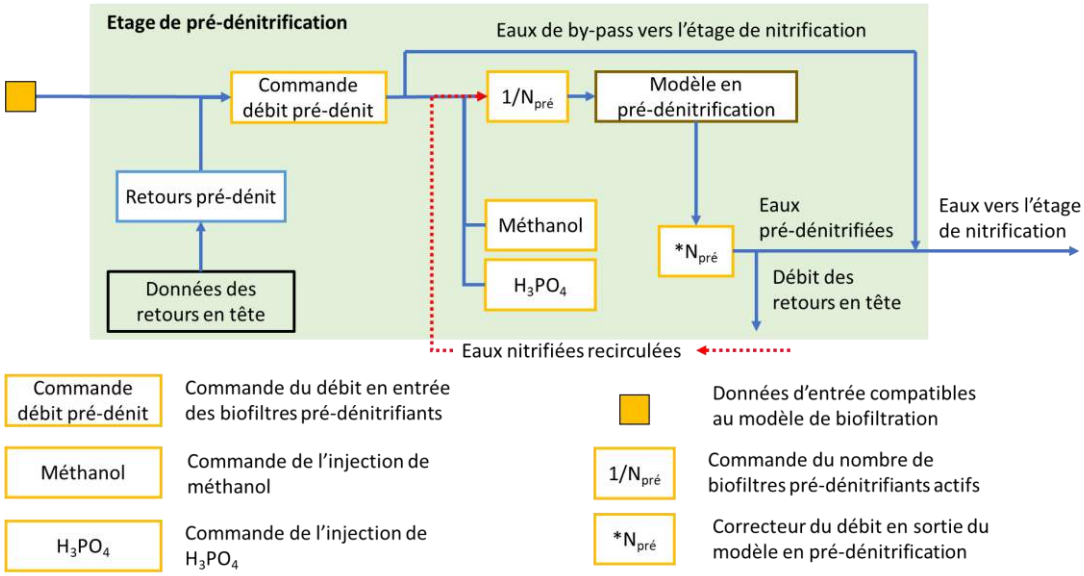


Figure 6.4 Structure de l'étage de pré-dénitrification du modèle filière.

Pour rappel, la somme des débits des retours en tête est faible par rapport au débit total traité par l'étage de pré-dénitrification (autour de 7%), ce qui est considéré avoir des effets mineurs sur la qualité de l'eau en entrée de l'étage.

- **Commande de débit en entrée des biofiltres pré-dénitrifiants**

Une commande de débit est ajoutée en entrée de l'étage de pré-dénitrification. Il sert à définir les quantités d'eau entrant dans les biofiltres pré-dénitrifiants en fonction du débit de l'eau décantée en amont, la capacité de traitement des biofiltres et le taux de recirculation de l'eau nitrifiée demandé par l'utilisateur. Les règles de commande établies consistent en trois étapes selon la documentation du projet BioSAV et les échanges avec les opérateurs de la station.

La première étape est de définir la capacité hydraulique maximale de l'étage de pré-dénitrification ($C_{hydrau,pré}$). Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.3), les biofiltres peuvent traiter jusqu'à 31,2 m^3/s, correspondant à une vitesse de filtration maximale de 12 m/h sur 54 biofiltres en fonctionnement (un en maintenance et trois en lavage). Dans ce cas-ci, chaque biofiltre en fonctionnement peut traiter un débit maximal de 49428 m^3/j (0,57 m^3/s). A partir de ces informations, la capacité hydraulique maximale de l'étage peut être définie en multipliant le débit maximal d'un biofiltre avec un nombre total de biofiltres en état « normal » qui sont disponibles pour la pré-dénitrification ($N_{pré}$). Ce nombre doit être indiqué à la commande par l'utilisateur du modèle selon les conditions de traitement qu'il veut tester.

La deuxième étape consiste à calculer le débit devant contourner l'étage de pré-dénitrification vers l'étage de nitrification. La capacité hydraulique maximale précédemment définie est comparée avec le débit en entrée de la commande qui correspond à la somme du débit de l'eau décantée ($Q_{décantée}$) et du débit des retours en tête ($Q_{retour,pré}$) (voir Tableau 6.3). Si le débit en entrée est inférieur ou égal à la capacité maximale, toutes les eaux en entrée de la commande seront envoyées à l'étage de pré-dénitrification. Dans le cas contraire, un débit contournant l'étage de pré-dénitrification vers l'étage de nitrification ($Q_{by\text{-}pass,pré}$) est calculé à partir de l'écart entre la capacité maximale de l'étage et le débit en entrée de la commande.

Tableau 6.3 Règles de commande du débit de l'eaux décantée (mélangée avec les retours en tête) envoyé à l'étage de pré-dénitrification et celui du by-pass.

Conditions	L'étage est capable de prendre les eaux décantées et les retours en tête : $Q_{décantée}+Q_{retour,pré} \leq C_{hydrau,pré}$	Les eaux décantées et les retours dépassent la capacité maximale de l'étage : $Q_{décantée}+Q_{retour,pré} > C_{hydrau,pré}$
Débit envoyé vers l'étage de pré-dénitrification (m^3/s)	$Q_{décantée}+Q_{retour,pré}$	$C_{hydrau,pré}$
Débit contournant l'étage de pré-dénitrification (m^3/s)	0	$Q_{décantée}+Q_{retour,pré}- C_{hydrau,pré}$

Enfin, la troisième étape est de calculer le débit de l'eau nitrifiée à recirculer (Q_{rec}). Pour réaliser ce calcul, l'utilisateur du modèle doit fournir à la commande un taux de recirculation souhaité ($Taux_{rec}$). Ce taux correspond à un pourcentage de débit d'eau (mélange de l'eau décantée et des retours) envoyé à l'étage. Lorsqu'il n'y pas de by-pass à effectuer, la commande décide s'il peut garder le taux de recirculation demandé ou s'il doit le diminuer en fonction de la capacité hydraulique maximale de l'étage et du débit en entrée de la commande (voir Tableau 6.4). En réalité, la recirculation de l'eau nitrifiée est arrêtée lorsqu'une partie de l'eau décantée doit être envoyée directement vers l'étage de nitrification. Cependant, pour éviter des problèmes numériques lors de simulation avec un arrêt ponctuel de la recirculation, un faible taux de recirculation (1%) est considéré lorsqu'il y a un by-pass à effectuer.

Tableau 6.4 Règles de commande du débit de l'eau nitrifiée recirculée vers l'étage de pré-dénitrification lorsqu'il n'y a pas de by-pass de l'étage à effectuer.

Conditions	Le taux de recirculation demandé peut être réalisé par l'étage : $1 + Taux_{rec} \leq \frac{C_{hydrau,pré}}{Q_{décantée} + Q_{retour,pré}}$	Le taux de recirculation demandé dépasse la capacité hydraulique de l'étage : $1 + Taux_{rec} > \frac{C_{hydrau,pré}}{Q_{décantée} + Q_{retour,pré}}$
Débit de recirculation (m^3/s)	$(Q_{décantée} + Q_{retour,pré}) \times Taux_{rec}$	$C_{hydrau,pré} - Q_{décantée} - Q_{retour,pré}$

- **Commande anticipative d'injection de méthanol pour l'étage de pré-dénitrification**

Tel que présenté au Chapitre 3, du méthanol est injecté pour finaliser le traitement en pré-dénitrification sur SAV. Une commande anticipative d'injection de méthanol est donc ajoutée. Selon la documentation technique du procédé disponible, le dosage de méthanol est contrôlé en fonction de la charge en NO_x^- en entrée, de la consigne de concentration en NO_x^- en sortie à atteindre et du rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever (en gMéthanol/gN-NO_x^-) défini par les agents de la station. Cette méthode est directement intégrée au modèle (voir Eq 6.3). Le rapport ($Taux_{Méthanol,pré}$) et la consigne ($NO_{x^-,consigne,pré}$) dans l'équation Eq 6.3 sont les deux paramètres qui peuvent être modifiés par l'utilisateur du modèle. Le méthanol injecté est transformé en DCO soluble biodégradable comme lors de la calibration du modèle en post-dénitrification (voir Chapitre 4), en utilisant un facteur de conversion de 1,5 gO_2/gMéthanol.

Eq 6.3 $$M_{Méthanol,pré} = Taux_{Méthanol,pré} \times Q_{pré} \times \left(NO^-_{x,entrée,pré} - NO^-_{x,consigne,pré}\right)$$

où

$M_{Méthanol,pré}$ est le flux de méthanol injecté dans l'étage de pré-dénitrification (g/j)

$Taux_{Méthanol,pré}$ est le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever défini par l'utilisateur (g/gN)
$Q_{pré}$ est le débit d'eau en entrée de l'étage de pré-dénitrification (m^3/j).
$NO_x^-{}_{,entrée,pré}$ est la concentration en NO_x^- en entrée de l'étage de pré-dénitrification (gN/m^3)
$NO_x^-{}_{,consigne,pré}$ est la consigne de la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de pré-dénitrification définie par l'utilisateur (gN/m^3)

- **Commande anticipative d'injection d'acide phosphorique pour l'étage de pré-dénitrification**

En plus du méthanol, de l'acide phosphorique est aussi injecté en tête de l'étage de pré-dénitrification. Pour rappel, les décanteurs physico-chimiques mis en route en 2022 renforceront la déphosphatation chimique au niveau du traitement primaire, ce qui peut causer des carences en phosphore pour le traitement biologique de la filière. Cet ajout vise à couvrir les besoins en phosphate du traitement biologique, en particulier des deux étages (nitrification et post-dénitrification) en aval de l'étage de pré-dénitrification. Selon la documentation technique du procédé disponible, la quantité d'acide phosphorique injectée est proportionnelle au débit d'eau décantée envoyée vers le traitement par biofiltration (voir Eq 6.4).

Eq 6.4 $$M_{H3PO4,pré} = Taux_{H3PO4,pré} \times (Q_{décantée} + Q_{retour,pré})/31 \times 98$$

où
$M_{H3PO4,pré}$ est le flux de H_3PO_4 injecté en tête de la pré-dénitrification (g/j)
$Taux_{H3PO4}$ est le taux de H_3PO_4 utilisé (gP/m^3)
31 et 98 dans l'équation sont les masses molaires de P et de H_3PO_4, respectivement (g/mol)

Le taux d'acide phosphorique dans l'équation Eq 6.4 peut être défini par les opérateurs de la station. Cependant, selon les échanges avec les agents de la station dans le cadre de la thèse, le mode d'injection de l'acide phosphorique est en cours d'être étudié et les règles d'injection prévues ne sont pas appliquées. Dans le modèle filière, les règles développées pour la commande d'injection de l'acide phosphorique sont modifiées (voir Eq 6.5) par rapport à celles du projet BioSAV (voir Eq 6.4). D'un point de vue d'économiser les réactifs, l'acide phosphorique est seulement injecté en cas de besoin. Une consigne de concentration en orthophosphates en entrée de l'étage de nitrification a été considérée pour la commande. Lorsque la concentration en orthophosphates en entrée de l'étage de nitrification est inférieure à la consigne définie par l'utilisateur du modèle, l'injection de l'acide phosphorique sera activée (voir Eq 6.5). Un facteur de correction, qui peut être défini par l'utilisateur, est également considéré pour prendre en compte l'effet de dilution des orthophosphates par l'eau nitrifiée recirculée ainsi que la consommation des phosphores par l'étage de pré-dénitrification. Dans le cas contraire, aucun acide phosphorique ne sera injecté en tête de l'étage de pré-dénitrification.

Eq 6.5 $$M_{H3PO4,pré} = F_{H3PO4,pré} \times (Q_{décantée} + Q_{retour,pré}) \times (PO_{4,consigne,nit}^{3-} - PO_{4,nit}^{3-}) \times 98 / 31$$

où

$F_{H3PO4,\ pré}$ est le facteur de correction défini par l'utilisateur (-)
$PO_4^{3-}{}_{,consigne,nit}$ est la consigne de la concentration en orthophosphates en entrée de l'étage de nitrification définie par l'utilisateur (gP/m^3)
$PO_4^{3-}{}_{,nit}$ est la concentration en orthophosphates en entrée de l'étage de nitrification (gP/m^3)

De manière similaire à l'injection du méthanol, en sortie de la commande, la quantité d'acide phosphorique injectée est convertie à celle du composant S_{PO} utilisé par le modèle.

- **Commande du nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs**

De manière similaire à la partie de traitement primaire du modèle filière, avant d'entrer dans le modèle en pré-dénitrification, les données de débit sont divisées par le nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs, estimé par une commande (voir le bloc « $1/N_{pré}$ »). En effet, tel que mentionné au Chapitre 2 (section 2.1.4.3), afin d'obtenir une bonne qualité de traitement, il est préférable d'éviter de surcharger ou de sous-charger les biofiltres. Dans ce cas-ci, le nombre de biofiltres actifs pour un étage ou une batterie de traitement de biofiltration doit être contrôlé afin que chaque biofiltre fonctionne sous une vitesse de filtration et une charge volumique appropriées.
Sur Seine Aval, le nombre de biofiltres pré-dénitrifiants à activer pour chaque batterie est décidé de manière indépendante en utilisant un même mode de commande. Pour une raison de simplification, dans le modèle filière, une seule commande du nombre de biofiltres actifs a été construite pour l'étage de pré-dénitrification complet en supposant que la performance de traitement des biofiltres des trois batteries est similaire. Le mode de commande appliquée est similaire à celui utilisé par les trois batteries de la station, qui consiste en trois étapes. Tout d'abord, un nombre minimum de biofiltres à activer est calculé en se basant sur le débit d'eau en entrée ($Q_{pré}$) et le critère de la vitesse de filtration par biofiltre défini par l'utilisateur du modèle ($v_{max,pré}$). Ensuite, de manière similaire, un nombre minimum de biofiltres à utiliser est déterminé en fonction du critère de la charge volumique par biofiltre définie par l'utilisateur ($Charge_{max,pré}$) et de la charge en NO_x^- en entrée de l'étage ($Charge_{pré}$). Enfin, le nombre de biofiltres actifs est fixé au plus grand de ces deux nombres minimums. Il est à noter que ce nombre fixé ne peut pas dépasser à la limite du nombre total de biofiltres pré-dénitrifiants disponibles ($N_{Pré}$) précédemment indiquée à la commande de débit en entrée de l'étage de pré-dénitrification.

En réalité, les opérateurs de la station indiquent aux commandes la vitesse de filtration et la charge en polluant à respecter. En cas de besoin, ils peuvent également manuellement changer le nombre de biofiltres actifs de chaque batterie. Dans ce cas-ci, afin de vérifier si la commande développée peut bien simuler le fonctionnement de l'étage de pré-dénitrification, un test de ce bloc de commande a été réalisé sur une période d'environ 250 jours (de juillet 2018 à avril

2019). Pour cette période la vitesse de filtration et la charge volumique moyenne en polluants appliquées pour les biofiltres pré-dénitrifiants des trois batteries ont été trouvées d'être proches (voir Tableau 6.5).

Tableau 6.5 Conditions d'exploitation des biofiltres dans les batteries de l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval (juillet 2018 - avril 2019).

	Batterie A	Batterie B	Batterie C
Vitesse moyenne de filtration par biofiltre (m/h)	9,53 ± 1,08	9,38 ± 1,15	9,45 ± 1,04
Charge volumique moyenne en NO_x^- par biofiltre (kgN/m^3/j)	0,62 ± 0,12	0,61 ± 0,13	0,61± 0,11

Pour prédire le nombre de biofiltres actifs, les deux critères ($v_{max,pré}$ et $Charge_{max,pré}$) sont fixés à des valeurs proches de celles opérées (0,6 m/h et 9,5 kgN/m^3/j). Les données de débit d'eau et de la charge en NO_x^- en entrée de l'étage de pré-dénitrification de la période de test sont récupérées et utilisées comme données en entrée de la commande. Enfin, pour décider le nombre total de biofiltres disponibles, les informations sur l'état des trois batteries (en arrêt ou en service) sont également collectées. Pour une batterie en service, un biofiltre est considéré en lavage ou en maintenance. Il n'est donc pas disponible pour le traitement. Lorsqu'une batterie est en arrêt, aucun biofiltre de cette batterie ne peut être activé.

Tel que montré à la Figure 6.5, le nombre de biofiltres actifs estimés par la commande du modèle filière (moyenne : 51,8 biofiltres) est proche de celui utilisé par l'étage de pré-dénitrification (moyenne : 51,6 biofiltres).

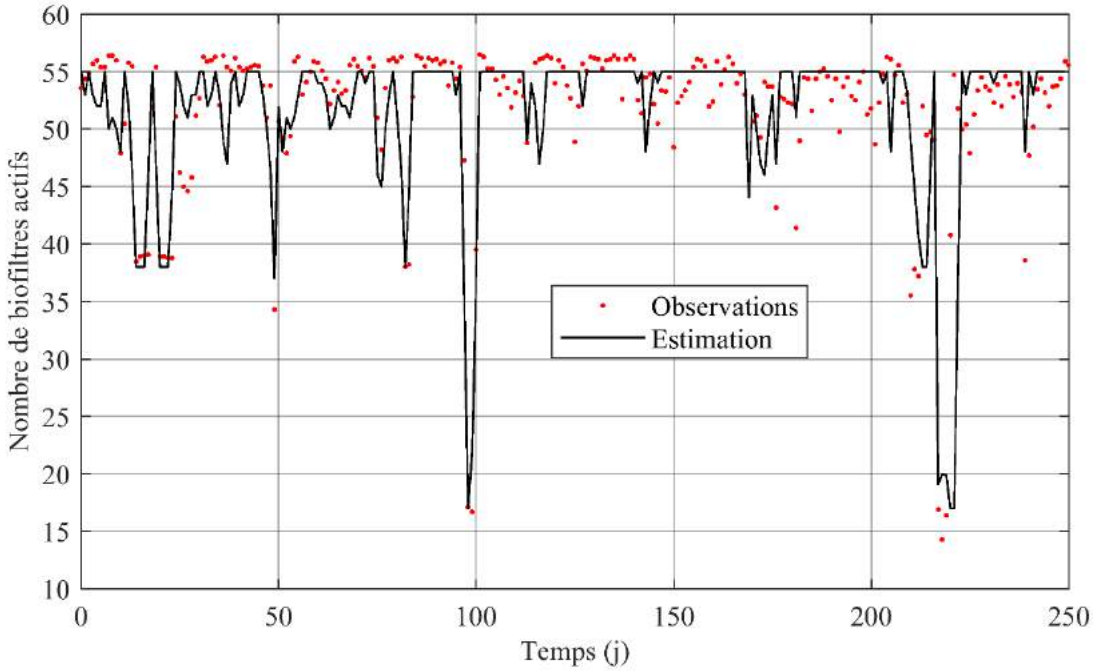


Figure 6.5 Résultats d'estimation du nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs pour la période de juillet 2018 à avril 2019 (point rouge : Observations, ligne noire : Estimation).

Les diminutions fortes en nombre de biofiltres autour du jour 100 et du jour 220, qui sont causées par les arrêts de batteries, ont également été adéquatement prédites par la commande.

Les erreurs de prédiction sont principalement liées à l'opération des biofiltres pré-dénitrifiants à la station. En effet, il existe des moments où tous les biofiltres dans une batterie étaient en service ou plusieurs biofiltres étaient simultanément en lavage selon l'état de colmatage des biofiltres. Ces situations sont difficiles à prédire par le modèle. Bien qu'il existe des erreurs de prédiction, le score MAE obtenu est faible (2,9 biofiltres) par rapport au nombre moyen de biofiltres en fonctionnement de cette période de test.

- **Modèle de biofiltration en pré-dénitrification**

Le modèle de biofiltration en pré-dénitrification présenté au Chapitre 4 (voir sous-chapitre 4.5) est appliqué pour l'étage de pré-dénitrification du modèle filière afin de simuler la performance de traitement des biofiltres. Pour rappel, ce modèle est construit, calibré et validé sur les biofiltres pré-dénitrifiants de la station Seine Grésillons (SEG). La technologie utilisée (Biostyr®) et les dimensions de ces biofiltres (hauteur du lit de média : 3,5 m; surface du lit de média : 173 m²; diamètre du média polystyrène : 4,5 mm) sont identiques à ceux la station Seine Aval. Comme pour la décantation primaire, le modèle en pré-dénitrification est suivi par un bloc qui sert à maintenir le bilan de débit d'eau pré-dénitrifiée (bloc « $*N_{pré}$ » dans la Figure 6.4).

Enfin, un débit d'eau, qui correspond aux retours en tête de l'étage de pré-dénitrification, est enlevé du flux des eaux pré-dénitrifiées envoyées à l'étage de nitrification.

6.1.2.2. Etage de nitrification

- **Bloc des eaux de retours en tête de l'étage de nitrification**

Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.2), l'étage de nitrification traite depuis mi-2017 principalement les eaux en sortie des biofiltres pré-dénitrifiants et les eaux décantées contournées de traitement de pré-dénitrification. A l'exception de ces deux affluents, cet étage traite aussi des retours en tête (à faible débit) issus de traitement des eaux sales produites lors du lavage des biofiltres nitrifiants. De manière similaire à l'étage de pré-dénitrification du modèle filière, un bloc illustrant les retours en tête a été créé pour l'étage de nitrification (voir bloc « Retours nit » dans la Figure 6.6).

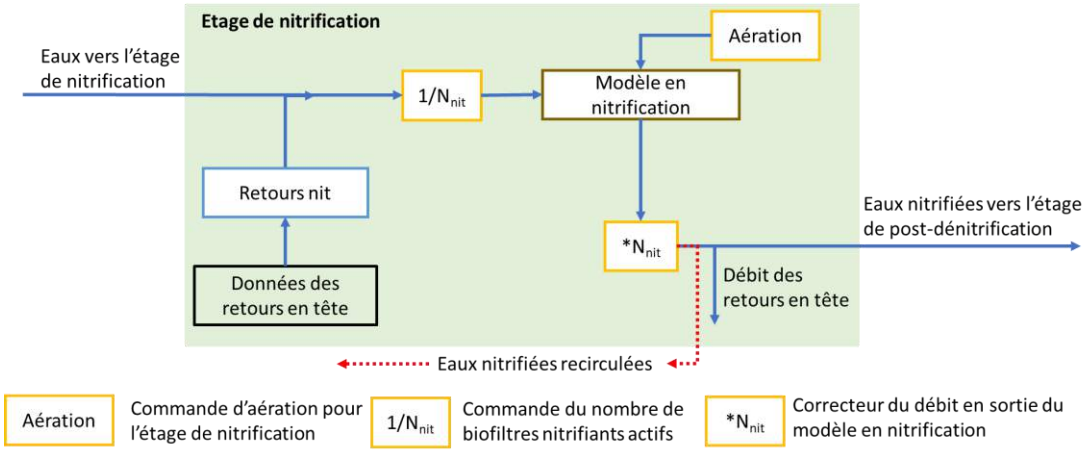


Figure 6.6 Structure de l'étage de nitrification du modèle filière.

- **Commande du nombre de biofiltres nitrifiants actifs**

Comme l'étage de pré-dénitrification du modèle filière, une commande du nombre du biofiltres actifs est également ajoutée en tête du modèle de biofiltration en nitrification (voir bloc « $1/N_{nit}$ » dans la Figure 6.6). Selon le manuel de procédé de l'étage de nitrification, le principe de commande du nombre de biofiltres actifs suivi par l'étage est similaire à celui effectué à l'étage de pré-dénitrification. Dans ce cas-ci, hormis la charge en polluant à considérer devenant l'ammonium, la commande du nombre de biofiltres nitrifiants actifs est construit de manière similaire à celui pour l'étage de pré-dénitrification précédemment présenté. En sortie de la commande, les données de débit d'eau envoyée à l'étage de nitrification sont divisées par le nombre de biofiltres actifs estimés. Elles sont ensuite envoyées vers le modèle de biofiltration en nitrification.

La commande développée a été testée sur les données d'exploitation de l'étage de nitrification de l'année 2018, une période récente après la mise en route du projet BioSAV (2017). Contrairement à ce qui a été fait pour le test de commande du nombre de biofiltres pré-dénitrifiants, les valeurs utilisées pour les critères de la vitesse de filtration et de la charge volumique (en NH_4^+) ne sont pas fixées. En effet, tel que montré à la Figure 6.7a, la vitesse

moyenne de filtration appliquée sur les biofiltres nitrifiants pour la période estivale est plus élevée que celle pour les autres périodes de l'année 2018. Cette variation est principalement liée aux arrêts alternatifs des batteries en été (autour des jours 175-275). Les biofiltres en service de cette période doivent ainsi prendre beaucoup plus de l'eau afin de compenser la réduction de la capacité de traitement. Contrairement à la vitesse de filtration, qui montre une variation saisonnière, la variation de la charge volumique en NH_4^+ appliquée pour les biofiltres de l'année 2018 est plus irrégulière. Plusieurs augmentations-diminutions de la charge volumique ont été observées au cours de l'année. Pour la période estivale, la charge volumique moyenne appliquée sur les biofiltres diminue à la fin de juin (autour du jour 175) et re-augmente à partir de mi-août (autour du jour 225) (voir Figure 6.7b), ce qui est liée à la diminution et la re-augmentation de la charge en ammonium de cette période estivale.

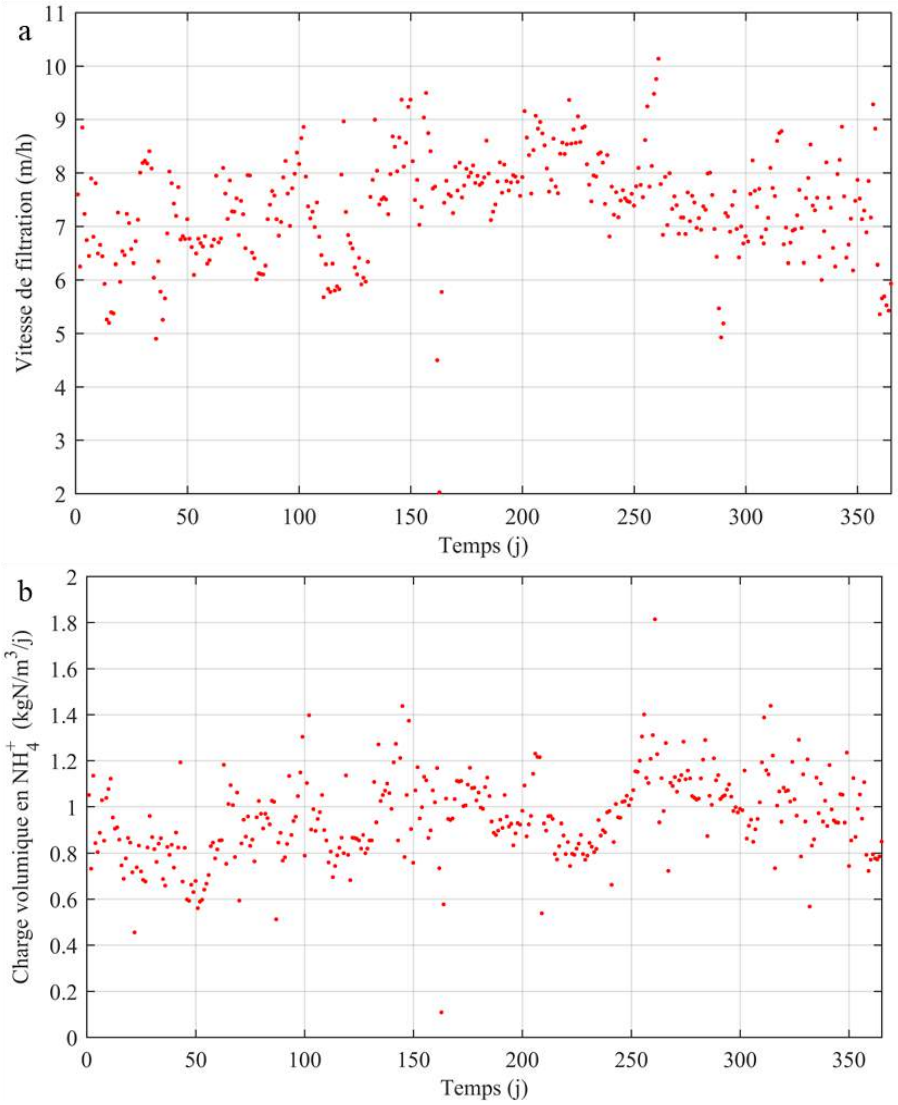


Figure 6.7 Les conditions d'exploitation des biofiltres nitrifiants de la station Seine Aval en 2018. a) Vitesse moyenne de filtration par biofiltre, b) Charge volumique moyenne en NH_4^+ par biofiltre.

Avec ces variations, il est difficile de bien estimer le nombre de biofiltres actifs en appliquant

des critères fixés, en particulier la vitesse de filtration. Pour cette raison, les valeurs attribuées aux critères $v_{max,nit}$ et $Charge_{max,nit}$ pour les jours 175-275 sont différents par rapport à celles pour les autres jours (0-174 et 276-364) de l'année 2018 (voir Tableau 6.6). Ces valeurs correspondent aux conditions moyennes d'exploitation des biofiltres nitrifiants de ces périodes. Les données de débit d'eau et de la charge en ammonium en entrée de l'étage de nitrification de l'année 2018 sont récupérées et utilisées comme données en entrée de la commande testée. Enfin, l'évolution de la disponibilité des biofiltres en état « normal » est considérée. Le nombre de biofiltres disponibles pour une batterie en service est fixé à 13,5. Dans ce cas-ci, lorsqu'il y a six batteries en fonctionnement, 81 biofiltres nitrifiants sur 84 seront disponibles pour le traitement, tandis que les trois autres sont considérés en maintenance ou en lavage. Encore une fois, aucun biofiltre ne peut être activé pour une batterie en arrêt.

Tableau 6.6 Valeurs de paramètres utilisées pour le test de la commande de nombre de biofiltres nitrifiants du modèle filière pour l'année 2018.

Paramètres	Unité	Symboles	Valeurs
Critère de la charge volumique en NH_4^+ pour un biofiltre nitrifiant	$kgN/m^3/j$	$Charge_{max,nit}$	0,94 (jours 0-174 et 276-364)
			0,99 (jours 175-275)
Critère de la vitesse de filtration pour un biofiltre nitrifiant	m/h	$v_{max,nit}$	7,14 (jours 0-174 et 276-364)
			8 (jours 175-275)
Nombre de biofiltres disponibles pour chaque batterie	-	$N_{biofiltre,nit}$	13,5

La Figure 6.8 montre le nombre de biofiltres nitrifiants actifs estimés par la commande intégrée au modèle filière avec les valeurs de paramètres résumées au Tableau 6.6 ainsi que celui utilisé à la station pour l'année 2018. Pour la plupart du temps, les résultats d'estimation sont proches d'observations avec des déviations autour de 2-4 biofiltres. Tel qu'expliqué à la section 6.1.2.1 sur la prédiction du nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs, ces déviations observées sont plutôt liées à l'opération réelle des biofiltres à la station qui est plus flexible que les règles de commande intégrées dans le modèle filière. La diminution en nombre en biofiltres actifs pour la période estivale, qui est causée par les arrêts de batteries, est en général reproduite par le modèle. Le nombre moyen de biofiltres estimé est de 73 biofiltres. Ce nombre est assez proche de celui utilisé par l'étage (74 biofiltres). Le score MAE obtenu est de 4,8 biofiltres, ce qui est faible par rapport au nombre moyen observé. Certaines déviations d'environ 10 biofiltres sont présentes entre les résultats d'estimation et les observations de la station autour du jour 150 et

du jour 275 (voir Figure 6.8). Pour ces jours, toutes les batteries de l'étage étaient en service, mais il y avait une batterie qui fonctionnait avec très peu de biofiltres disponibles (n=1-2) ou deux batteries qui ont activé chacune 6-7 biofiltres. Ces conditions d'opérations exceptionnelles sont difficiles à estimer par la commande qui est basée sur l'hypothèse que le nombre de biofiltres disponibles pour chaque batterie est identique.

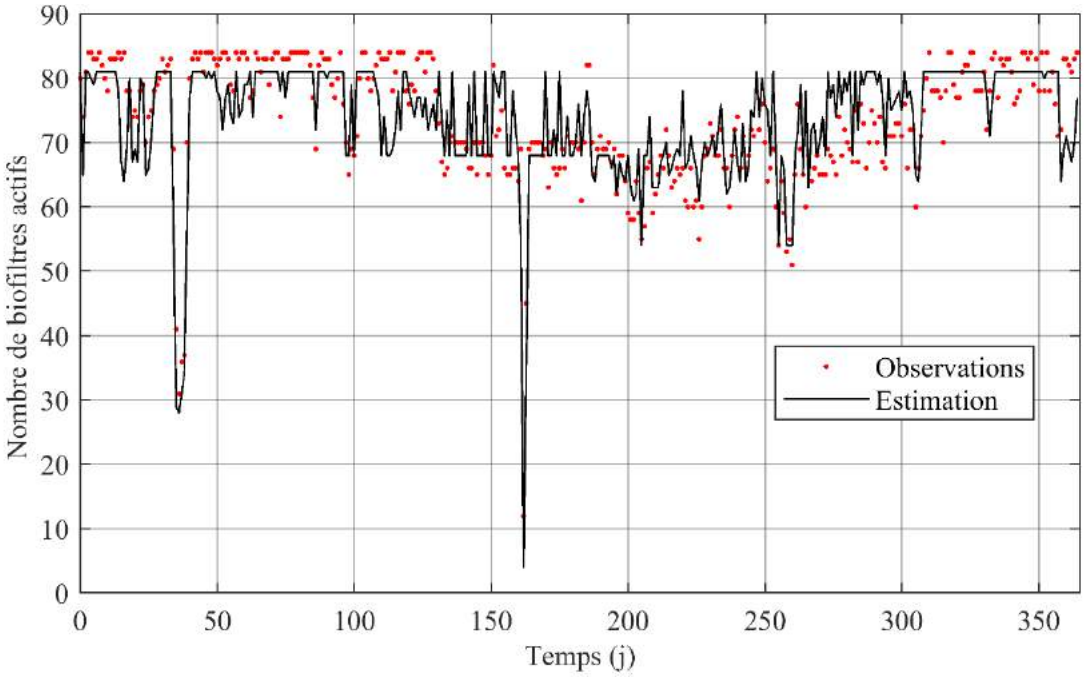


Figure 6.8 Résultats d'estimation du nombre de biofiltres nitrifiants actifs pour l'étage de nitrification pour l'année 2018 (point rouge : Observations, ligne noire : Estimation).

- **Modèle de biofiltration en nitrification et commande d'aération pour l'étage de nitrification**

Le modèle de biofiltration en nitrification est identique à celui précédemment développé (voir sous-chapitre 4.3). Comme il a été déjà validé sur les données après la mise en route du projet BioSAV, ses paramètres ne sont pas modifiés pour le modèle filière. La commande d'aération est également identique à celle présentée au Chapitre 4. Comme l'étage de pré-dénitrification, un bloc qui sert à maintenir le bilan de débit d'eau a été ajouté (bloc « $*N_{nit}$ » dans la Figure 6.6). En sortie de ce bloc, les eaux nitrifiées simulées sont séparées en trois flux. Le premier flux est recirculé vers l'étage de pré-dénitrification. Le débit de recirculation est déjà calculé par la commande de débit en entrée des biofiltres pré-dénitrifiants précédemment présentée. Le deuxième flux déduit le débit des retours en tête en entrée de l'étage de nitrification. En effet, une partie de l'eau nitrifiée est utilisée pour laver les biofiltres. Les eaux sales de lavage sont centrifugées et l'effluent de centrifugation est retourné à l'étage de nitrification. Dans ce cas-ci, le flux déduit n'est pas renvoyé directement en tête de l'étage. Finalement, les eaux restantes sont envoyées vers l'étage de post-dénitrification du modèle filière.

6.1.2.3. Etage de post-dénitrification

- **Commande du débit en entrée des biofiltres post-dénitrifiants**

Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.2), après la mise en route du projet BioSAV, l'étage de post-dénitrification n'a que 12 biofiltres. Selon les études de conception du projet BioSAV, la capacité hydraulique de l'étage de post-dénitrification après la modernisation est en général inférieur au débit de l'eau nitrifiée en aval de la recirculation. Dans ce cas-ci, un by-pass de l'eau nitrifiée directement vers le traitement tertiaire doit être fait. Un bloc représentant la commande du débit maximal en entrée des biofiltres post-dénitrifiants est donc créée et placée en tête de l'étage de post-dénitrification du modèle filière (voir bloc « Commande débit post-dénit» dans la Figure 6.9).

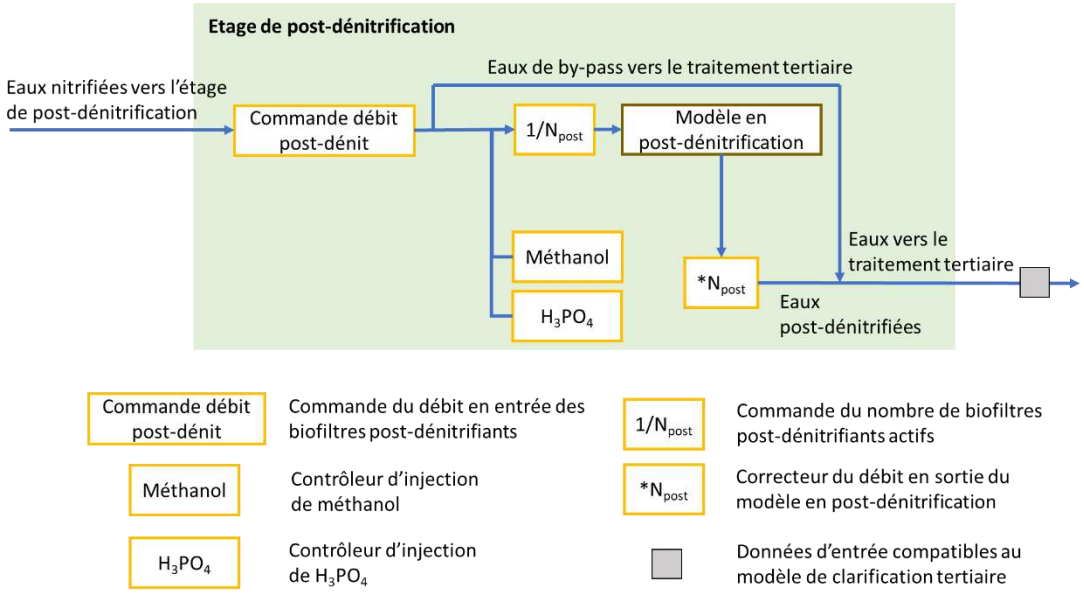


Figure 6.9 Structure de l'étage de post-dénitrification du modèle filière.

Les règles développées pour la commande sont basées sur les études de conception du projet BioSAV et le manuel de procédé de l'étage de post-dénitrification. Elles déterminent le débit de by-pass de l'étage de post-dénitrification en fonction de la capacité de traitement des biofiltres post-dénitrifiants. Comme cet étage n'a qu'une batterie et fonctionne presque toujours à la capacité hydraulique maximale, il est supposé que l'étage active toujours tous les biofiltres disponibles pour le traitement. La commande calcule donc d'abord le débit et la charge en NO_x^- maximum que l'étage de post-dénitrification peut accepter en fonction du nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs (N_{post}) et des critères de la vitesse de filtration ($v_{max,post}$) et de la charge volumique en NO_x^- par biofiltre ($Charge_{max,post}$). Ces trois paramètres sont définis par l'utilisateur du modèle. Les résultats du calcul sont ensuite comparés avec le débit et la charge en NO_x^- de l'eau nitrifiée issue de l'étage de nitrification afin de déterminer le débit envoyé aux biofiltres post-dénitrifiants actifs. Lorsque la charge en NO_x^- dans l'eau nitrifiée dépasse la

charge en NO_x^- maximum calculé, l'étage de post-dénitrification fonctionne à un débit correspond au seuil de la charge (voir Eq 6.6). Dans le cas contraire, l'étage traite toutes les eaux nitrifiées qu'il peut accepter selon le débit maximum précédemment calculé. Une fois le débit envoyé aux biofiltres est calculé, le débit contournant l'étage de pré-dénitrification peut être déterminé facilement.

Eq 6.6 $$Q_{post} = (Charge_{post,max} \times N_{post} \times V_{post})/NO_x^-$$

où
Q_{post} est le débit de l'eau nitrifiée accepté par les biofiltres post-dénitrifiants (m^3/j)
NO_x^- est la concentration en NO_x^- dans l'eau nitrifiée (kgN/m^3)
V_{post} est le volume de lit de média d'un biofiltre post-dénitrifiant (m^3)

- **Commandes d'injection de méthanol et d'acide phosphorique pour l'étage de post-dénitrification**

Tel que présenté au Chapitre 3, du méthanol et de l'acide phosphorique sont injectés en tête de l'étage de post-dénitrification. Selon le manuel de procédé de l'étage de post-dénitrification, la règle d'injection de méthanol de cet étage est similaire à celle de l'étage de pré-dénitrification. Pour cette raison, le mode de dosage utilisé pour la commande d'injection de méthanol dans les biofiltres post-dénitrifiants est identique à celui de l'étage de pré-dénitrification. Mais, le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever et la consigne en NO_x^- en sortie à atteindre utilisés par la commande peuvent être fixés indépendamment de la pré-dénitrification.

Les règles d'injection de l'acide phosphorique ne sont pas présentées dans le manuel. Il indique seulement que pour ne pas limiter la dénitrification, les orthophosphates résiduels en sortie de l'étage post-dénitrification doivent être au moins à 0,3-0,4 gP/m^3. Dans ce cas-ci, le mode de dosage de l'acide phosphorique utilisé par la commande est similaire à celui proposé pour l'étage de pré-dénitrification. Par contre, la consigne à atteindre considérée par la commande est les orthophosphates en sortie de l'étage de post-dénitrification.

- **Commande du nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs**

Contrairement aux deux sous-modèles précédents, le bloc de commande du nombre de biofiltres actifs de l'étage de post-dénitrification n'est pas un vrai « commande » (voir bloc « $1/N_{post}$ » dans la Figure 6.9). Ce bloc n'estime pas le nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs, puisqu'il s'agit d'un paramètre déjà défini par l'utilisateur pour décider le débit de l'eau nitrifiée contournant la post-dénitrification. Pour cette raison, ce bloc sert seulement à diviser les données de débit d'eau envoyée vers la post-dénitrification par le nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs.

- **Modèle de biofiltration en post-dénitrification**

Le modèle de biofiltration en post-dénitrification présenté au sous-chapitre 4.4 est appliqué pour illustrer la performance de traitement des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Aval (voir bloc « modèle en post-dénitrification » dans la Figure 6.9). Pour rappel, ce modèle est construit en se basant sur le procédé de post-dénitrification de la station Seine Centre. Bien que les biofiltres post-dénitrifiants de ces deux stations utilisent le même type de technologie (biofiltre de type Biofor®), leurs dimensions sont différentes. Le volume de lit de média (441 m^3) des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Aval est plus grand que celui des biofiltres (301,6 m^3) de la station Seine Centre. D'ailleurs, le diamètre de média de ces deux procédés n'est pas identique (Seine centre : 3 mm ; Seine Aval 4.5 mm). Les paramètres de dimensions correspondants dans le modèle en post-dénitrification ont donc été changés (voir Tableau 6.7).

Tableau 6.7 Paramètres de dimensions modifiés pour le modèle de biofiltration en post-dénitrification développé sur la station Seine Centre pendant la construction du modèle filière de la station Seine Aval.

Paramètre	Symbole	Seine Centre	Seine Aval
Volume d'un réacteur de média (m^3)	$V_{réacteur}$	43,1	62,9
Aire d'échange média-liquide (m^2)	A_a	35862,3	22502,6
Porosité du média propre	ε_0	0,36	0,45

Comme les deux autres étages de biofiltration, le modèle de biofiltration en post-dénitrification est suivi par un bloc qui sert à maintenir le bilan de débit d'eau (voir bloc « $*N_{post}$ » dans la Figure 6.9). Les données de l'eau post-dénitrifiée en sortie de ce bloc se réunissent avec celles du by-pass de la post-dénitrification pour être envoyées au traitement tertiaire du modèle filière.

6.1.3. Adaptation du modèle de clarification tertiaire pour l'intégrer dans le modèle filière

Tel que présenté au Chapitre 3 (section 3.1.3), le traitement tertiaire de la filière de biofiltration prévu en 2022 utilise les neuf clarificateurs (Actiflo®) fonctionnant actuellement en traitement primaire. Comme ce procédé n'est pas encore mis en service, peu d'informations ont pu être trouvées sur son mode d'exploitation et de commande exact prévus. Des hypothèses sur les commandes du procédé concernant la distribution du débit d'eau, l'injection de chlorure ferrique et l'estimation du nombre de clarificateurs actifs doivent donc être posées.

- **Commande du mode de traitement des clarificateurs tertiaires**

Tel que montré à la Figure 6.10, une commande du mode de traitement des clarificateurs tertiaires est ajoutée en tête du traitement tertiaire (voir bloc « Commande mode de traitement » dans la Figure 6.10). Il sert à identifier et envoyer les eaux en sortie de traitement par biofiltration vers le rejet lorsque que les clarificateurs sont en traitement primaire.

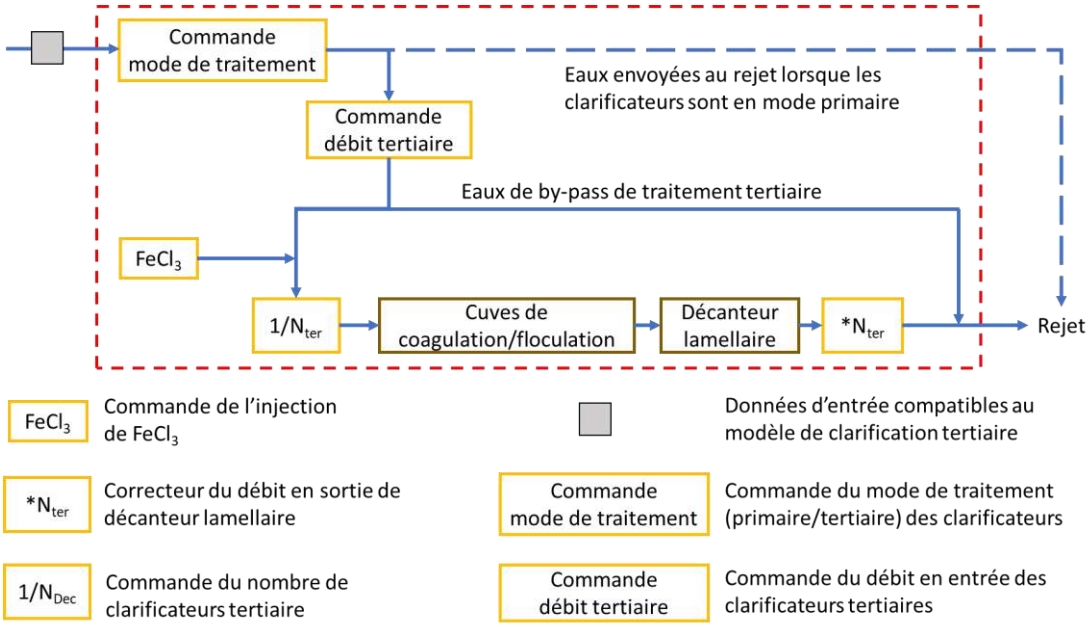


Figure 6.10 Structure de la partie de traitement tertiaire du modèle filière.

Pour rappel, selon les modes de traitement de la station Seine Aval prévus en 2022, lorsque le débit d'eau en entrée de la station est élevé (> 30 m^3/s), les clarificateurs tertiaires peuvent fonctionner en parallèle avec les nouveaux décanteurs primaires pour renforcer la décantation primaire. Lors de la construction de la partie de traitement primaire du modèle filière (voir section 6.1.1), ce mode de traitement a déjà été pris en compte en amplifiant le nombre de décanteurs primaires (voir Tableau 6.2). Dans ce cas-ci, les eaux en sortie de traitement par biofiltration seront envoyées directement vers le rejet. Afin d'identifier le moment où les

clarificateurs sont en traitement primaire, les résultats d'estimation du nombre de décanteurs actifs de la partie de traitement primaire sont récupérés et utilisés comme données d'entrée de la commande. Lorsque le nombre de décanteurs actifs en primaire estimé est égal ou supérieur à 22 (voir *Tableau* 6.2), les clarificateurs sont dans ce cas-ci en mode primaire et les eaux en sortie de traitement par biofiltration seront envoyées directement vers le rejet. Dans le cas contraire, la commande envoie les eaux en sortie des biofiltres nitrifiants et post-dénitrifiants aux neufs clarificateurs qui sont considérés en mode tertiaire. Il est à noter que le modèle ne prend pas en compte une condition intermédiaire sur le mode de fonctionnement des clarificateurs, par exemple, quatre clarificateurs en tertiaire et les autres cinq en primaire. Ce genre de condition n'est pas prévue selon les informations disponibles sur le fonctionnement de la station en 2022.

- **Commande du débit en entrée des clarificateurs en mode tertiaire**

Une commande du débit en entrée des clarificateurs en mode tertiaire a également été ajoutée après la commande du mode de fonctionnement précédemment présentée (voir bloc « Commande débit tertiaire » dans la Figure 6.10). En supposant qu'en temps normal la concentration en MES en sortie de biofiltration est faible (15 g/m^3 selon les études de conception du projet BioSAV), les clarificateurs tertiaires servent donc principalement à la déphosphatation. Dans ce cas-ci, les règles de distribution du débit développées pour la commande sont basées sur les hypothèses concernant le traitement des orthophosphates dans les clarificateurs :

1) L'utilisateur du modèle doit fixer la consigne de concentration en orthophosphates en sortie. Lorsque la concentration en orthophosphates dans l'affluent est inférieure ou égale à cette consigne, les clarificateurs ne seront pas activés et les eaux seront directement contournées vers le rejet. Cette conceptualisation permet d'économiser les réactifs et donc de diminuer le coût de traitement.

2) Si la concentration en orthophosphates dans l'affluent est supérieure à la consigne définie par l'utilisateur, les clarificateurs seront activés et effectueront la déphosphatation tertiaire. Pour calculer le débit ($Q_{cal,ter}$) que les clarificateurs doivent traiter afin d'atteindre la consigne de traitement, l'utilisateur du modèle doit estimer et indiquer à la commande l'efficacité de traitement des orthophosphates des clarificateurs (E_{ter} en %) (voir Eq 6.7).

Eq 6.7 $$Charge_{aff,P} - Charge_{eff,p} = Q_{cal,ter} \times PO_{4,\ aff}^{3-} \times E_{ter}$$

où
PO_4^{3-}, $_{aff}$ est la concentration en orthophosphates dans l'affluent du traitement tertiaire (gP/m^3)

Le premier terme à gauche de l'équation Eq 6.13 représente la charge en orthophosphates dans

l'affluent du traitement tertiaire (en gP/j), tandis que le deuxième est la charge résiduelle en sortie du traitement lorsque la consigne est atteinte. La différence entre ces deux charges correspond à celle traitée par les clarificateurs, ce qui peut être calculée par les termes à droit de l'équation. Dans certains cas, le débit calculé a risque de dépasser le débit d'affluent ou la capacité hydraulique des clarificateurs (prévue : 25 m^3/s). Pour cette raison, le débit calculé est comparé avec ces deux derniers pour trouver le minimum qui est le vrai débit à attribuer aux clarificateurs tertiaires (Q_{ter}). Enfin, un by-pass du traitement tertiaire vers le rejet de la filière est effectué par la commande lorsque le débit attribué aux clarificateurs est inférieur à celui de l'affluent.

- **Commande d'injection de chlorure ferrique pour le traitement tertiaire**

La commande d'injection de chlorure ferrique pour le traitement tertiaire est similaire à celui utilisé en décantation primaire (voir bloc «$FeCl_3$» dans la Figure 6.10). Cependant, le taux de $FeCl_3$ utilisé par la commande peut être fixé de manière indépendante à celui de la décantation primaire et le débit d'eau utilisé pour calculer devient celui traité par les clarificateurs tertiaires.

- **Commande du nombre de clarificateurs tertiaires actifs**

De manière similaire au traitement primaire du modèle filière, le nombre de clarificateurs tertiaires actifs est estimé en fonction du débit en entrée par une commande (voir bloc « $1/N_{ter}$ » dans la Figure 6.10). Tel que montré dans le Tableau 6.8, deux gammes de débit ont été considérées. De plus, parmi les neuf clarificateurs, huit sont considérés disponibles pour utilisation et un en maintenance.

Tableau 6.8 Règles de commande du nombre de clarificateurs tertiaires actifs dans le modèle filière.

Débit attribué aux clarificateurs tertiaires (Q_{ter}) (m^3/s)	$0<Q_{pré} \leq 12$	$12<Q_{ter}$
Nombre de clarificateurs tertiaires disponibles	8	8
Nombre de clarificateurs tertiaires en maintenance	1	1
Nombre de clarificateurs tertiaires actifs estimés	$\lfloor Q_{pré}/1,5 \rfloor$	8

Pour la première gamme (0-12 m^3/s), le nombre de clarificateurs actifs augmente en fonction du débit. Le débit d'eau cible pour chaque clarificateur est limité à 1,5 m^3/s. Cette valeur a été déterminée à partir des conditions d'exploitation des clarificateurs tertiaires (débit moyen : 1,4 ± 0,2 m^3/s) de la station Seine Amont de janvier 2016 à mai 2017 sur lesquels le modèle de clarification tertiaire a été développé. Lorsque le débit attribué aux clarificateurs tertiaires dépasse 12 m^3/s, les huit clarificateurs disponibles seront activés. En sortie de la commande, les données de débit d'eau sont divisées par le nombre de clarificateurs actifs.

- **Blocs représentants les cuves de coagulation/floculation et le décanteur lamellaire**

Tel que montré à la Figure 6.10, les eaux en sortie de la commande du nombre de clarificateurs tertiaires sont envoyées vers le bloc des cuves de coagulation/floculation et du décanteur (clarificateur) lamellaire. Le modèle utilisé pour ces blocs a été calibré sur les clarificateurs tertiaires de la station Seine Amont qui ont les mêmes dimensions que ceux de la station Seine Aval. Encore une fois, un bloc maintenant le bilan de débit est considéré (voir bloc « $*N_{ter}$ » dans la Figure 6.10). La sortie de ce bloc se réunit avec les eaux du by-pass du traitement tertiaire et forme les eaux de rejet de la filière.

Bien que le procédé de clarification tertiaire ne soit pas encore mis en route, un test sur ce mode de traitement a été réalisé par la station Seine Aval pour une période courte (environ 10 jours au mois d'août 2018). Pendant le test, les clarificateurs Actiflo® traitaient les eaux en sortie de biofiltration en temps sec. Dans ce cas-ci, seuls les décanteurs conventionnels réalisaient le traitement primaire. Par contre, en temps de pluie (deuxième jour du test), les clarificateurs sont tournés en traitement primaire. Le débit moyen en entrée pour les jours en temps sec de cette période était de 981 800 (m^3/j) avec 2-4 clarificateurs en service simultanément. Le taux de chlorure ferrique utilisé pour les premiers 9 jours était autour de 28 g/m^3, puis il a été réduit à 20 g/m^3 pour le dernier jour de test. Le Tableau 6.9 résume les conditions d'exploitation principales de la période de test pour les clarificateurs en mode tertiaire. Il est à noter que la concentration en orthophosphates en entrée des clarificateurs tertiaires soit plus élevée que celle prévue en 2022, puisqu'il n'y avait pas de déphosphatation au niveau du traitement primaire lors de la période de test.

Tableau 6.9 Conditions d'exploitation principales des clarificateurs en mode tertiaire de la station Seine Aval pour la période de test (10 jours au mois d'août 2018).

Concentrations en entrée	DCO (mgO_2/L)	MES (mg/L)	PO_4^{3-} (mgP/L)
Moyenne	50	15	1,78
Ecart-type	4,8	3,5	0,17

Les données d'exploitation des clarificateurs en temps sec de la période de test ont été utilisées pour vérifier si le modèle de clarification tertiaire calibré et validé sur la station Seine Amont est directement transférable à la station Seine Aval. Les Figures 6.11a, b et c montrent les résultats de simulation obtenus par le modèle sans modification des valeurs des paramètres calibrés et du modèle de fractionnement en entrée. Tel que montré aux Figure 6.11a et b, le modèle surestime la capacité de traitement de la DCO et des MES du procédé. Concernant la prédiction de la déphosphatation chimique (Figure 6.11c), l'augmentation des orthophosphates résiduels causée par la diminution du taux d'injection du chlorure ferrique est bien prédite par le modèle. Cependant, une surestimation d'environ 0,2 mgP/L est observée lorsque l'on

compare les résultats de simulation (moyenne 0.47 mgP/L) avec les données de mesure (moyenne 0.27 mgP/L) en sortie des clarificateurs.

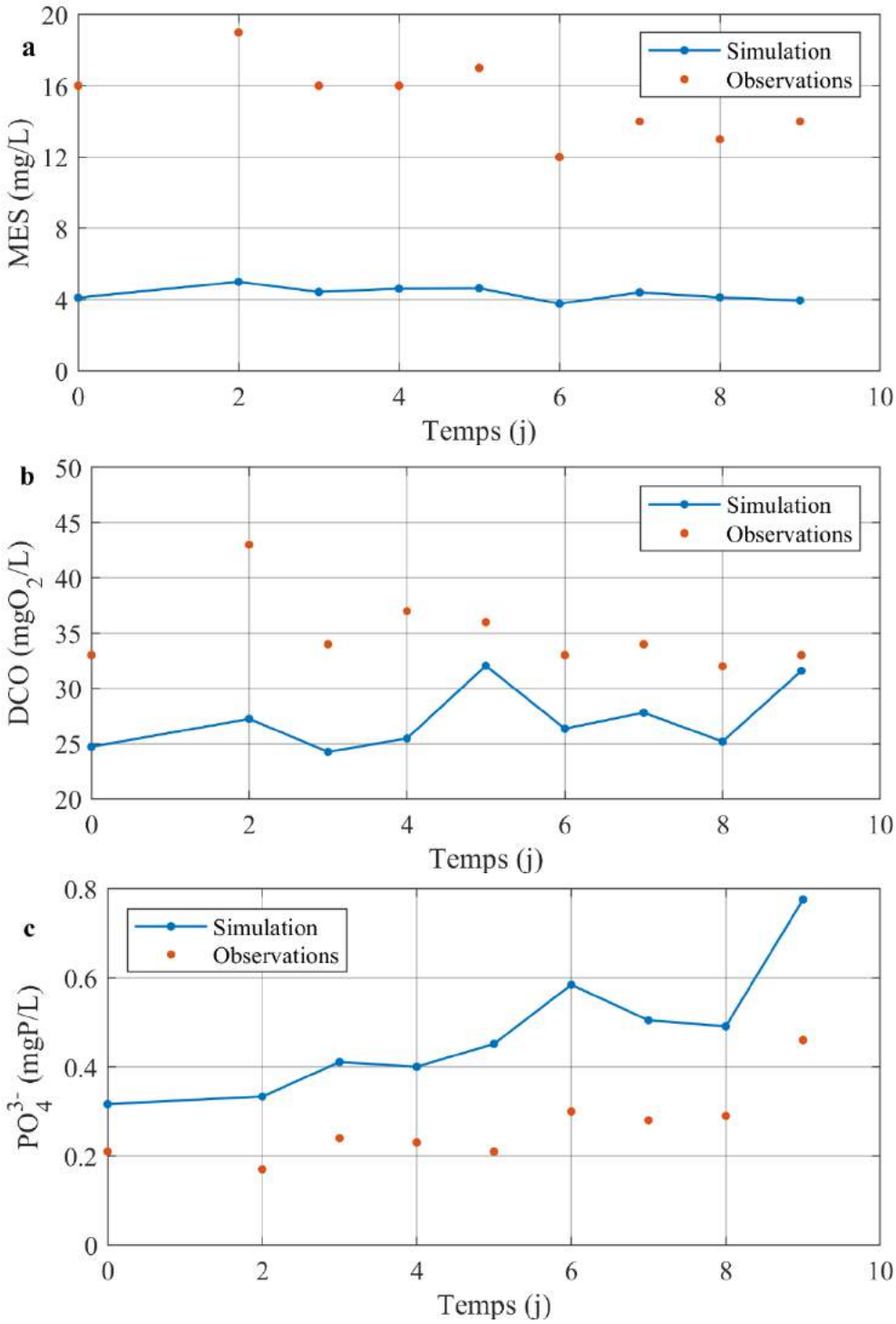


Figure 6.11 Résultats de simulation obtenus par le modèle de clarification tertiaire sans modification de paramètres pour la période où les clarificateurs de la station Seine Aval sont en mode tertiaire. a) DCO en sortie. b) MES en sortie. c) PO_4^{3-} en sortie.

Quelques modifications ont été apportées au modèle afin d'améliorer sa performance de prédiction. La concentration en MES en sortie mesurée est proche de celle en entrée (15 mg/L),

ce qui est différent par rapport à la performance du traitement tertiaire observée sur la station Seine Amont (environ 50% d'enlèvement). Cette différence signifie que la fraction des particules non-décantables dans l'affluent des clarificateurs de Seine Aval est plus élevée que celle estimée pour la station Seine Amont (10 %). Pour cette raison la fraction des particules non-décantables en entrée dans le modèle est augmenté à 32%. Il est à noter que les clarificateurs tertiaires de la station Seine Amont traitent l'effluent de décanteurs secondaires conventionnels. Les particules contenues dans ce type d'eau peuvent avoir des caractéristiques de décantation (vitesse de chute et tendance de floculation) différentes par rapport à celles dans l'eau en sortie de biofiltration (cas de la station Seine Aval).

Pour la période de test des clarificateurs en mode tertiaire, la DCO en sortie de post-dénitrification augmente d'environ 10 mgO_2/L par rapport à celle en entrée. Cette augmentation indique que le méthanol injecté n'est pas complètement dégradé et qu'une fraction est donc envoyée aux clarificateurs tertiaires. En considérant que le méthanol ne peut pas être coagulé ou décanté pendant la clarification, le mode d'estimation de la coagulation-floculation de la DCO soluble dans le modèle de clarification tertiaire a donc été légèrement modifié. Différentes constantes cinétiques de coagulation sont attribuées à la DCO soluble biodégradable (0 j^{-1}) et la DCO soluble inerte (50 j^{-1}), qui remplace celle unique utilisée par le modèle original calibré sur les clarificateurs de la station Seine Amont (68 j^{-1}). Cette modification permet de prendre en compte la présence du méthanol dans l'affluent des clarificateurs de la station Seine Aval et donc de diminuer la surestimation d'enlèvement de DCO par le modèle. Une autre modification possible pour résoudre la surestimation d'enlèvement de la DCO est d'introduire la fraction colloïdale dans le modèle (van Nieuwenhuijzen *et al.*, 2004; Sousa *et al.*, 2018). Pendant la coagulation-floculation, les composants colloïdaux peuvent être coagulés, tandis que les substances solubles restent stables pendant la clarification tertiaire. Cette modification a besoin d'informations sur la distribution de la taille des particules dans l'effluent de traitement par biofiltration, afin d'estimer la fraction colloïdale en entrée des clarificateurs tertiaires (Water Environment Federation, 2005c).

Enfin, pour la prédiction d'enlèvement des orthophosphates, la constante cinétique de précipitation du PO_4^{3-} a été augmentée de 58 $m^3/g/j$ à 120 $m^3/g/j$. Pendant la période de test, les clarificateurs tertiaires de la station Seine Aval fonctionnaient à un débit autour de 2,8 m^3/s, ce qui est deux fois plus élevé que celui opéré pour les clarificateurs de la station Seine Amont. Cette modification permet d'accélérer la précipitation des orthophosphates dans le modèle original afin de compenser la diminution du temps de séjour hydraulique.

Par rapport aux résultats de simulation précédemment obtenus, la performance de prédiction du modèle est améliorée avec ces modifications (voir Figures 6.12a, b et c). Bien que la

concentration en MES en sortie simulée (moyenne : 13 mg/L) reste légèrement inférieure à celle mesurée (moyenne : 15 mg/L), cette différence est acceptable vue que l'incertitude de mesure des MES de laboratoire est de 20%. La concentration moyenne en DCO en sortie simulée par le modèle modifié est de 35,4 mgO_2/L, ce qui est proche de celle mesurée (35 mgO_2/L).

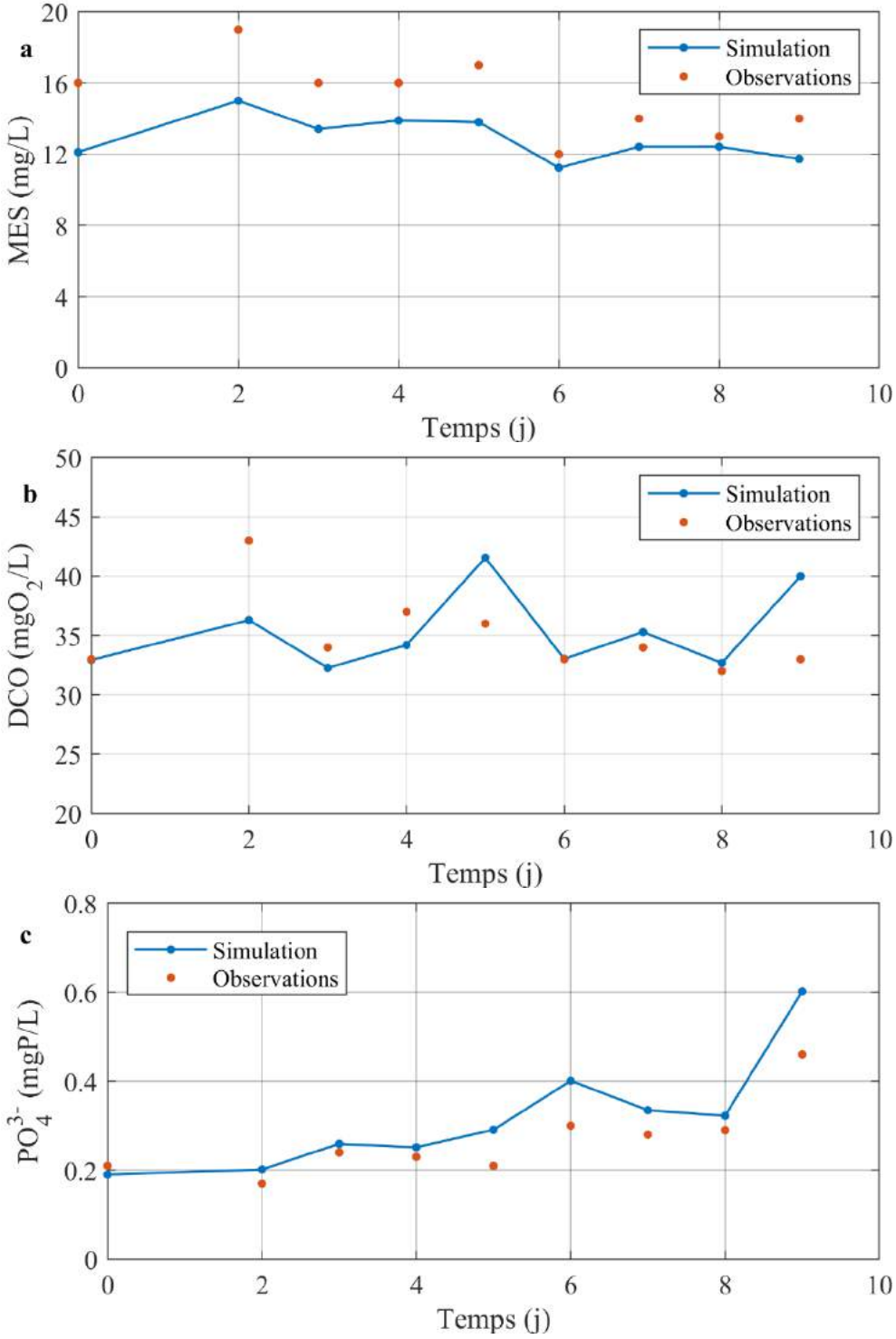


Figure 6.12 Résultats de simulation obtenus par le modèle de clarification tertiaire modifié pour la période où les clarificateurs de la station Seine Aval sont en mode tertiaire. a) DCO en sortie. b) MES en sortie. c) PO_4^{3-} en sortie.

A l'exception du dernier jour, la concentration en orthophosphates en sortie est bien reproduite par le modèle modifié (voir Figure 6.12c). Pour rappel, le taux de chlorure ferrique utilisé est réduit de 28 g/m^3 à 20 g/m^3 pour le dernier jour de test. Dans ce cas-ci, le rapport molaire Fe/P (2,3 mole/mole) de ce jour est plus faible que les autres jours de la période de test (2,7-3,4 mole/mole) ce qui modifie donc probablement la forme du précipité formé. Tel que discuté au Chapitre 5, ce changement est actuellement difficile à suivre par le modèle de clarificateur tertiaire développé car il utilise une forme de précipité fixée.

Ces modifications sont conservées pour la partie de traitement tertiaire du modèle de filière. Plus de simulations doivent être réalisées après la mise en route des clarificateurs en mode tertiaire en 2022 pour vérifier la fiabilité de ces modifications.

6.2. Intégration de l'évaluation des coûts et des impacts environnementaux de traitement dans le modèle filière

Le modèle filière construit sera utilisé comme outil aidant l'optimisation du traitement de la station Seine Aval après sa modernisation. Avec un modèle qui prédit uniquement la qualité de traitement des procédés, il est difficile de comparer deux propositions d'optimisation qui produisent les mêmes résultats de traitement selon le modèle. Pour cette raison, l'évaluation des coûts et des impacts environnementaux de traitement est intégrée dans le modèle filière afin de comparer les différentes propositions d'optimisation sous plusieurs critères.

6.2.1. Evaluation des coûts de traitement

6.2.1.1. Types de coûts de traitement considérés par le modèle

La consommation d'énergie et de réactifs chimiques, la main d'œuvre et le traitement des boues sont les coûts principaux pour le traitement et la maintenance d'une station d'épuration (McNamara, 2018). Comme le modèle filière ne simule pas le traitement des boues et le coût de la main d'œuvre est considéré comme un coût fixé, le modèle filière se concentre donc sur la consommation d'énergie électrique et de réactifs. Selon l'étude réalisée par Azimi et Rocher (2017) sur la consommation énergétique de la station Seine Aval avant la modernisation, plus de 90% de la consommation électrique de la file de traitement des eaux de la station est liée au traitement biologique. Ce pourcentage de consommation élevé est dû principalement à l'aération pour les procédés aérés et le pompage d'eau entre les procédés de traitement. Ces deux derniers sont donc pris en compte de manière prioritaire pour évaluer les coûts de traitement liés à la consommation énergétique.

Enfin, les coûts liés à la consommation du méthanol, du chlorure ferrique et de l'acide phosphorique sont considérés par le modèle. L'injection de ces réactifs a été prise en compte par différents commandes du modèle précédemment présentées, ce qui facilite le calcul des coûts de consommation. Pour les autres réactifs comme le polymère, qui sont potentiellement à utiliser par la filière en 2022, vue que leurs effets ne sont pas encore intégrés dans le modèle, les coûts liés à leur consommation ne sont pas considérés.

6.2.1.2. Mode de calcul des coûts de traitement utilisé par le modèle

- **Pompage**

Le mode de calcul des coûts de pompage utilisé par le modèle filière commence par l'estimation de la consommation d'énergie électrique par les pompes. Une fois cette estimation est réalisée, les coûts de pompage peuvent être facilement calculés en multipliant le prix unitaire de l'électricité avec la somme d'énergie consommée.

Tel que présenté au Chapitre 4, une équation d'estimation de la consommation d'énergie électrique d'une pompe centrifuge a été proposée et utilisée pour évaluer l'énergie consommée par le pompage d'eau vers les biofiltres nitrifiants. Afin de vérifier si cette équation est adaptable pour les autres pompages actuellement effectués à la station Seine Aval et de décider si elle peut éventuellement être intégrée dans le modèle filière, des tests de simulation ont été réalisés sur le pompage du by-pass de l'eau décantée (vers la pré-dénitrification sans avoir été traitée par les clarificateurs) et le pompage des eaux (l'eau décantée et l'eau nitrifiée recirculée) vers les biofiltres pré-dénitrifiants. Les raisons derrière le choix de ces étapes de pompage pour tester l'équation sont que premièrement, les informations techniques dont l'équation d'estimation a besoin, peuvent être trouvées dans la documentation de ces pompes (voir Annexe 1). Deuxièmement, ces pompages connectent les différentes étapes de traitement de la filière biofiltration et seront probablement conservés après la modernisation de la station, en particulier le pompage des eaux vers les biofiltres pré-dénitrifiants. Les résultats d'estimation sur ces étapes de pompage permettent d'évaluer si l'équation peut être utilisé par le modèle filière pour évaluer les coûts de traitement. Les tests de simulation sont réalisés sur une période de juin à novembre 2018 (180 jours). C'est une période récente où les données de consommation d'électricité de ces deux étapes de pompage sont disponibles. Le nombre de pompes en service et le débit de pompage de la période testée ont été récoltées et utilisées comme données d'entrée de la simulation.

Tel que montré à la Figure 6.13a, l'énergie consommé par le pompage du by-pass de l'eau décantée varie entre 0-25 MWh/j. Comme ce pompage se déclenche en fonction du besoin, les écarts de consommation entre les jours sont grands. En revanche, l'électricité consommée par le pompage des eaux vers les biofiltres pré-dénitrifiants est stable pour la plupart du temps, en général autour de 60 MWh/j (voir Figure 6.13b). A l'exception de quelques déviations, les énergies consommées journalières par ces deux étapes de pompage sont bien prédites par l'équation proposée. Les scores MAE obtenus pour l'estimation d'énergie électrique sont inférieurs à 1 MWh/j (0,5 et 0,8 MWh/j), et donc faibles par rapport aux consommations moyennes observées pour ces pompages pour la période simulée (8,5 et 60,6 MWh/j).

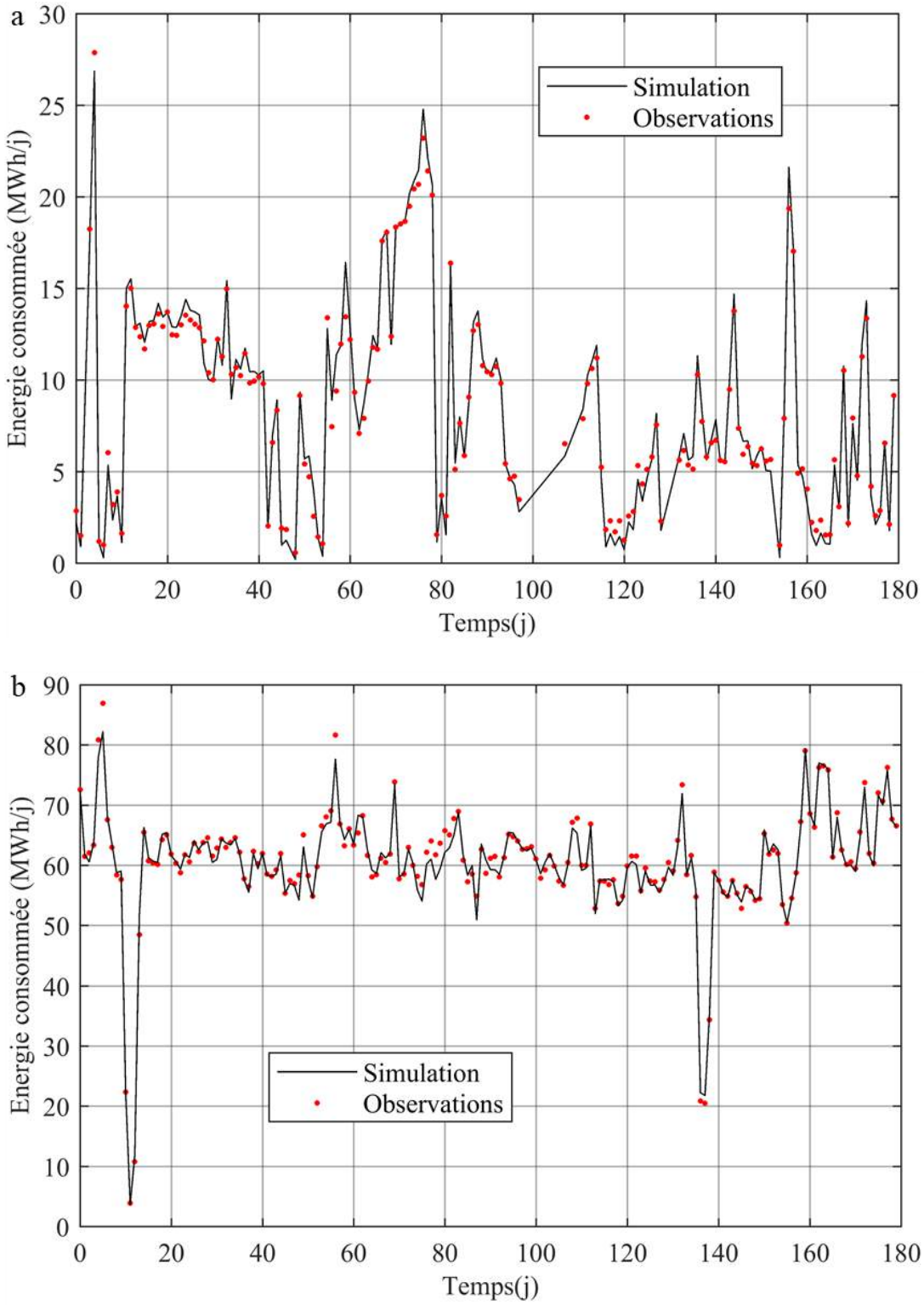


Figure 6.13 Résultats de simulation de la consommation d'énergie par pompage. a) Pompage du by-pass de l'eau décantée b) Pompage des eaux vers les biofiltres pré-dénitrifiants.

Comme l'équation proposée est adaptable pour estimer différents pompages de la station Seine Aval, elle est intégrée dans le modèle filière pour toutes les estimations des coûts liés à la consommation d'énergie électrique par pompage. Le Tableau 6.10 résume les étapes de pompage prises en compte pour chaque partie de traitement du modèle filière.

Tableau 6.10 Synthèse des étapes de pompage prises en compte pour évaluer les coûts de traitement.

Traitement	Consommation d'énergie par pompage prise en compte
Traitement primaire	Pompage des eaux décantées vers le canal d'alimentation de l'étage pré-dénitrification
Traitement par biofiltration	Pompage des eaux dans le canal d'alimentation de l'étage pré-dénitrification vers les biofiltres pré-dénitrifiants
	Pompage des eaux pré-dénitrifiées et des eaux de by-pass de la pré-dénitrification vers les biofiltres nitrifiants
	Pompage des eaux nitrifiées vers les biofiltres pré-dénitrifiants
Traitement tertiaire	Pompage des eaux vers les clarificateurs tertiaires

Comme la modernisation de la station n'est pas encore finie, certaines informations liées au pompage entre les différentes parties du traitement ne sont pas connues. Des hypothèses ont donc été faites pour réaliser l'évaluation des coûts liés au pompage :

1) Comme les nouveaux décanteurs ne sont pas encore installés, le mode de pompage des eaux décantées vers le traitement par biofiltration n'est pas encore connu. Dans ce cas-ci, on suppose que le mode de pompage de l'eau décantée vers le traitement par biofiltration en 2022 sera identique à celui actuellement appliqué à la station. L'eau décantée doit d'abord être envoyée dans le canal d'alimentation de l'étage de pré-dénitrification et ensuite pompée vers les biofiltres pré-dénitrifiants. De plus, on suppose aussi que les pompes utilisées pour le pompage de l'eau décantée vers le canal d'alimentation de l'étage pré-dénitrification seront identiques à celles qui servent actuellement le by-pass de l'eau décantée. Ils ont été précédemment simulés avec l'équation proposée. Par contre, la capacité maximale du pompage de by-pass de l'eau décantée est de 30 m^3/s (si toutes les 6 pompes sont en fonctionnement). Elle ne peut pas satisfaire le besoin de pompage pour la configuration de traitement en temps de pluie en 2022 (entre 26-55 m^3/s). Pour cette raison, le nombre de pompes disponibles pour le pompage est considéré d'augmenter de 6 à 12 pour satisfaire le débit maximal en temps de pluie (55 m^3/s).

2) Vue que les étages de pré-dénitrification et de nitrification ne seront pas changés en 2022, on suppose que les pompes qui servent actuellement le pompage des eaux vers les biofiltres pré-dénitrifiants et nitrifiants, seront conservées après la modernisation (voir Tableau 6.10).

Pour rappel, l'énergie électrique consommée par ces pompes a déjà été simulée avec l'équation proposée.

3) Actuellement, les eaux nitrifiées sont envoyées gravitairement vers les biofiltres post-dénitrifiants. Il n'y a donc pas de pompage d'eau entre l'étage de nitrification et celui de post-dénitrification. Ce mode de transport d'eau est considéré a été conservé en 2022.

4) Comme le traitement tertiaire de la filière n'est pas encore mis en route, le mode de pompage des eaux en sortie du traitement par biofiltration vers les clarificateurs n'est pas connu. Dans ce cas-ci, il est supposé que les 6 pompes supplémentaires considérées, qui renforcent transporter les eaux décantées en temps de pluie vers le traitement par biofiltration, feront le pompage des eaux biofiltrées vers les clarificateurs tertiaires en temps sec.

5) Tel que mentionné précédemment, les pompages sont réalisés par plusieurs pompes. Les tests de simulation effectués utilisent les informations du nombre de pompes actives issues de la station pour estimer l'énergie consommée pour les pompages. Cependant, lorsque le modèle filière est utilisé pour les tests de scénarios, le nombre de pompes actives est inconnu et doit donc être estimé en divisant le débit d'eau à transporter par la capacité hydraulique des pompes.

6) Le prix unitaire de l'électricité est fixé à 0,056 €/kWh (cas de la station Seine Aval en 2018). C'est le prix le plus récent disponible lors du développement du modèle filière.

- **Aération**

Comme les coûts de pompage, les coûts d'aération sont calculés en se basant sur l'estimation d'électricité consommée. Tel que présenté au Chapitre 4, une équation d'estimation de la consommation d'énergie électrique par aération a été proposée. Elle a été appliquée avec succès pour estimer la consommation d'électricité par les compresseurs servant l'injection d'air dans les biofiltres nitrifiants sur une période de 180 jours de l'année 2017. Comme l'étage de nitrification est le seul procédé aéré dans la filière modélisée, cette équation est donc directement utilisée par le modèle filière pour évaluer les coûts d'aération. Le prix unitaire de l'électricité utilisé est identique à celui du pompage (0,056 €/kWh).

- **Réactifs chimiques**

Tel que présenté précédemment, les coûts liés à la consommation du chlorure ferrique, du méthanol et de l'acide phosphorique sont pris en compte dans le modèle filière. Ils sont estimés en multipliant les quantités de réactifs injectés calculées par les commandes intégrées dans le modèle filière avec les prix unitaires correspondants issus du SIAAP (voir Tableau 6.11). Vue

que les prix des réactifs évoluent constamment, les valeurs utilisées pour le chlorure ferrique et le méthanol (141,5 €HT/t$FeCl_3$ et 360 €HT/tMéthanol) correspondent aux prix moyens après la mise en route du projet BioSAV (de mars 2017 à avril 2019). Le prix de l'acide phosphorique est fixé à 750 €HT/t, qui correspond à la valeur moyenne de janvier à février 2017. C'est la période la plus récente pour laquelle le prix de l'acide phosphorique est disponible. Il est à noter que l'acide phosphorique utilisé par la station a une concentration en masse de 75%. Un facteur de conversion entre la masse de l'acide phosphorique ajouté et celle du produit commercial utilisé est donc pris en compte lors du calcul des coûts liés à la consommation de l'acide phosphorique.

Tableau 6.11 Réactifs pris en compte pour évaluer les coûts de traitement et les prix unitaires correspondants utilisés (données issues du SIAAP).

Traitement	Réactifs injectés	Prix unitaires (€HT/t)
Traitement primaire	Chlorure ferrique	141,5*
Traitement par biofiltration	Méthanol (pré- et post-dénitrification)	360**
	Acide phosphorique à 75% (pré- et post-dénitrification)	750
Traitement tertiaire	Chlorure ferrique	141,5*

*141,5 €HT/t$FeCl_3$. **360 €HT/tMéthanol.

6.2.2. Evaluation des impacts environnementaux

6.2.2.1. Types d'impacts considérés par le modèle

Pendant le fonctionnement de la station d'épuration, différents impacts environnementaux peuvent être produits. Par exemple, l'eutrophisation peut être produite lorsque les nutriments azotés et phosphorés ne sont pas bien enlevés par la station. Les métaux lourds présents dans les boues peuvent avoir des effets d'écotoxicité. Les gaz à effet de serre émis durant les traitements des eaux et des boues peuvent conduire au réchauffement climatique. Parmi ces impacts, le modèle filière construit se concentre sur l'évaluation des émissions des gaz à effet de serre. Les raisons derrière ce choix sont les suivantes :

1) L'évaluation des impacts comme l'eutrophisation et l'écotoxicité doit être réalisée avec un logiciel spécifique pour l'analyse du cycle de vie. C'est une méthode standardisée (ISO, 2006) pour évaluer les impacts environnementaux ayant lieu dans le cycle de vie de produits ou de procédés, qui est relativement complexe et donc ne peut pas directement être appliquée par le modèle filière. Par contre, l'évaluation des émissions des gaz à effet de serre a été réalisée dans certaines études utilisant des modèles mathématiques de traitement de l'eau usée (Flores-Alsina *et al.*, 2011; Flores-Alsina *et al.*, 2014; Mannina *et al.*, 2016). Certains éléments liés à cette évaluation comme la production et la dégradation biologique du N_2O ainsi que la consommation d'énergie et des réactifs ont déjà été inclus dans le modèle filière.

2) Les stations d'épuration sont un des contributeurs majeurs à l'augmentation des émissions à gaz d'effet de serre (Zhan *et al.*, 2018). Il y a donc un intérêt pour tester différentes stratégies de diminution des émissions par le modèle filière.

En général, les stations d'épuration peuvent émettre des gaz à effet de serre comme le CO_2, le N_2O et le CH_4 par voies directes et indirectes. Les émissions par les voies directes sont liées principalement aux traitements biologiques (Mannina *et al.*, 2016). Par exemple, pendant le traitement des eaux usées, la respiration des biomasses peut produire du CO_2 et les procédés de nitrification et de dénitrification peuvent émettre du N_2O. Pendant le traitement des boues, du CH_4 peut être émis par la digestion anaérobie (Kampschreur *et al.*, 2009). La consommation d'énergie électrique et thermique dans la station peut créer de manière indirecte des émissions des gaz à effet de serre. Les émissions indirectes peuvent aussi avoir lieu à l'extérieur de la station, par exemple, les gaz émis lors de la production des réactifs chimiques utilisés par la station. Ce genre d'émission indirecte doit également être pris en compte pour évaluer les gaz à effet de serre émis par la station.

Le Tableau 6.12 résume les différentes sources d'émissions de gaz à effet de serre prises en

compte par le modèle filière. Les émissions directes considérées sont le N_2O émis dans l'atmosphère au niveau de l'étage de nitrification et le N_2O présent dans le rejet de la filière. Pour rappel, lors du développement du modèle en pré- et post- dénitrification, le coefficient de transfert gaz-liquide (k_La) est considéré nul en condition anoxie. Dans ce cas-ci, tout le N_2O produit par les deux procédés de dénitrification se trouve dans la phase liquide dans les modèles, vu qu'il n'y pas de transfert gaz-liquide. Pour cette raison, les émissions de N_2O dans l'atmosphère ne sont pas considérées pour l'étage de pré- et post-dénitrification par le modèle filière. Tel que mentionné lors de la construction des modèles en pré- et post-dénitrification, cette conception appliquée reste à vérifier. Des mesures d'émission de N_2O dans la phase liquide et la phase gazeuse en sortie de ces deux types de biofiltres de la station ont déjà été proposées lors de la discussion sur l'amélioration de ces deux modèles.

Les émissions de CO_2 issues de la respiration et la dégradation des matières organiques par les biomasses ne sont pas prises en compte par le modèle, parce que ce type d'émission de (CO_2 de cycle court) n'est pas d'origine fossile et donc considéré être neutre pour l'effet de serre (ASTEE, 2009; Kampschreur *et al.*, 2009). Les émissions directes de CH_4 ne sont également pas prises en compte par le modèle filière, puisque ce gaz est principalement produit par la méthanisation par la digestion anaérobie qui n'est pas inclue dans la filière modélisée.

Tableau 6.12 Les différentes sources d'émissions de gaz à effet de serre prises en compte par le modèle filière.

Traitement	Emissions directes	Emissions indirectes
Traitement primaire	-	Production de chlorure ferrique
		Pompage des eaux décantées vers le canal d'alimentation de l'étage de pré-dénitrification
Traitement par biofiltration	N_2O émis au niveau de l'étage de nitrification	Production de méthanol
		Production de l'acide phosphorique
		Pompage des eaux dans le canal d'alimentation de l'étage de pré-dénitrification vers les biofiltres pré-dénitrifiants
		Pompage des eaux vers les biofiltres nitrifiants
		Pompage des eaux nitrifiées vers les biofiltres pré-dénitrifiants
		Aération pour les biofiltres nitrifiants
Traitement tertiaire	N_2O dans le rejet	Production de chlorure ferrique
		Pompage des eaux vers les clarificateurs tertiaires

Les émissions indirectes de la filière prises en compte par le modèle sont les émissions liées à la consommation de l'énergie électrique par le pompage et l'aération ainsi que celles liées a

production des réactifs chimiques utilisés (chlorure ferrique, méthanol et acide phosphorique). Ces éléments ont déjà été inclus dans l'évaluation des coûts de traitement. A cause d'un manque d'informations comme le mode de transport, les émissions indirectes liées au transport des réactifs ne sont pas prises en compte par le modèle.

6.2.2.2. Mode de calcul des émissions utilisé par le modèle

- **N_2O**

La quantité de N_2O émis dans l'atmosphère au niveau de l'étage de nitrification et dans le rejet de la filière peut être directement simulée par le modèle. Cette quantité est convertie en équivalents CO_2 (298 gCO_2/gN_2O) par le modèle pour évaluer le potentiel de réchauffement global (Corominas *et al.*, 2012).

- **Emissions indirectes**

Pour les émissions indirectes, les gaz à effet de serre produits lors de la consommation d'énergie électrique sont évalués en multipliant l'électricité consommée avec le facteur d'émission de CO_2 provenant de la production d'électricité (Ashrafi, 2012). Ce dernier varie en fonction des modes de génération de l'électricité et leur pourcentage dans la production d'électricité. Dans le modèle, la valeur de ce facteur est fixée à 65 gCO_2/kWh qui est estimée à partir des données liées à la production d'électricité en France de l'année 2017 et aux facteurs d'émission des modes de génération d'électricité (voir Tableau 6.13). Tel que montré au tableau 6.13, l'énergie nucléaire est le mode de génération de l'électricité principale en France (71,6% de la production). Ce mode de génération a un facteur d'émission faible (6 gCO_2/kWh). Pour cette raison le facteur d'émission de CO_2 provenant de la production d'électricité précédemment estimé (65 gCO_2/kWh) est considérablement plus faible dans d'autres pays qui produisent l'électricité principalement par mode thermique à flamme (>50% de la production), comme par exemple l'Allemagne (440 gCO_2/kWh) et le Royaume-Uni (281 gCO_2/kWh) (EEA, 2018). Le mode d'estimation de la consommation de l'énergie électrique utilisé est identique à celui présenté pour l'évaluation des coûts de traitement.

Tableau 6.13 Production de l'électricité en France et les facteurs d'émission de gaz à effet de serre correspondants à chaque mode de génération. (Source : RTE (2017); ADEME (2016))

Mode de génération	Pourcentage dans la production (%)	Facteur d'émission (gCO_2/kWh)
Nucléaire	71,6	6
Hydraulique	10,1	10-13
Thermique à flamme	10,3	580
Eolien	4,5	7
Solaire	1,7	13-32
Bioénergies	1,7	11-41

L'impact des émissions indirectes pour les réactifs utilisés par la filière biofiltration est quantifié en multipliant les facteurs d'émission relatifs à la production des réactifs avec les quantités injectées estimées par le modèle filière. Ces facteurs d'émission représentent les émissions des gaz à effet de serre relatives à la production des réactifs (hors transport vers le lieu d'utilisation) (voir Tableau 6.14).

Tableau 6.14 Facteurs d'émission relatifs à la production des réactifs pris en compte pour l'évaluation des émissions des gaz à effet de serre. (Source : ASTEE (2009))

Réactifs	Chlorure ferrique	Méthanol	Acide phosphorique à 75%
Facteur d'émission (kg CO_2/kg réactifs)	0,322	0,521	1,42

6.3. Sommaire

En fonction des configurations de traitement de la station Seine Aval prévues en 2022, le modèle filière a été construit en connectant les modèles de procédés individuels précédemment développés. Certains modèles ont été modifiés pour adapter les ouvrages et les conditions d'exploitation de la station Seine Aval. Les commandes sont également intégrées dans le modèle afin de mieux reproduire le comportement de la filière face aux variations de débits et de charges en polluants en entrée de la station. Ces commandes sont établies en fonction des informations actuellement disponibles sur les règles des commandes des procédés de traitement de la station ainsi que sur les hypothèses basées sur celles effectuées dans les autres stations du SIAAP. Certains commandes développées ont été testées avec les données d'exploitations issues de la station après la mise en route du projet BioSAV.

Après la construction du modèle filière, l'évaluation des couts et l'impact environnemental lié aux gaz à effet de serre ont été intégrés dans le modèle filière. Certaines hypothèses ont été faites par rapport au traitement de la filière en 2022 et le modèle construit afin d'établir les modes de calcul des coûts et des émissions des gaz à effet de serre dans le modèle.

Ce modèle filière sera amélioré et modifié lorsque les informations de commande et les données d'exploitation des procédés seront disponibles après la modernisation de la station. Des tests de scénario ont été réalisés avec le modèle filière développé (voir Chapitre 7) afin de vérifier le fonctionnement du modèle et de prédire la performance de traitement de la filière en 2022.

Références

ADEME. (2016). *Base Carbone® (Version 11.5.0)*. Documentation des facteurs d'émissions de la Base Carbone®. Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie (ADEME), Angers, France. Extrait de https://www.bilans-ges.ademe.fr/docutheque/docs/%5BBase%20Carbone%5D%20Documentation%20g%C3%A9n%C3%A9rale%20v11.5.pdf

Ashrafi, O. (2012). *Estimation of Greenhouse Gas Emissions in Wastewater Treatment Plant of Pulp & Paper Industry*. (Thèse de doctorat). Concordia University, Québec, QC, Canada.

ASTEE. (2009). *Guide Méthodologique d'Evaluation des Emissions de Gaz à Effet de Serre des Services de l'Eau et de l'Assainissement*. Association Scientifique et Technique pour l'Eau et l'Environnement (ASTEE), Nanterre, France.

Azimi, S. et Rocher, V. (2017). Energy consumption reduction in a waste water treatment plant. *Water Practice and Technology, 12*(1), 104-116.

Corominas, L., Flores-Alsina, X., Snip, L., & Vanrolleghem, P. A. (2012). Comparison of different modeling approaches to better evaluate greenhouse gas emissions from whole wastewater treatment plants. *Biotechnology and Bioengineering, 109*(11), 2854-2863.

EEA. (2018). *CO_2 emission intensity*. European Environment Agency (EEA), Copenhague, Danemark. Extrait de https://www.eea.europa.eu/data-and-maps/daviz/co2-emission-intensity-5#tab-googlechartid_chart_11_filters=%7B%22rowFilters%22%3A%7B%7D%3B%22columnFilters%22%3A%7B%22pre_config_ugeo%22%3A%5B%22European%20Union%20(current%20composition)%22%5D%7D%7D

Flores-Alsina, X., Corominas, L., Snip, L., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Including greenhouse gas emissions during benchmarking of wastewater treatment plant control strategies. *Water Research, 45*(16), 4700-4710.

Flores-Alsina, X., Arnell, M., Amerlinck, Y., Corominas, L., Gernaey, K. V., Guo, L., Lindblom, E., Nopens, I., Porro, J., Shaw, A., Snip, L., Vanrolleghem, P. A., & Jeppsson, U. (2014). Balancing effluent quality, economic cost and greenhouse gas emissions during the evaluation of (plant-wide) control/operational strategies in WWTPs. *Science of the Total Environment, 466-467*, 616-624.

ISO. (2006). *Environmental Management - Life Cycle Assessment - Principles and Framework: International Standard 14040.* International Standards Organisation (ISO), Geneva, Swiss.

Kampschreur, M. J., Temmink, H., Kleerebezem, R., Jetten, M. S., & van Loosdrecht, M. C. M. (2009). Nitrous oxide emission during wastewater treatment. *Water Research, 43*(17), 4093-4103.

Mannina, G., Ekama, G., Caniani, D., Cosenza, A., Esposito, G., Gori, R., Garrido-Baserba, M., Rosso, D., & Olsson, G. (2016). Greenhouse gases from wastewater treatment — A review of modelling tools. *Science of the Total Environement, 551-552*, 254-270.

McNamara, G. (2018). *Economic and Environmental Cost Assessment of Wastewater Treatment Systems - A Life Cycle Perspective*. (Thèse de doctorat). Dublin City University, Dublin, Ireland.

RTE. (2017). *Bilan Electrique 2017*. Rapport technique. Réseau de transport d'électricité (RTE), France. Extrait de https://assets.rte-france.com/prod/public/2020-06/bilan_electrique_2017.pdf

Sousa, M. R. S., Lora-Garcia, J., & Lopez-Pérez, M.-F. (2018). Modelling approach to an ultrafiltration process for the removal dissolved and colloidal substances from treated wastewater for reuse in cycled paper manufacturing. *Journal of Water Process Engineering, 21*, 96-106.

van Nieuwenhuijzen, A. F., van der Graaf, J. H. J. M., Kampschreur, M. J., & Mels, A. R. (2004). Particle related fractionation and characterisation of municipal wastewater. *Water Science & Technology, 50*(12), 125-132.

Water Environment Federation. (2005c). Tertiary clarifier design concepts and considerations. In *Clarifier Design: WEF Manual of Practice No. FD-8* (2rd ed., pp. 211-301). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Zhan, X., Hu, Z., & Wu, G. (2018). *Greenhouse Gas Emission and Mitigation in Municipal Wastewater Treatment Plants*. IWA Publishing, London, UK.

Chapitre 7 Application du modèle filière comme outil d'optimisation pour la station Seine Aval

Ce chapitre présente en détails le travail effectué pour réaliser les premiers essais d'application du modèle filière en tant qu'outil d'optimisation pour la station Seine Aval. Ce travail peut être décomposé en trois parties successives. La première partie concerne la génération d'un scénario d'affluent à la station. En effet, les variations du débit et des concentrations de l'eau en entrée peuvent impacter les choix d'opérations des procédés de la station (configurations de traitement, quantités des réactifs ajoutés, nombres de réacteurs à activer, etc.) ainsi que la performance de traitement. Pour cette raison, il vaut mieux utiliser les données d'entrée qui reflètent les caractéristiques des eaux acceptées par la station pour simuler le fonctionnement de la filière biofiltration par le modèle. En supposant que les conditions d'entrée en 2022 soient proches de celles actuellement en vigueur, le scénario d'affluent à tester est généré à partir des caractéristiques des eaux prétraitées d'une période issue de l'année 2018.

Lors de la construction du modèle filière, des changements des paramètres de dimension ont été faites sur certaines modèles de procédés individuels afin de les adapter aux procédés de la filière. De plus, certaines conditions d'exploitation de la station Seine Aval sont différentes par rapport aux stations sur lesquelles les modèles de procédés ont été développés. Considérant ces changements et différences, la performance de prédiction du modèle filière doit être vérifiée. D'ailleurs, les valeurs de certains paramètres de commande des procédés qui ne sont pas encore mises en route, sont actuellement inconnues. Il faut donc trouver des valeurs adéquates pour ces paramètres. Pour ces raisons, des tests de simulation sont réalisés avec le scénario d'affluent généré pour déterminer les valeurs de certains paramètres de commande et vérifier la performance de prédiction du modèle filière, étape qui constitue la deuxième partie du travail.

Toujours en utilisant le même scénario d'affluent, six scénarios d'exploitation sont proposés et testés avec le modèle filière. L'inter-comparaison de ces scénarios, qui consiste en la troisième partie du travail réalisé, vise à prédire la performance de traitement de la filière sous différentes conditions d'exploitation et à démontrer le potentiel d'utilisation du modèle comme outil d'optimisation. Pour comparer les résultats des différents scénarios, des critères d'évaluation en termes de qualité des eaux en sortie, de coûts de traitement et d'émissions de gaz à effet de serre sont proposés.

Une conclusion sur le travail ainsi que les perspectives sur l'application du modèle filière sont apportées à la fin du chapitre.

7.1. Génération du scénario d'affluent

7.1.1. Période choisie pour générer le scénario d'affluent

Afin de générer le scénario d'affluent, les variations du débit et des concentrations en polluants des eaux prétraitées de la station Seine Aval sont étudiées. Tel que présenté au Chapitre 6, la sortie du prétraitement est considérée comme l'entrée du modèle filière. D'ailleurs, dans la station Seine Aval, les mesures journalières sur les échantillons composites de 24 heures des eaux en sortie de prétraitement sont définies comme la qualité des eaux brutes en entrée de la station. Ces mesures sont comparées avec la qualité du rejet de la station afin d'évaluer la performance de traitement et de surveiller la conformité du rejet de la station. La période choisie pour générer le scénario d'affluent est du 2 au 30 mai 2018 (29 jours). Les raisons derrières ce choix sont que premièrement, le débit moyen journalier des eaux prétraitées de cette période est autour de 1 418 000 m^3/j (16,4 m^3/s) ce qui est proche du débit moyen en entrée de la station défini pour le projet BioSAV (1 250 000 m^3/j, 14,5 m^3/s). De plus, les valeurs moyennes des concentrations de polluants (DCO, MES, NTK et NH_4^+) en sortie de prétraitement (échantillons composites de 24 heures) de cette période choisie sont proches de la qualité de l'eau brute définie pour le cas de débit moyen (voir Tableau 7.1). Dans ce cas-ci, en simulant cette période, on peut comparer les résultats en sortie de la filière biofiltration simulés par le modèle avec ceux prévus après la refonte de la station.

Tableau 7.1 La qualité de l'eau en sortie de prétraitement de la station Seine Aval du 2 au 30 mai 2018 et celle définie pour le cas de débit moyen 1 250 000 m^3/j du projet BioSAV.

Polluant	Unité	Moyenne observée	Ecart-type	Concentration définie pour BioSAV
DCO	mgO_2/L	477	106	471
MES	mg/L	265	77	253
NTK	mgN/L	50,3	9,2	50,4
NH_4^+	mgN/L	33,3	7,6	31,4

Deuxièmement, tel que montré à la Figure 7.1, pour la plupart du temps de cette période, le débit horaire varie entre 10-20 m^3/s. De fortes augmentations de débit ont été observées autour du 12 au 14 mai et du 22 au 30 mai. Ces augmentations sont liées à des évènements de pluie à ces jours, car des précipitations ont été observées pour ces jours et la conductivité de l'eau prétraitée diminue de 120-150 mS/m à 30-90 mS/m lorsque le débit augmente fortement (voir Figure 7.1). En effet, l'eau de pluie a une conductivité plus faible que l'eau brute (Verbanck, 1995b; Bersinger *et al.*, 2015). Pour les réseaux d'assainissement de type unitaire (cas de la station Seine Aval), en temps de pluie, les ions présents dans les eaux usées en entrée de la station sont diluées par la pluie, ce qui conduit donc à la diminution de la conductivité de l'eau.

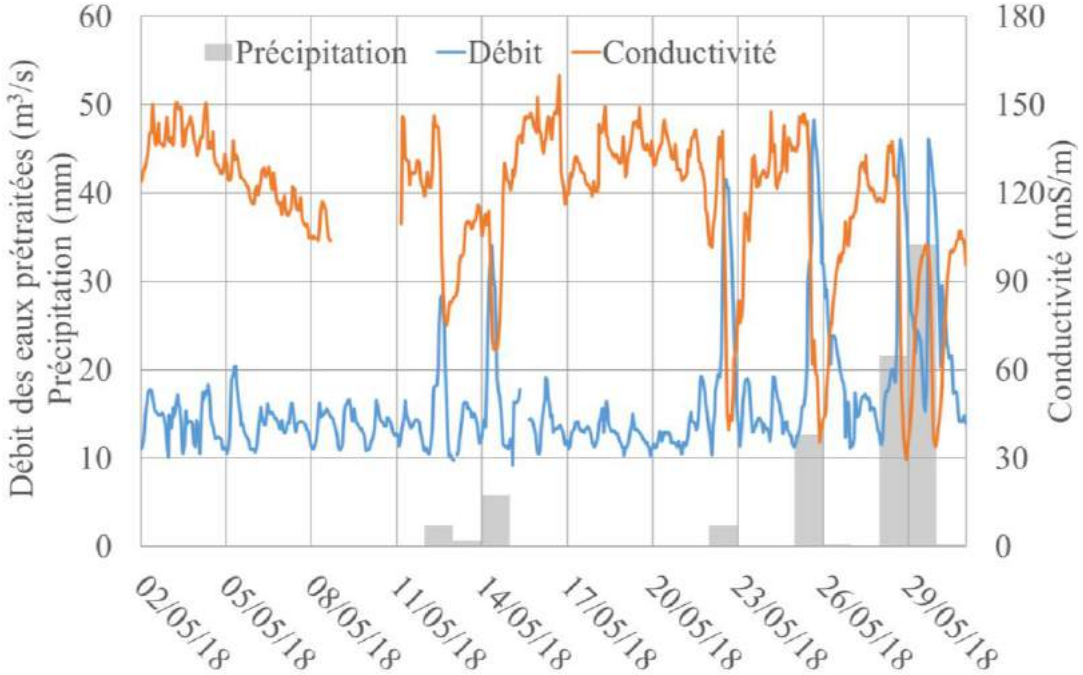


Figure 7.1 Débit (ligne bleue) et conductivité (ligne orange) des eaux prétraitées de la station Seine Aval et précipitation journalière (colonnes grises) mesurée à la station Paris-Montsouris (75)(Infoclimat, 2018) du 2 mai au 30 mai 2018.

En plus du débit, les évènements de pluie peuvent influencer les concentrations des polluants de l'eau prétraitée, tel que montrés aux Figures 7.2a et 7.2b. Les concentrations sont relativement stables pour les jours supposés en temps sec (2-11 mai et 15-21 mai). Des augmentations de concentrations moyennes journalières en DCO et en MES ont été observées sur les jours qui rencontrent des événements de pluie (12-14 mai et 22-30 mai) (voir Figure 7.2a). En effet, au début d'un événement de pluie, les particules accumulées dans les réseaux de transport des eaux usées en temps sec peuvent être resuspendues à cause des forts débits. Dans ce cas-ci, la concentration en MES des jours en temps de pluie augmente(Verbanck, 1995a). Vue qu'une partie des particules re-suspendues sont des matières organiques particulaires, la concentration en DCO augmente également à ces jours. Contrairement à la DCO et les MES, à cause de l'effet de dilution, les concentrations moyennes journalières en NH_4^+ et en PO_4^{3-} diminuent lors des jours de pluie (voir Figure 7.2b). Considérant les variations observées sur les eaux prétraitées de la station Seine Aval de la période de 2 à 30 mai 2018, il est donc intéressant d'utiliser le jeu de données issu de cette période pour tester le fonctionnement du modèle filière, comme, par exemple, la vérification des réponses des commandes intégrées dans le modèle (voir les détails dans la section 7.2).

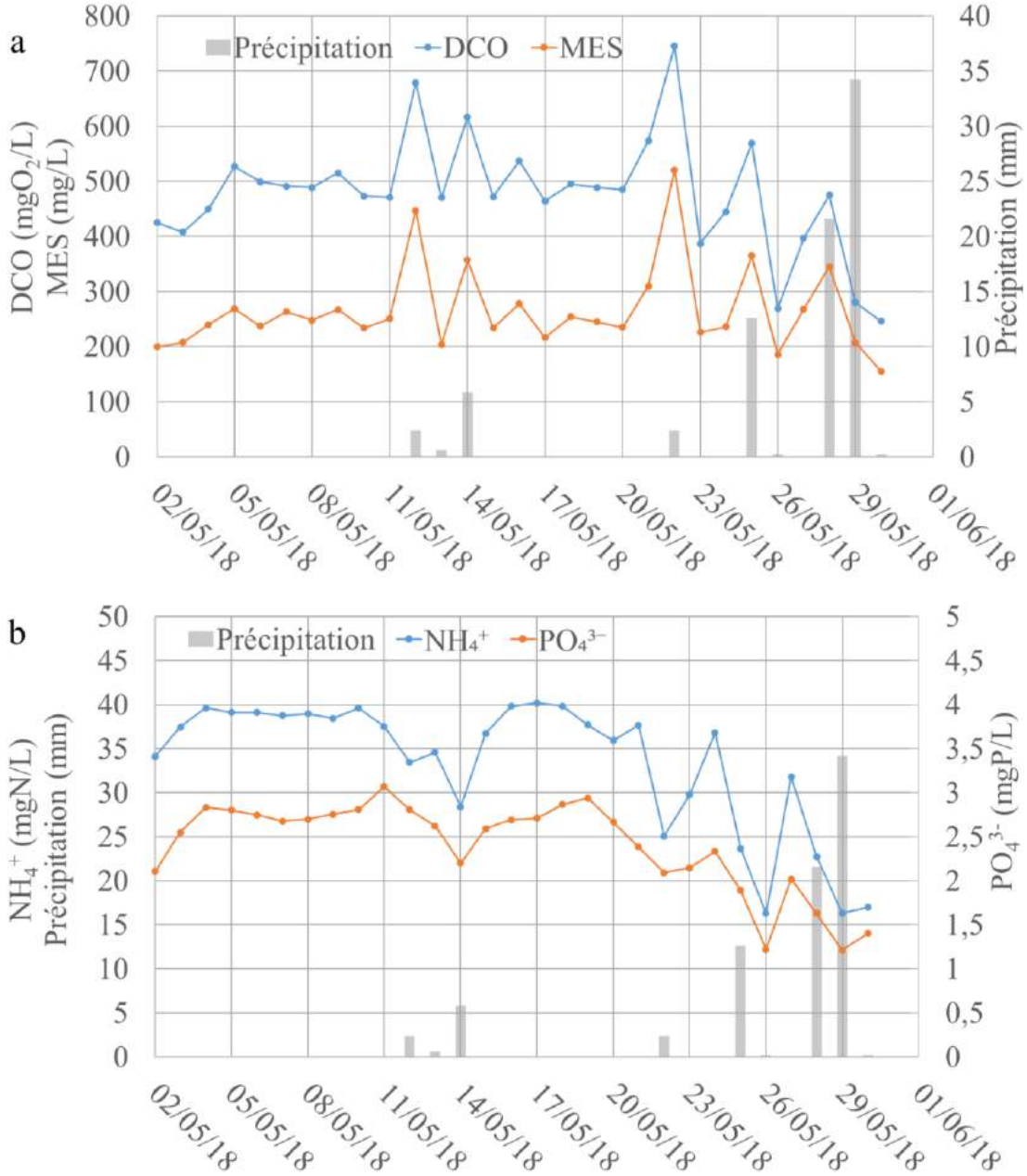


Figure 7.2 Variations des concentrations (composite 24h) des polluants en sortie du prétraitement de la station Seine Aval et de la précipitation journalière (colonnes grises) mesurée à la station Paris-Montsouris (75)(Infoclimat, 2018) du 2 au 30 mai 2018. a) DCO et MES, b) NH_4^+ et PO_4^{3-}.

7.1.2. Génération du scénario d'affluent

7.1.2.1. Données collectées pour générer le scénario

Le Tableau 7.2 résume différents types de données récoltées de la station Seine Aval pour générer le jeu de données du scénario d'affluent. Considérant que les débits et les polluants à traiter peuvent évoluer en fonction des activités des habitants et des industries de la région ainsi que les évènements de pluie (Martin et Vanrolleghem, 2014), certaines données issues des mesures de capteurs sont récoltées afin de générer un jeu de données contenant des variations horaires du débit et des polluants. Comme la concentration en MES est le seul polluant mesuré par capteur au niveau de la sortie de prétraitement, des données du NH_4^+ et de la DCO filtrée en sortie de tamisage de la filière BRM sont aussi collectées et utilisées. Tel que présenté au Chapitre 3 sur le fonctionnement actuel de la station, l'eau en entrée de la filière de BRM est un mélange de l'eau prétraitée et de l'eau en sortie des décanteurs primaires conventionnels. Avant d'être envoyé aux bassins biologiques de BRM, ce mélange est traité par des tamis de 1 mm. On suppose que le traitement de décantation conventionnelle et le tamisage ont très peu d'influences sur les concentrations en NH_4^+ et en DCO filtrée de l'eau prétraitée.

Tableau 7.2 Les données récoltées pour établir le jeu de données du scénario d'affluent.

Localisation	Type de données	Mesure
Sortie de prétraitement	Capteurs (horaire)	Débit (m^3/s)
		Température (°C)
		MES (mg/L)
		Conductivité (mS/m)
	[1]Laboratoire (journalière)	NH_4^+ (mgN/L)
		NTK (mgN/L)
		DCO (mgO_2/L)
		PO_4^{3-} (mgP/L)
		NO_3^- (mgN/L)
		NO_2^- (mgN/L)
		Alcalinité (mmol/L)
		MES (mg/L)
Sortie de tamisage BRM	Capteurs (horaire)	NH_4^+ (mgN/L)
		DCO filtrée (mgO_2/L)
	[1]Laboratoire (journalière)	DCO filtrée (mgO_2/L)

[1] Mesure laboratoire sur les échantillons composites de 24 heures (de 7h à 6h le lendemain)

7.1.2.2. Mode de génération du scénario d'affluent

Le jeu de données du scénario d'affluent est généré par les étapes suivantes :

1) Grâce à leur fiabilité, le débit et la température mesurés par les capteurs peuvent être intégrés tels quels dans le jeu de données du scénario d'affluent.

2) Tel que mentionné précédemment, des données horaires sont générées pour certains polluants. Considérant les impacts des événements de pluie sur les concentrations de polluants, les données horaires pour les jours en temps sec sont générées de façons différentes par rapport à celles des jours rencontrant des événements de pluie. Les données de débit et de conductivité des eaux prétraitées sont utilisées pour aider à distinguer les jours de temps sec et de temps de pluie. Les jours qui contiennent des débits supérieurs à 22 m^3/s et des conductivités inférieures à 90 mS/m, sont considérés comme jours de temps de pluie. Pour la période du 2 au 30 mai 2018, les jours de 12, 14, 22-23, 25-26 et 28-30 mai sont identifiés comme jours de temps de pluie. Les autres jours dans la période sont considérés comme jours de temps sec.

3) Afin d'établir un scénario d'affluent qui reflète la tendance globale des variations de polluants des jours de temps sec, les évolutions horaires des concentrations en NH_4^+, en DCO filtrée et en MES en sortie de prétraitement sont étudiées. Cette étude est réalisée sur les données de capteurs d'une période d'un an (de mi-avril 2018 à mi-avril 2019) incluant les jours choisis pour générer le scénario d'affluent. Les proportions horaires des concentrations en DCO filtrée, en NH_4^+ et en MES dans les concentrations totales journalières correspondantes sont calculées (voir Eq 7.1). Ces proportions sont ensuite utilisées pour obtenir les répartitions moyennes des concentrations des polluants (voir Eq 7.2).

Eq 7.1 $$Proportion_{i,j,k} = {Polluant_{i,j,k}}\Big/{\sum_j Polluant_{i,j,k}} * 100\%$$

Eq 7.2 $$Répartition_{i,j} = \overline{\sum_k Proportion_{i,j,k}}$$

où
$Proportion_{i,j,k}$ est la proportion de la concentration du polluant i à l'heure j du jour k dans les concentrations totales journalières (%)
$Polluant_{i,j,k}$ est la concentration du polluant i à l'heure j du jour k mesurée par capteur (mg/L)
$Répartition_{i,j}$ est la répartition moyenne de la concentration du polluant i à l'heure j dans les concentrations totales journalières (%)

Afin de diminuer les influences ponctuelles des évènements de pluie et des erreurs de mesure de capteurs, certains jours ne sont pas pris en compte pour le calcul selon le débit et les concentrations mesurées (voir Tableau 7.3). Comme la concentration en MES est

directement mesurée en sortie de prétraitement, le débit de l'eau prétraitée est utilisé pour identifier les jours de pluie, tandis que le critère de concentration en MES est plutôt utilisé pour exclure les jours contenant des erreurs de mesures très faibles ou élevées. Pour les concentrations en DCO filtrée et en NH_4^+ qui sont mesurées en entrée des bassins biologiques de BRM, les jours sont sélectionnés seulement en fonction des critères de concentration. Les limites inférieures des concentrations (60 mgO_2/L et 20 mgN/L) sont fixées pour exclure les jours où il y a des effets de dilution par la pluie, tandis que les limites supérieures (200 mgO_2/L et 60 mgN/L) servent à identifier les jours contenant des erreurs de mesures. Pour chaque concentration, environ 250 jours (sur 365 jours au total) sont sélectionnés pour calculer les proportions horaires.

Tableau 7.3 Critères de sélection des jours à prendre en compte pour calculer les proportions horaires des concentrations (MES, DCO filtrée et NH_4^+) pour la période de mi-avril 2018 à mi-avril 2019.

Concentration	Critère de sélection
MES	Débit de l'eau prétraitée < 22 m^3/s et 50 < MES < 500 mg/L
DCO filtrée	60 < DCO filtrée < 200 mgO_2/L
NH_4^+	20 < NH_4^+ < 60 mgN/L

Tel que montré à la Figure 7.3, la concentration en DCO filtrée varie très peu entre 7 heures et 12 heures. Une diminution de cette concentration est observée à partir de 13 heures. Après avoir passé un minimum vers 18 heures, la concentration en DCO filtrée augmente jusqu'à 4 heures le lendemain.

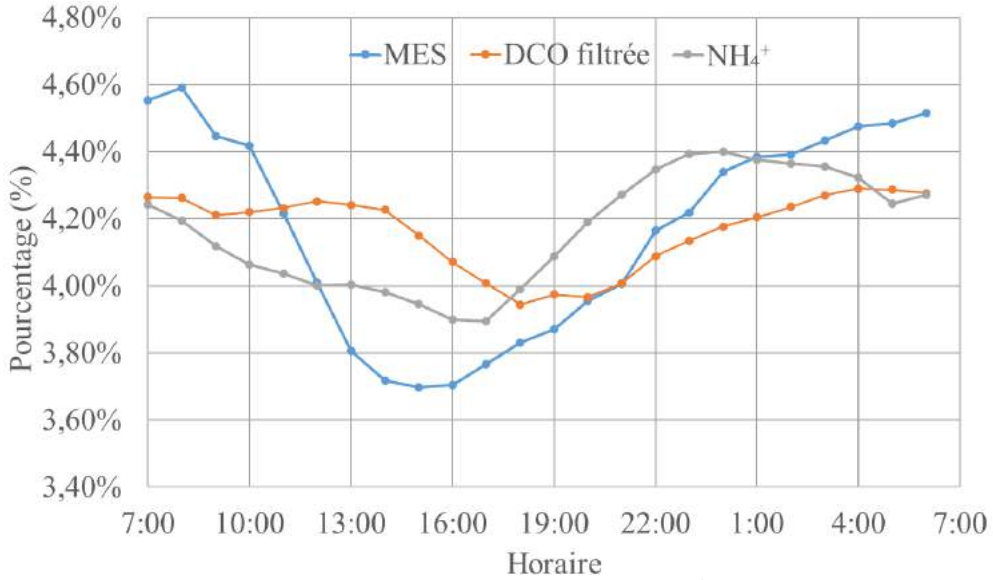


Figure 7.3 Répartitions moyennes des concentrations en NH_4^+ (ligne grise) et en DCO filtrée (ligne orange) en sortie de tamisage de BRM et de la concentration en MES (ligne bleue) des eaux prétraitées en temps sec pour la période de mi-avril 2018 à mi-avril 2019.

Les concentrations en MES et en NH_4^+ sont plus variées par rapport à celle de la DCO filtrée. Tel que montré à la Figure 7.3, ces deux concentrations diminuent à partir de 7 heures et réaugmentent après avoir passés les valeurs minimums vers 15-17 heures. Une faible diminution de la concentration en NH_4^+ est observée à partir de 23 heures. Les coefficients de variation obtenus pour les répartitions moyennes des concentrations en NH_4^+ et en DCO filtrée sont autour de 10%, ce qui est plus faibles que ceux de la concentration en MES (autour de 25%-35%) (voir Figures 4.1 dans l'Annexe 4). Ces résultats signifient que les répartitions des concentrations en NH_4^+ et en DCO filtrée pour les jours de temps sec sont moins variées que celles de la concentration en MES.

4) Les concentrations horaires en NH_4^+, en DCO filtrée et en MES en sortie de prétraitement du scénario de l'affluent en temps sec sont générées à partir des mesures laboratoire sur les échantillons composites 24 heures et les répartitions horaires moyennes correspondantes précédemment trouvées (voir Eq 7.3).

Eq 7.3 $$Polluant_{i,j,généré} = Polluant_{i,moyen} * Répartition_{i,j} * 24$$

où
$Polluant_{i,j,généré}$ est la concentration de polluant i à heure j générée (mg/L)
$Polluant_{i,moyen}$ est la concentration moyenne journalière du polluant i mesurée (mg/L)
$Répartition_{i,j}$ est la répartition moyenne de la concentration du polluant i à l'heure j dans les concentrations totales journalières (%)

5) En plus des concentrations en NH_4^+, en DCO filtrée et en MES, les données horaires des jours en temps sec du NTK et du PO_4^{3-} des eaux prétraitées sont aussi générées. Selon les observations d'une longue période (de mi-avril 2017 à mi-avril 2019, 730 jours), les concentrations journalières en NTK et en PO_4^{3-} varient de manière similaire à celles du NH_4^+ (ratio NTK/NH_4^+ :1,5±0,12 mgN/mgN; ratio NH_4^+/PO_4^{3-} :12,8±1,3 mgN/mgP). Dans ce cas-ci, on suppose que les variations du NTK et du PO_4^{3-} sont similaires à celle du NH_4^+. Les concentrations horaires de ces deux polluants sont donc générés avec la répartition moyenne horaire du NH_4^+.

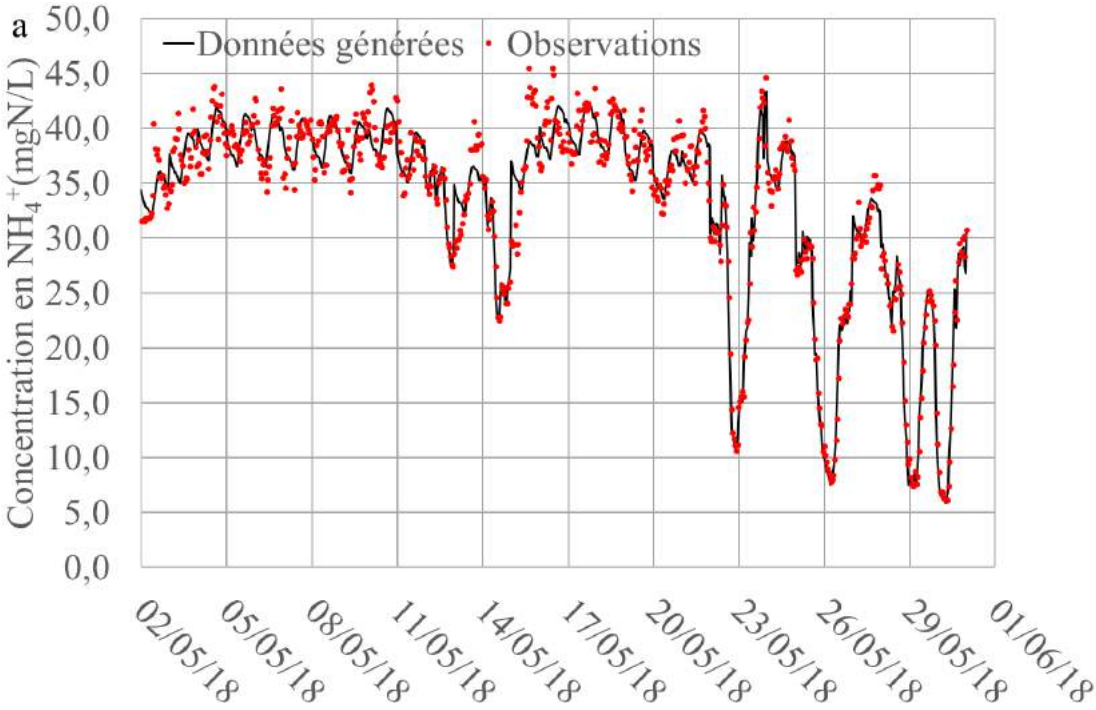
6) Pour les jours en temps de pluie, les concentrations horaires des polluants DCO filtrée, MES, NTK, PO_4^{3-} et NH_4^+ sont générées à partir des concentrations journalières et les répartitions horaires. Elles sont toutefois calculées avec les données horaires correspondantes issues de capteur de MES en sortie de prétraitement ainsi que ceux de la DCO filtrée et du NH_4^+ en entrée de bassins biologiques de BRM.

7) Pour les données entre les heures, elles sont générées de manière « zero-order hold ».

8) Considérant que les concentrations en nitrites et en nitrates des eaux prétraitées sont faibles (NO_3^- : 0,36±0,08 mgN/L ; NO_2^- : 0,16±0,14 mgN/L) et que les NO_x^- traités par les étages

de pré- et de post-dénitrification sont principalement issus de l'ammonium nitrifié provenant de l'étage de nitrification, les concentrations horaires en NO_3^- et en NO_2^- ne sont pas générées. Les mesures moyennes journalières de la station de ces deux variables sont directement utilisées pour établir le jeu de données du scénario d'affluent. Elles sont considérées être constantes pour chaque jour. Comme les NO_x^-, la mesure journalière de l'alcalinité est directement intégrée dans le jeu de données du scénario et considérée être constante pour chaque jour.

Pour vérifier les données générées, les concentrations horaires en NH_4^+ et en MES de l'eau prétraitée générée sont comparées avec les données des capteurs. Les biais entre les mesures laboratoire et celles de capteurs sont corrigés en multipliant les données horaires avec les ratios journaliers laboratoire/capteur lors de la vérification. Tel que montré par la Figure 7.4a, les données générées pour les concentrations horaires en NH_4^+ en sortie de prétraitement sont proches de celles observées (MAE : 1,62 mgN/L, moyenne observée : 33,3 mgN/L). Concernant les MES en sortie de prétraitement (voir Figure 7.4b), la tendance générale de variation de concentration est générée, mais certains pics ponctuels observés en temps sec ne sont pas reproduits. Pour cette raison, les différences moyenne entre les données générées et les observations de concentration en MES sont légèrement élevées (MAE : 28,8 mg/L, moyenne observée : 266,1 mg/L).



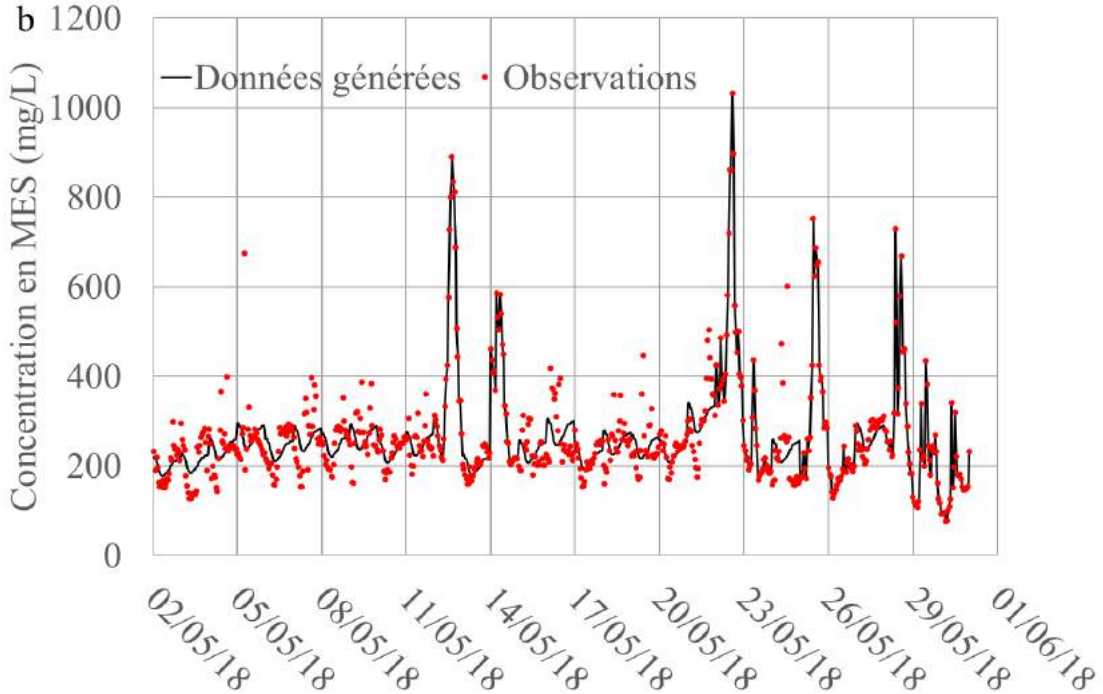


Figure 7.4 Les données générées pour les concentrations horaires en en NH_4^+ (a) et en MES (b) en sortie du prétraitement du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : données générées ; points rouges : Observations).

7.1.2.3. Modèle de fractionnement de l'affluent du modèle filière

Le jeu de données des eaux prétraitées généré doit être traduit en concentrations en variables de composants considérées par le modèle. Le modèle de fractionnement utilisé pour le modèle filière est similaire à celui appliqué pour le modèle de décanteur lamellaire physico-chimique de la station Seine Centre, précédemment développé (voir Chapitre 5). La seule différence est que pour le modèle filière, la variable DCO_x (DCO particulaire) est considérée comme une variable connue dans l'affluent au lieu d'être une variable intermédiaire. Durant la génération du jeu de données d'affluent, la concentration moyenne journalière en DCO particulaire est estimée en calculant la différence entre la DCO mesurée en sortie de prétraitement et la DCO filtrée en sortie de traitement de tamisage de la filière BRM. En supposant que la concentration en DCO particulaire varie de manière similaire à celle des MES, la concentration horaire de DCO particulaire est calculée à partir de la répartition horaire de MES et la concentration moyenne journalière estimée. Il est à noter que les eaux brutes (eaux prétraitées) de la station Seine Centre ont des caractéristiques similaires à celles de la station Seine Aval (principalement résidentiel, urbain dense). Pour cette raison, les valeurs des paramètres de fractionnement d'affluent utilisées par le modèle filière sont identiques à celles du modèle de décantation primaire.

7.2. Détermination des valeurs pour les paramètres de commande et évaluation de la performance de prédiction du modèle filière

Trois séries de tests de simulation ont été réalisées de manière successive sur les trois parties du modèle filière (traitement primaire, biofiltration et clarification tertiaire) pour déterminer les valeurs adéquates de certains paramètres de commande et pour évaluer la performance de prédiction de chaque partie du modèle. La première série de tests vise à déterminer le taux de chlorure ferrique adéquat pour les décanteurs futurs et à évaluer les réponses des commandes qui distribuent les eaux prétraitées et déterminent le nombre de décanteurs actifs pour le traitement primaire. Ensuite, en conservant les modifications apportées lors des tests en décantation primaire, la performance de prédiction de la partie de biofiltration du modèle filière a été évaluée. Les résultats de simulation sur la qualité de l'eau en sortie et les réponses de certaines commandes de chaque étage de biofiltration sont comparés avec celles observées de la station et/ou celles prévues lors de la conception du projet BioSAV. Enfin, la dernière série de tests vise à chercher un taux de chlorure ferrique adéquat pour la clarification tertiaire en fixant les autres paramètres de commande.

7.2.1. Détermination du taux de chlorure ferrique pour les décanteurs futurs et évaluation des réponses des commandes pour le traitement primaire

Pour la partie de décantation primaire du modèle, les valeurs des paramètres à utiliser pour les commandes du nombre de décanteurs actifs et de la distribution des eaux prétraitées ont déjà été fixées lors de la construction du modèle filière. Par contre, le taux de chlorure ferrique n'était pas encore déterminé. Actuellement, il n'y a pas d'information disponible sur le taux prévu pour le traitement primaire en 2022. Différents taux de chlorure ferrique sont donc testés et les résultats obtenus sont comparés avec la qualité de l'eau décantée en sortie de traitement primaire mesurée sur site lors de la période du 2 au 30 mai 2018. En même temps, les réponses issues des commandes du nombre de décanteurs actifs et de la distribution des eaux prétraitées sont évaluées afin de valider le fonctionnement normal des règles utilisées.

7.2.1.1. Détermination du taux d'injection de $FeCl_3$ pour les futurs décanteurs

Le taux de chlorure ferrique (autour de 30-40 g/m^3) appliqué dans les clarificateurs (Actiflo®) pour le traitement primaire du 2 au 30 mai est d'abord testé. Pour rappel, actuellement, le traitement primaire pour la filière biofiltration est réalisé par un mode de double décantation. Les eaux prétraitées en entrée sont d'abord traitées par les décanteurs conventionnels (sans réactif). Une partie des eaux décantées est ensuite envoyées dans les clarificateurs (Actiflo®) pour renforcer le traitement de particules et réaliser la déphosphatation. Les eaux restantes sont transportées directement vers le traitement par biofiltration (voir Figure 7.5).

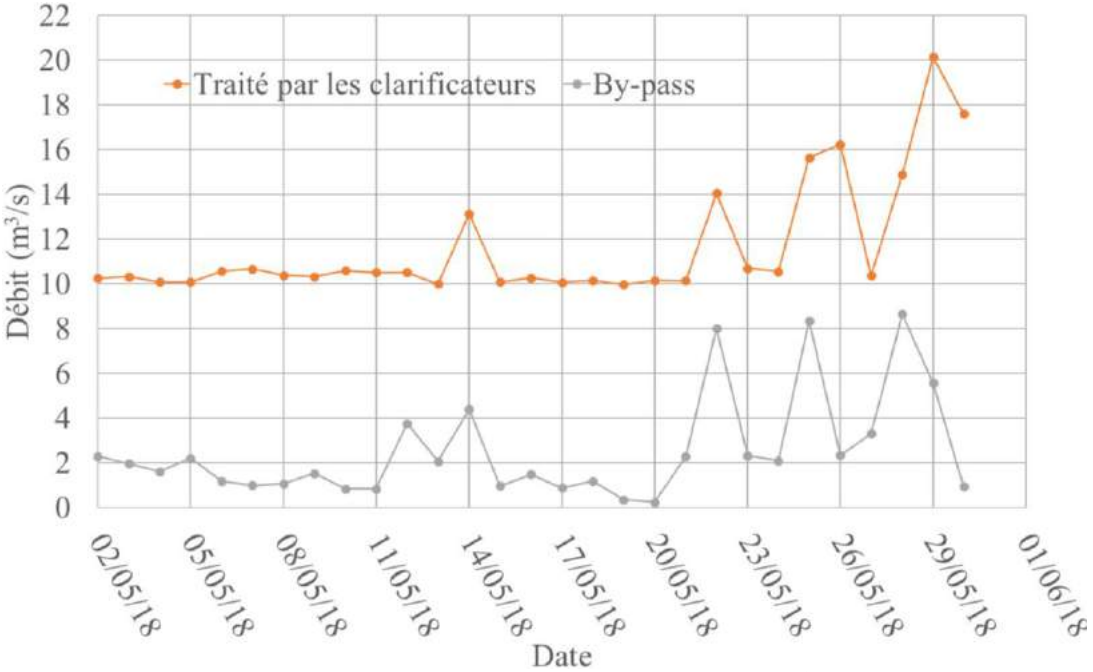


Figure 7.5 Débit d'eau décantée envoyée vers les clarificateurs (Actiflo®) (ligne orange) et celui du by-pass (ligne grise) pour la période du 2 au 30 mai 2018.

Selon les données d'exploitation de la station du 2 mai au 30 mai 2018, la concentration en orthophosphate en sortie des clarificateurs était assez faible (0,18 ± 0,09 mgP/L). Après avoir été mélangée avec les eaux du by-pass de la seconde décantation, la concentration en PO_4^{3-} augmente d'environ 0,25 mgP/L (0,45 ± 0,21 mgP/L). Les concentrations moyennes en MES et en DCO en sortie du traitement primaire sont de 48,4 (± 15,0 mg/L) et de 127,7 (± 29,5 mgO_2/L), respectivement.

Selon les résultats de simulation obtenus, le modèle prédit qu'en utilisant le dosage de chlorure ferrique actuel, les concentrations moyennes en MES (41,7±13,8 mg/L) et en DCO (117,8±26,1 mgO_2/L) en sortie des décanteurs futurs sont légèrement inférieures à celles du traitement primaire actuel. Cependant, la concentration en orthophosphates obtenue par la simulation est très faible, autour de 0,11 mgP/L (voir la Figure A4.2 dans l'Annexe 4). Cette faible concentration risque de causer une carence en phosphore pour le traitement par biofiltration et donc produire une consommation supplémentaire d'acide phosphorique (si l'injection de H_3PO_4 pour la biofiltration est activée). Pour cette raison, le taux de chlorure ferrique actuellement utilisé ne semble pas adapté au traitement primaire en 2022.

En considérant que la clarification tertiaire sera en service en 2022, le traitement primaire pourra effectuer une déphosphatation partielle. Les orthophosphates résiduels en sortie de biofiltration pourront être enlevés par les clarificateurs tertiaires. Dans ce cas-ci, une plage plus faible a été proposée pour le dosage de $FeCl_3$ pour la décantation primaire prévue en 2022. Concrètement, pour les jours de temps sec, le taux de $FeCl_3$ proposé est de 25 g/m^3, tandis que

pour les jours affectés par des événements de pluie, le taux est diminué à 15 g/m^3 afin de prendre en compte la diminution de la concentration en PO_4^{3-} en entrée. Pour rappel, cette plage de dosage proposée (15-25 g/m^3) correspond à l'hypothèse basée sur les tests de scénarios de dosage de $FeCl_3$ présentée au Chapitre 5 (section 5.3.5).

La Figure 7.6 montre la concentration en orthophosphates simulée sous la plage de dosage de chlorure ferrique proposée. En temps sec, la concentration simulée par le modèle (autour de 0,8 mgP/L) est en général supérieure à celle en sortie de la double décantation. En temps de pluie, les résultats de simulation obtenus sont proches des observations actuelles. La concentration moyenne en orthophosphates simulée (0,67±0,23 mgP/L) est supérieure à celle en sortie de traitement primaire actuel. Dans ce cas-ci, la concentration en orthophosphates est en général suffisante pour le traitement par biofiltration en aval des futurs décanteurs et les orthophosphates résiduels en sortie de biofiltration pouvent être enlevés par les clarificateurs tertiaires disponibles en temps sec (voir section 7.2.3).

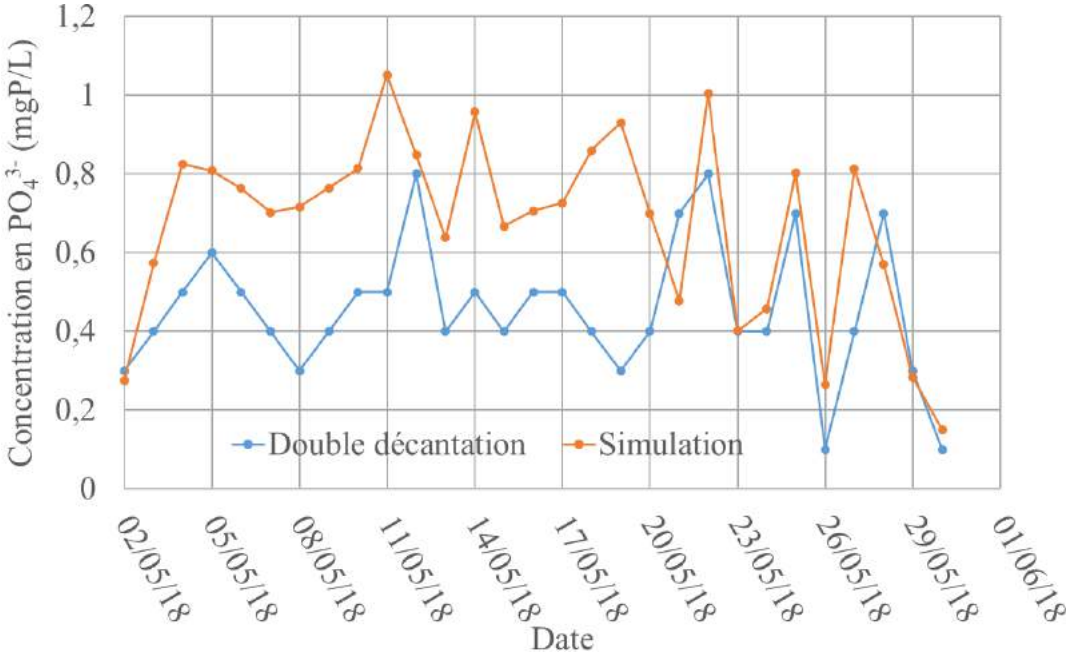


Figure 7.6 Résultats de simulation de la concentration en orthophosphates en sortie de la décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie du traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018.

Concernant l'enlèvement de la DCO et des MES, les concentrations moyennes en sortie simulées (MES : 41,5±10,5 mg/L, DCO : 118,9 ±22,9 mgO_2/L) avec le dosage de chlorure ferrique proposé demeurent similaires par rapport à celles obtenues avec le dosage utilisé par la station. Ces résultats de prédiction sont attendus et correspondent à ceux obtenus par le test de scénario effectué lors de la construction du modèle de décanteur primaire. Tel que montré aux Figure 7.7 et Figure 7.8, pour les jours en temps sec, les concentrations en DCO et en MES en sortie simulées par le modèle avec le dosage de chlorure ferrique proposé, sont proches de

celles observées en sortie du traitement primaire actuel. En temps de pluie, comme plus des eaux prétraitées sont prévues d'être traitées par le traitement primaire en 2022, la DCO et les MES en sortie prédites par le modèle sont plus faibles que celles observées après la double décantation.

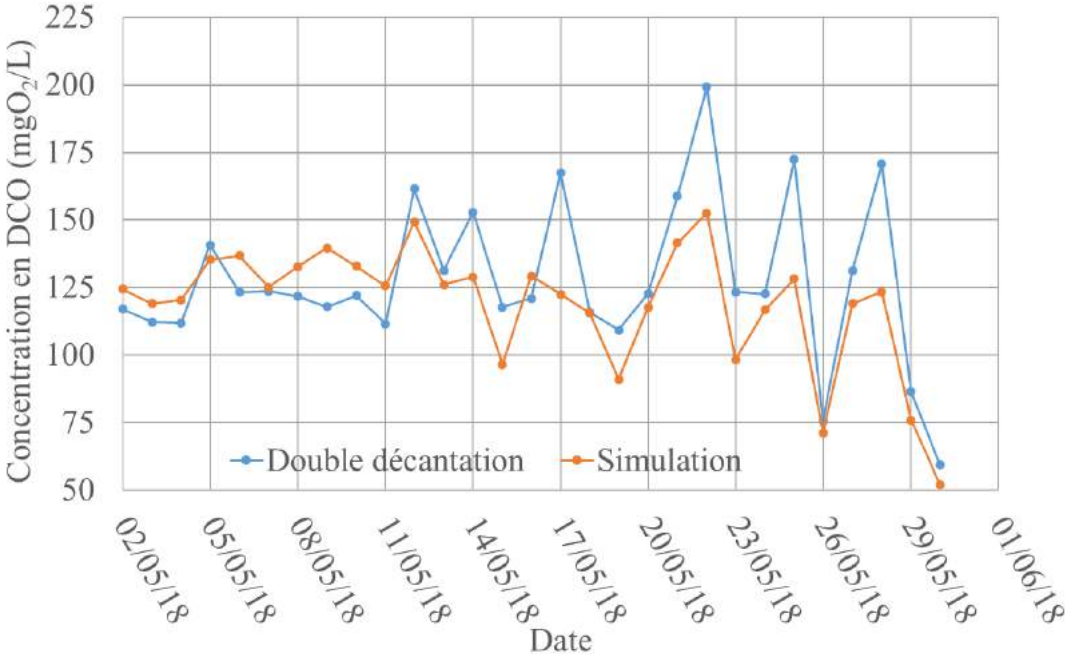


Figure 7.7 Résultats de simulation de la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie de traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018.

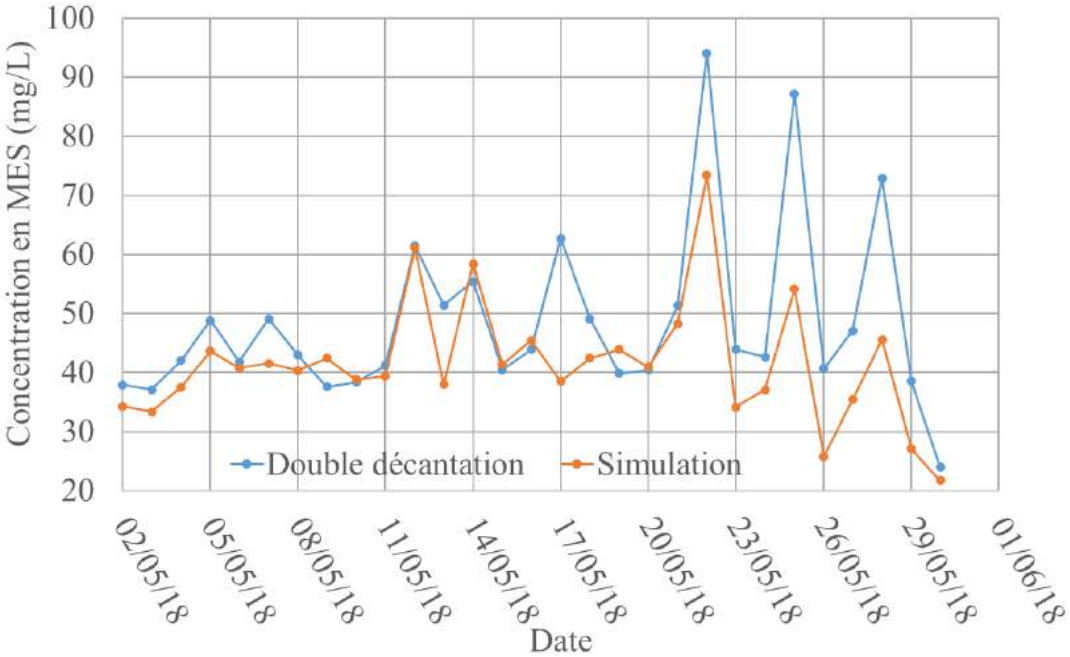


Figure 7.8 Résultats de simulation de la concentration en MES en sortie de la décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie de traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018.

Ces résultats de prédiction obtenus indiquent que le taux de chlorure ferrique proposé pour la

configuration de traitement en 2022 est adapté aux besoins de traitement de la station après la modernisation. Premièrement, par rapport au dosage actuel utilisé à la station, il évite de produire une trop faible concentration en orthophosphates en sortie qui risque de causer une carence en phosphore pour le traitement biologique (biofiltration) qui suit. Deuxièmement, le traitement des particules est renforcé en temps de pluie, ce qui permet de réduire le risque potentiel de colmatage des biofiltres pre-dénitrifiants.

7.2.1.2. Evaluation des réponses des commandes de la distribution des eaux prétraitées et du nombre de décanteurs actifs

Pour valider les règles proposées, les résultats de prédiction de la distribution des eaux prétraitées sont récupérés et comparées avec celle effectuée dans la station. Pour rappel, ces règles sont établies en fonction des configurations de traitement primaire prévues en 2022 et la consigne de débit instantané pour la filière BRM actuellement utilisée par la station.

Tel que montré aux Figures 7.9a et b, les débits attribués à la filière biofiltration et à la filière BRM selon le modèle sont en général proches de ceux mesurés à la station. Par contre, de temps en temps, des surestimations de débit des eaux prétraitées envoyées à la filière BRM ont été observées. Il est probable que pour ces moments, il y avait une indisponibilité d'un équipement ou une maintenance pour la filière BRM qui font que le débit théorique de la filière ne pouvait pas être traité. Dans ce cas-ci, le débit transporté vers la filière biofiltration a été augmenté, ce qui peut expliquer les erreurs entre les observations et la prédiction.

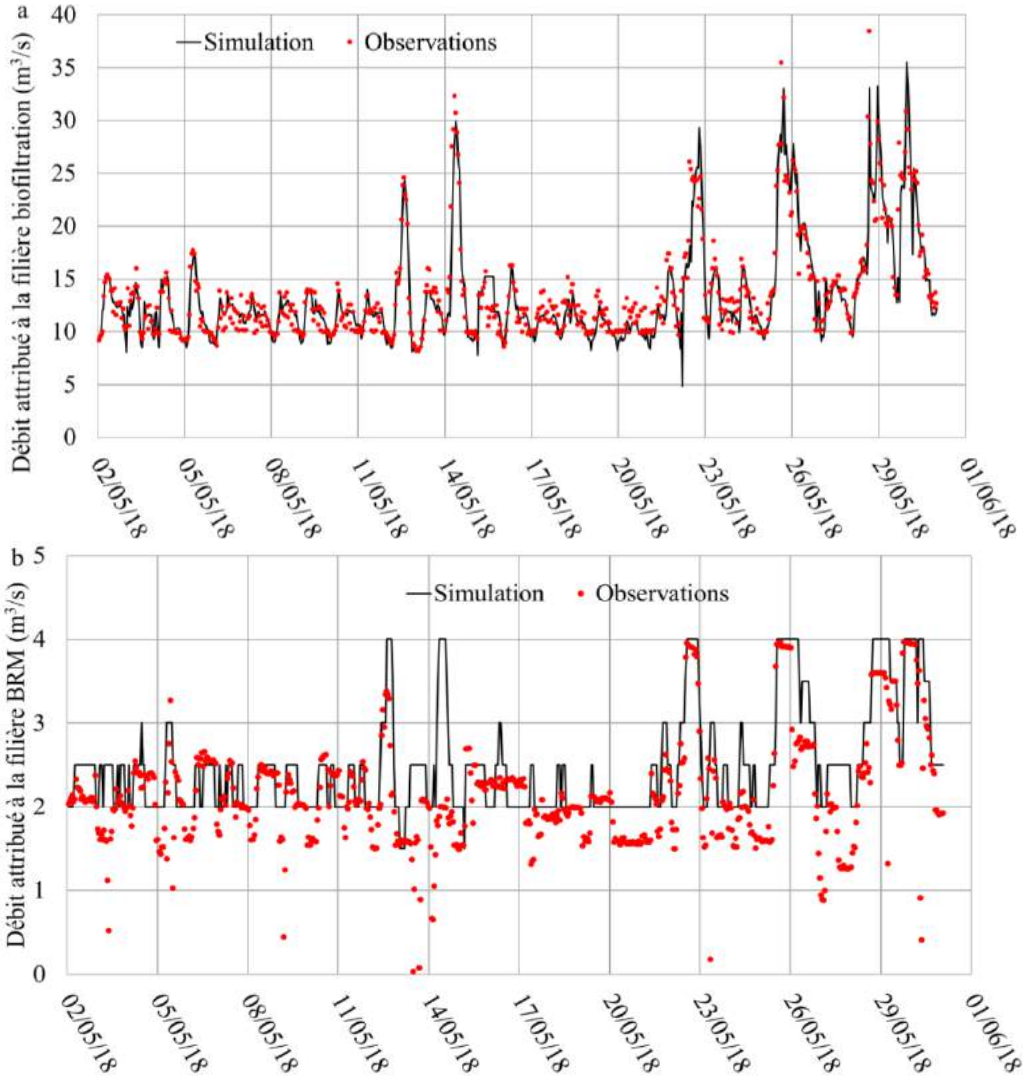


Figure 7.9 Résultats de simulation des débits des eaux prétraitées attribués à la filière biofiltration et BRM pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Les différences moyennes absolues (score MAE) entre les débits simulés et ceux observés pour les filières biofiltration et BRM sont de 1,1 m^3/s (moyenne observée : 13,6 m^3/s) et de 0,4 m^3/s (moyenne observée : 2,2 m^3/s), respectivement. Elles sont toutes les deux inférieures à 20% des valeurs moyennes observées. Ces résultats indiquent que les règles proposées pour la distribution des eaux prétraitées entre les filières de traitement sont réalistes.

Le nombre de décanteurs actifs prédit par le modèle et le débit des eaux prétraitées attribué à la filière biofiltration sont tracés à la Figure 7.10. Tel que montré à la figure, lorsque le débit des eaux prétraitées est inférieur ou égal à 26 m^3/s, le nombre de décanteurs prédit varie en fonction du débit. Dans le cas contraire, le nombre de décanteurs actifs est fixé à 22, ce qui signifie que les clarificateurs tertiaires fonctionnent en mode primaire. Ces réponses de la commande correspondent aux règles de commande conçues pour le modèle filière. Par contre, comme les futurs décanteurs ne sont pas encore mis en route, il n'y pas de moyen de valider ces règles avec les données d'exploitation réelles de la station.

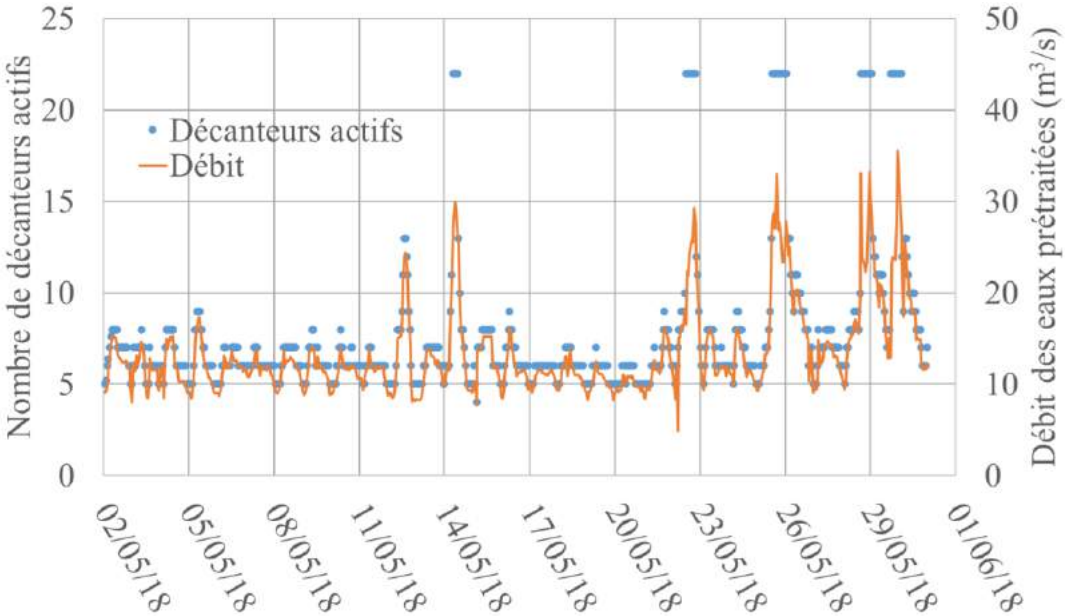


Figure 7.10 Résultats de simulation sur la variation du nombre de décanteurs réactifs (points bleus) pour la filière biofiltration en fonction du débit des eaux prétraitées attribué (ligne orange).

7.2.2. Tests pour évaluer la performance de prédiction sur le traitement par biofiltration du modèle filière

La qualité de l'eau décantée simulée avec l'ajustement du dosage de chlorure ferrique proposé est utilisée comme données d'entrée pour vérifier la performance de prédiction des trois étages de biofiltration. Pour ces simulations, les valeurs des paramètres utilisées par les commandes de procédé sont fixées aux valeurs en vigueur à la station pour la période du 2 au 30 mai 2018 lorsqu'elles sont disponibles, et à celles prévues par le projet de BioSAV autrement. La qualité de l'eau et les réponses de certaines commandes simulées pour chaque étage de biofiltration sont comparées soit avec les mesures issues de la station (cas de la pré-dénitrification et de la nitrification), soit avec la performance prévue issue de la documentation du projet BioSAV (cas de la post-dénitrification). Considérant que les différences entre la qualité de l'eau décantée simulée et celle observée peuvent influencer les résultats de prédiction, la qualité de l'eau simulée est comparée plutôt avec les mesures journalières pour vérifier les niveaux des polluants prédits. En revanche, vu que les réponses des commandes comme la distribution de l'eau entre les étages sont moins influencées par la qualité de l'eau décantée (concentrations en MES et en DCO), les mesures horaires sont utilisées pour évaluer les dynamiques rapides liées aux réponses de commandes simulées par le modèle. Durant les tests de simulation, quelques paramètres, qui ont déjà été calibrés lors de la construction des modèles de procédés individuels, ont dû être réajustés pour les adapter aux changements des dimensions des biofiltres simulés et aux conditions d'exploitation.

7.2.2.1. L'étage de pré-dénitrification

- **Choix des valeurs de paramètres pour les commandes de l'étage de pré-dénitrification**

Le Tableau 7.4 résume les valeurs des paramètres choisies pour les commandes de l'étage de pré-dénitrification. Selon les informations d'exploitation pour la période du 2 au 30 mai 2018, les trois batteries de l'étage étaient en service et le nombre moyen journalier de biofiltres disponibles des batteries étaient de 18,7, 18,3 et 17,2, respectivement. Dans ce cas-ci, dans le modèle filière, le nombre total de biofiltres disponibles pour la pré-dénitrification ($N_{Pré}$) est fixé à 55, ce qui est proche de la somme réelle des trois batteries (54,2). Le taux de recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-dénitrification du modèle attribué à la commande ($Taux_{rec,u}$) est pris comme celui effectué par les exploitants de la station pour la période du 2 au 30 mai 2018. Pour les jours de temps sec dans la période du 2 au 30 mai 2018, les exploitants ont utilisé un taux de recirculation autour de 70%. Ce taux a été beaucoup diminué pendant les événements de pluie (autour de 5% à 30%). Les paramètres $Charge_{Méthanol,pré}$ et $v_{max,pré}$ du modèle qui servent à estimer le nombre de biofiltres pré-dénitrifiants, ont été fixés à 0,6 kgN/m^3/j et 9,5 m/h,

respectivement (voir Tableau 7.4). Ces deux valeurs correspondent à la charge volumique moyenne en NO_x^- et la vitesse moyenne de filtration appliquée pour les biofiltres pré-dénitrifiants pour la période du 2 au 30 mai 2018.

Tableau 7.4 Valeurs des paramètres choisies pour les commandes de l'étage de pré-dénitrification du modèle filière.

Paramètre de commande pour l'étage de pré-dénitrification	Symbole	Valeur
Nombre de biofiltres disponibles pour l'étage	$N_{Pré}$	55
Taux de recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-dénitrification défini par l'utilisateur	$Taux_{rec,u}$	Données d'exploitation de la station
Rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever pour la pré-dénitrification	$Taux_{Méthanol,pré}$	0,75 g/gN
Consigne de la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de pré-dénitrification	$NO_x^-{}_{consigne,pré}$	1,3 gN/m^3
Critère de la vitesse de filtration pour un biofiltre pré-dénitrifiant	$v_{max,pré}$	9,5 m/h
Critère de la charge volumique en NO_x^- pour un biofiltre pré-dénitrifiant	$Charge_{max,pré}$	0,6 kgN/m^3/j
Facteur de correction d'injection de H_3PO_4	$F_{H3PO4,\ pré}$	2,8 (-)
Consigne de la concentration en PO_4^{3-} en entrée de l'étage de nitrification	$PO_4^{3-}{}_{,consigne,nit}$	0,3 gP/m^3

Pour les moments où l'injection de méthanol est arrêtée à la station, le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever pour l'étage est fixé à 0 g/gN.

Pour la commande d'injection du méthanol, selon les informations fournies par les exploitants de la station, la consigne de la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage est fixée à 1,3 gN/m^3. Cette valeur est attribuée au paramètre $NO_x^-{}_{consigne,pré}$ de la commande. Tel que montré à la Figure 7.11, pour la période du 2 au 30 mai 2018, le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever appliqué pour la batterie B de l'étage est toujours supérieur à ceux pour les batteries A et C. D'ailleurs, vers la fin de la période, une diminution du rapport des trois batteries, surtout pour la batterie B, a été observée. Cette diminution est liée à l'arrêt d'injection du méthanol lorsque la recirculation de l'eau nitrifiée est fortement réduite. Etant donné que le modèle filière représente la performance moyenne des trois batteries de l'étage, en considérant que tous les biofiltres pré-dénitrifiants sont opérés de manière identique, la valeur du paramètre $Taux_{Méthanol,pré}$ du modèle filière a été variée de la manière suivante :

1) Pour les moments où le méthanol est injecté, la valeur du paramètre est fixée à 0,75 g/gN. Cette valeur correspond au rapport moyen appliqué pour les trois batteries des jours sans arrêt d'injection du méthanol pendant la période du 2 au 30 mai 2018.

2) Pour les moments où l'injection du méthanol est arrêtée, la valeur de $Taux_{Méthanol,pré}$ est fixée à 0 g/gN.

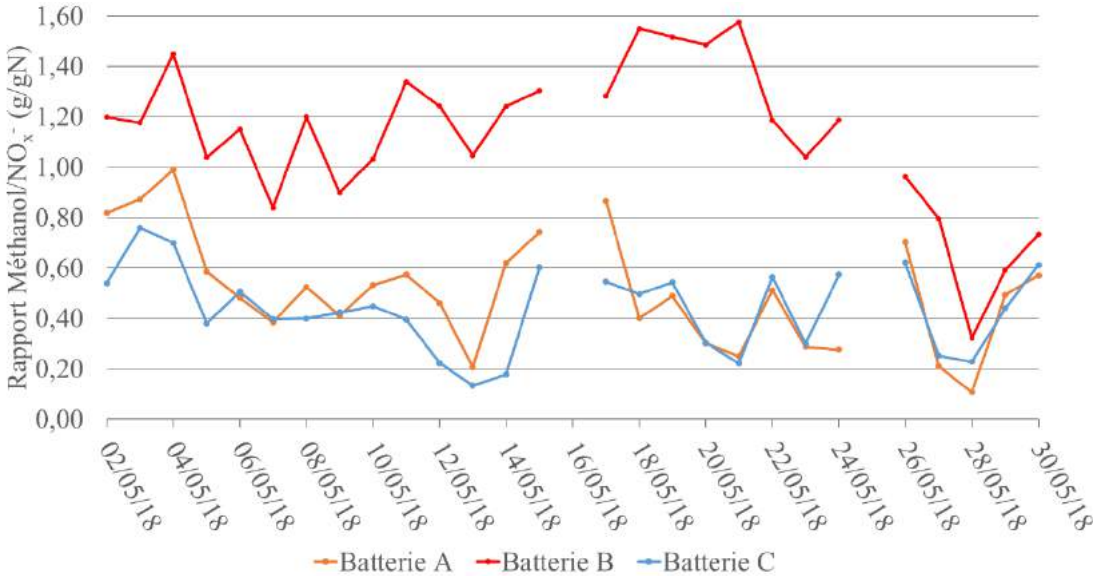


Figure 7.11 Rapports méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever appliqués par les exploitants de la station pour les trois batteries de l'étage pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018.

Enfin, les valeurs des paramètres liées à la commande d'injection de l'acide phosphorique en tête de l'étage de pré-dénitrification ($F_{H3PO4,\ pré}$ et $PO_4^{3-}{}_{consigne,nit}$) sont fixées à 2,8 et 0,3 mgP/L, respectivement. Pour rappel, la commande d'injection de l'acide phosphorique considérée par le modèle est différente par rapport à celle initialement prévue pour la filière. Il n'y a donc pas de référence disponible pour ces deux paramètres. On a donc fait des tests de simulation sur les valeurs pour ces deux paramètres. Selon les résultats obtenus, les valeurs 2,8 (pour F_{H3PO4}) et 0,3 mP/L (pour $PO_4^{3-}{}_{consigne,nit}$) fonctionnaient bien car elles permettent d'éviter une carence importante des orthophosphates pour les étages de biofiltration et de ne pas produire trop d'orthophosphates résiduels en sortie du traitement par biofiltration.

- **Evaluation de la qualité de l'eau simulée et des réponses des commandes de l'étage de pré-dénitrification**

La Figure 7.12 montre les résultats de simulation du NO_x^- (somme des nitrates et nitrites) en sortie de l'étage de pré-dénitrification et les compare avec les mesures de la station. Pour la plupart du temps, le niveau de la concentration en nitrate en sortie prédit par le modèle (2,20±1,09 mgN/L) est proche de celui observé sur l'étage de pré-dénitrification (2,19±0,36 mgN/L). Les différences entre les résultats de simulation et les observations se trouvent principalement entre le 15 et le 20 mai. Pour le 15, le 17 et le 19 mai, la concentration en DCO en sortie du traitement primaire simulée est inférieure à celle observée en sortie de la double décantation (voir Figure 7.7). Dans ce cas-ci, il est possible que la DCO biodégradable en entrée de l'étage de post-dénitrification dans le modèle soit inférieure à celle observée, ce qui limite

la vitesse de dénitrification et donc crée des différences entre la simulation et les observations.

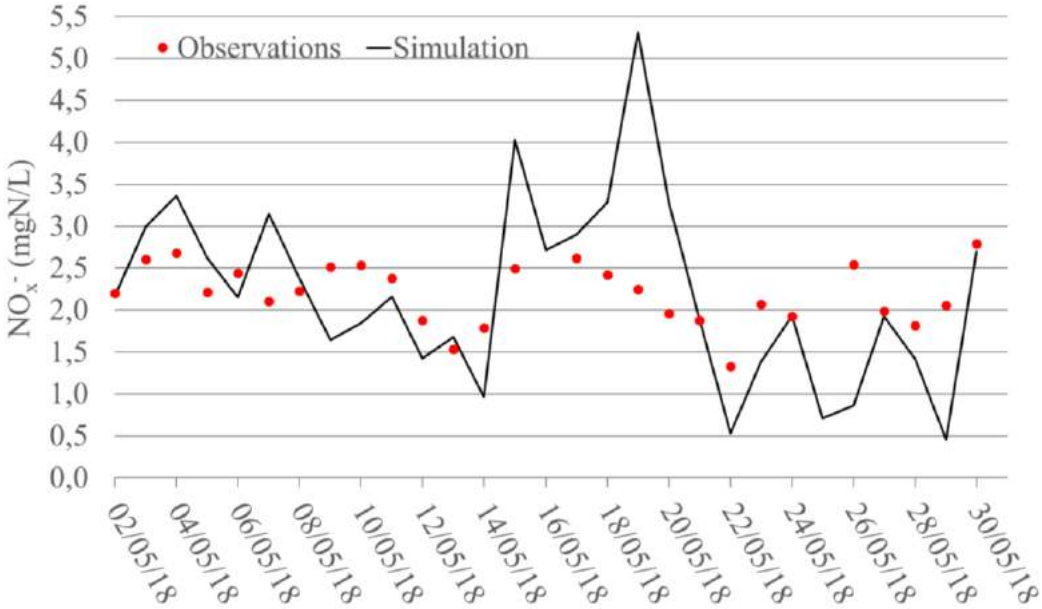


Figure 7.12 Résultats de simulation de la concentration en NO_x^- en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Les concentrations en DCO et en MES simulées sont également proches de celles observées en sortie de l'étage (voir Figure 7.13 et Figure 7.14). Cependant, pour le 22 et le 28 mai, les concentrations simulées sont plus faibles que les observations. Ces différences sont aussi liées aux différences entre la qualité de l'eau décantée simulée pour les décanteurs futurs et celle en sortie de la double décantation actuelle (voir Figure 7.7 et Figure 7.8). Les autres résultats de simulation sur la qualité de l'eau en sortie de l'étage de pré-dénitrification sont résumés au Tableau A4.1 de l'Annexe 4.

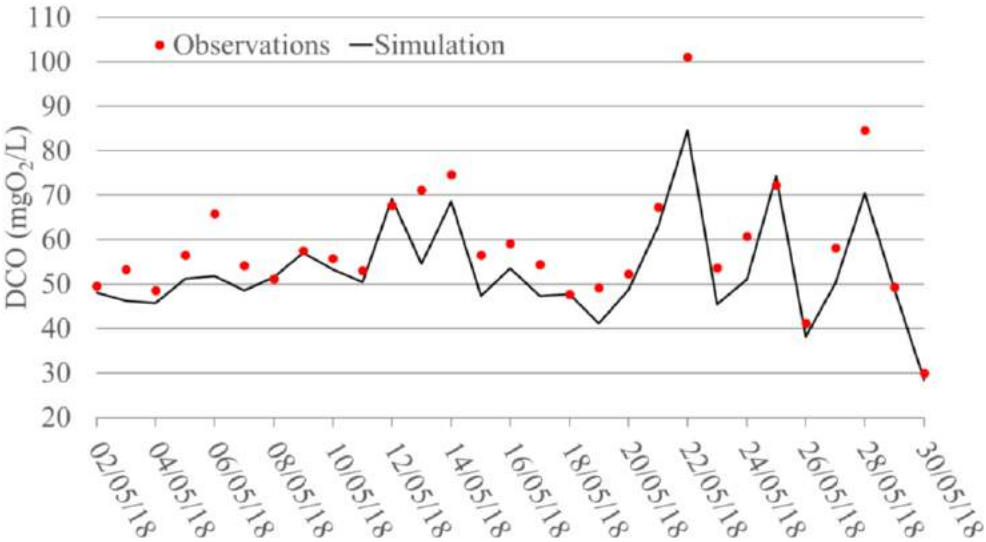


Figure 7.13 Résultats de simulation de la concentration en DCO en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

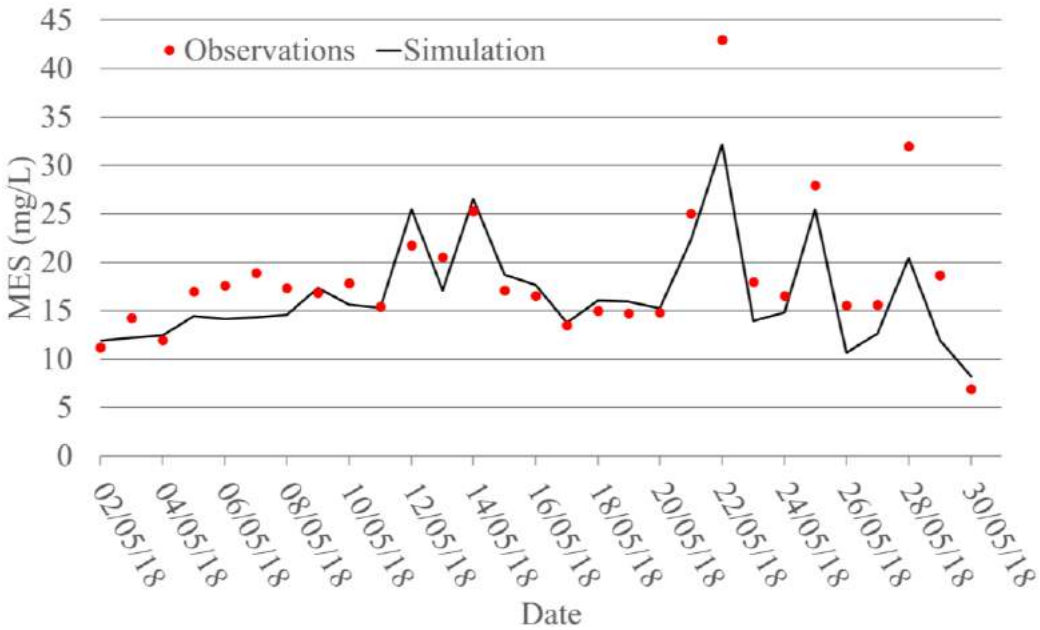


Figure 7.14 Résultats de simulation de la concentration en MES en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Pour obtenir ces résultats de simulation, quelques paramètres calibrés lors du développement du modèle en pré-dénitrification sur le procédé de la station Seine Grésillons ont été ajustés légèrement (voir Tableau 7.5). Premièrement, le facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie ($\eta_{YOHO,\ Ax}$) a été diminué. En effet, les bactéries méthylotrophes sont probablement abondantes dans les biofiltres de Seine Aval à cause de l'injection de méthanol, ce qui n'est pas le cas pour la station Seine Grésillons. Dans ce cas-ci, le comportement des bactéries dénitrifiantes dans les biofiltres pré-dénitrifiants est différent (Takács *et al.*, 2007; de Barbadillo *et al.*, 2009). Deuxièmement, la concentration en MES observée en sortie de l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval est plus élevée que celle de la station Seine Grésillons (autour 5-10 mg/L). Les deux paramètres liés à la filtration (β et λ_0) sont réduits afin de diminuer l'efficacité de filtration.

Tableau 7.5 Paramètres réajustés pour l'étage de pré-dénitrification du modèle filière par rapport au modèle de la biofiltration en pré-dénitrification développé.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur calibrée	Valeur réajustée
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,87	0,78
Facteur d'empilement du média	β	-	2,89	1
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,6	0,4

Les réponses de la commande de débit en entrée de l'étage de pré-dénitrification sont récoltées et comparées avec les conditions d'exploitation réelles de la station. Tel que montré à la Figure 7.15, le niveau et les variations observées sur le débit de recirculation de l'eau nitrifiée vers

l'étage de pré-dénitrification sont bien reproduits par le modèle. Une bonne performance de prédiction est également obtenue pour la commande du débit total (eau décantée + eau nitrifiée recirculée) envoyé à l'étage de biofiltration (voir Figure 7.16).

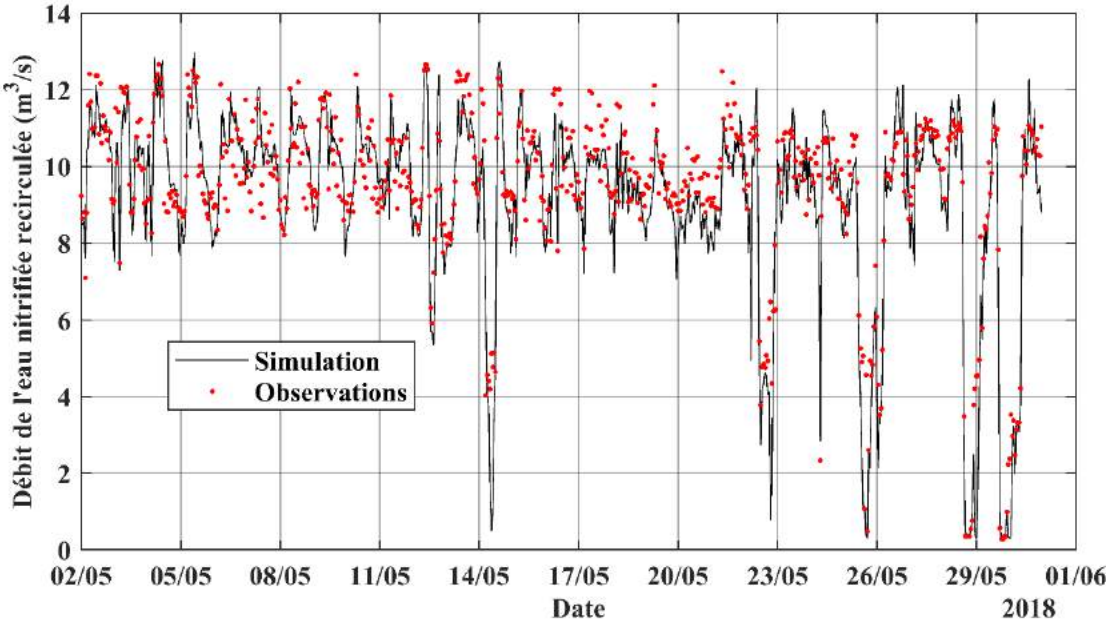


Figure 7.15 Résultats de simulation du débit de l'eau nitrifiée recirculée vers l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

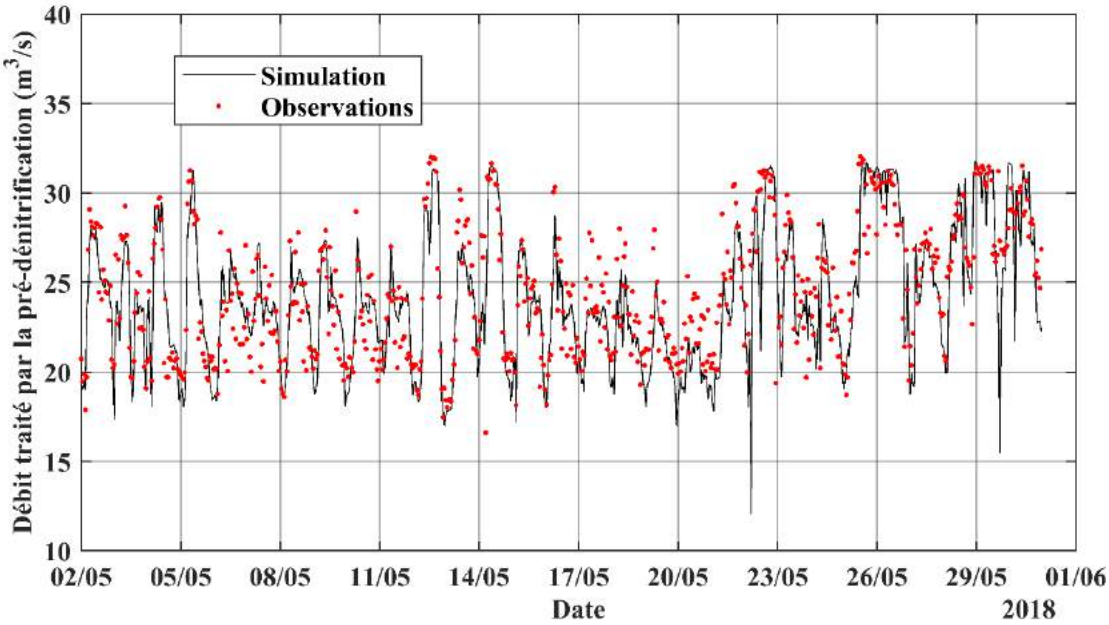


Figure 7.16 Résultats de simulation du débit traité par l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Les scores MAE obtenus pour la prédiction de ces deux types de débit sont de 0,76 m^3/s (moyenne observée : 9,47 m^3/s) et 1,73 m^3/s (moyenne observée : 24,52 m^3/s), respectivement. Les erreurs observées sont probablement liées en partie aux écarts sur la prédiction des eaux

prétraitées entre les deux filières de la station précédemment mentionnés, ce qui peut influencer le débit des eaux décantées en entrée de l'étage de pré-dénitrification. En temps de pluie, quelques by-pass d'eau décantée vers l'étage de nitrification ont été effectués à la station, comme, par exemple, le 14, le 25, le 28 et le 29 mai. Ces by-pass ont aussi été identifiés par le modèle.

Enfin, le nombre de biofiltres actifs simulé pour l'étage de pré-dénitrification est évalué. Pour la période étudiée, le nombre moyen de biofiltres actifs prédit par le modèle est de 52,7 (±3,5 biofiltres, N=696) ce qui est proche de celui en vigueur à la station (53,4±2,3 biofiltres). Le score MAE obtenu est de 2,97 biofiltres.

7.2.2.2. L'étage de nitrification

- **Choix des valeurs des paramètres pour les commandes de l'étage de nitrification**

Le Tableau 7.6 résume les valeurs des paramètres choisies pour la commande du nombre de biofiltres actifs et celui de l'aération pour l'étage de nitrification. La commande du nombre de biofiltres a été construite avec les données de l'année 2018. Comme les résultats de prédiction obtenus sont proches des observations de la station, les valeurs des paramètres $v_{max,nit}$, $Charge_{max,nit}$ et $N_{biofiltre,\ nit}$ ont été conservées. Pour les jours du 2 au 13 mai 2018, les six batteries de l'étage étaient en fonctionnement presque tout le temps. A partir du 14 mai 2018, le nombre de batteries en fonctionnement diminue à cinq. Dans ce cas-ci, le nombre de biofiltres nitrifiants maximum disponible (N_{nit}) dans le modèle est fixé à 81 (3 biofiltres en lavage) pour les premiers 12 jours simulés, tandis que pour les 17 jours restants le nombre est fixé à 68 (14 biofiltres sont considérés en arrêt et 2 en lavage).

Tableau 7.6 Valeurs des paramètres choisies pour les commandes de l'étage de nitrification du modèle filière.

Paramètre de commande pour l'étage de nitrification	Symbole	Valeur
Critère de la vitesse de filtration pour un biofiltre nitrifiant	$v_{max,nit}$	7,14 m/h
Critère de la charge volumique en NH_4^+ pour un biofiltre nitrifiant	$Charge_{max,nit}$	0,94 kgN/m^3/j
Nombre de biofiltres nitrifiants disponibles pour l'étage	N_{nit}	81 et 68
Besoin en air par rapport à la charge en NH_4^+ utilisé par la commande anticipative	k_a	78 Nm^3/kgN-NH_4^+
Consigne de la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de nitrification	$C_{NH4,set}$	0,5-1,5
Débit d'air compensatoire par batterie	k_b	54000 m^3/j
Besoin en air par rapport à la charge en NH_4^+ utilisé par la commande rétroactive	k_{fb}	111 Nm^3/kgN-NH_4^+
Constante F_1 pour la commande rétroactive	F_1	3
Coefficient de lissage pour la commande rétroactive	λ	1

Les valeurs fixées pour les paramètres de commande d'aération pour l'étage de nitrification sont issues directement ou calculées des données d'exploitation de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018. Pour cette période étudiée, la consigne de la concentration en ammonium en sortie de l'étage était fixée principalement à 1,5 mgN/L par les exploitants de la station. Une diminution de cette consigne de 1,5 à 0,5 mgN/L a été observée pour la période du 26 au 29 mai.

- **Evaluation de la qualité de l'eau simulée et des réponses de commandes de l'étage de nitrification**

Tel que montré à la Figure 7.17, pour les jours de temps sec, les résultats de prédiction de la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de nitrification se trouve entre les mesures laboratoire et les données moyennes des capteurs installés en sortie des batteries. En revanche, en temps de pluie, la capacité de nitrification simulée par le modèle est plus élevée que celle observée. Tel qu'expliqué précédemment, l'eau décantée simulée par le modèle pour les jours de temps de pluie contient moins de DCO et des MES que ce qui est observé. Dans ce cas-ci, les eaux envoyées à l'étage de nitrification (l'eau pré-dénitrifiée et l'eau décantée by-passée) ont moins de matières biodégradables que les observations, ce qui limite l'activité hétérotrophe dans l'étage. La capacité de nitrification prédite par le modèle est donc plus élevée que celle observée, puisque plus d'oxygène dissous est disponible pour la biomasse autotrophe qui réalise la nitrification.

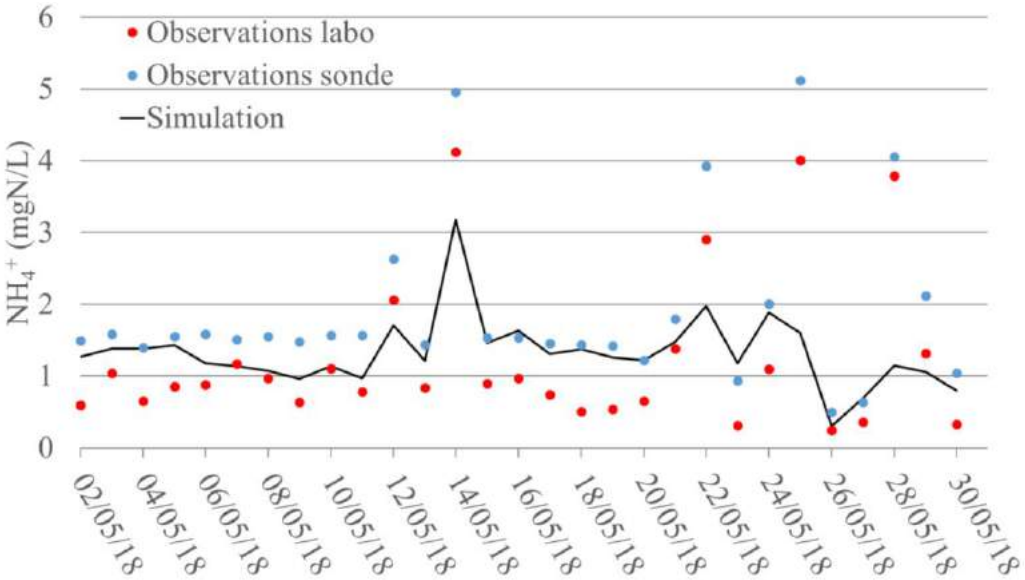


Figure 7.17 Résultats de simulation de la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations issues de la mesure laboratoire de la station ; points bleus : observations issues de capteurs).

Le niveau des nitrates en sortie simulés par le modèle est proche de celui observé (voir Figure 7.18). Les différences entre la simulation et les observations sont inférieures à 5 mgN/L. Les variations des nitrites en sortie de l'étage sont aussi reproduites par le modèle, mais le niveau prédit est surestimé par rapport aux mesures (voir Figure 7.19) (moyenne observée : 0,26 mgN/L, moyenne simulée : 0,41 mgN/L). Cette surestimation de la concentration en nitrites est probablement liée à la sous-estimation de la dénitrification à l'intérieur du biofilm dans le modèle. Les autres résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de l'étage de nitrification sont résumés au Tableau A4.2 de l'Annexe 4.

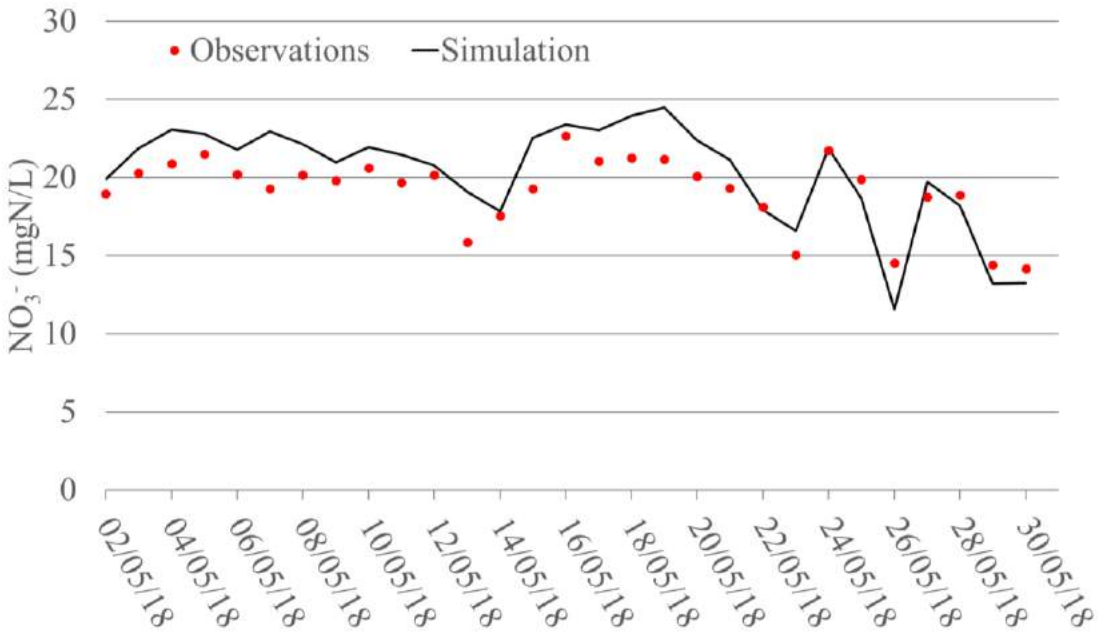


Figure 7.18 Résultats de simulation de la concentration en NO_3^- en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

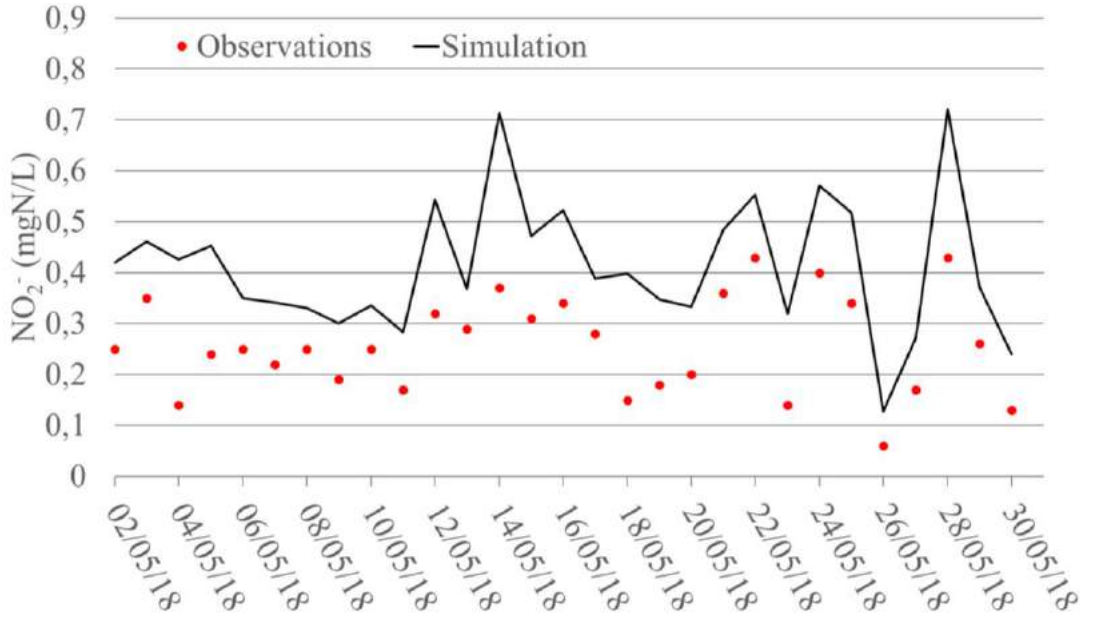


Figure 7.19 Résultats de simulation de la concentration en NO_2^- en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Le débit d'air calculé par la commande est comparé avec celui effectivement injecté dans l'étage de nitrification. Tel que montré à la Figure 7.20, en temps sec, le débit simulé par le modèle est généralement proche de celui observé à la station. En temps de pluie, par exemple les jours entre le 25 et le 28 mai, les pics de débit d'air injecté durent plus longtemps que ceux simulés. Encore une fois, cette différence est liée aux faibles concentrations en DCO et en MES en sortie prédites pour les décanteurs futurs par rapport à la double décantation actuelle. Ceux-ci réduisent la vitesse de croissance hétérotrophe simulée au niveau de l'étage de nitrification.

Comme il y a moins de concurrence pour l'oxygène dissous entre les biomasses hétérotrophe et autotrophe, la concentration en NH_4^+ en sortie simulée est plus proche de la consigne de NH_4^+ en sortie pour la commande d'aération (0,5 mgN/L) que celle mesurée (voir Figure 7.17). Dans ce cas-ci, la commande d'aération du modèle prédit que les biofiltres ont besoin de moins d'air que celle effectuée à la station.

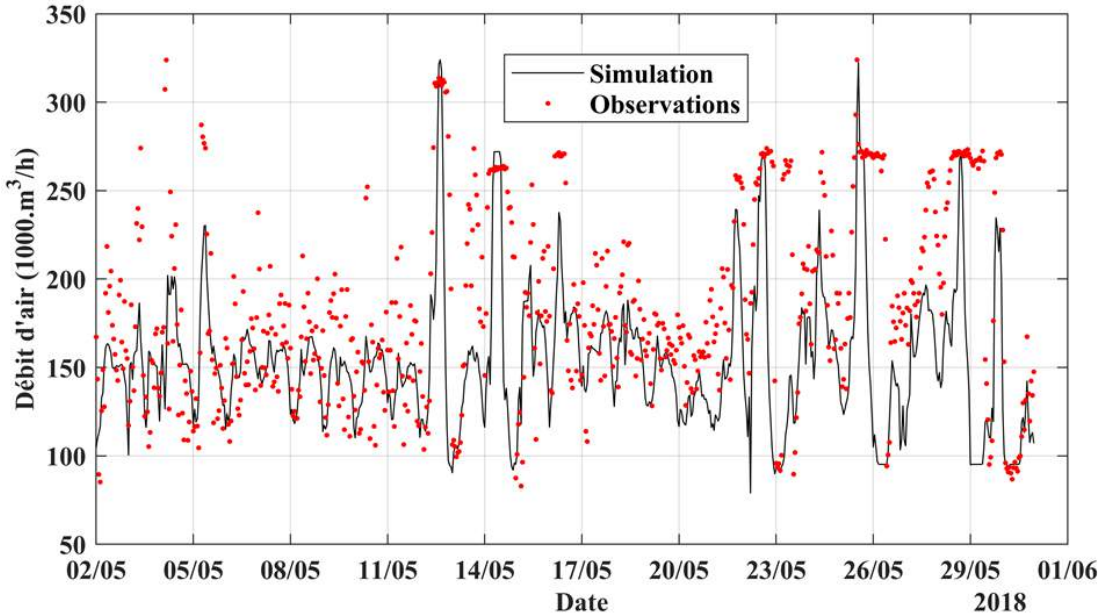


Figure 7.20 Résultats de simulation du débit d'air pour l'étage de nitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations).

Enfin, le nombre moyen de biofiltres actifs prédit pour l'étage de nitrification est de 70,5, ce qui est proche de celui utilisé à la station (moyenne : 73,5 biofiltres ; MAE : 4,16 biofiltres, N=696).

7.2.2.3. L'étage de post-dénitrification

- **Choix des valeurs des paramètres pour les commandes de l'étage de post-dénitrification**

Tel que présenté précédemment, à cause du souci de colmatage des biofiltres, la capacité de traitement de l'étage de post-dénitrification n'est pas encore arrivée à celle attendue du projet BioSAV. Selon les données d'exploitation de la station, pour les jours entre le 2 et le 30 mai 2018, seulement 3-7 biofiltres (12 au total) ont été en service. Dans ce cas-ci, les valeurs des paramètres régulant le by-pass de l'eau nitrifiée ($v_{max,post}$ et $Charge_{max,post}$) vers la clarification tertiaire et l'injection du méthanol pour les biofiltres post-dénitrifiants ($Taux_{Méthanol,post}$ et $NO_x^-{}_{consigne,post}$) sont issues de la documentation du projet BioSAV. Comme cet étage n'a qu'une batterie, le nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs (N_{post}) est fixé à 11 en considérant qu'il y a toujours un biofiltre en maintenance ou lavage. Les valeurs choisies pour les paramètres d'injection d'acide phosphorique de l'étage de post-dénitrification sont identiques à celles pour l'étage de pré-dénitrification. Le Tableau 7.7 résume les valeurs des paramètres fixées pour les commandes de l'étage de post-dénitrification du modèle filière.

Tableau 7.7 Valeurs des paramètres choisies dans le test pour les commandes de l'étage de post-dénitrification du modèle filière.

Paramètre de commande pour l'étage de post-dénitrification	Symbole	Valeur
Vitesse de filtration maximum pour un biofiltre post-dénitrifiant	$v_{max,post}$	15,2 m/h
Charge volumique maximum en NO_x^- pour un biofiltre post-dénitrifiant	$Charge_{max,post}$	2,6 kgN/m^3/j
Rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever pour l'étage de post-dénitrification	$Taux_{Méthanol,post}$	3 g/gN
Consigne de concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification	$NO_x^-{}_{consigne,post}$	2 gN/m^3
Nombre de biofiltres post-dénitrifiants actifs	N_{Post}	11
Facteur de correction d'injection de H_3PO_4	$F_{H3PO4,\ pré}$	2,8 (-)
Consigne de concentration en PO_4^{3-} en sortie de l'étage de post-dénitrification	$PO_4^{3-}{}_{,consigne,post}$	0,3 gP/m^3

- **Evaluation de la qualité de l'eau simulée et des réponses des commandes de l'étage de post-dénitrification**

Comme le fonctionnement de l'étage de post-dénitrification n'est pas en état « normal », les résultats de simulation sur la qualité de l'eau en sortie de l'étage sont comparés avec les concentrations prévues à cet endroit pour le cas du débit moyen en entrée de la station (1 250 000 m^3/j), issues de la documentation du projet BioSAV. Selon le design du projet, le débit et la concentration en NO_x^- en entrée de l'étage sont autour de 590 000 m^3/j et de 21,2 mgN/L, respectivement, valeurs qui sont proches de celles simulées par le modèle pour la période du 2 au 30 mai (débit moyen : 566 000 m^3/j et concentration moyenne en NO_x^- : 20,7 mgN/L).

En général, tel que résumé au Tableau 7.8, les niveaux de la plupart de variables en sortie de pré-dénitrification simulés correspondent à ceux prévus pour le projet BioSAV. La concentration en MES en sortie prédite par le modèle (6,25 mg/L) est inférieure à celle prévue (15 mg/L). Il est cependant à noter que selon la documentation du projet, l'enlèvement des MES n'est pas pris en compte dans les calculs de conception. La concentration en MES prévue en entrée d'étage est donc égale à celle en sortie. Cette simplification sera à valider lorsque le fonctionnement de l'étage de post-dénitrification redeviendra « normal ».

Tableau 7.8 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de l'étage post-dénitrification et celle prévue du projet BioSAV.

Variable	Unité	Simulation		Concentration prévue
		Moyenne	Ecart-type	
DCO	mgO_2/L	49,75	7,45	53,00
NO_x^-	mgN/L	2,67	0,54	2,00
NO_2^-	mgN/L	0,97	0,19	1,20
MES	mg/L	6,25	1,85	15
NH_4^+	mgN/L	0,69	0,42	0,50
PO_4^{3-}	mgP/L	0,32	0,06	0,50

Selon les résultats de simulation, la concentration moyenne en S_B en sortie de l'étage de post-dénitrification est autour de 19,2 mgO_2/L, ce qui est plus élevée que celle en sortie de l'étage de nitrification (2,3 mgO_2/L). Cette différence observée signifie que le modèle prédit qu' une partie du méthanol injecté dans les biofiltres post-dénitrifiants n'est pas dégradée (correspond à une DBO_5 d'environ 10 mg/L). Il est à noter que l'augmentation de la biodégradabilité après le traitement de post-dénitrification est aussi prévue pour le projet BioSAV. Selon la documentation du projet, par rapport à la sortie de l'étage de nitrification (DBO_5 prévue 13,5 mgO_2/L), une augmentation de la DBO_5 d'environ 5 mgO_2/L a été prise en compte pour la sortie des biofiltres post-dénitrifiants. Comme les MES en sortie de l'étage, ces résultats de simulation ainsi que les hypothèses faites pour la performance du traitement doivent être vérifiés lorsque

le fonctionnement de l'étage de post-dénitrification redeviendra « normal », car premièrement, le surdosage du méthanol peut conduire à une augmentation des coûts de traitement, et deuxièmement, la présence du méthanol dans le rejet de la station peut impacter la qualité de l'eau de la Seine.

Pour rappel, le modèle en post-dénitrification a été calibré et validé sur les biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre qui possèdent des dimensions différentes de ceux de la station Seine Aval. Pour obtenir les résultats de simulation montrés au Tableau 7.8, en plus des paramètres de dimension, certains paramètres ont été réajustés par rapport au modèle en post-dénitrification précédemment calibré (voir Tableau 7.9). En effet, avec les valeurs des paramètres calibrés, la concentration en MES en sortie de post-dénitrification simulée est supérieure à celle en sortie de la nitrification. Ce résultat « anormal » signifie que l'effet de détachement des particules estimé par le modèle est fort, ce qui est probablement lié à l'épaisseur du biofilm formé. Selon les données d'exploitation, la charge volumique en NO_x^- (2,6 kgN/m^3/j) et le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever (3 g/gN) considérés par le modèle filière pour l'étage de post-dénitrification sont plus élevés que ceux appliqués pour les biofiltres dénitrifiants de la station Seine Centre (charge volumique autour de 1,5 kgN/m^3/j, rapport méthanol/NO_x^- inférieur à 3 g/gN). Dans ce cas-ci, avec les mêmes valeurs de paramètres, la quantité de biomasse simulée dans un biofiltre post-dénitrifiant de la station Seine Aval est plus élevée que celle de la station Seine Centre, ce qui augmente l'épaisseur du biofilm. La fraction de biofilm enlevé pendant les lavages est donc augmentée pour diminuer l'épaisseur du biofilm et la quantité de biomasse présente dans les biofiltres. De plus, la masse volumique du biofilm est aussi beaucoup augmentée par rapport à celle calibrée, mais reste dans l'espace d'échantillonnage considérée lors de la calibration (133600 ± 50% gO_2/m^3). Ce changement permet de prendre en compte que le biofilm formé sous une charge volumique élevée soit plus dense que celui formé sous une charge faible. Ce changement permet aussi de diminuer l'épaisseur du biofilm simulé. Enfin, le facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie a également été ajusté pour compenser les impacts sur la quantité de la biomasse présente dans le biofiltre apportés par ces modifications.

Tableau 7.9 Paramètres réajustés pour l'étage de pré-dénitrification du modèle filière par rapport au modèle en post-dénitrification développé.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur calibrée	Valeur réajustée
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	108582	165000
Fraction de biofilm enlevé pendant un lavage	f_{Lavage}	%	13%	32%
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,72	0,5

Les résultats obtenus en sortie de traitement par biofiltration (mélange de l'eau nitrifiée et de l'eau post-dénitrifiée) sont comparés également avec la performance attendue pour le projet BioSAV (voir Tableau 7.10). Bien qu'il existe des différences concernant la qualité de l'eau décantée entre la simulation et les observations et des erreurs de prédictions accumulées issues de chaque procédé simulé, les niveaux des concentrations simulées sont proches de ceux prévus en sortie de traitement par biofiltration du projet BioSAV.

Tableau 7.10 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie du traitement par biofiltration (mélange de l'eau nitrifiée et de l'eau post-dénitrifiée) et celle prévue du projet BioSAV.

Variable	Unité	Simulation		Concentration prévue
		Moyenne	Ecart-type	
DCO	mgO_2/L	45,14	7,44	49,1
MES	mg/L	8,54	2,84	15
NO_x^-	mgN/L	10,95	1,22	11,3
NO_2^-	mgN/L	0,72	0,12	1,3
NH_4^+	mgN/L	0,98	0,47	1
PO_4^{3-}	mgP/L	0,35	0,08	-

7.2.3. Détermination du taux de chlorure ferrique pour la clarification tertiaire

Les résultats en sortie du traitement par biofiltration du modèle filière sont utilisés pour déterminer le taux de chlorure ferrique pour la clarification tertiaire du modèle filière. Comme le traitement primaire, la clarification tertiaire de la station n'est pas encore mise en route. Les informations liées à l'injection du chlorure ferrique ne sont donc pas encore disponibles. Dans ce cas-ci, il faut chercher un taux de chlorure ferrique adéquat pour les conditions d'exploitation du traitement tertiaire par tests de simulation. Pendant ces tests, la consigne de concentration en orthophosphates en sortie de la clarification ($PO_4^{3-}{}_{con,ter}$) a été fixée à 0,2 mgP/L, tandis que l'efficacité de déphosphatation estimée (E_{ter}) pour les clarificateurs est considérée égale à 80%. Ces deux valeurs de paramètre sont décidées à partir des observations disponibles lorsque les clarificateurs de la station Seine Aval ont fonctionné en mode tertiaire pour une période de test de 10 jours (concentration en sortie 0,2-0,3 mgP/L, taux d'enlèvement 80%-90%) (voir section 6.1.3).

Par rapport aux orthophosphates en entrée observés durant les 10 jours de test (1,78 mgP/L), la concentration en PO_4^- en sortie du traitement par biofiltration précédemment simulée est environ 5 fois plus faible (0,35 mgP/L). Dans ce cas-ci, les dosages de chlorure ferrique ($Taux_{FeCl3,Ter}$) testés sont plus faibles par rapport à celui utilisé pendant les 10 jours du test (28 mg/L). Le premier taux de chlorure ferrique testé est de 6 mg/L. Ce dosage est choisi en se basant sur le rapport entre les orthophosphates en entrée durant les 10 jours du test et ceux simulés en sortie de traitement par biofiltration. En considérant que sous le même rapport molaire Fe/P, la diminution de la concentration en orthophosphates en entrée peut faire réduire l'efficacité de déphosphatation, le deuxième taux de chlorure ferrique testé est de 10 mg/L afin d'accélérer la vitesse de réaction (Szabó *et al.*, 2008).

La Figure 7.21 montre les résultats de simulation obtenus pour la concentration en orthophosphates en sortie du traitement tertiaire avec les deux dosages de chlorure ferrique testés. Pour les jours en temps sec, la plupart de résultats obtenus avec un dosage de 10 mg/L arrive à la consigne demandée (0,2 mgP/L), tandis qu'avec un dosage de 6 mg/L, le modèle prédit que la consigne ne peut pas être respectée. Pour les jours de temps de pluie (par exemple le 14, le 22, le 25 et le 29 mai), les résultats obtenus sont plus élevés que la consigne pour les deux dosages testés. Tel que montré à la Figure 7.10, pour ces jours simulés, il y a des moments où les clarificateurs sont en mode de traitement primaire pour renforcer le traitement primaire en temps de pluie. Dans ce cas-ci, la déphosphatation tertiaire n'est pas activée par le modèle. La concentration en orthophosphates en sortie pour ces jours est donc supérieure à la consigne. Selon les résultats obtenus, le taux de chlorure ferrique de 10 mg/L s'accorde bien aux

conditions d'exploitation (orthophosphates en entrée et consigne demandée) prévues pour le traitement tertiaire.

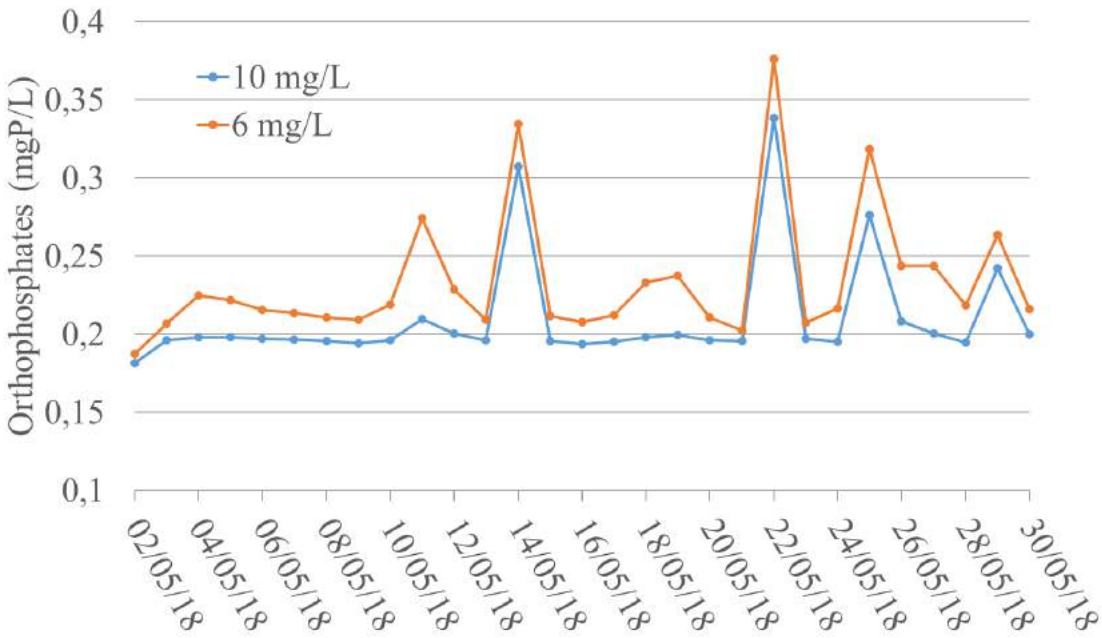


Figure 7.21 Résultats de simulation de la concentration en PO_4^{3-} en sortie du traitement tertiaire avec un dosage de $FeCl_3$ à 6 (ligne orange) et 10 mg/L (ligne bleue).

Le Tableau 7.11 résume les résultats de prédiction sur la qualité de l'eau en sortie du traitement tertiaire. Par rapport à la qualité de l'eau en sortie du traitement par biofiltration prédite par le modèle (DCO moyenne : 45.1 mgO_2/L ; MES moyenne 8,5 mg/L, voir Tableau 7.10), après la clarification tertiaire avec un dosage de chlorure ferrique de 10 mg/L, les concentrations en DCO et en MES diminuent d'environ 10% (voir Tableau 7.11).

Tableau 7.11 Résultats de simulation sur la qualité de l'eau en sortie de la filière biofiltration.

Variable	Unité	Simulation	
		Moyenne	Ecart-type
DCO	mgO_2/L	39,21	6,64
DCO biodégradable	mgO_2/L	15,26	2,49
MES	mg/L	7,90	2,42
NO_3^-	mgN/L	10,15	1,15
NO_2^-	mgN/L	0,71	0,13
NH_4^+	mgN/L	0,98	0,48
PO_4^{3-}	mgP/L	0,21	0,04

7.2.4. Conclusions sur les tests de simulation réalisés

En utilisant le scénario d'affluent généré, les taux de chlorure ferrique adéquats pour la décantation primaire et la clarification tertiaire ont été déterminés. Le taux de chlorure ferrique proposé pour les décanteurs futurs est faible par rapport à celui appliqué actuellement à la station. Par rapport au mode de décantation actuelle, la concentration en particules simulée par le modèle est plus faible en temps pluie. Par contre, à cause de la diminution de la dose de chlorure ferrique, le niveau simulé pour les orthophosphates en sortie augmente par rapport à celui mesuré. Selon les résultats de simulation, la baisse de la capacité de déphosphatation primaire peut être compensée par la clarification tertiaire avec un taux de chlorure ferrique de 10 g/m^3 testé. En fixant les valeurs des paramètres de commande des trois étages de biofiltration, la qualité de l'eau en sortie de chaque étage a été simulée et évaluée avec les données de mesures et/ou la qualité prévue selon le design du projet BioSAV. En général, les niveaux des polluants en sortie simulés pour chaque étage de biofiltration sont corrects. Les différences entre l'eau décantée simulée pour les décanteurs futurs et celle en sortie de la double décantation actuelle sont les sources principales impactant les résultats de simulation. Les valeurs de certains paramètres des modèles de pré- et post-dénitrification ont été réajustées pour adapter aux changements des dimensions et des conditions d'exploitation par rapport aux situations utilisées pour la construction des modèles. En plus de la qualité de l'eau en sortie de chaque étape de traitement, les réponses des commandes considérées sont également évaluées avec les données horaires issues de la station. A l'exception de la prédiction de l'aération qui est influencée par la qualité de l'eau simulée en entrée de l'étage, les débits attribués pour les différents procédés et le nombre de biofiltres actifs pour la pré-dénitrification et la nitrification sont correctement simulés.

Les résultats de ces tests de simulation montrent que le modèle peut en général simuler le fonctionnement futur de la filière biofiltration de la station. Il est donc prêt pour tester différents scénarios d'exploitation.

7.3. Analyses de scénarios d'exploitation

Après avoir vérifié la performance de prédiction du modèle filière et déterminé les taux de chlorure ferrique adaptés à la décantation primaire et à la clarification tertiaire, des analyses de scénarios d'exploitation ont été lancées. Six scénarios ont été testés et analysés avec le scénario d'entrée précédemment généré. Les résultats de simulation de ces scénarios sont comparés avec ceux précédement présentés à la section 7.2 (SC0). Pour réaliser une comparaison complète incluant non seulement la qualité de l'eau en sortie, mais aussi les coûts de traitement et les impacts environnementaux, différents critères d'évaluation de scénario ont été proposés.

7.3.1. Scénarios testés

Six scénarios d'exploitation ont été testés. Les deux premiers scénarios testent différents taux de recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-nitrification. Tel que présenté au Chapitre 2 (section 2.1.4.3), lorsque la source de carbone est suffisante, le changement du taux de recirculation peut influencer l'efficacité de l'enlèvement de NO_x^- pour l'étage de pré-dénitrification. Ce changement peut augmenter non seulement la charge en NO_x^- à traiter, mais aussi l'oxygène dissous en entrée. Cette dernière a un effet négatif sur la dénitrification étant un accepteur d'électrons préféré. Par rapport au test du fonctionnement du modèle filière (taux de recirculation autour de 70%), le premier scénario (SC1) recircule moins d'eau nitrifiée ($Taux_{rec,u}$ = 60%), tandis que pour le deuxième scénario (SC2), le taux de recirculation a été renforcé ($Taux_{rec,u}$=85%) (voir Tableau 7.12).

Le troisième et le quatrième scénarios (SC3 et SC4) modifient les consignes en sortie pour la commande de l'aération de l'étage de nitrification ($C_{NH4,set}$) et de l'injection du méthanol de l'étage de post-dénitrification ($NO_x^-{}_{consigne,post}$). Par rapport au scénario de base (SC0), le scénario 3 applique des consignes moins exigeantes, tandis que le scénario 4 demande de traiter plus de NH_4^+ et de NO_x^- afin d'atteindre des niveaux plus faibles en NH_4^+ et en NO_x^- (voir Tableau 7.12). Ces modifications des consignes peuvent influencer non seulement la qualité de l'eau en sortie de la filière, mais aussi les coûts de traitement et les impacts environnementaux.

Le cinquième scénario d'exploitation (SC5) renforce le traitement par pré-dénitrification en augmentant le rapport méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever de 0,75 à 1,5 g/gN pour cet étage. En même temps, pour limiter le niveau des nitrites en sortie, la charge volumique appliquée pour les biofiltres post-dénitrifiants est diminuée de 2,6 kgN/m^3/j à 2,2 kgN/m^3/j. Selon Rocher *et al.* (2011a), dans le cas des biofiltres de type Biofor®, il est difficile de maintenir la concentration en nitrite résiduel inférieur à 1 mgN/L, lorsque la charge volumique en nitrite en entrée se trouve entre 2,5-2,8 kgN/m^3/j.

Tableau 7.12 Scénarios d'exploitation testés et paramètres de commande modifiés par rapport au scénario de base.

Scénario	Opération	Paramètre concerné	Valeur testée	Valeur SC0
SC1	Diminution du taux de recirculation	$Taux_{rec}$	60 %	Autour de 70%
SC2	Augmentation du taux de recirculation	$Taux_{rec}$	85 %	Autour de 70%
SC3	Augmentation des consignes en sortie pour la nitrification et la post-dénitrification	$C_{NH4,set}$	4,5 gN/m^3	1,5 gN/m^3
		$NO_x^-{}_{consigne,post}$	6 gN/m^3	2 gN/m^3
SC4	Diminution des consignes en sortie pour la nitrification et la post-dénitrification	$C_{NH4,set}$	1,2 gN/m^3	1,5 gN/m^3
		$NO_x^-{}_{consigne,post}$	0,67 gN/m^3	2 gN/m^3
SC5	Amélioration du traitement par pré- et post-dénitrification	$Taux_{méthanol,\ pré}$	1,5 g/gN	0,75 g/gN
		$Charge_{post,max}$	2,2 kgN/m^3/j	2,6 kgN/m^3/j
SC6	Diminution du dosage de $FeCl_3$ en décantation primaire	$Taux_{FeCl3,pri}$	15 mg/m^3	15 et 25g/m^3

Enfin, le dernier scénario testé (SC6) diminue le taux de chlorure ferrique utilisé pour la décantation primaire ($Taux_{FeCl3,\ pri}$). Selon les résultats des jar-tests sur les eaux brutes de la station Seine Aval présenté au Chapitre 5 (voir Figure 5.4), l'efficacité de l'enlèvement des MES avec un dosage de $FeCl_3$ de 15 g/m^3 est proche de celui de 25 g/m^3 (autour de 85-90%), tandis que l'enlèvement des orthophosphates est beaucoup réduit par la diminution du dosage. Tel qu'expliqué précédemment, avec la mise en route de la clarification tertiaire, une déphosphatation du traitement primaire partielle peut être suffisante. Les orthophosphates restants peuvent être éliminés par les procédés biologiques ainsi que par la clarification tertiaire. Dans ce cas-ci, il est donc intéressant de tester les effets d'une diminution du taux de chlorure ferrique de la décantation primaire sur la performance de traitement de la filière. Ce scénario permet aussi d'évaluer s'il est plus efficace selon le modèle de faire un surplus d'injection de chlorure ferrique pour éliminer les orthophosphates en primaire ou en tertiaire.

7.3.2. Critères d'évaluation des scénarios

Tel que mentionné précédemment, afin de réaliser une évaluation complète des scénarios d'exploitation testés et de comparer leurs avantages et inconvénients, trois critères d'évaluation de scénario ont été proposés.

7.3.2.1. Qualité d'effluent

Le premier critère considéré est un indice de la qualité d'effluent (effluent quality index en anglais, EQI) qui évalue la qualité générale de l'eau en sortie de la filière biofiltration. Ce critère est calculé à partir des concentrations des polluants choisis, du débit en sortie de traitement ainsi que des poids attribués aux polluants (voir Eq 7.4) (Nopens *et al.*, 2010). Ces poids représentent l'importance de l'enlèvement des polluants du point de vue de la protection du milieu naturel recevant le rejet de la station.

Eq 7.4 $$EQI = \frac{1}{10^6 * t_{obs}} \int \sum(\beta_i * Polluant_i) * Q_{effluent}\, dt$$

où
EQI est l'indice de la qualité d'effluent (t/j)
β_i est le poids attribué au polluant i considéré (-)
$Polluant_i$ est la concentration du polluant i considéré (mg/L)
$Q_{effluent}$ est le débit d'eau en sortie de la filière biofiltration (m^3/j)
t_{obs} est la durée de la période étudiée (j)

Les polluants choisis à intégrer dans l'EQI et les poids attribués sont modifiés par rapport à ceux basés sur la sortie du modèle BSM2 trouvé dans la littérature (Nopens *et al.*, 2010) (voir Tableau 7.13) :

1) Comme le modèle ne simule pas la DBO_5 en sortie de la filière et comme la relation entre la DCO (ou la DCO biodégradable) et la DBO_5 en sortie en 2022 n'est pas encore connue, il est difficile d'estimer la DBO_5 en sortie à partir de la DCO ou la DCO biodégradable simulées. Pour cette raison, la DBO_5 considérée dans l'EQI proposée dans la littérature est remplacée par la DCO biodégradable ce qui peut être directement simulée par le modèle. Pour punir le surdosage du méthanol pour l'étage de post-dénitrification, le poids de la DCO biodégradable utilisé pour l'EQI (5, voir Tableau 7.13) est plus élevé que celui attribué à la DBO_5 (2) dans le modèle BSM2.

2) Le poids des MES pour l'EQI est diminué de 72 à 10. Par rapport aux procédés de traitement des eaux considérés dans le modèle BSM2 (boues activées et décantation conventionnelle)(Nopens *et al.*, 2010), les procédés de la filière biofiltration (biofiltration et décantation physico-chimique) permettent de traiter de manière très efficace les MES. Dans ce cas-ci, les MES en sortie de la filière sont constamment

faibles. En utilisant un poids important, il sera difficile à séparer les différents scénarios d'exploitation.

Tableau 7.13 Polluants et facteurs de poids du critère de l'EQI trouvés dans la littérature (Nopens et al., 2010) et ceux considérés pour comparer les scénarios proposés pour le modèle filière.

Polluant et facteur de poids trouvés dans la littérature (Nopens *et al.*, 2010)		Polluant et facteur de poids utilisés	
Polluant	Facteurs de poids	Polluant	Facteur de poids
DCO	1	DCO	1
DBO_5	2	DCO biodégradable	5
MES	72	MES	10
NTK	30	NH_4^+	30
NO_x^-	20	NO_3^-	10
		NO_2^-	20
		Orthophosphates	20

3) Le NTK considéré dans la littérature est remplacé par le NH_4^+. Ce dernier est un des polluants inclus dans les exigences de la Directive Cadre sur l'Eau (DCE) pour évaluer la qualité physico-chimique de la rivière (Diannoux *et al.*, 2017). Une autre raison pour ce remplacement est que la variable de sortie NTK inclut aussi les composants particulaires (en termes d'azote). Comme la présence de ces composants en sortie a été punie par la DCO et les MES, il n'y pas besoin d'une punition supplémentaire.
4) Le polluant NO_x^- considéré dans le modèle BSM2 pour le critère EQI est séparée en NO_3^- et NO_2^- pour le modèle filière. Comme le NH_4^+, ces deux polluants sont inclus dans les exigences DCE et sont donc intégrés dans le critère de l'EQI. Selon le suivi de la qualité de la Seine en aval de la station SAV effectué par le SIAAP, environ 25 % des concentrations en nitrite mesurées sont supérieurs à la limite supérieure de bon état définie par la DCE (0,3 mg/L) (Gonzalez et al., 2019), tandis que celles en nitrate se trouvent toujours dans la gamme de bon état (entre 10 et 50 mg/L). Dans ce cas-ci, le poids attribué au nitrite est supérieur à celui appliqué pour le nitrate afin de récompenser l'effort de la diminution des nitrites en sortie de la filière biofiltration.
5) Enfin, comme les procédés de déphosphatation par voie physico-chimique sont utilisés par la filière modélisée, les orthophosphates en sortie sont considérés dans le critère de l'EQI. Ce polluant est également inclus dans les exigences de la DCE sur la qualité physico-chimique de la rivière. Le poids attribue à ce polluant pour calculer l'indice EQI est 20 (Gernaey et Jørgensen, 2004).

Il est à noter que les valeurs de poids utilisées restent à vérifier, car certaines études proposent

différentes valeurs. Par exemple, pour le poids des orthophosphates, Solon *et al.* (2017) suggèrent d'utiliser un poids de 100 pour ce polluant, tandis que De Ketele *et al.* (2018) proposent d'appliquer un poids plus faible (20). Plus d'études sur la relation entre la composition des polluants dans le rejet de la station Seine Aval et la qualité de la rivière (la Seine) doivent être réalisées afin de vérifier et d'améliorer le choix des valeurs de poids pour évaluer la qualité de traitement de la filière biofiltration.

7.3.2.2. Coûts de traitement

Le deuxième critère d'évaluation est le coût de traitement représenté par l'indice des coûts d'opération (OCI, operational cost index en anglais)(Nopens *et al.*, 2010). Cet indice est calculé en divisant la somme des différents coûts de traitement considérés et présentés à la section 6.2.1.2 par la durée de la période étudiée (t_{obs}) (voir Eq 7.5). Les prix unitaires (réactifs et électricité) à utiliser pour le calcul ont aussi déjà été présentés à la section 6.2.1.2.

Eq 7.5 $$OCI = \left(Coût_{Méthanol} + Coût_{FeCl3} + Coût_{H3PO4} + Coût_{pompage} + Coût_{aération}\right)/t_{obs}$$

où
OCI est l'indice des coûts d'opération (€/j)
$Coût_{Méthanol}$, $Coût_{FeCl3}$ et $Coût_{H3PO4}$ sont les coûts de consommation du méthanol, du $FeCl_3$ et du H_3PO_4, respectivement (€).
$Coût_{pompage}$ et $Coût_{aération}$ sont les coûts de la consommation de l'électricité pour le pompage et l'aération, respectivement (€).

7.3.2.3. Empreinte carbone

Comme ce qui a été proposé par Flores-Alsina *et al.* (2014), les émissions des gaz à effet de serre (GHG) de la filière biofiltration sont inclues comme le troisième critère d'évaluation. L'empreinte CO_2 est calculée à partir des différents types d'émissions considérés et présentés au Chapitre 6 (section 6.2.2.2) (voir Eq 7.6).

Eq 7.6 $$GHG_{émission} = \left(M_{CO2,N2O} + M_{CO2,électricité} + M_{CO2,réactifs}\right)/t_{obs}$$

où
$GHG_{émission}$ est l'émission journalière des gaz à effet de serre de la filière biofiltration (tCO_2/j)
$M_{CO2,N2O}$ est l'équivalent en CO_2 lié au N_2O émit par la filière biofiltration (tCO_2)
$M_{CO2,électricité}$ est les émissions indirectes des gaz à effet de serre (exprimées en équivalents CO_2) liées à la consommation d'électricité (tCO_2)
$M_{CO2,réactifs}$ est les émissions indirectes des gaz à effet de serre (exprimées en équivalents CO_2) liées à la consommation des réactifs (tCO_2)

7.3.3. Résultats obtenus

La Figure 7.22 montre les résultats des indicateurs EQI, OCI et $GHG_{émission}$ obtenus pour chaque scénario testé et le Tableau 7.14 synthétise les concentrations moyennes des polluants en sortie de la filière simulée. Les résultats de simulation obtenus sur la qualité de l'eau en sortie de chaque étape de traitement de la filière biofiltration peuvent être trouvés dans l'Annexe 4 (voir Tableau A4.3-Tableau *A4.7*).

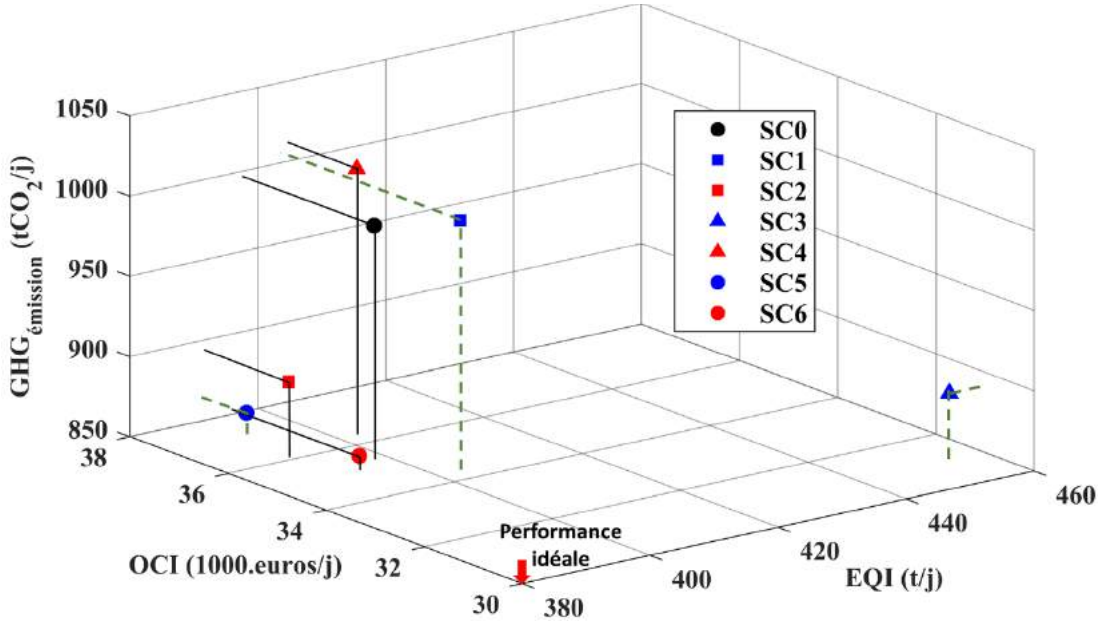


Figure 7.22 L'EQI, l'OCI et les émissions de gaz à effet de serre obtenus pour chaque scénario testé.

Par rapport au scénario de base (SC0, le point noir à la Figure 7.22), la diminution du taux de recirculation de l'eau nitrifiée vers l'étage de pré-dénitrification permet de réduire les coûts de traitement (SC1, le carré bleu à la Figure 7.22) de 35400 euros/j à 34400 euros/j (voir Tableau 7.14). Cette réduction est liée à la diminution du débit d'eau à recirculer ainsi que du méthanol injecté dans l'étage de pré-dénitrification. Cependant, comme il y a une limite sur la capacité de traitement de l'étage de post-dénitrification, la réduction de dénitrification au niveau de l'étage de pré-dénitrification ne peut pas être compensée, ce qui augmente la concentration en nitrates en sortie (de 10,15mgN/L à 10,48 mgN/L). Pour cette raison, ce choix d'opération fait augmenter légèrement l'indice EQI. De plus, il conduit aussi à une émission supplémentaire de N_2O (environ 12 tCO_2/j), ce qui augmente légèrement les émissions totales des gaz à effet (de 995 tCO_2/j à 1005 tCO_2/j).

En revanche, lorsque le taux de recirculation monte à 85% de l'eau décantée, ce qui engendre une augmentation des coûts (SC2, le carré rouge à la Figure 7.22), une importante diminution des émissions des gaz à effet de serre d'environ 10% est observée (de 995 tCO_2/j à 898 tCO_2/j), ce qui est plutôt liée à la réduction des émissions de N_2O (de 945 tCO_2/j à 847 tCO_2/j). La raison derrière cette réduction sera discutée en détail plus loin dans cette section. A cause des

diminutions légères des concentrations en nitrite, en MES et en DCO en sortie, l'indice d'EQI obtenu pour ce choix d'opération diminue d'environ 2% (de 398 t/j à 390 t/j). Pour obtenir ces améliorations en termes de la qualité de l'eau en sortie et des impacts environnementaux, une augmentation d'environ 2% des coûts de traitement est demandée par rapport au scénario de base (de 35400 €/j à 36100 €/j). Ce changement en termes des coûts de traitement est lié aux augmentations du débit de l'eau nitrifiée à recirculer et du méthanol à injecter au niveau de l'étage de pré-dénitrification. Ces changements de conditions d'exploitation font augmenter aussi les émissions indirectes des gaz à effet de serre de la filière (de 50,3 tCO_2/j à 51,1 tCO_2/j). Cependant, vue que le choix d'opération de ce scénario permet de diminuer largement les émissions de N_2O, cette augmentation est négligeable.

Tableau 7.14 L'EQI, l'OCI et les émissions de gaz à effet de serre obtenus pour chaque scénario testé et les concentrations moyennes des polluants en sortie de la filière simulée (cellules en orange : valeurs maximales ; cellules en vert : valeurs minimales).

	Unités	**SC0**	**SC1**	**SC2**	**SC3**	**SC4**	**SC5**	**SC6**
EQI	t/j	398	404	390	456	403	392	395
OCI	1000.€/j	35,4	34,4	36,1	31,2	36,4	37,2	35,2
$GHG_{émission}$	tCO_2/j	995	1005	898	889	1015	864	857
[1]$GHG_{indirecte}$	tCO_2/j	50,3	48,7	51,1	44,4	51,7	52,8	49,7
DCO	mgO_2/L	39,21	39,58	38,84	34,94	41,24	37,85	35,48
DCO_{bio}	mgO_2/L	15,26	15,44	15,02	11,80	17,12	13,88	14,35
MES	mg/L	7,90	8,20	7,69	7,47	7,98	7,97	8,41
NH_4^+	mgN/L	0,98	0,98	0,99	2,98	0,83	1,12	0,99
NO_3^-	mgN/L	10,15	10,48	9,88	9,66	10,20	9,87	10,10
NO_2^-	mgN/L	0,71	0,66	0,71	1,83	0,54	0,69	0,69
PO_4^{3-}	mgP/L	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21	0,21

[1]$GHG_{indirecte}$: émissions de gaz à effet de serre issues des consommations d'électricité et de réactifs, en autres mots, sans émissions de N_2O.

Le troisième scénario (SC3, le triangle bleu à la Figure 7.22) peut réduire en même temps, et de façon importante, les coûts et les émissions de gaz à effet de serre. Cependant, comme ce scénario applique des consignes moins exigeantes pour les étages de nitrification et de post-dénitrification, l'EQI obtenu est d'environ 15 % supérieur à celui du scénario de base (SC0 : 398 t/j ; SC3 : 456 t/j).

Contrairement au SC3, le quatrième scénario (SC4, le triangle rouge à la Figure 7.22) demande à diminuer les concentrations en NH_4^+ et en NO_x^- en sortie des deux derniers étages, ce qui fait augmenter les coûts de traitement et les émissions des gaz à effet de serre. Bien que selon les résultats de simulation (voir Tableau 7.14), les concentrations en NH_4^+ et en NO_2^- diminuent par rapport au scénario de base, à cause de l'augmentation de la DCO en sortie, l'indice EQI ne peut pas être amélioré. Cette augmentation est liée au surdosage du méthanol ajouté dans l'étage de post-dénitrification. Selon les résultats de simulation (voir Tableau 7.14), les concentrations en NH_4^+ et en NO_2^- en sortie de la filière diminuent par rapport au scénario de base. Cependant, comme c'est déjà le cas pour le scénario de base, le modèle prédit qu'il y a du méthanol résiduel en sortie de l'étage de post-dénitrification (environ 10 mg/L, voir section 7.2.2.3). En demandant moins de NO_x^- en sortie (SC4), plus de méthanol est injecté aux biofiltres post-dénitrifiants, ce qui fait augmenter la DCO en sortie ainsi que l'indice EQI.

Comme le deuxième scénario d'exploitation (SC2), le renforcement du traitement de la dénitrification (SC5, le point bleu à la Figure 7.22) permet aussi de diminuer l'EQI et les émissions de gaz à effet de serre avec une augmentation des coûts de traitement.

Enfin, selon les résultats obtenus, la diminution du dosage de $FeCl_3$ pour le traitement primaire (SC6, le point rouge à la Figure 7.22) n'a pas un effet évident sur la qualité de l'eau en sortie ni sur les coûts de traitement. Selon les résultats de simulation obtenus (voir Tableau A4.3 dans l'Annexe 4), les concentrations moyennes en DCO (121 mgO_2/L) et en MES (43 mg/L) en sortie du traitement primaire de ce scénario sont proches de celles du scénario de base (DCO moyenne : 119 mgO_2/L; MES moyenne : 41,5 mg/L), tandis que celles des orthophosphates augmentent de 0,67 à 1,22 mgP/L. Ces résultats sont attendus. Tel que présenté au Chapitre 5, pour le dosage de $FeCl_3$ entre 10 à 30 mg/L, le taux d'enlèvement des orthophosphates est plus sensible au changement du taux de $FeCl_3$ que ceux de la DCO et des MES. De plus, la concentration en orthophosphates en sortie de ce scénario est identique à celle du scénario de base (0,21 mgP/L). Ce résultat de simulation indique que la baisse d'enlèvement des orthophosphates peut être compensée pleinement par le traitement biologique et la clarification tertiaire. De plus, par rapport au scénario de base, ce choix d'opération fait diminuer l'émission de gaz à effet de serre d'environ 15% sans influence sur les coûts de traitement. Tel que montré au Tableau 7.14, l'impact apporté par ce choix d'opération sur les émissions indirectes de gaz à effet de serre est très mineur (SC6 : 49,7 tCO_2/j ; SC0 50,3 tCO_2/j), ce qui signifie que la diminution des émissions de gaz à effet de serre totales ($GHG_{émission}$) observée (autour de 140 tCO_2/j) est plutôt liée à la réduction des émissions de N_2O. La raison derrière de cette réduction sera discutée en détails dans les sections suivantes.

Les résultats des tests de scénario montrent que les choix d'exploitation de la filière peuvent

influencer simultanément la qualité d'effluent, les coûts de traitement et les émissions de gaz à effet de serre. Il faut donc trouver un compromis entre ces trois critères afin d'atteindre un mode de traitement durable pour la filière (Flores-Alsina *et al.*, 2011; 2014). Tel que résumé au Tableau 7.14, les émissions indirectes dues aux consommations de réactifs et de l'électricité ne représentent que 5%-6% des émissions totaux. Cette observation indique que l'émission de N_2O est la source principale des émissions de gaz à effet de serre de la filière biofiltration. En supposant que les résultats de prédiction obtenus soient proches de la performance de traitement de la station en 2022, la diminution du N_2O est le choix prioritaire à considérer pour réduire les impacts environnementaux de la station. Dans ce cas-ci, les résultats de simulation en détail des scénarios SC2, SC5 et SC6 (voir Tableau 7.15), qui permettent de diminuer les émissions du N_2O sans influence évidente sur la qualité de l'eau en sortie de la filière, sont étudiés afin d'identifier les raisons de la limitation des émissions de N_2O de ces scénarios.

Tableau 7.15 Résultats de simulation de la qualité de l'eau (concentrations moyennes) en sortie des trois étages de biofiltration et les émissions de N_2O au niveau de l'étage de nitrification.

Traitement	Variable	SC0	SC2	SC5	SC6
Pré-dénitrification	S_B (mgO_2/L)	10,0	9,2	11,9	10,0
	NO_2^- (mgN/L)	0,23	0,25	0,15	0,23
	NO_3^- (mgN/L)	1,97	2,46	0,56	1,91
	N_2O (mgN/L)	0,060	0,064	0,034	0,059
	PO_4^{3-} (mgP/L)	0,51	0,51	0,50	0,91
Nitrification	S_B (mgO_2/L)	2,3	2,3	2,3	2,3
	NH_4^+ (mgN/L)	1,33	1,32	1,43	1,34
	NO_2^- (mgN/L)	0,41	0,39	0,44	0,39
	NO_3^- (mgN/L)	20,3	19,9	18,7	20,3
	N_2O (mgN/L)	0,091	0,081	0,077	0,074
	PO_4^{3-} (mgP/L)	0,40	0,40	0,38	0,73
	Gaz N_2O (tN/j)	1,93	1,73	1,66	1,65
Post-dénitrification	S_B (mgO_2/L)	19,17	18,77	17,26	18,99
	NO_2^- (mgN/L)	0,97	0,97	0,93	0,95
	NO_3^- (mgN/L)	1,70	1,68	1,40	1,65
	N_2O (mgN/L)	0,023	0,023	0,022	0,022
	PO_4^{3-} (mgP/L)	0,32	0,32	0,32	0,59
	[1]$N_2O_{biofiltration}$ (mgN/L)	0,07	0,06	0,06	0,06

[1]$N_2O_{biofiltration}$ est la concentration moyenne en N_2O en sortie du traitement par biofiltration (mélange de l'eau du by-pass de la post-dénitrification et de l'eau post-dénitrifiée).

Tel que présenté précédemment, le scénario SC2 augmente le taux de recirculation de l'eau

nitrifiée vers l'étage de pré-dénitrification. Selon les résultats montrés au Tableau 7.15, par rapport au scénario de base, les concentrations en NO_3^-, en NO_2^- et en N_2O en sortie des biofiltres pré-dénitrifiants augmentent. En effet, en recirculant plus de l'eau nitrifiée, la charge en oxygène dissous en entrée de l'étage de pré-dénitrification augmente, ce qui influence la performance de la dénitrification (Water Environment Federation, 2010a). Bien que le renforcement de la recirculation conduit à une augmentation de la concentration en N_2O en sortie de l'étage de pré-dénitrification, l'émission de N_2O au niveau de l'étage de nitrification n'est pas augmentée. En revanche, par rapport au scénario de base, une diminution de cette émission est observée (voir Tableau 7.15). La raison derrière cette diminution est que le renforcement de la recirculation fait augmenter la charge hydraulique des biofiltres nitrifiants, ce qui diminue l'épaisseur de la couche limite entre la phase liquide et le biofilm. Dans ce cas-ci, la diffusion de l'oxygène dissous de la phase liquide au biofilm nitrifiant est favorisée, ce qui permet de réduire la production de N_2O pendant la nitrification (Kampschreur *et al.*, 2009; Bollon *et al.*, 2016b). De plus, l'augmentation du taux de recirculation des eaux nitrifiées diminue la concentration en NH_4^+ en entrée de l'étage de nitrification, ce qui peut aussi influencer négativement l'émission de N_2O (Bollon *et al.*, 2016b).

Dans le scénario SC5, le rapport du méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever pour l'étage de pré-dénitrification est augmenté, ce qui permet de réaliser une dénitrification plus complète que celle du scénario de base. La concentration en N_2O en sortie est ainsi diminuée de 0,06 à 0,034 mgN/L. Comme le N_2O issu de l'étage de pré-dénitrification peut être émis dans l'air au niveau de l'étage de nitrification à cause de fort échange gaz-liquide, la diminution de N_2O en sortie de l'étage de pré-dénitrification peut réduire partiellement les émissions de N_2O pour l'étage de nitrification. De plus, par rapport au scénario de base, la DCO soluble biodégradable (S_B) en sortie de l'étage de pré-dénitrification de SC5 augmente légèrement, ce qui favorise la croissance de la biomasse hétérotrophe présente dans les biofiltres nitrifiants. Bien que la concentration en NO_2^- (facteur important conduisant à la production de N_2O) augmente légèrement au niveau de l'étage de nitrification, il semble que cette croissance supplémentaire de la biomasse hétérotrophe accélère aussi la dénitrification présente au fond du biofilm, ce qui élimine une partie du N_2O produit (Fiat, 2019). Enfin, la concentration de NO en entrée de l'étage de nitrification est aussi diminuée (de 0,009 à 0,007 mgN/L) à cause de l'augmentation du dosage méthanol. Cependant, considérant le niveau de ce composant, l'effet de cette diminution sur l'émissions du N_2O est considéré négligeable.

Tel que mentionné précédemment, le scénario SC6 diminue le taux d'enlèvement des orthophosphates en sortie du traitement primaire. Selon les résultats obtenus, ces orthophosphates supplémentaires n'influencent pas la production de N_2O au niveau de l'étage de pré-dénitrification. Par contre, les concentrations en N_2O et en NO_2^- dans l'effluent de l'étage

de nitrification ainsi que le gaz N_2O émit par cet étage diminuent. Par rapport au scénario de base, l'étage de nitrification du scénario SC6 consomme plus d'orthophosphates. Ces observations indiquent que les orthophosphates présents en entrée de l'étage de nitrification du SC0 sont suffisant pour réaliser la nitrification avec la biomasse autotrophe présente dans les couches de surface du biofilm. Par contre, dans les couches profondes du biofilm, il existe probablement une carence en phosphore qui limite la dénitrification hétérotrophe. En augmentant la concentration en PO_4^{3-} en entrée de l'étage de nitrification (cas du SC6), la dénitrification est accélérée, ce qui diminue l'émission de N_2O.

Enfin, selon les résultats de simulation obtenus, ces trois scénarios testés n'ont pas d'effet évident sur la concentration en N_2O en sortie de l'étage de post-dénitrification.

Considérant les coûts de traitement et la complexité d'opération, parmi ces trois scénarios permettant de réduire l'émission de N_2O, le choix d'opération proposé par le scénario SC6 (diminution du taux de $FeCl_3$ pour le traitement primaire) semble le choix optimal. Il est à noter que les facteurs liés à l'émission de N_2O, comme, par exemple la carence en PO_4^{3-} pour la dénitrification, sont identifiés à partir de résultats de simulation. Il faut donc vérifier si ces facteurs sont bien réels considérant les mesures sur site de la qualité de l'eau et l'émission de N_2O en sortie de chaque étape de traitement.

7.4. Conclusion et perspectives

En se basant sur les données des eaux prétraitées mesurées, un scénario d'affluent a été construit pour tester le fonctionnement du modèle filière. Trois séries de tests par simulation ont été réalisées pour évaluer la performance en termes de prédiction du modèle filière et déterminer les taux de chlorure ferrique adaptés aux traitements primaire et tertiaire futurs. Avec les valeurs de paramètres de commande choisies et les réajustements sur certains paramètres des modèles en pré- et post-dénitrification, les concentrations de polluants en sortie simulées pour chaque étape de traitement par biofiltration sont proches de celles observées à la station ou de celles prévues du projet BioSAV. Il en va de même pour les réponses des commandes considérées dans le modèle comme la distribution des débits et le nombre d'ouvrages actifs. Les erreurs observées entre les résultats de simulation et les observations sont liées principalement aux différences entre la configuration de traitement primaire actuelle et celle simulée, plutôt basée sur les configurations futures. Bien qu'il reste des travaux de vérification du modèle filière à réaliser avec les données de la future station, on trouve que la performance de prédiction actuelle du modèle est très satisfaisante. De plus, comme le modèle peut s'adapter lui-même aux variations d'affluent et aux consignes demandées pour chaque procédé, il peut facilement être appliqué pour réaliser des tests de scénario d'exploitation.

Après les trois séries de tests de simulation, six scénarios d'exploitation ont été proposés et testés avec le scénario d'affluent précédemment généré. En suivant les propositions de Nopens *et al.* (2010) et Flores-Alsina *et al.* (2014) trois critères d'évaluation (EQI, OCI et $GHG_{émissions}$) ont été proposés afin de comparer les différents scénarios. Selon les résultats de simulation obtenus, avec les critères proposés, les avantages et les inconvénients de chaque scénario peuvent être identifiées et quantifiés. Les différences obtenues en termes de qualité en sortie et des coûts de traitement peuvent en général être expliquées selon les principes derrière chaque étape de traitement et des commandes considérées par le modèle. Les résultats obtenus par ces tests montrent que les changements des choix d'exploitation de la filière peuvent influencer non seulement la qualité du rejet, mais aussi les coûts et les émissions de gaz à effet de serre. Il est donc nécessaire de trouver un compromis entre ces trois critères. Les résultats montrent aussi que l'émission de N_2O pendant le traitement est la source principale des émissions de gaz à effet de serre de la filière et doit être prioritairement réduite. Les trois scénarios (SC2, SC5 et SC6) qui permettent de réduire les émissions de N_2O ont donc été analysés en détails afin d'identifier les raisons de cette réduction. Parmi ces trois scénarios, on trouve que la diminution du dosage de $FeCl_3$ pour le traitement primaire (SC6), qui permet d'apporter une source de phosphates suffisante pour l'étage de nitrification est le choix d'opération le plus durable pour améliorer le traitement de la filière.

L'analyse des scénarios d'exploitation montre que le modèle filière développé est capable d'être utilisé comme outil pour évaluer les changements de performance de traitement apportés par les différents choix d'opération des procédés et d'aider à identifier le choix optimal pour améliorer les procédés de traitement. Un modèle adoptant les idées du « benchmark simulation » pour la future filière de biofiltration de la station Seine Aval a été développé.

Comme le modèle de la filière de biofiltration a été développé par rapport aux configurations de traitement de la station Seine Aval après sa modernisation en 2022, les paramètres réajustés pour les modèles individuels devront être vérifiés lorsque des données d'exploitation après la modernisation seront disponibles. Les commandes de procédés considérées ainsi que les paramètres correspondants utilisés par le modèle filière devront également être mis à jour après la mise en service de la station modernisée.

Enfin, le modèle filière biofiltration peut être connecté avec un modèle rivière comme le modèle ProSe (Raimonet *et al.*, 2015; Wang *et al.*, 2019) qui simule l'hydrodynamique, le transport de composants ainsi que les processus biogéochimiques de la Seine, afin de prédire les impacts des rejets de la filière biofiltration sur la qualité de la Seine. Ce genre de connexion étend la capacité du modèle et met en lien la qualité du rejet de la station et la qualité de la rivière. Il permet donc d'optimiser l'opération de la station en se basant sur l'impact sur la rivière (Vanrolleghem *et al.*, 2005) et d'aider à trouver un compromis entre la qualité de rivière, les coûts de traitement et les impacts environnementaux (Saagi *et al.*, 2017). Tel que montré par l'analyse de scénarios, le SC4 demande moins de coûts de traitement et émet moins de gaz à effet de serre, mais les concentrations de polluants en sortie sont plus élevées que le scénario de référence. Si le modèle rivière prédit que ces concentrations élevées n'influencent pas la qualité de la rivière en termes des exigences de la DCE, ce choix d'opération peut également être considérée comme une solution d'optimisation pour le traitement de la filière.

Références

Bersinger, T., Le Hécho, I., Bareille, G., Pigot, T., & Lecomte, A. (2015). Continuous monitoring of turbidity and conductivity in wastewater networks. *Revue des Science de l'Eau, 28*(1), 9-17.

Bollon, J., Filali, A., Fayolle, Y., Guerin, S., Rocher, V., & Gillot, S. (2016b). N_2O emissions from full-scale nitrifying biofilters. *Water Research, 102*, 41-51.

de Barbadillo, C., Sabherwal, B., Shaw, A., & Schauer, P. (2009). Application and comparison of dynamic models to assess impact of loading variations on performance of denitrification filters. *Water Science & Technology, 60*(7), 1721-1729.

De Ketele, J., Davister, D., & Ikumi, D. S. (2018). Applying performance indices in plantwide modelling for a comparative study of wastewater treatment plant operational strategies. *Water SA, 44*(539-550).

Diannoux, C., Carnet, E., & Bailly, A. (2017). *Qualité des Cours d'Eau en Ile-de-France — Evolution des Critères d'Evaluation pour le Deuxième Cycle de la Directive Cadre sur l'Eau*. Document Gouvernemental. Direction Régionale et Interdépartementale de l'Environnement et de l'Energie (DRIEE), Ile-de-France, France.

Fiat, J. (2019). *Analyse et Modélisation des Emissions de Protoxyde d'Azote par les Biofiltres Nitrifiants Tertiaires à Echelle Industrielle.* (Thèse de Doctorat). Université de Toulouse, Toulouse, France.

Flores-Alsina, X., Corominas, L., Snip, L., & Vanrolleghem, P. A. (2011). Including greenhouse gas emissions during benchmarking of wastewater treatment plant control strategies. *Water Research, 45*(16), 4700-4710.

Flores-Alsina, X., Arnell, M., Amerlinck, Y., Corominas, L., Gernaey, K. V., Guo, L., Lindblom, E., Nopens, I., Porro, J., Shaw, A., Snip, L., Vanrolleghem, P. A., & Jeppsson, U. (2014). Balancing effluent quality, economic cost and greenhouse gas emissions during the evaluation of (plant-wide) control/operational strategies in WWTPs. *Science of the Total Environment, 466-467*, 616-624.

Gernaey, K. V. et Jørgensen, S. B. (2004). Benchmarking combined biological phosphorus and nitrogen removal wastewater treatment processes. *Control Engineering Practice, 12*(3), 357-373.

Gonzalez, E. G., Richoux, R., Guérin, S., & Rocher, V. (2019). *Suivi de la Qualité de la Seine et de Ses Affluents en Agglomération Parisienne (Année 2018)*. Bilan annuel. Service Expertise et Prospective du SIAAP, Paris, France.

Infoclimat. (2018). *Climatologie de l'année 2018 à Paris-Montsouris*. Paris, France. Extrait de www.infoclimat.fr/climatologie/annee/2018/paris-montsouris/valeurs/07156.html

Kampschreur, M. J., Temmink, H., Kleerebezem, R., Jetten, M. S., & van Loosdrecht, M. C. M. (2009). Nitrous oxide emission during wastewater treatment. *Water Research, 43*(17), 4093-4103.

Martin, C. et Vanrolleghem, P. A. (2014). Analysing, completing and generating influent data for WWTP modelling: A critical review. *Envrionmental Modelling & Software, 60*, 188-201.

Nopens, I., Benedetti, L., Jeppsson, U., Pons, M.-N., Alex, J., Copp, J. B., Gernaey, K. V., Rosen, C., Steyer, J.-P., & Vanrolleghem, P. A. (2010). Benchmark Simulation Model No 2: Finalisation of plant layout and default control strategy. *Water Science & Technology, 62*(9), 1967-1974.

Raimonet, M., Vilmin, L., Flipo, N., Rocher, V., & Laverman, A. M. (2015). Modelling the fate of nitrite in an urbanized river using experimentally obtained nitrifier growth parameters. *Water Research, 73*, 373-387.

Rocher, V., Paffoni, C., Goncalves, A., Briand, C., & Azimi, S. (2011a). Conditions d'apparition des nitrites lors de la dénitrification des eaux usées 1. Importance de la charge azotée appliquée. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 344*, 92-96.

Saagi, R., Flores-Alsina, X., Kroll, S., Gernaey, K. V., & Jeppsson, U. (2017). A model library for simulation and benchmarking of integrated urban wastewater systems. *Environmental Modelling & Software, 93*, 282-295.

Solon, K., Flores-Alsina, X., Kazadi Mbama, C., Ikumi, D. S., Volcke, E. I. P., Vaneeckhaute, C., Ekama, G., Vanrolleghem, P. A., Batstone, D. J., Gernaey, K. V., & Jeppsson, U. (2017). Plant-wide modelling of phosphorus transformations in wastewater treatment systems: Impacts of control and operational strategies. *Water Research, 113*, 97-110.

Szabó, A., Takács, I., Murthy, S., Daigger, G. T., Licskó, I., & Smith, S. (2008). Significance of design and operational variables in chemical phosphorus removal. *Water Environment Research, 80*(5), 407-416.

Takács, I., O'Shaugnessy, M., Murthy, S., Brian, K., Shirodkar, N., & Katehis, D. (2007). Design of denitrification systems using methanol. In *Proceedings of the WEF-IWA Specialized Conference "Nutrient Removal 2007: State of the Art"*. Baltimore, Maryland, États-Unis, 4-7, Mars, 2007.

Vanrolleghem, P. A., Benedetti, L., & Meirlaen, J. (2005). Modelling and real-time control of the integrated urban wastewater system. *Environmental Modelling & Software, 20*(4), 427-442.

Verbanck, M. A. (1995a). Capturing and releasing settleable solids — The significance of dense undercurrents in combined sewer flows. *Water Science & Technology, 31*(7), 85-93.

Verbanck, M. A. (1995b). Variabilité des charges solides en suspension à l'exutoire des réseaux de collecte. In *Proceedings of the Journée d'étude CB-IAWQ "Fonctionnement du traitement des eaux usées en cas de fortes variations de débit"*. Liège, Belgique, 31, Mai, 1995.

Wang, S., Flipo, N., & Romary, T. (2019). Oxygen data assimilation for estimation micro-organism communities' parameters in river systems. *Water Research, 165*, 115021.

Water Environment Federation. (2010a). Biological filters. In *Biofilm Reactors* (pp. 327-391). McGraw-Hill Education, Alexandria, Virginia, États-Unis.

Chapitre 8 Conclusion et perspectives

8.1. Conclusion

Cette thèse présente le travail de modélisation pour la filière de biofiltration de la station d'épuration Seine Aval après sa modernisation en 2022. Cette filière est composée d'un procédé de décantation primaire, de trois étages de biofiltration servant au traitement secondaire et d'un procédé de clarification tertiaire. Considérant l'état d'avancement des travaux de refonte et les problématiques liées à chaque étape de modélisation et à l'application du modèle filière, quatre sous-objectifs ont été proposés et réalisés selon l'ordre suivant :

1) Proposer une stratégie de modélisation d'une station actuellement en phase de construction partielle
2) Concevoir et améliorer des modèles pour chaque procédé de traitement de la filière biofiltration à l'aide du logiciel WEST®.
3) Construire le modèle de filière de traitement
4) Proposer des scénarios d'entrée et réaliser une première évaluation complète de quelques scénarios d'optimisation potentiels

Le Chapitre 3 de la thèse présente les travaux réalisés pour le premier sous-objectif en deux parties. La première partie concerne l'étude du fonctionnement pendant et après la modernisation de la station Seine Aval. Les informations récoltées dans le cadre de la thèse sur l'évolution du mode de traitement des eaux usées de la station et les états actuels des procédés de la filière biofiltration à modéliser sont résumées. A partir de cette étude, la stratégie de modélisation de la filière biofiltration par rapport aux phases de la refonte de la station a été proposée. Ceci compose la deuxième partie du chapitre. Cette stratégie définit premièrement l'ordre de modélisation des procédés individuels de la filière. Pour rappel, les nouveaux décanteurs primaires et les clarificateurs tertiaires ne sont pas encore mis en route et les données d'exploitation de ces deux procédés ne sont donc pas disponibles pour la modélisation. De plus, les étages de pré- et post-dénitrification de la station ont respectivement des soucis concernant la représentativité des mesures et le colmatage. Sous ces conditions, la modélisation de ces procédés doit d'abord être réalisée sur des équivalents similaires exploités dans d'autres stations d'épuration du SIAAP. Des procédés similaires ont été identifiés pendant l'élaboration de la stratégie. Deuxièmement, la stratégie de modélisation définit aussi les règles de commande à intégrer dans le modèle filière. Il s'agit de la distribution de l'eau entre les deux filières de la station (biofiltration et BRM) et entre les trois étages de biofiltration (recirculation et by-pass), de l'estimation du nombre de filtres et décanteurs actifs ainsi que des injections d'air et de réactifs (méthanol, chlorure ferrique et acide phosphorique). L'intégration de ces règles de

commandes permet au modèle filière, qui consiste en un assemblage des modèles procédés individuels, d'être proche aux comportements de la filière de traitement réelle. Les informations récoltées lors de la réalisation de ce premier sous-objectif fournissent une base solide qui favorise la modélisation des procédés individuels ainsi que la construction du modèle filière. Selon les expériences de modélisation acquises dans le cadre de cette thèse, on trouve que la stratégie de modélisation proposée est compréhensive et adéquate pour modéliser la station Seine Aval qui a des configurations de traitement complexes.

Le deuxième sous-objectif est couvert par les Chapitres 4 et 5. Le Chapitre 4 présente le travail de modélisation réalisé pour les trois étages de biofiltration. Le modèle de biofiltration utilisé pour simuler ces procédés est une amélioration du modèle SimBio (Bernier *et al.*, 2014a; 2014b). Par rapport au modèle original, le modèle développé utilise plus de couches de biofilm (5) et une couche stagnante d'épaisseur variable. Afin de simuler la production/dégradation biologique du N_2O pendant la nitrification et la dénitrification, les réactions biologiques sont également étendues. De plus, le modèle développé considère une phase gazeuse simplifiée pour mieux illustrer le transfert gaz-liquide dans le biofiltre. Enfin, pour prédire la consommation d'énergie et éventuellement estimer les coûts et les impacts environnementaux de traitement, des équations calculant l'énergie consommée par l'aération et le pompage sont intégrées.

Considérant le nombre de paramètres utilisés, afin de faciliter la calibration du modèle de biofiltration, une analyse de sensibilité globale a été réalisée à l'aide de simulation Monte-Carlo afin d'identifier les paramètres influents pour les variables à calibrer. Toujours par simulation Monte-Carlo, les paramètres identifiés sont ajustés de manière semi-automatique pour calibrer le modèle. Cette procédure de calibration proposée a déjà été appliquée pour calibrer les modèles de réacteurs à boues activées trouvés dans la littérature (Sin *et al.*, 2008b), mais elle est rarement appliquée pour faciliter le calage des paramètres des modèles simulant les procédés de culture fixée, comme, par exemple, la biofiltration.

Selon l'ordre de modélisation défini, l'étage de nitrification de la station Seine Aval a d'abord été modélisé. Des données d'exploitation de l'étage avant (année 2009) et après (de mi-avril à mi-octobre 2017) la mise en route du projet BioSAV ont été récoltées pour la calibration et validation respectivement. Les grandes différences en termes de débit et de type de l'eau en entrée de l'étage entre les deux périodes utilisées permettent donc une validation forte. Les variables en sortie choisies à calibrer incluent le NH_4^+, le NO_3^-, le NO_2^-, le PO_4^{3-}, l'OD, les MES, la DCO et les émissions de N_2O. Parmi les 142 paramètres du modèle, 93 ont été sélectionnés pour analyser leur influence sur ces variables en sortie par la méthode de simulation Monte-Carlo. Selon les résultats d'analyse de sensibilité globale, les variables qui ont des paramètres influents communs sont inclus dans le même groupe de calibration. Cinq

groupes de calibration ont donc été formés, chacun contient 5-10 paramètres influents à calibrer. Les résultats de calibration montrent que le modèle peut bien reproduire les variations dynamiques observées en sortie de l'étage de nitrification. Les résultats de validation démontrent que le modèle est capable de maintenir cette bonne performance de prédiction face aux changements des conditions d'exploitation du procédé simulé (coefficients de Janus < 2). Ce genre de démonstration est rarement réalisée par les travaux de modélisation de biofiltration trouvés dans la littérature. Les erreurs de simulation sont probablement liées à la prédiction de la carence ponctuelle de phosphore (pour le NH_4^+ et le NO_2^- en sortie) et aux changements de mode d'exploitation en amont de l'étage de nitrification. Après la validation, les règles de commande d'aération de l'étage sont intégrées dans le modèle afin de prédire le débit d'aération. Les résultats obtenus montrent que le modèle validé est capable de bien prédire la capacité de nitrification et la qualité de l'eau en sortie de l'étage avant et après la mise en route du projet BioSAV. L'évolution de l'intensité d'aération simulée reproduit correctement ce qui est observé. Le score MAE obtenu pour la prédiction de débit d'air injectée est autour de 10% de la moyenne d'observation. De plus, la qualité de prédiction du NH_4^+ (MAE=1,06 mgN/L) est maintenue après l'intégration des règles de commande (MAE=0,96 mgN/L). Enfin, le modèle peut également bien estimer l'énergie consommée par pompage et aération. Tous les scores statistiques obtenus sur la prédiction de la consommation d'énergie sont inférieurs à 5% des moyennes observées.

Avec des modifications légères, le modèle de biofiltration développé a ensuite été utilisé pour simuler l'étage de post-dénitrification de la station Seine Centre. La calibration du modèle en post-dénitrification a été réalisée sur une des trois files de traitement de l'étage avec des jeux de données de 50 jours d'octobre à novembre 2008. A cette période, un test étudiant l'impact du dosage du méthanol sur les nitrates et les nitrites en sortie a été effectué sur la file. Les variables en sortie choisies pour la calibration incluent le NO_3^-, le NO_2^-, la DCO, la DCOs, les MES, le PO_4^{3-}, le NH_4^+ et le facteur d'émission de N_2O. La validation du modèle a été réalisée avec les données d'exploitation de l'étage complet d'avril à mi-septembre 2008 et de février à avril 2016. Comme le travail de modélisation de l'étage de nitrification, les conditions d'exploitation de ces deux périodes choisies étaient différentes par rapport à celle de calibration, ce qui permet de réaliser une validation forte. 54 paramètres (145 au total) ont été choisis pour analyser leur influence sur les variables à calibrer. Selon les résultats obtenus, les variables sont divisées en quatre groupes de calibration. Les résultats de calibration montrent que le modèle peut en général reproduire la performance de dénitrification de la file simulée. Les résultats de validation démontrent que le modèle peut également être appliqué pour prédire la qualité de l'eau en sortie de l'étage complet sous différentes conditions d'exploitation (coefficient de Janus < 2). Une partie des erreurs de prédiction sont probablement liées aux différents

comportements des biomasses dégradant le NO_3^- et le NO_2^- face à l'évolution de la température. Cet effet de la température n'a pas encore été considéré par le modèle. Également, lorsqu'il existe des grands écarts sur la performance de dénitrification entre les trois files de traitement, les observations sur le NO_x^- en sortie sont relativement difficiles à simuler correctement.

Enfin, le modèle de pré-dénitrification par biofiltration a été construit à partir de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de la station Seine Grésillons. La calibration du modèle a été réalisée avec les données d'exploitation de l'étage de juin à fin-août 2015 (90 jours), tandis que celles de septembre 2015 à fin-janvier 2016 ont servi à la validation du modèle (150 jours). Par rapport à la période de calibration, le débit et la charge en NO_x^- en entrée de l'étage pour la période de validation sont plus élevées, ce qui permet de valider la performance de prédiction du modèle sous différentes conditions d'exploitation. Les variables en sortie choisies pour la calibration incluent le NO_3^-, le NO_2^-, la DCO, la DCOs, les MES, le PO_4^{3-}, le NH_4^+ et le NTK. Une analyse de sensibilité globale a été réalisée sur 52 paramètres choisis (142 au total). Selon les résultats d'analyse obtenus, les variables à calibrer sont divisées en deux groupes de calibration. Selon les résultats de calibration-validation, la qualité de l'eau dénitrifiée en sortie prédite par le modèle correspond généralement à celle observée sur l'étage. De plus, tous les coefficients de Janus obtenus sont inférieurs à 1.5, ce qui signifie une validation réussite du modèle. Les écarts entre la simulation et les observations sont liées principalement à l'incertitude de mesure de la DCO en entrée de l'étage, la précision sur l'estimation des composants biodégradables (S_B et X_{CB}) ainsi que l'évolution de la fréquence de lavage effectuée pour les biofiltres pré-dénitrifiants de la station.

Le travail de modélisation sur la décantation primaire et la clarification tertiaire ont été présentés au Chapitre 5. Le modèle SimDec (Bernier *et al.*, 2016) qui simule le fonctionnement d'un décanteur lamellaire physico-chimique a été utilisé comme base pour ces deux procédés. La modélisation de la décantation primaire est réalisée sur le procédé de la station Seine Centre. Par rapport au modèle de base, les variations de la fraction de particules non-décantables d'affluent et la vitesse de chute de particules en fonction de dose $FeCl_3$ utilisé sont ajoutées dans le modèle développé. Les résultats expérimentaux issus de jar tests et des mesures de la distribution de vitesses de chute de particules par la méthode ViCAs sont utilisées pour générer les équations illustrant ces variations. Le modèle développé est calibré et validé avec les jeux de données récoltées de la station de 2000 à 2008. Les variables en sortie choisies pour la calibration incluent la DCO, la DCOs, les MES, le PO_4^{3-} et l'alcalinité. Le modèle développé peut en général bien prédire les performances d'enlèvement des MES, de la DCO et des orthophosphates. Les niveaux des variables de sortie simulées correspondent aux observations sur la qualité de l'eau en sortie de traitement primaire. Tous les coefficients de Janus obtenus sont entre 0,8-1,4, ce qui signifie une validation réussite du modèle. Certaines variations

observées en sortie de traitement primaire ne sont pas bien reproduites. Ces erreurs de prédiction sont liées principalement aux variations ponctuelles du fractionnement de la matière organique et des particules et à la formule chimique unique considérée pour illustrer le précipité issu de la complexation entre les orthophosphate et l'hydroxyde de fer. Un test a également été réalisé après la validation du modèle afin d'évaluer l'impact de différents taux de chlorure ferrique sur la qualité de l'eau décantée. Ce test montre qu'une diminution de 50% du dosage de $FeCl_3$ (de 30-40 mg/L à 15-20 mg/L) n'influence pas le traitement des MES et de la DCO, mais elle peut conduire à une réduction de l'efficacité d'enlèvement des orthophosphates d'environ 25%. Si cette réduction peut être compensée par le traitement biologique ou la clarification tertiaire, environ 600 euro peut être économisé par jour pour le traitement primaire. Ces résultats obtenus aident à déterminer le taux de chlorure ferrique adéquat pour les décanteurs primaires futurs lors de la construction du modèle filière.

La modélisation de la clarification tertiaire a été réalisée sur le procédé de la station Seine Amont (Seine Valenton). Contrairement au modèle de décantation primaire, la vitesse de chute de particules et la fraction de particules non-décantables sont dans ce cas-ci constantes. La calibration et la validation se concentrent sur le PO_4^{3-} et les MES en sortie de traitement en utilisant les données des années 2016 et 2017. Selon les résultats obtenus, le modèle est généralement capable de prédire les niveaux de ces deux variables en sortie de clarification tertiaire. Les coefficients de Janus obtenus sont proches de 1 indiquant une réussite pour la validation du modèle. Cependant, comme ce qui a été observé en décantation primaire, certaines erreurs de prédiction sont liées à la forme unique utilisée pour le produit de précipitation des orthophosphates. La résolution limitée de la mesure des orthophosphates (0,1 mgP/L) sur site est aussi une raison potentielle qui causent des erreurs de prédiction sur la déphosphatation tertiaire.

Après avoir construit les modèles procédés individuels, le troisième sous-objectif concernant la modélisation de la filière biofiltration a été réalisé par l'assemblage des modèles construits et les commandes de procédés correspondants (Chapitre 6). Les modèles de commande ont été développés à partir des informations actuellement disponibles sur les commandes des procédés de la station Seine Aval ainsi que d'hypothèses basées sur ce qui est fait sur les autres stations du SIAAP. Des tests de simulation ont également été réalisés pour évaluer la performance des commandes du nombre de biofiltres actifs pour les étages de pré-dénitrification et de nitrification. Les résultats des tests montrent que les réponses des commandes correspondent aux opérations effectuées à la station. Les scores MAE obtenus ne représentent que 5% des observations. Enfin, les calculs des coûts de traitement et des impacts environnementaux liés aux émissions de gaz à effet de serre sont proposés et intégrés dans le modèle filière. Pour estimer précisément les impacts environnementaux, le facteur d'émission de CO_2 provenant de

la production d'électricité a été déterminé à partir des modes de génération de l'électricité en France. Comme l'énergie nucléaire est le mode de génération de l'électricité principale en France, la valeur trouvée pour ce facteur est plus faible que les autres pays qui produisent l'électricité principalement par thermique à flamme. On a aussi démontré que l'équation proposée pour calculer l'énergie de pompage de l'eau pour les biofiltres nitrifiants est adaptable pour estimer différents pompages de la station Seine Aval.

La réalisation du dernier sous-objectif a été présentée au Chapitre 7. Un scénario d'affluent de 29 jours a d'abord été généré à partir des données récoltées de la station Seine Aval du 2 au 30 mai 2018 et des variations horaires des concentrations en polluants observées de mi-avril 2018 à mi-avril 2019. Les valeurs moyennes du débit et des concentrations en polluants de la période choisie pour générer le scénario sont proches de celles considérées dans les documents de conception de la refonte de la station pour le cas de débit moyen en entrée. Le scénario d'affluent généré est ensuite utilisé pour déterminer les taux de chlorure ferrique adéquats pour le traitement primaire et tertiaire et évaluer la performance de prédiction des trois étages de biofiltration. Les résultats de simulation obtenus sur la qualité de l'eau en sortie de chaque procédé sont comparés avec les mesures correspondantes de la période étudiée ainsi que la qualité attendue dans la documentation du projet BioSAV. Le comportement des commandes de chaque procédé de traitement du modèle a également été évalué avec les données d'exploitations de la station. Les résultats de simulation montrent que le dosage de $FeCl_3$ (30-40 mg/L) actuellement utilisé pour le traitement primaire est très élevé et peut probablement causer la carence de PO_4^{3-} pour le traitement biologique de la future filière. Ils démontrent aussi qu'un dosage entre 15-25 mg/L permet de laisser pomper plus de PO_4^{3-} pour le traitement biologique sans dégrader la performance de décantation, ce qui est plus adéquat pour le futur traitement de la filière biofiltration. Les résultats des comparaisons indiquent que le modèle réagit correctement par rapport aux variations des débits et des concentrations en polluants à l'entrée. Les scores MAE obtenus sur les commandes de la distribution des eaux entre les procédés de la filière et du nombre des biofiltres actifs sont en général autour de 10% des observations. La qualité de l'eau en sortie de chaque procédé simulé correspond à celle observée/attendue. Pour la prédiction des MES et de la DCO, les différences entre les moyennes observées (ou performance attendue) et les résultats de simulation sont autour de 5 mg/L, tandis que pour la prédiction de NH_4^+, de NO_x^- et de PO_4^{3-} les différences sont inférieur à 1 mg/L. Certains paramètres du modèle en pré- et en post-dénitrification ont dû être ajustés par rapport à ceux calibrés sur les procédés d'autres stations du SIAAP. Il s'agit des paramètres de dimension, du facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie et des paramètres liés à la filtration des particules et à la croissance du biofilm. On trouve que la performance de prédiction du modèle filière est satisfaisante. Il peut donc être appliqué pour tester différents

scénarios d'opération pour trouver.

Enfin, des analyses de scénarios ont été réalisées sur six choix d'opération. Trois critères d'évaluation de la performance de traitement ont été proposés et appliquées pour comparer les scénarios. Il s'agit de la qualité d'effluent en sortie de la filière, des coûts de traitement et des émissions à gaz à effet de serre. Les résultats obtenus montrent que les choix d'opération peuvent influencer non-seulement la qualité du rejet, mais aussi les coûts et les impacts environnementaux, il faut donc trouver un compromis entre ces trois critères afin de réaliser un traitement durable. Les résultats montrent aussi qu'environ 90% des émissions à gaz à effet de serre de la filière est dû à l'émission de N_2O, la réduction de N_2O est le choix prioritaire à considérer pour améliorer le traitement de la future filière. Parmi les choix d'opération testés, la diminution du dosage de $FeCl_3$ pour le traitement primaire est le choix optimal selon les résultats de simulation, car il permet de réduire environ 15% d'émission de N_2O sans affecter la qualité de rejet ni augmenter les coûts de traitement. On trouve que le modèle filière construit peut fournir une évaluation complète sur la performance de traitement de la filière sous différents choix d'opération. Le modèle peut donc être utilisé comme un outil pour aider à identifier les pistes d'optimisation du traitement des eaux de la filière biofiltration.

8.2. Perspectives

Plusieurs pistes de vérification et d'amélioration des modèles de procédés individuels et du modèle filière ont été proposées et discutées au moment de présenter les travaux de modélisation et les résultats obtenus.

Pour les trois modèles simulant la performance de traitement par biofiltration, les niveaux du NO_2^- en sortie des procédés peuvent en général être prédits par les modèles. Cependant, comme il s'agit d'un composant intermédiaire dans les réactions considérées pour la nitrification et la dénitrification, des variations de cette variable en sortie observées sont difficiles à suivre par les modèles. Des propositions d'explications ont été faites sur les erreurs observées à partir des conditions d'exploitation des biofiltres modélisés et de la littérature étudiant la présence de nitrite en sortie de la nitrification et dénitrification. La réalisation de campagnes de mesure de la qualité de l'eau en fonction de la hauteur du lit de média est suggérée pour identifier les raisons de la présence de pics de nitrite en sortie de la nitrification. Actuellement, on suppose que la carence des phosphates est la raison derrière à la présence de ces pics. Des études sur l'influence de la température sur la biomasse hétérotrophe réduisant le NO_3^- et celle réduisant le NO_2^- ont été également proposées comme pistes d'amélioration des modèles.

En plus de nitrite, pour les modèles en nitrification et en post-dénitrification, la prédiction de la production/dégradation du N_2O n'a été calibrée qu'approximativement, tandis que celle du modèle en pré-dénitrification n'a pas été calibrée à cause du manque de mesures et de valeurs de référence. Dans ce cas-ci, afin d'améliorer la précision sur les émissions du N_2O, qui est un des contributeurs principaux des émission des gaz à effet de serre de la station d'épuration, des mesures directes sur les procédés modélisés devraient idéalement être réalisées.

Enfin, la fraction d'enlèvement du biofilm et la fréquence de lavage sont considérées constantes dans les modèles. Cependant, en réalité, les exploitants de la station peuvent modifier la fréquence de lavage en fonction de l'état de fonctionnement des biofiltres comme, par exemple, la perte de charge. Le changement de la fréquence de lavage peut influencer la quantité de biofilm attaché sur le lit de média des biofiltres. Afin de mieux prédire l'évolution de la performance de traitement des biofiltres liée au cycle de lavage, la relation entre la fraction de biofilm enlevée et la fréquence de lavage peut être étudiée et modélisée. L'intégration des équations calculant la perte de charge pour estimer le niveau du colmatage de biofiltres, comme ce qui a déjà été réalisé par Bernier *et al.* (2014a) pour le modèle SimBio, sont également envisagées. Ces perspectives d'amélioration s'appliquent à tous les trois étages de biofiltration.

Pour le modèle de décantation primaire, la première piste d'amélioration concerne la prédiction des variations de la vitesse de chute de particules en fonction du taux de $FeCl_3$. L'équation calculant la vitesse de chute en fonction du taux de $FeCl_3$ utilisée par le modèle est basée sur

très peu de données expérimentales faites à des taux de $FeCl_3$ de 10, 20 et 30 g/m^3. Selon les résultats de jar test, l'efficacité d'enlèvement en MES varie beaucoup à faible dosage de $FeCl_3$ (0-10 g/m^3). De plus, le taux de chlorure ferrique adéquat proposé pour les décanteurs futurs de la station, qui a été déterminé par simulation (15-25 g/m^3), est beaucoup plus faible que celui actuellement utilisé (30-40 g/m^3). Pour ces raisons, il serait donc intéressant d'effectuer des mesures ViCAs sur des taux de $FeCl_3$ faibles pour vérifier et améliorer l'équation développée. Cette piste d'amélioration est aussi valide pour le modèle de clarification tertiaire.

La deuxième piste d'amélioration du modèle de décantation primaire concerne la prédiction de l'enlèvement des orthophosphates. Les erreurs de prédiction du PO_4^{3-} en sortie de la décantation primaire et de la clarification tertiaire sont liées principalement à la forme unique considérée pour le produit précipité. Pour améliorer la performance du modèle, l'intégration d'une forme de précipité variable en fonction du rapport molaire Fe/P initial ainsi que la réalisation d'essais expérimentaux correspondants sont proposés.

La dernière piste d'amélioration est sur la prédiction de la biodégradabilité de l'eau décantée. Bien que les prédictions de la DCO et de la DCO soluble soient satisfaisantes, on ne sait pas aujourd'hui si l'effet de la coagulation sur la DCO biodégradable est similaire à celui sur la DCO inerte. La quantité de carbone biodégradable contenue dans l'eau décantée est importante pour les procédés de traitement biologiques situés en aval du traitement primaire, notamment pour l'étage de pré-dénitrification. Pour le modèle filière, une bonne prédiction de la biodégradabilité de l'eau décantée permet d'aider à optimiser le développement de la stratégie d'injection du méthanol. Pour ces raisons, afin de vérifier et ajuster le modèle, le lien entre les doses de coagulant utilisées et les changements de la fraction de la DCO biodégradable devrait être étudié par des mesures de fractionnement de la DCO (respirométrie et Oxitop®) avant et après la décantation.

Enfin, pour le modèle de clarification tertiaire, tel que mentionné précédemment, une forme de produit précipité variable peut être intégrée dans le modèle pour améliorer la prédiction de la déphosphatation. De plus, des jar tests et des mesures de ViCAs peuvent être réalisées sur les eaux en entrée des clarificateurs tertiaires afin de vérifier les valeurs de la vitesse de chute et de la fraction des particules non-décantables utilisées par le modèle.

En plus de ces propositions d'amélioration, parmi les procédés individuels étudiés, seuls les modèles en nitrification et en post-dénitrification ont été calibrés et validés avec des données intensives issues de capteurs. Les travaux de calibration-validation pour les autres modèles ont été faits avec des données journalières. Cependant, le développement et la mise à l'essai des stratégies de commandes de procédé nécessitent d'avoir des modèles capables de reproduire les dynamiques rapides observées en sortie de procédé. L'évaluation de la performance de

prédiction de ces modèles confrontés aux données intensives serait donc idéalement à envisager dans le futur.

Pour le modèle filière, la performance de prédiction du modèle doit être validée. Une étape de recalibration du modèle doit probablement être réalisée lorsque des données d'exploitation fiables des nouveaux procédés seront disponibles. De même, les règles de commandes intégrées dans le modèle doivent être mises à jour au fur et à mesure. En plus de ces points, pour étendre la capacité de prédiction, le modèle filière peut également être amélioré sur les aspects suivants :

1) Le modèle filière devra être combiné avec le modèle de la filière BRM qui est en train d'être développé par le SIAAP en utilisant le logiciel WEST®. Cette combinaison produira un modèle global de la station qui permettra d'étendre les analyses de scénarios au-delà de la file biofiltration, comme, par exemple l'effet de la distribution de l'eau entre la filière biofiltration et la filière BRM sur la qualité d'effluent.

2) La vitesse de simulation du modèle filière est relativement lente. Pour le scénario d'affluent présenté au Chapitre 7 (29 jours), le temps nécessaire pour réaliser la simulation est d'environ un jour (processeur de l'ordinateur utilisé : Intel Xeon® E5-1620). Cette plage de temps de calcul constitue un frein à la réalisation de tests de scénario long terme. Une augmentation de la capacité de calcul est donc nécessaire afin d'arriver à lancer des simulations dans des temps réalistes. En plus de moderniser le matériel informatique, notamment sur la puissance de processeur, la capacité de calcul peut également être augmentée par l'utilisation simultanée de plusieurs processeurs au lieu d'un seul pour effectuer la simulation (Wang *et al.*, 2018). On peut également faire une sélection des paramètres du solveur (Claeys *et al.*, 2008) ou modifier des modèles pour les rendre moins « stiff » afin de favoriser le calcul pendant la simulation.

Tel qu'expliqué dans la partie de conclusions et perspectives du Chapitre 7, afin de mieux étudier l'influence de traitement de la filière biofiltration sur la Seine, le modèle filière peut également être branché avec le modèle ProSE qui simule et évalue la qualité de l'eau de la Seine (Wang *et al.*, 2018; 2019).

Concernant la méthodologie de modélisation, on propose une procédure de calibration-validation pour le modèle de biofiltration et l'a appliqué pour calibrer les trois modèles de biofiltration. Cette procédure est efficace qui permet d'identifier rapidement les paramètres influents et de réaliser un ajustement semi-automatique des valeurs de paramètres. Cette procédure reste à être testé et comparé avec les autres procédures de calibration-validation de la littérature afin de vérifier sa reproductibilité et fiabilité.

Pour la création des scénarios d'entrée, on a proposé une méthode qui permet de générer les concentrations des polluants pour les jours en temps sec à partir du mode d'évolution journalière d'affluent observé. Cependant, elle ne peut pas réaliser la génération des scénarios d'entrée pour les jours de pluie. Les méthodes de génération basées sur l'approche de <<data-driven>> peuvent être appliquées afin de résoudre ce problème (Li et Vanrolleghem, 2021).

Enfin, les modèles individuels développés ainsi que la méthode de calibration utilisée pour la construction du modèle filière dans le cadre de cette thèse pourront également être réutilisés pour modéliser les autres stations du SIAAP comme la station Seine Centre et la station Seine Grésillons, qui utilisent des procédés intensifs similaires pour le traitement des eaux usées.

Références

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Bernier, J., Guérin, S., Azimi, S., Rocher, V., & Lessard, P. (2016). Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension. *L'Eau, l'Industrie, les Nuisances, 391*, 75-82.

Claeys, P., van Griensven, A., Benedetti, L., De Baets, B., & Vanrolleghem, P. A. (2008). On numerical solver selection and related uncertainty terminology. *Journal of Hydroinformatics, 12*(3), 241-250.

Li, F. et Vanrolleghem, P. A. (2021). An influent generator for WRRF design and operation based on a recurrent neural network using a genetic algorihm for multi-objective optimization. In *Proceedings of the 7th IWA Water Resource Recovery Modelling Seminar.* Conférence virtuelle, 21-25 août 2021.

Sin, G., De Pauw, D. J. W., Weijers, S., & Vanrolleghem, P. A. (2008b). An efficient approach to automate the manual trial and error calibration of activated sludge models. *Biotechnology and Bioengineering, 100*(3), 516-528.

Wang, S., Flipo, N., & Romary, T. (2018). Time-dependent global sensitivity analysis of the C-RIVE biogeochemical model in contrasted hydrological and trophic contexts. *Water Research, 144*, 341-355.

Wang, S., Flipo, N., & Romary, T. (2019). Oxygen data assimilation for estimation micro-organism communities' parameters in river systems. *Water Research, 165*, 115021.

Liste des Figures

Chapitre 1

Figure 1.1 Evolution de la configuration de traitement de la station Seine Aval au cours du programme de modernisation. 8

Chapitre 2

Figure 2.1 Principes de la production/consommation du N_2O lors de la nitrification (a) et la dénitrification (b). 23
Figure 2.2 Décanteur idéal illustré par Camp (1953). 26
Figure 2.3 Relation entre les régimes de sédimentation, la concentration et la cohésion des particules (figure modifiée de Crittenden et al. (2012)). 28
Figure 2.4 Distribution des particules dans les eaux en entrée du traitement primaire d'une station d'épuration (70 mg/L et 300 mg/L) en fonction de leurs vitesses de chute obtenue par test ViCAs (v1-v5 : vitesse de chute ; F1-F5 : fraction des MES) (figure traduite de Bachis et al. (2015)). 30
Figure 2.5 Décanteur idéal divisé en deux par une plaque (Camp, 1953). 32
Figure 2.6 Différentes configurations entre flux d'eau et flux des particules pour la décantation lamellaire. (figure traduite de Water Environment Federation (2005a)). 34
Figure 2.7 Exemple d'un banc de jar-test avec des béchers installés (Degrémont, 2005). 38
Figure 2.8 a) Influence de pH sur l'enlèvement de phosphore. b) Cinétiques d'enlèvement de phosphore. (Szabó et al., 2008) 39
Figure 2.9 Vue générale d'un décanteur Actiflo® (traduite et modifiée de Treguer et al. (2012)). 41
Figure 2.10 Configurations de traitement des biofiltres de type Biofor®(a), Biocarbone®(b) et Biostyr®(c) (Morgenroth, 2008a). 44
Figure 2.11 Trois mécanismes de filtration présents au cours de la filtration granulaire. a) Filtration par formation de gâteau. b) Filtration par coincement. c) Filtration en profondeur (McDowell-Boyer et al., 1986). 45
Figure 2.12 La formation de biofilm (modifiée de Sabaté Brescó et al. (2017)). 47
Figure 2.13 Structure 3D de biofilm générée par les images de CLSM (Li et al., 2019) (a) et structure à l'intérieur de biofilm obtenue par MRM (Seymour et al., 2004)(b). 48
Figure 2.14 Gradients des substrats et du pH observés dans un biofilm nitrifiant cultivé dans un réacteur de tambour rotatif (figure traduite de Bishop et al. (1995)). 49
Figure 2.15 Evolution des concentrations en A) nitrate et B) nitrite dans l'eau dénitrifiée de Seine Centre en fonction du rapport DBO injectée/N-NOx appliqué. (figure adaptée de Rocher et al. (2011b)) 52
Figure 2.16 Structure générale du modèle de Takács et al. (1991). 63
Figure 2.17 Relation entre la vitesse de chute et la concentration des particules (Patry et Takács, 1992). 65
Figure 2.18 Évolutions proposées sur la concentration en particules non-décantation (f_{ns}) et la vitesse de chute (V_0) en fonction de la concentration d'alun injecté (C_{alum_inlet}) et locale (C_{alum_layer})(Tik et Vanrolleghem, 2017). 66
Figure 2.19 Structure de la zone de lit de média du modèle de biofiltration dans le logiciel GPS-X™(selon (Vigne et al., 2010)). 74
Figure 2.20 Procédure générale de calibration-validation d'un modèle (selon (Mannina et al., 2011; Rieger et al., 2012)). 79

Chapitre 3

Figure 3.1 Mode de traitement de la file de traitement des eaux usées de la Station Seine Aval avant la refonte. *93*

Figure 3.2 Mode de traitement global de la file de traitement des eaux usées de la Station Seine Aval après les travaux du projet BioSAV. Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. *96*

Figure 3.3 Fonctionnement détaillé de la filière BRM actuelle. a. La filière globale. b. Un des six réacteurs biologiques relié aux cuves membrane. *97*

Figure 3.4 Fonctionnement détaillé de la filière biofiltration actuelle. Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. *98*

Figure 3.5 Mode de traitement global du traitement des eaux usées de la station Seine Aval en cas de débit normal prévu en 2022 (Débit ≤ 30 m3/s). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode tertiaire. *102*

Figure 3.6 Mode de traitement en détails de la filière biofiltration prévu en 2022 (Cas de débit normal). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode tertiaire. *102*

Figure 3.7 Mode de traitement global du traitement des eaux usées de la station Seine Aval en temps de pluie prévu en 2022 (Débit >30 m^3/s). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Blocs en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Blocs en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode primaire. *103*

Figure 3.8 Mode de traitement en détails de la filière biofiltration prévu en 2022 (en temps de pluie). Blocs en bleu : procédés installés pendant le projet BioSAV. Blocs en blanc : procédés préexistants avant BioSAV. Bloc en orange : Nouveaux décanteurs primaires (mis en route prévus en 2022). Bloc en gris : Clarificateurs préexistants avant BioSAV en mode primaire. *104*

Chapitre 4

Figure 4.1 Procédure générale de modélisation et de calibration-validation du modèle pour les trois étages de biofiltration. *114*

Figure 4.2 Structure générale du modèle SimBio et le transport/transfert des composants considérés dans le modèle de biofilm 1D. *116*

Figure 4.3 Structure générale du modèle de biofiltration construit dans le logiciel WEST®. *120*

Figure 4.4 Schéma des phénomènes physiques pris en compte dans le modèle développé pour simuler le transfert et le transport des composants solubles dans le biofilm. *122*

Figure 4.5 Schéma des phénomènes physiques pris en compte par le modèle développé pour simuler le transfert et le transport des composants particulaires dans le système biofilm. *124*

Figure 4.6 Mode de mélange du média (avec biofilm attaché) considéré dans le modèle développé. *131*

Figure 4.7 Composants et réactions liées à la nitrification, la dénitrification ainsi que la

production/consommation biologique de N_2O pris en compte par le modèle développé. 134
Figure 4.8 La phase gazeuse et le transfert gaz-liquide pris en compte dans le modèle développé. 135
Figure 4.9 Évolution de la charge en NH_4^+ en entrée de l'étage de nitrification (points bleus : calibration; points oranges : validation)..... 143
Figure 4.10 Estimation des composants de DCO à partir des mesures en entrée de l'étage de la nitrification pour la période de calibration du modèle (blocs gris : mesures en entrée, blocs jaunes : variables composites intermédiaires, blocs bleus : variables d'état en entrée du modèle). 145
Figure 4.11 Résultats d'analyse de sensibilité globale pour les concentrations en NH_4^+ et en NO_3^- en sortie du modèle en nitrification (Colonnes bleues : NH_4^+ en sortie, colonnes oranges : NO_3^- en sortie). 151
Figure 4.12 Treatment configuration of the Seine Aval WWTP. a. Configuration before upgrade b. Current configuration c. Future configuration 157
Figure 4.13 Biological reactions (nitrification and denitrification) and physical phenomena considered in the improved model. a. Biological reactions b. Physical phenomena 160
Figure 4.14 Calibration simulation results for the effluent ammonium concentrations. a. Late January to mid-March 2009. b. Late May to mid-July 2009. (Red line: simulation results; black dots: observations)..... 165
Figure 4.15 Calibration simulation results for the effluent NO_2^- (a) and PO_4^{3-} (b) concentrations (Red line: simulation results; black dots: observations) 167
Figure 4.16 Validation simulation results for the effluent ammonium concentrations from mid-September to mid-October 2017. (Red line: simulation results; black dots: observations) 169
Figure 4.17 Simulation results for daily energy consumption of the nitrification stage from May to October 2017. a. Aeration energy consumption b. Pumping energy consumption. (Red line: simulation results; black dots: observations)..... 170
Figure 4.18 Simulation results obtained for late-September to mid-October 2017 after integration of the aeration control sub-model. a. Average air flow rate injected in the biofilters b. Effluent NH_4^+ concentrations (Red line: simulations; black dots: observations) 171
Figure 4.19 Configurations de traitement des trois étages de biofiltration de la station Seine Centre. a. Configuration en temps sec ; b. Configuration en temps de pluie..... 174
Figure 4.20 Modèle de fractionnement de la DCO en entrée utilisé par le modèle de biofiltration en post-dénitrification. 179
Figure 4.21 Résultats obtenus par simulation Monte-Carlo pour le nitrite en sortie du modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20%-50% des valeurs par défaut). 184
Figure 4.22 Résultats obtenus par simulation Monte-Carlo pour le nitrite en sortie du modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20% des valeurs par défaut)..... 185
Figure 4.23 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables NO_3^- et NO_2^- en sortie du modèle en post-dénitrification. (Colonnes bleues : les nitrates en sortie ; colonnes oranges : les nitrites en sortie)..... 186
Figure 4.24 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification (jours 2-20 de la période de calibration) pour la concentration en NO_3^- en sortie de la file 3 de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).... 191

Figure 4.25 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification (jours 2-20 de la période de calibration) pour la concentration en NO_2^- en sortie de la file 3 de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).... 192
Figure 4.26 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification sur la concentration en DCO soluble en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation)..... 193
Figure 4.27 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification pour la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation)..... 194
Figure 4.28 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 pourr la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations laboratoire; ligne noire : résultats de simulation)..... 196
Figure 4.29 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification du 6 août au 10 septembre 2008 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations de capteurs; ligne noire : résultats de simulation). 197
Figure 4.30 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 pour la concentration en nitrates (a) et en nitrites (b) en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations; ligne noire : résultats de simulation).... 198
Figure 4.31 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations laboratoire; ligne noire : résultats de simulation)..... 201
Figure 4.32 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 pour la concentration en NO_x^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations de capteurs; ligne noire : résultats de simulation). 202
Figure 4.33 Comparaisons entre la simulation de validation de février à mi-avril 2016 avec le NO_x^- en sortie de la file 1(a), 2(b) et 3(c) (points rouges : observations; ligne noire : simulation)..... 203
Figure 4.34 Configurations de traitement des files SEG1 et SEG2 de la station Seine Grésillons. 211
Figure 4.35 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables NO_3^- et NO_2^- en sortie du modèle en pré-dénitrification. (Colonnes bleues : NO_3^- en sortie ; colonnes oranges : NO_2^- en sortie)..... 217
Figure 4.36 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NO_3^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 220
Figure 4.37 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NO_2^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 221
Figure 4.38 Résultats de simulation obtenus avec différentes valeurs du paramètre $K_{NO2,OHO}$ (lignes : simulations; points rouges: observations). 222
Figure 4.39 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en DCO en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 223
Figure 4.40 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en DCO soluble en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 224
Figure 4.41 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en MES en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 224
Figure 4.42 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en PO_4^{3-} en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 225
Figure 4.43 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NH_4^+ en

sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 226
Figure 4.44 Résultats de validation en pré-dénitrification sur la concentration en NO_3^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 227
Figure 4.45 Evolution de la performance de dénitrification de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016 (colonne grise : taux d'enlèvement du NO_3^- ; points bleus : concentration en NO_3^- en entrée ; points oranges : concentration en NO_3^- en sortie)..... 228
Figure 4.46 Evolution du ratio DBO_5/NO_x^- en entrée de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016..... 228
Figure 4.47 Fréquence de lavage des biofiltres pré-dénitrifiants de la file SEG2 de juin 2015 à fin-janvier 2016..... 229
Figure 4.48 Résultats de validation en pré-dénitrification sur la concentration en NO_2^- en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 231
Figure 4.49 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en DCO en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 232
Figure 4.50 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en DCOs en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 232
Figure 4.51 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en PO_4^{3-} en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation)..... 233

Chapitre 5

Figure 5.1 Procédure générale de modélisation et de calibration-validation utilisée pour la décantation primaire et la clarification tertiaire. 246
Figure 5.2 Structure générale du modèle SimDec. 247
Figure 5.3 Structure générale du modèle développé dans logiciel WEST®. 253
Figure 5.4 Taux de MES décantées en fonction du dosage de $FeCl_3$ lors d'essais jar-tests réalisés sur les eaux brutes de la station Seine Aval)(Mèche et Goncalves, 2013) et courbe d'estimation correspondante (points rouges : observations, ligne noire : courbe d'estimation. 255
Figure 5.5 Résultats des essais de ViCAs sur les eaux brutes de la station Seine Centre obtenus par la direction innovation du SIAAP (chaque essai correspond à une mesure de ViCAs sur un échantillon de l'eau brute). a. Sans $FeCl_3$ et polymère et avec dose de chlorure ferrique de b. 10 g/m^3 c. 20 g/m^3 d. 30 g/m^3. 259
Figure 5.6 Vitesse de chute moyenne de particules obtenue à partir des mesures de ViCAs en fonction de la dose de $FeCl_3$ utilisée et la courbe d'estimation issue de la « Curve Fitting Toolbox ». (points rouges : observations, ligne noire : courbe d'estimation) 261
Figure 5.7 Schéma de fonctionnement d'un décanteur lamellaire physico-chimique de type Densadeg® (Degrémont Technologies) (adaptée de Suez (2015)). 262
Figure 5.8 Estimation des composants de DCO et de particules à partir des mesures en entrée de procédé (blocs en gris : les mesures en entrée, blocs en jaune : variables intermédiaires, blocs en bleu : variables en entrée du modèle). 264
Figure 5.9 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire. 268
Figure 5.10 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en DCOs en sortie de la décantation primaire. 268

Figure 5.11 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mai 2001 à février 2004 (jours 500-1500) sur la concentration en MES en sortie de la décantation primaire. 270
Figure 5.12 Résultats de calibration du modèle développé pour la période de mi-juillet 2000 à mi-avril 2003 (jours 200-1200) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la décantation primaire. 271
Figure 5.13 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire. 273
Figure 5.14 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en DCOs en sortie de la décantation primaire. 273
Figure 5.15 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en MES en sortie de la décantation primaire. 274
Figure 5.16 Résultats de validation du modèle développé pour la période de fin juin 2005 à mi-mars 2008 (jours 2000-3000) sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la décantation primaire (résolution de la mesure de pour les jours 2000-2500 était de 0,1 mgP/L). .. 275
Figure 5.17 Résultats de validation de fin juin 2005 à fin juillet 2006 (jours 2000-2400) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie et le rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la décantation primaire de la station Seine Centre. 276
Figure 5.18 Résultats de calibration d'octobre à décembre 2000 (jours 280-360) de la concentration en PO_4^{3-} en sortie et le rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la décantation primaire de la station Seine Centre. 277
Figure 5.19 Taux de PO_4^{3-} en fonction du dosage de FeCl3 lors d'essais jar-tests réalisés sur les eaux brutes de la station Seine Aval (Mèche et Goncalves, 2013) et résultats de simulation obtenus pour la période de calibration et les tests de scénario (points rouges : observations des essais jar-tests, triangles noirs : Résultats de simulation). 281
Figure 5.20 Configuration de traitement de la station Seine Amont (bloc en bleu: procédé modélisé). 287
Figure 5.21 Estimation des composants de DCO et de particules à partir des mesures en entrée de procédé (blocs en gris : les mesures en entrée, blocs en jaune : variables intermédiaires, blocs en bleu : variables en entrée du modèle). 288
Figure 5.22 Résultats de calibration des jours 80-360 de l'année 2016 sur la concentration en MES en sortie de la clarification tertiaire. 292
Figure 5.23 Résultats de calibration des jours 80-360 de l'année 2016 sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de la clarification tertiaire. 292
Figure 5.24 Taux de traitement de PO_4^{3-} observé sur la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (année 2016) de la période de calibration. 293
Figure 5.25 Charge en PO_4^{3-} en entrée de la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (années) de la période de calibration. 294
Figure 5.26 Rapport molaire Fe/P initial utilisé pour la clarification tertiaire de Seine Amont pour les jours 80-360 (année 2016) de la période de calibration. 294
Figure 5.27 Résultats de validation des jours 40-130 sur la concentration en MES en sortie de la clarification tertiaire. 295
Figure 5.28 Résultats de validation des jours 40-130 sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de clarification tertiaire. 296

Figure 5.29 Rapport molaire Fe/P initial utilisé par la clarification tertiaire pour les jours 30-130 de la période de validation. 296

Chapitre 6

Figure 6.1 Schéma global du modèle de la filière biofiltration construit. 304
Figure 6.2 Structure de la partie de traitement primaire du modèle filière. 306
Figure 6.3 Structure générale de traitement par biofiltration du modèle filière. 310
Figure 6.4 Structure de l'étage de pré-dénitrification du modèle filière. 310
Figure 6.5 Résultats d'estimation du nombre de biofiltres pré-dénitrifiants actifs pour la période de juillet 2018 à avril 2019 (point rouge : Observations, ligne noire : Estimation). 315
Figure 6.6 Structure de l'étage de nitrification du modèle filière. 317
Figure 6.7 Les conditions d'exploitation des biofiltres nitrifiants de la station Seine Aval en 2018. a) Vitesse moyenne de filtration par biofiltre, b) Charge volumique moyenne en NH_4^+ par biofiltre. 318
Figure 6.8 Résultats d'estimation du nombre de biofiltres nitrifiants actifs pour l'étage de nitrification pour l'année 2018 (point rouge : Observations, ligne noire : Estimation). 320
Figure 6.9 Structure de l'étage de post-dénitrification du modèle filière. 321
Figure 6.10 Structure de la partie de traitement tertiaire du modèle filière. 324
Figure 6.11 Résultats de simulation obtenus par le modèle de clarification tertiaire sans modification de paramètres pour la période où les clarificateurs de la station Seine Aval sont en mode tertiaire. a) DCO en sortie. b) MES en sortie. c) PO_4^{3-} en sortie. 328
Figure 6.12 Résultats de simulation obtenus par le modèle de clarification tertiaire modifié pour la période où les clarificateurs de la station Seine Aval sont en mode tertiaire. a) DCO en sortie. b) MES en sortie. c) PO_4^{3-} en sortie. 330
Figure 6.13 Résultats de simulation de la consommation d'énergie par pompage. a) Pompage du by-pass de l'eau décantée b) Pompage des eaux vers les biofiltres pré-dénitrifiants. 334

Chapitre 7

Figure 7.1 Débit (ligne bleue) et conductivité (ligne orange) des eaux prétraitées de la station Seine Aval et précipitation journalière (colonnes grises) mesurée à la station Paris-Montsouris (75)(Infoclimat, 2018) du 2 mai au 30 mai 2018. 348
Figure 7.2 Variations des concentrations (composite 24h) des polluants en sortie du prétraitement de la station Seine Aval et de la précipitation journalière (colonnes grises) mesurée à la station Paris-Montsouris (75)(Infoclimat, 2018) du 2 au 30 mai 2018. a) DCO et MES, b) NH_4^+ et PO_4^{3-}. 349
Figure 7.3 Répartitions moyennes des concentrations en NH_4^+(ligne grise) et en DCO filtrée (ligne orange) en sortie de tamisage de BRM et de la concentration en MES (ligne bleue) des eaux prétraitées en temps sec pour la période de mi-avril 2018 à mi-avril 2019... 352
Figure 7.4 Les données générées pour les concentrations horaires en en NH_4^+(a) et en MES (b) en sortie du prétraitement du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : données générées ; points rouges : Observations). 355
Figure 7.5 Débit d'eau décantée envoyée vers les clarificateurs (Actiflo®) (ligne orange) et celui du by-pass (ligne grise) pour la période du 2 au 30 mai 2018. 357
Figure 7.6 Résultats de simulation de la concentration en orthophosphates en sortie de la

décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie du traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018. ..... *358*

*Figure 7.7 Résultats de simulation de la concentration en DCO en sortie de la décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie de traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018.*359

*Figure 7.8 Résultats de simulation de la concentration en MES en sortie de la décantation primaire avec le dosage de $FeCl_3$ proposé (ligne orange) et celle observée en sortie de traitement par double décantation (ligne bleue) pour la période du 2 au 30 mai 2018.*359

Figure 7.9 Résultats de simulation des débits des eaux prétraitées attribués à la filière biofiltration et BRM pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *361*

Figure 7.10 Résultats de simulation sur la variation du nombre de décanteurs réactifs (points bleus) pour la filière biofiltration en fonction du débit des eaux prétraitées attribué (ligne orange). *362*

Figure 7.11 Rapports méthanol à injecter sur NO_x^- à enlever appliqués par les exploitants de la station pour les trois batteries de l'étage pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018. ..... *365*

Figure 7.12 Résultats de simulation de la concentration en NO_x^- en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *366*

Figure 7.13 Résultats de simulation de la concentration en DCO en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *366*

Figure 7.14 Résultats de simulation de la concentration en MES en sortie de la pré-dénitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *367*

Figure 7.15 Résultats de simulation du débit de l'eau nitrifiée recirculée vers l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *368*

Figure 7.16 Résultats de simulation du débit traité par l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *368*

Figure 7.17 Résultats de simulation de la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations issues de la mesure laboratoire de la station ; points bleus : observations issues de capteurs). *371*

Figure 7.18 Résultats de simulation de la concentration en NO_3^- en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *372*

Figure 7.19 Résultats de simulation de la concentration en NO_2^- en sortie de l'étage de nitrification pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *372*

Figure 7.20 Résultats de simulation du débit d'air pour l'étage de nitrification de la station Seine Aval pour la période du 2 au 30 mai 2018 (ligne noire : simulation ; points rouges : observations). *373*

Figure 7.21 Résultats de simulation de la concentration en PO_4^{3-} en sortie du traitement

tertiaire avec un dosage de $FeCl_3$ à 6 (ligne orange) et 10 mg/L (ligne bleue). *379*
Figure 7.22 L'EQI, l'OCI et les émissions de gaz à effet de serre obtenus pour chaque scénario testé..... *386*

Liste des Tableaux

Chapitre 2

Tableau 2.1 Méthodes d'analyse couramment utilisées pour mesurer les nutriments azotés et phosphorés (Lou et al., 2002; Metcalf & Eddy, 2014). *17*
Tableau 2.2 Exemple de matrice de Gujer (tableau issu de van Loosdrecht et al. (2008)) *61*

Chapitre 3

Tableau 3.1 Consignes de débit instantané pour la filière BRM en fonction de débit entrant sur la station Seine Aval (SIAAP, 2016). *96*
Tableau 3.2 Ordre de modélisation pour les procédés individuels de la filière biofiltration et stations correspondantes dont proviennent les données utilisées pour la calibration et validation. *106*
Tableau 3.3 Règles de commade des procédés considérées pour la construction du modèle filière et niveaux de disponibilité d'informations correspondants (détails fournis dans le texte). *111*

Chapitre 4

Tableau 4.1 Processus de conversion biologique pris en compte par le modèle développé (les lignes en gris sont les procédés qui étaient déjà considérés dans le modèle SimBio) *133*
Tableau 4.2 Composants solubles et particulaires pris en compte par le modèle développé. *134*
Tableau 4.3 Conditions d'exploitation principales de l'étage de nitrification de la station Seine Aval en 2009 (période de calibration) et de mi-avril à mi-octobre 2017 (période de validation). *142*
Tableau 4.4 Résumé des données de performance de traitement collectées pour l'étage de nitrification pour la calibration et la validation du modèle. *144*
Tableau 4.5 Valeurs des paramètres de fractionnement utilisées pour la période de calibration. *146*
Tableau 4.6 Valeurs des paramètres de fractionnement utilisées pour la période de validation. *147*
Tableau 4.7 Groupes d'importance d'influence en fonction des coefficients de régression (SRC) (Bernier, 2014). *149*
Tableau 4.8 Statistical score results for the nitrification stage simulation in 2009 (Calibration) and 2017 (Validation). *166*
Tableau 4.9 Synthèse des données récoltées pour établir le jeu de données de calibration. *176*
Tableau 4.10 Conditions d'exploitation principales de la file 3 de l'étage de post-dénitrification pour la période de calibration (sous mode de traitement de post-dénitrification). *176*
Tableau 4.11 Conditions d'exploitation principales de l'étage de post-dénitrification pour la période d'avril à mi-septembre 2008 et pour celle de février à mi-avril 2016 (données horaires). *177*
Tableau 4.12 Valeurs des paramètres de fractionnement de la DCO pour le modèle en post-dénitrification. *180*
Tableau 4.13 Coefficients de détermination (R^2) obtenus par l'analyse de sensibilité globale pour le modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20%-50% des valeurs par défaut). *183*

Tableau 4.14 Coefficients de détermination (R^2) obtenus par l'analyse de sensibilité globale pour le modèle en post-dénitrification (espace d'échantillonnage : ±20% des valeurs par défaut)..... 185
Tableau 4.15 Paramètres qui ont un impact non-négligeable pour les nitrates et les nitrites en sortie du modèle identifiés par l'analyse de sensibilité globale (espaces d'échantillonnage fixés à ±20% des valeurs par défaut de paramètres). 187
Tableau 4.16 Résultats des scores statistiques obtenus pour la simulation de la période de calibration en post-dénitrification (entre octobre et novembre 2008, 50 jours)..... 192
Tableau 4.17 Résultats des scores statistiques obtenus pour la simulation de la première période de validation du modèle en post-dénitrification (d'avril à mi-septembre 2008). 197
Tableau 4.18 Résultats des scores statistiques obtenus pour la deuxième période de validation du modèle en post-dénitrification (de fin-janvier à mi-avril 2016)..... 202
Tableau 4.19 Différences entre les concentrations en NO_x^- en sortie des trois files de traitement et la simulation de validation. 204
Tableau 4.20 Paramètres calibrés pour le modèle en post-dénitrification..... 207
Tableau 4.21 Conditions d'exploitation principales de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 pour la période de calibration (juin à fin-août 2015)..... 213
Tableau 4.22 Conditions d'exploitation principales de l'étage de pré-dénitrification de la file SEG2 pour la période de validation (septembre 2015 à fin-janvier 2016)..... 213
Tableau 4.23 Valeurs de paramètres du fractionnement de la DCO en entrée pour le modèle en pré-dénitrification..... 214
Tableau 4.24 Résultats des scores statistiques obtenus pour la calibration du modèle en pré-dénitrification (de juin à fin-août 2015, 90 jours)..... 221
Tableau 4.25 Résultats des scores statistiques obtenus pour la validation du modèle en pré-dénitrification (de septembre 2015 à fin-janvier 2016, 150 jours). 230
Tableau 4.26 Paramètres calibrés pour le modèle en pré-dénitrification. 235

Chapitre 5

Tableau 5.1 Résultats d'estimation des paramètres de l'équation Eq 5.21 obtenus par le « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab®..... 256
Tableau 5.2 Les intervalles de temps prédéfinis pour changer les coupelles pendant les essais de ViCAs en fonction du type d'échantillon testé. 257
Tableau 5.3 Résultats d'estimation des paramètres de l'équation Eq 5.23 obtenus par la « Curve Fitting Toolbox » du logiciel Matlab®. 261
Tableau 5.4 Conditions d'exploitation principales des décanteurs lamellaires physico-chimiques de la station Seine Centre de 2000 à 2008. 263
Tableau 5.5 Les paramètres de fractionnement utilisés pour la DCO et les MES en entrée de procédé. 265
Tableau 5.6 Valeurs par défaut des paramètres pour le modèle de décantation primaire... 266
Tableau 5.7 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de calibration du modèle développé avec les valeurs par défaut des paramètres et les scores obtenus par le modèle SimDec pour la même période de simulation..... 267
Tableau 5.8 Valeurs avant et après ajustement des paramètres pour améliorer la performance de prédiction du modèle développé sur la DCO en sortie de décanteur. 267
Tableau 5.9 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de calibration du modèle développé avec les paramètres ajustés et les scores obtenus par le modèle SimDec

pour la même période de simulation..... 272
Tableau 5.10 Résultats des scores statistiques pour la simulation de la période de validation du modèle développé et les scores obtenus par le modèle SimDec pour la même période de simulation. 277
Tableau 5.11 Résultats moyens des sorties modèles pour les MES, la DCO, la DCOs et le PO_4^{3-} pour les scénarios tests réalisés sur la période de calibration..... 279
Tableau 5.12 Conditions d'exploitation principales des clarificateurs tertiaires de la station Seine Amont sur la période étudiée (janvier 2016 – mai 2017)..... 288
Tableau 5.13 Les paramètres de fractionnement utilisés pour la DCO et les MES en entrée de clarification tertiaire..... 289
Tableau 5.14 Valeurs par défaut des paramètres considérées pour le modèle de clarification tertiaire. 291
Tableau 5.15 Scores statistiques pour la simulation de la clarification tertiaire pour la période de calibration (jours 0-360 de l'année 2016) 291
Tableau 5.16 Scores statistiques pour la simulation de la clarification tertiaire pour la période de validation de janvier à mai 2017 (jours 0-130). 295

Chapitre 6

Tableau 6.1 Règles de distribution de l'eau prétraitée entre les filières BRM et biofiltration et le by-pass de la station. 307
Tableau 6.2 Règles d'estimation du nombre du décanteurs primaires actifs pour la filière biofiltration développée pour le modèle filière. 309
Tableau 6.3 Règles de commande du débit de l'eaux décantée (mélangée avec les retours en tête) envoyé à l'étage de pré-dénitrification et celui du by-pass..... 311
Tableau 6.4 Règles de commande du débit de l'eau nitrifiée recirculée vers l'étage de pré-dénitrification lorsqu'il n'y a pas de by-pass de l'étage à effectuer. 312
Tableau 6.5 Conditions d'exploitation des biofiltres dans les batteries de l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval (juillet 2018 - avril 2019)..... 315
Tableau 6.6 Valeurs de paramètres utilisées pour le test de la commande de nombre de biofiltres nitrifiants du modèle filière pour l'année 2018. 319
Tableau 6.7 Paramètres de dimensions modifiés pour le modèle de biofiltration en post-dénitrification développé sur la station Seine Centre pendant la construction du modèle filière de la station Seine Aval..... 323
Tableau 6.8 Règles de commande du nombre de clarificateurs tertiaires actifs dans le modèle filière. 326
Tableau 6.9 Conditions d'exploitation principales des clarificateurs en mode tertiaire de la station Seine Aval pour la période de test (10 jours au mois d'août 2018). 327
Tableau 6.10 Synthèse des étapes de pompage prises en compte pour évaluer les coûts de traitement..... 335
Tableau 6.11 Réactifs pris en compte pour évaluer les coûts de traitement et les prix unitaires correspondants utilisés (données issues du SIAAP). 337
Tableau 6.12 Les différentes sources d'émissions de gaz à effet de serre prises en compte par le modèle filière. 339
Tableau 6.13 Production de l'électricité en France et les facteurs d'émission de gaz à effet de serre correspondants à chaque mode de génération. (Source : RTE (2017); ADEME (2016)) 341
Tableau 6.14 Facteurs d'émission relatifs à la production des réactifs pris en compte pour

l'évaluation des émissions des gaz à effet de serre. (Source : ASTEE (2009)) *342*

Chapitre 7

Tableau 7.1 La qualité de l'eau en sortie de prétraitement de la station Seine Aval du 2 au 30 mai 2018 et celle définie pour le cas de débit moyen 1 250 000 m^3/j du projet BioSAV. *347*
Tableau 7.2 Les données récoltées pour établir le jeu de données du scénario d'affluent. .. *350*
Tableau 7.3 Critères de sélection des jours à prendre en compte pour calculer les proportions horaires des concentrations (MES, DCO filtrée et NH_4^+) pour la période de mi-avril 2018 à mi-avril 2019. ..... *352*
Tableau 7.4 Valeurs des paramètres choisies pour les commandes de l'étage de pré-dénitrification du modèle filière. *364*
Tableau 7.5 Paramètres réajustés pour l'étage de pré-dénitrification du modèle filière par rapport au modèle de la biofiltration en pré-dénitrification développé. *367*
Tableau 7.6 Valeurs des paramètres choisies pour les commandes de l'étage de nitrification du modèle filière. *370*
Tableau 7.7 Valeurs des paramètres choisies dans le test pour les commandes de l'étage de post-dénitrification du modèle filière. *374*
Tableau 7.8 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de l'étage post-dénitrification et celle prévue du projet BioSAV. *375*
Tableau 7.9 Paramètres réajustés pour l'étage de pré-dénitrification du modèle filière par rapport au modèle en post-dénitrification développé. *376*
Tableau 7.10 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie du traitement par biofiltration (mélange de l'eau nitrifiée et de l'eau post-dénitrifiée) et celle prévue du projet BioSAV. *377*
Tableau 7.11 Résultats de simulation sur la qualité de l'eau en sortie de la filière biofiltration. *379*
Tableau 7.12 Scénarios d'exploitation testés et paramètres de commande modifiés par rapport au scénario de base. *382*
Tableau 7.13 Polluants et facteurs de poids du critère de l'EQI trouvés dans la littérature (Nopens et al., 2010) et ceux considérés pour comparer les scénarios proposés pour le modèle filière. *384*
Tableau 7.14 L'EQI, l'OCI et les émissions de gaz à effet de serre obtenus pour chaque scénario testé et les concentrations moyennes des polluants en sortie de la filière simulée (cellules en orange : valeurs maximales ; cellules en vert : valeurs minimales). *387*
Tableau 7.15 Résultats de simulation de la qualité de l'eau (concentrations moyennes) en sortie des trois étages de biofiltration et les émissions de N_2O au niveau de l'étage de nitrification. *389*

Annexe 1 Informations techniques en détails des ouvrages

Tableau A1.1 Informations techniques de pompage de l'eau usée pour alimenter les biofiltres nitrifiants au point de fonctionnement requis.

Nombre de pompes par batterie	6 (1 en secours)
Débit unitaire	2,65 m^3/s
Hauteur géométrique	10,4 m
Hauteur manométrique totale	10,83 m
Rendement pompe	85 %
Rendement moteur	93,3 %

Tableau A1.2 Informations techniques des surpresseurs d'aération pour l'étage de nitrification.

Nombre de surpresseurs	15 (5 par deux batteries, 1 en secours)
Débit nominal unitaire	22 300 Nm^3/h
Pression différentielle variable au débit nominal	0,87 à 1,15 bars
Rendement moteur	97,4 %

Tableau A1.3 Informations techniques des pompes pour le by-pass de l'eau décantée au point de fonctionnement requis.

Nombre de pompes	6 (1 en secours)
Débit unitaire	5 m^3/s
Hauteur géométrique	5,4 m
Hauteur manométrique totale	6,12 m
Rendement pompe	87 %
Rendement moteur	92,2 %

Tableau A1.4 Informations techniques des pompes alimentant les biofiltres pré-dénitrifiants aux débits nominaux.

Batterie A et B	Pompes de l'eau décantée	Pompes de l'eau nitrifiée
Nombre de pompes	6 par batterie (1 en secours)	4 par batterie (1 en secours)
Débit unitaire	1.8 m^3/s	1,44 m^3/s
Hauteur géométrique	10,51 m	5,75 m
Hauteur manométrique totale	10,67 m	5,96 m
Perte de charge dans tube	0,03 m	0,03 m
Hauteur du dôme d'eau	0,13 m	0,17 m
Rendement pompe-moteur	71,3 %	72,9 %
Batterie C	**Pompes de l'eau décantée**	**Pompes de l'eau nitrifiée**
Nombre de pompes	6 (1 en secours)	4 (1 en secours)
Débit unitaire	1.6 m^3/s	1,13 m^3/s
Hauteur géométrique	7,57 m	2,93 m
Hauteur manométrique totale	8,07 m	3,24 m
Perte de charge dans tube	0,02 m	0,04 m
Hauteur du dôme d'eau	0,1 m	0,26 m
Rendement pompe-moteur	69,4 %	65,9 %

Tableau A1.5 Informations techniques des trois étages de biofiltration de la station Seine Aval.

Pré-dénitrification (Premier étage)	
Nombre de batteries	3
Nombre de biofiltres	58 (20 + 20 + 18)
Type de technologie	Biostyr® (Veolia)
Surface de lit de média	173 m²
Hauteur de lit de média	3,5 m
Matériel de média	Polystyrène
Diamètre de média	4,5 mm
Type de carbone exogène utilisé	Méthanol
Nitrification (Deuxième étage)	
Nombre de batteries	6
Nombre de biofiltres	84 (14 filtres / batterie)
Type de technologie	Biostyr® (Veolia)
Surface de lit de média	173 m²
Hauteur de lit de média	3,5 m
Matériel de média	Polystyrène
Diamètre de média	4 mm
Post-dénitrification (Troisième étage)	
Nombre de batteries	1
Nombre de biofiltres	12
Type de technologie	Biofor® (Degrémont Technology)
Surface de lit de média	147 m²
Hauteur de lit de média	3 m
Matériel de média	Argile
Diamètre de média	4,5 mm
Type de carbone exogène utilisé	Méthanol

Tableau A1.6 Informations techniques des biofiltres post-dénitrifiants de la station Seine Centre.

Nombre de batteries	1
Nombre de biofiltres	12
Type de technologie	Biofor® (Degrémont Technology)
Surface de lit de média	104 m²
Hauteur de lit de média	2,9 m
Matériel de média	Argile
Diamètre de média	3 mm
Type de carbone exogène utilisé	Méthanol

Tableau A1.7 Informations techniques des biofiltres pré-dénitrifiants de la station Seine Grésillons.

Nombre de batteries	1
Nombre de biofiltres	12
Type de technologie	Biostyr® (Veolia)
Surface de lit de média	173 m²
Hauteur de lit de média	3,5 m
Matériel de média	Polystyrène
Diamètre de média	4,5 mm
Type de carbone exogène utilisé	Sans injection de carbone exogène

Tableau A1.8 Informations techniques des décanteurs primaires Densadeg® (n=9) de la station Seine Centre.

Cuves de mélange rapide	Nombre de cuves	2
	Volume unitaire	75 m^3
Cuve de floculation	Nombre de cuves	1
	Volume unitaire	373 m^3
Cuve de décantation	Volume	1640 m^3
	Surface apparente	225 m^2 (15 m *15 m)
	Surface projetée globale des lamelles	1512 m^2

Tableau A1.9 Informations techniques des clarificateurs Actiflo® (n=9) de la station Seine Aval.

Cuves de mélange rapide 1	Nombre de cuves	2
	Volume unitaire	160 m^3
Cuves de mélange rapide 2	Nombre de cuves	2
	Volume unitaire	200 m^3
Cuves de floculation	Nombre de cuves	2
	Volume unitaire	768 m^3
Cuve de décantation	Volume	1600 m^3
	Surface apparente	225 m^2 (15 m *15 m)
Zone lamellaire dans la cuve de décantation	Nombre de lamelles	1680
	Largeur de lamelle	1,04 m
	Longueur de lamelle	2,5 m
	Angle d'inclinaison	60°

Annexe 2 Informations supplémentaires de Chapitre 4

- **Partie 1 Description en détails du modèle SimBio (Bernier, 2014)**

a) Structure générale du modèle et calcul du dimensionnement

Dans le modèle SimBio, la zone de lit de média est divisée par sept réacteurs homogènes successives, chacun possède d'une septième de hauteur de lit (voir Eq 1). Ce nombre de réacteurs est décidé en fonction des profils de concentrations observés dans les biofiltres simulés (Bernier, 2014).

$$Eq\ 1 \qquad V_{réacteur} = \frac{V_{lit}}{N_{réacteur}} = A_{lit} \times \left(\frac{H_{lit}}{N_{réacteur}}\right)$$

où
$V_{reacteur}$ est le volume d'un réacteur de la zone de lit filtrant (m^3).
V_{lit} est le volume de lit filtrant (m^3).
H_{lit} est la hauteur de lit filtrant (m).
A_{lit} est la surface apparente lit filtrant (m^2).
$N_{réacteur}$ est le nombre de réacteurs considéré ($N_{réacteur} = 7$).

Similaire au modèle de (Vigne, 2007) dans chaque réacteur de lit de média, le system de biofilm est illustré par un modèle de biofilm uni-dimensionnel. La phase de liquide à traiter dans le modèle de SimBio est décrite par un compartiment homogène. Le média filtrant dans le réacteur est considéré comme un compartiment inerte sur lequel le biofilm est attaché. Ce dernier consiste en deux couches de biofilm qui considérées être homogènes. Ce choix de nombre de couches de biofilm est pour accélérer le temps de calcul durant la simulation (Bernier, 2014). Le déplacement des composants solubles entre le compartiment de liquide à traiter et le biofilm est limité par une couche limite possédant d'une épaisseur constante. Dans chaque réacteur, le volume de compartiment de média filtrant ($V_{média}$) est fixé (voir Eq 2). Le volume de compartiment de liquide à traiter ($V_{liquide}$) change en fonction de volume de biofilm ($V_{biofilm}$) attaché sur le média (voir Eq 3). Le volume de biofilm est calculé en multipliant l'air d'échange média-liquide avec l'épaisseur de biofilm (voir Eq 4 et 5).

$$Eq\ 2 \qquad V_{média} = V_{réacteur} * (1 - \varepsilon_0)$$

$$Eq\ 3 \qquad V_{liquide} = V_{réacteur} - V_{média} - V_{biofilm} = V_{réacteur} \times \varepsilon$$

$$Eq\ 4 \qquad V_{biofilm} = A_a \times \sum d_j$$

$$Eq\ 5 \qquad A_a = a_a \times V_{réacteur}$$

où
ε_0 est la porosité initiale du média propre sans biofilm attaché (-)
ε est la porosité du média avec biofilm attaché (-)
d_j est l'épaisseur la couche j du biofilm (m)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)

a_a est l'aire spécifique du média (m^2/m^3)

Pour estimer l'épaisseur de la couche du biofilm, une épaisseur maximale est d'abord définie. En effet, la disponibilité des nutriments et la vitesse de fluide de média limitent l'épaisseur qu'un biofilm peut atteindre (Elenter *et al.*, 2007; Araújo *et al.*, 2016). Cependant, considérant la hétérogénéité de la distribution de la biomasse dans le biofiltre, il est difficile à quantifier ou estimer précisément cette épaisseur maximale du biofilm sous condition dynamique. Dans ce cas-ci, une épaisseur maximale constante est donc utilisée par le modèle SimBio. L'épaisseur maximale de chaque couche du biofilm est obtenue en divisant l'épaisseur maximale du biofilm par le nombre de couches considéré (2) (Eq 6).

Eq 6 $$d_{j,max} = {}^{d_{max}}/_{N_{couche}}$$

où
d_{max} est l'épaisseur maximale du biofilm (m)
$d_{j,max}$ est l'épaisseur maximale de la couche de biofilm j (m)
N_{couche} est le nombre de couches de biofilm considéré (-)

Dans le modèle SimBio, lorsque la concentration de particules dans une couche atteint à la masse volumique sèche de biofilm pré-définie, cette couche est considérée d'être remplie par les particules et son épaisseur égale à celle de maximum. L'épaisseur de la couche est calculée en se basant sur le rapport entre la concentration de particules et la masse volumique sèche de biofilm (voir Eq 7).

Eq 7 $$d_j = \frac{\sum X_{i,j}}{\rho_{sec}} \times d_{j,max}$$

où
$X_{i,j}$ est la concentration de composant particulaire i dans la couche j du biofilm (g/m^3)
ρ_{sec} est la masse volumique de la masse sèche de biofilm (g/m^3)

Afin de faciliter les calculs des réactions biologiques, les concentrations des composants solubles et particulaires sont calculées en se basant sur le volume maximal de la couche (Eq 8).

Eq 8 $$C_{i,j} = \frac{M_{i,j}}{V_{max,j}}$$

où
$M_{i,j}$ est la masse de composant i dans la couche du biofilm j (g)
$V_{max,j}$ est le volume maximal de la couche du biofilm (m^3)
$C_{i,j}$ est la concentration de composant i dans la couche du biofilm (g/m^3)

Déplacement des composants solubles

Dans le modèle SimBio, le déplacement des composants solubles entre les deux couches ainsi que entre le biofilm et la phase de liquide à traiter est décrit par la diffusion. Cette conceptualisation de déplacement a été déjà appliquée dans certains modèles de biofilm (Spengel et Dzombak, 1992; Rauch *et al.*, 1999; Vigne *et al.*, 2010). Les flux de diffusion sont calculés en se basant sur une approximation de la loi de Fick (voir Eq 9 et Eq 10). Tel que mentionné précédemment, un film liquide stagnant (couche limite) possédant d'une épaisseur fixée entre le biofilm et le liquide à traiter est considéré afin d'illustrer la résistance de diffusion entre le liquide et la couche biofilm 1. Considérant que le déplacement des composants solubles dans le biofilm n'est pas une ligne droite et doit suivre le chemin de l'eau pour traverser les pores présents dans le biofilm, la vitesse de diffusion des composants dans le biofilm est réduite par rapport celle dans l'eau en appliquant un facteur de réduction.

$$Eq\ 9 \qquad J_{S,i,liq} = \frac{f_D D_{W,S,i}}{L_f} \times \left(S_{i,liq} - S_{i,1}\right) \times A_a$$

où
$J_{S,i,liq}$ est le flux de composant soluble i diffusé de liquide à traiter vers la couche 1 du biofilm (g/j)
L_f est l'épaisseur de la couche limite entre liquide et le biofilm (m)
$D_{W,S,i}$ est le coefficient de diffusion de composant soluble i (m^2/j)
$S_{i,\ liq}$ et $S_{i,\ 1}$ est la concentration de composant soluble i dans le liquide et dans la couche 1 du biofilm respectivement (g/m^3)
f_D est le facteur de réduction de la diffusion dans le biofilm (-)

$$Eq\ 10 \qquad J_{S,i,1} = \frac{f_D D_{W,S,i}}{d_1} \times \left(S_{i,1} - S_{i,2}\right) \times A_a$$

où
$J_{S,i,1}$ est le flux de composant soluble i diffusé de la couche 1 du biofilm vers la couche 2 (g/j)
d_1 est l'épaisseur de la couche 1 du biofilm (m)
$S_{i,1}$ et $S_{i,2}$ est la concentration de composant soluble i de la couche 1 et 2 du biofilm respectivement (g/m^3)

Déplacement des composants particulaires

Par rapport aux composants solubles, plusieurs phénomènes physiques sont considérés dans le modèle SimBio pour illustrer le déplacement des composants particulaires dans chaque réacteur de lit de média :

Filtration

Dans le modèle SimBio, la filtration en profondeur est considérée comme le phénomène physique principal capturant les composants particulaires dans le liquide à traiter par le média filtrant. Pour rappel, ce type de filtration n'est pas un simple coincement physique, il correspond

au enlèvement des particules plus petites que les pores du média filtrant par les interactions physico-chimiques entre le composant particulaires et le média (McDowell-Boyer *et al.*, 1986). Les équations liées à la filtration en profondeur dans le modèle SimBio sont basées sur celles de Horner *et al.* (1986) (voir Eq 11). Selon l'équation Eq 11, l'accumulation des particules autour de média est exprimée par le dépôt volumique (volume de biofilm/ volume de réacteur) qui évolue dans le temps en fonction du coefficient de filtration du filtre, la concentration volumique de particules et la vitesse du fluide.

$$Eq\ 11 \qquad \frac{d\sigma}{dt} = \frac{\lambda C_{X,r} u}{1 - \varepsilon_D - C_{X,r}}$$

où
σ est le dépôt volumique des particules autour de média (m^3/m^3)
λ est le coefficient de filtration du filtre (1/j)
$C_{X,r}$ est la concentration volumique réelle de particules (m^3 particules /m^3 eau)
u est la vitesse du fluide (m/j)
ε_D est la porosité du dépôt de particules (-)

Le coefficient de filtration du filtre dans l'équation Eq 11 sert à représenter l'efficacité de filtration du filtre. Il est réduit lors de l'accumulation des particules sur le média filtrant. Afin d'estimer ce coefficient sous condition dynamique, l'équation semi-empirique développée par Ives (1970) est appliquée dans le modèle SimBio (Eq 12). Cette équation considère une efficacité initiale du filtre propre (λ_0). Les trois termes suivant λ_0 dans l'équation illustrent chacun un phénomène affectant l'efficacité de la filtration. Le premier terme représente l'augmentation de la surface disponible pour capter les particules dû à l'accumulation des particules autour de média filtrant. Le deuxième terme représente la diminution de la probabilité de contact entre les particules et le média à cause de l'augmentation de la vitesse du fluide dans les pores du média encrassés. Finalement, une quantité limite de particules accumulées sur le média (σ_u) est considérée et illustrée par le dernier terme. Lors que ce seuil est dépassé, la filtration ne peut pas être effectuée.

$$Eq\ 12 \qquad \lambda = \lambda_0 \left(1 + \beta \frac{\sigma}{\varepsilon_0}\right)^y \left(1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_0}\right)^z \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^x$$

où
λ_0 est le coefficient de filtration du filtre propre (1/j)
β est un coefficient géométrique lié à l'empilement du média (-)
σ_u est le dépôt volumique ultime des particules atour de média (m^3/m^3)
x, y et z sont les constantes empiriques (-)

L'équation développée par Horner *et al.* (1986) a été simplifiée dans le modèle SimBio en considérant que le volume possédé par un gramme de particule dans l'eau est similaire à celui d'un gramme de biofilm contenant des pores interstitiels. En conséquence, la concentration

volumique réelle de particules peut être transformées en concentration volumique apparent, ce qui facilite le calcul (voir Eq 13 et Eq 14).

Eq 13 $$C_{X,r} = C_{X,a}(1 - \varepsilon_D)$$

Eq 14 $$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{\lambda C_{X,r} u}{1 - \varepsilon_D - C_{X,r}} = \frac{\lambda C_{X,a} u}{1 - C_{X,a}}$$

où
$C_{X,a}$ est la concentration volumique apparente de particules dans l'eau (m^3 particules /m^3 eau)
σ est le dépôt volumique des particules autour de média (m^3/m^3)
λ est le coefficient de filtration du filtre (1/j)
$C_{X,r}$ est la concentration volumique réelle de particules (m^3 particules /m^3 eau)
u est la vitesse du fluide (m/j)
ε_D est la porosité du dépôt de particules (-)

Le dépôt volumique et la concentration volumique apparente de particules utilisés par l'équation Eq 14 sont transformés respectivement en masse de particules dans le biofilm (Eq 15) et en concentration massique (Eq 16) afin de faciliter le calcul de bilan de masse de particule (voir Eq 17 et Eq 18). Il est à noter que dans le modèle SimBio, toutes les particules déplaçant de la phase liquide vers le biofilm sous l'effet de la filtration en profondeur sont considérées entrer uniquement dans la couche de surface du biofilm.

Eq 15 $$\frac{d\sigma}{dt} = \frac{d\left({V_{biofilm}}/{V_{réacteur}}\right)}{dt} = \frac{d\left(\sum M_{X,i}\right)}{dt} \times \frac{a_a}{\rho_{sec} A_a}$$

Eq 16 $$C_{X,a} = \frac{\sum X_{i,liq}}{\rho_{sec}}$$

où
$M_{x,i}$ est la masse de composant particulaire i dans le biofilm (g)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)
a_a est l'aire spécifique du média (m^2/m^3)
ρ_{sec} est la masse volumique de la masse sèche de biofilm (g/m^3)
$X_{i,liq}$ est la concentration de composant particulaire i dans le liquide (g/m^3)

Eq 17 $$J_{F,global} = \frac{d\left(\sum M_{X,i}\right)}{dt} = \frac{\lambda \sum X_{i,l}\, u}{1 - \sum X_{i,l}/\rho_{sec}} \times \frac{A_a}{a_a}$$

Eq 18 $$J_{F,i} = J_{F,global} \times {X_{i,l}}/{\sum X_{i,l}}$$

où
$J_{F,global}$ et $J_{F,i}$ est respectivement le flux global de particules et le flux de composant particulaire i déplaçant de liquide vers la couche 1 du biofilm sous l'effet de filtration (g/j).

Echange des particules entre les couches du biofilm

Similaire à la diffusion des composants solubles, l'échange de particules entre les deux couches de biofilm est considéré avoir lieu lorsque la concentration de particules entre les deux couches du biofilm est différente :

$$Eq\ 19 \qquad J_{X,Exc,i,1} = -J_{X,Exc,i,2} = k_{Exc} \times \left(X_{i,1} - X_{i,2}\right) \times A_a$$

où
$J_{X,Exc,i,1\ ou\ 2}$ est le flux de composant particulaire i échangé par les deux couches du biofilm (g/j)
k_{exc} est la vitesse constante d'échange (m/d)
$X_{i,1}$ et $X_{i,2}$ est la concentration de composant particulaire i de la couche 1 et 2 du biofilm respectivement (g/m^3)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)

Détachement des particules du biofilm

Dans le modèle de SimBio, trois types de détachement de particules sont considérés par le modèle SimBio.

- **Détachement sous la force de cisaillement**

Le premier type de détachement représente l'influence de la force de cisaillement causée par l'écoulement des fluides sur l'épaisseur de biofilm. Ce détachement, illustré par une équation de premier ordre (Eq 20), est considéré avoir lieu uniquement dans la couche de surface du biofilm.

$$Eq\ 20 \qquad J_{X,Dét-1,i} = k_{Dét-1} A_a \frac{X_{i,1}}{\sum X_{i,1}}$$

où
$J_{X,Dét-1,i}$ est le flux de particules i détachées de la couche 1 du biofilm vers liquide sous la force de cisaillement (g/j).
$k_{Dét-1}$ est le taux de détachement (g/m^2/j)
A_a est l'aire d'échange média-liquide (m^2)
$X_{i,j}$ est la concentration de composant particulaire i dans la couche j du biofilm (g/m^3)

- **Détachement lorsque l'épaisseur maximale de la couche du biofilm est dépassée**

Le deuxième type de détachement, qui peut être également considéré comme un genre d'échange de particules entre les deux couches de biofilm, se déclenche lorsque l'épaisseur d'une couche dépasse l'épaisseur maximale préfixée. Comme ce qui est montré à l'équation (Eq 21), la quantité de particules correspond à ce dépassement est calculée. Ces particules se déplaceront soit vers l'autre couche, soit vers le liquide lorsque cette dernière est pleine.

$$Eq\ 21 \qquad J_{X,Dét-2,i,j} = k_{Dét-2} V_{max,j} \frac{\left(\sum X_{i,j} - \rho_{sec}\right)}{\sum X_{i,j}} X_{i,j}$$

où
$J_{X,Dét-2,i,j}$ est le flux de particules i détachées de la couche j du biofilm lié à l'épaisseur de la couche du biofilm (g/j)
$k_{Dét-2}$ est le taux de détachement (1/j)
$X_{i,j}$ est la concentration de composant particulaire i dans la couche j du biofilm (g/m^3)
ρ_{sec} est la masse volumique de la masse sèche de biofilm (g/m^3)
$V_{max,j}$ est le volume maximal de biofilm de la couche j (m^3)

- **Détachement sous l'effet de lavage**

Le troisième type de détachement concerne l'enlèvement du biofilm pendant le lavage du biofiltre. Pour rappel, afin d'éviter le problème de colmatage et d'assurer le bon fonctionnement de la biofiltration, un biofiltre fonctionne en cycle qui consiste une phase de traitement normal et une phase de lavage. Similaire au premier type de détachement, le détachement causé par lavage est considéré de n'affecter que la couche de surface du biofilm et décrit par une équation de premier ordre (Eq 22). Le temps de lavage considéré est proche de celui réellement appliqué dans les stations (environ 30 minutes). Une concentration minimale est considérée pour chaque composant particulaire afin d'éviter des problèmes numériques.

$$Eq\ 22\ Si\ k_{lavage}V_{biofilm,1}X_{i,1} > \frac{V_{biofilm,1}(X_{i,1}-X_{i,min})}{t_{lavage}} \Rightarrow J_{X,lavage,i} = \frac{V_{biofilm,1}(X_{i,1}-X_{i,min})}{t_{lavage}}$$

$$Sinon \Rightarrow J_{X,lavage,i} = k_{lavage}V_{biofilm,1}X_{i,1}$$

où
$J_{X,lavage,i}$ est le flux de particules i enlevé de la couche 1 du biofilm pendant lavage (g/j)
$X_{i,1}$ est la concentration de composant particulaire i dans la couche 1 du biofilm (g/m^3)
$X_{i,min}$ est la concentration minimale de composant particulaire i prédéterminée (g/m^3)
k_{lavage} est le constant cinétique de lavage (1/j)
t_{lavage} est le temps pour un lavage (j)
$V_{biofilm,1}$ est le volume de biofilm de la couche 1 (m^3)

Mélange du média entre les différents réacteurs pendant lavage

Le modèle SimBio prend en compte aussi le phénomène de mélange de média entre les réacteurs lors de lavage. Comme le compartiment de média dans chaque réacteur est considéré inerte et son volume ne change pas, seulement le biofilm attaché dessus échange avec celui des autres réacteurs de média. La quantité de biofilm accepté ou perdu dans un réacteur est calculée de manière suivante : (1) Un taux de mélange du média est considéré pour illustrer l'importance de mélange (voir Eq 23). (2) La masse moyenne de particule de chaque couche du biofilm dans le lit de média est calculée (voir le premier terme entre la parenthèse d'Eq 23). La quantité de particule à perdre ou recevoir pour chaque couche d'un réacteur est déterminée à partir de la différence entre la masse moyenne de la couche du lit et celle du réacteur (le deuxième terme entre la parenthèse d'Eq 23).

$$Eq\ 23 \qquad J_{X,mix,i,j,k} = k_{mix}\left(\sum \frac{M_{x,i,j,k}}{N_{réacteur}} - M_{x,i,j,k}\right)$$

où
$J_{X,mix,i,j,k}$ est le flux de composant particule i à échanger pour la couche j de réacteur k (g/j)
k_{mix} est le taux d'échange du média (1/d)
$N_{réacteur}$ est le nombre de réacteur de lit filtrant (-)
$M_{i,j,k}$ est la masse de composant particulaire i dans la couche j du biofilm de réacteur k (g/m^3)

Réactions biologiques

Considérant que les concentrations en biomasse dans la phase liquide sont beaucoup plus faibles par rapport à celles dans le biofilm, les réactions biologiques dans le modèle SimBio ont lieu uniquement dans les deux couches de biofilm. Le modèle biologique utilisé par le modèle SimBio est une version modifiée du modèle ASM1 (Henze *et al.*, 2000a). Les modifications principales sont suivantes :

Contrairement au modèle ASM1 qui utilise une seule étape de réaction pour décrire la nitrification et la dénitrification, le nitrite est considéré dans le modèle SimBio, comme intermédiaire pour ces deux processus biologiques. Cette extension du modèle permet de prédire la production et l'élimination du nitrite pendant le traitement. Concrètement, la nitrification est divisée en deux réactions successives : la nitritation et la nitratation (Sin *et al.*, 2008d). La biomasse autotrophe considérée dans le modèle ASM1 est donc divisée en biomasse nitritante et biomasse nitratante. Les deux premières équations de la dénitrification du modèle de Hiatt et Grady (2008) sont utilisées pour décrire la dénitrification hétérotrophe. Le nitrate est d'abord transformé en nitrite et ensuite en diazotes. Selon le modèle de Hiatt et Grady (2008), toutes les bactéries hétérotrophes sont actives en aérobie, tandis qu'en anoxie, différentes fractions de biomasse hétérotrophe sont utilisées pour illustrer la réduction des nitrates et des intermédiaires produits durant la dénitrification. Cette conceptualisation est conservée dans le modèle SimBio.

L'assimilation du phosphore pendant la croissance des bactéries sont prise en compte dans le modèle qui est décrite par l'équation similaire à l'assimilation de NH_4^+ pendant la croissance de la biomasse hétérotrophe (Hauduc *et al.*, 2013).La matrice de Gujer du modèle SimBio est montré aux Tableaux A2.1 et A2.2 dans l'Annexe 2.

Aération

Afin de décrire les transfert gaz-liquide dans les biofiltres aérés, les équations concernant le transfert d'oxygène sont intégrées dans le modèle SimBio. Ce transfert est pris en compte non seulement dans les réacteurs de média, mais aussi dans la zone de surverse afin de simuler la concentration en oxygène dissous dans l'endroit où la sonde d'oxygène est installée. Le flux d'oxygène transféré du gaz vers le liquide est décrit par une équation classique basée sur le coefficient de transfert (k_La) (voir Eq 24) (EPA, 1989).

Eq 24 $$J_{OD} = \alpha \times F \times k_L a_{O2} \times \left(\beta_{sol} \times C^*{}_{O2} - S_{o,liq}\right) \times V_{liquide}$$

où
J_{OD} est le flux d'oxygène transféré du gaz vers le liquide dans les réacteurs de média (g/j)
α est le facteur de la réduction de transfert gaz-liquide dans l'eau usée (-)
F est le facteur de la réduction de transfert gaz-liquide issue d'encrassement des diffuseurs (-)
$k_L a_{O2}$ est le coefficient de transfert gaz-liquide d'oxygène (1/j)
C^*_{O2} est la concentration en oxygène dissout à l'équilibre dans le liquide (g/m^3)
$S_{o,\,liq}$ est la concentration en oxygène dissout dans le liquide (g/m^3)
B_{sol} est le facteur de la solubilité de l'oxygène dans une eau usée (-)
$V_{liquide}$ est le volume du liquide (m^3)

Dans le modèle SimBio, le coefficient de transfert d'oxygène varie en fonction du débit d'air injecté dans le biofiltre et de la température (voir Eq 25) (EPA, 1989).

Eq 25 $$k_L a|_{T,Qair2} = k_L a|_{20,Qair1} \left({Q_{air2}}/{Q_{air1}}\right)^m \times \theta^{T-20}$$

où
$k_L a|_{T,Qair2}$ est le coefficient de transfert d'oxygène au débit d'air Qair2 à T°C (1/j)
$k_L a|_{20,Qair1}$ est le coefficient de transfert d'oxygène au débit d'air Qair1 à 20°C (1/j)
m est une constante empirique (-)
θ est le coefficient d'Arrhenius (-)

Les influences de la pression de l'eau dans le biofiltre et de la température sur la concentration en oxygène dissout à l'équilibre dans l'eau sont également prises en compte et décrites par l'équation Eq 26 et Eq 27, respectivement (Sander, 2015a).

Eq 26 $$C^* = f_{O2} * K_H * \left(P_{atm} + \delta\left(H_{r,k} + H_{surverse}\right)\right)$$

Eq 27 $$K_H|_{T2} = K_H|_{T1} \times \exp\left(\frac{d(\ln K_H)}{d(1/T)} \times \left(\frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1}\right)\right)$$

où
K_H est la constante d'Henry pour l'oxygène (g/m^3/atm)
P_{atm} est la pression d'atmosphère (atm)
δ est le facteur de conversion hauteur-pression (atm/m)
f_{O2} est la fraction volumique d'oxygène dans le gaz (-)
$H_{r,k}$ et $H_{surverse}$ est le profondeur de réacteur k et la hauteur de la zone de surverse respectivement (m)
$K_H|_{T1}$ et $K_H|_{T2}$ est la constante d'Henry à la température de T1 (K) et T2 (K) respectivement (g/m^3/atm)

Il faut à noter que dans le modèle SimBio, il n'y pas d'une phase gazeuse illustrant le volume de gaz dans le biofiltre et le changement de la composition d'air en fonction d'hauteur de biofiltre n'est pas pris en compte non plus. Pour cette raison, la fraction volumique d'oxygène dans l'air est constante dans le modèle.

Référence

Araújo, P. A., Malheiro, J., Machado, I., Mergulhão, F., Melo, L., & Simões, M. (2016). Influence of flow velocity on the characteristics of pseudomonas fluorescens biofilms. *Journal of Environmental Engineering, 142*(7), 04016031.

Bernier, J. (2014). *Modélisation Simultanée de l'Enlèvment des Nutriments et de l'Evolution de la Perte de Charge en Biofiltration des Eaux Usées.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Elenter, D., Milferstedt, K., Zhang, W., Hausner, M., & Morgenroth, E. (2007). Influence of detachment on substrate removal and microbial ecology in a heterotrophic/autotrophic biofilm. *Water Research, 41*(20), 4657-4671.

EPA. (1989). *Design Manual: Fine Pore Aeration Systems*. (EPA/625/1-89/023). Risk Reduction Research Labs. Cincinnati, Ohio, USA.

Hauduc, H., Rieger, L., Oehmen, A., van Loosdrecht, M. C. M., Comeau, Y., Heduit, A., Vanrolleghem, P. A., & Gillot, S. (2013). Critical review of activated sludge modeling: State of process knowledge, modeling concepts, and limitations. *Biotechnology and Bioengineering, 110*(1), 24-46.

Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosedrecht, M. C. M. (2000a). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Hiatt, W. C. et Grady, C. P. L. J. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification, and denitrification. *Water Environment Research, 80*(11), 2145-2156.

Horner, R. M. W., Jarvis, R. J., & Mackie, R. I. (1986). Deep bed filtration: A new look at the basic equations. *Water Research, 20*(2), 215-220.

Ives, K. J. (1970). Rapid filtration. *Water Research, 4*(3), 201-223.

McDowell-Boyer, L. M., Hunt, J. R., & Sitar, N. (1986). Particle transport through porous media. *Water Resources Research, 22*(13), 1901-1921.

Rauch, W., Vanhooren, H., & Vanrolleghem, P. A. (1999). A simplified mixed-culture biofilm model. *Water Research, 33*(9), 2148-2162.

Sander, R. (2015a). Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent. *Atmospheric Chemistry and Physics, 15*(8), 4399-4981.

Sin, G., Kaelin, D., Kampschreur, M. J., Takacs, I., Wett, B., Gernaey, K. V., Rieger, L., Siegrist, H., & van Loosdrecht, M. C. M. (2008d). Modelling nitrite in wastewater treatment systems: A discussion of different modelling concepts. *Water Science & Technology, 58*(6), 1155-1171.

Spengel, D. B. et Dzombak, D. A. (1992). Biokinetic modeling and scale-up considerations for rotating biological contactors. *Water Environment Research, 64*(3), 223-235.

Vigne, E. (2007). *Étude et Modélisation Dynamique d'un Procédé par Biofiltration en Nitrification Tertiaire.* (Thèse de Doctorat). Université Laval, Québec, QC, Canada.

Vigne, E., Choubert, J. M., Canler, J. P., Héduit, A., Sorensen, K., & Lessard, P. (2010). A biofiltration model for tertiary nitrification of municipal wastewaters. *Water Research, 44*(15), 4399-4410.

Tableau A2.1 Matrice de Gujer du modèle SimBio (partie stœchiométrie).

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
j	Ss	Xs	Xbh	Xbai	Xbaa	Xp	So	Sno	Sni	Snn	Snh	Snd	Xnd	Spo	Salk
1	$-\frac{1}{Y_H}$		1				$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$				$-ixbn$			$-ixbp$	$-\frac{ixbn}{14}$
2	$-\frac{1}{\eta_Y Y_H}$		1					$-\frac{1-\eta_Y Y_H}{8/7 * \eta_Y Y_H}$	$\frac{1-\eta_Y Y_H}{8/7 * \eta_Y Y_H}$		$-ixbn$			$-ixbp$	$-\frac{ixbn}{14}$
3	$-\frac{1}{\eta_Y Y_H}$		1						$-\frac{1-\eta_Y Y_H}{12/7 * \eta_Y Y_H}$	$\frac{1-\eta_Y Y_H}{12/7 * \eta_Y Y_H}$	$-ixbn$			$-ixbp$	$\frac{1-\eta_Y Y_H}{14 * 12/7 * \eta_Y Y_H} - \frac{ixbn}{14}$
4				1			$-\frac{48/14 - Y_{Al}}{Y_{Al}}$		$\frac{1}{Y_{Al}}$		$-ixbn$ $-\frac{1}{Y_{Al}}$			$-ixbp$	$-\frac{ixbn}{14} - \frac{1}{7Y_{Al}}$
5					1		$-\frac{16/14 - Y_{AA}}{Y_{AA}}$	$\frac{1}{Y_{AA}}$	$-\frac{1}{Y_{AA}}$		$-ixbn$			$-ixbp$	$-\frac{ixbn}{14}$
6		$1-f_p$	-1			f_p							$ixbn - f_p ixun$	$ixbp - f_p ixup$	
7		$1-f_p$		-1		f_p							$ixbn - f_p ixun$	$ixbp - f_p ixup$	
8		$1-f_p$			-1	f_p							$ixbn - f_p ixun$	$ixbp - f_p ixup$	
9											1	-1			$\frac{1}{14}$
10	1	-1													
11												1	-1		
	Substrat soluble biodégradable (g DCO/m^3)	Substrat particulaire biodégradable (g DCO/m^3)	Biomasse hétérotrophe (g DCO/m^3)	Biomasse nitritante (g DCO/m^3)	Biomasse nitratante (g DCO/m^3)	Particules inertes issues de la mort cellulaire (g DCO/m^3)	Oxygène dissout (g DCO/m^3)	Nitrate (g N/m^3)	Nitrite (g N/m^3)	Azote gazeux (g N/m^3)	Azote ammoniacal (g N/m^3)	Azote organique soluble (g N/m^3)	Azote organique particulaire (g N/m^3)	Orthophosphates (g P/m^3)	Alcalinité (mole/m^3)

Tableau A2.2 Matrice de Gujer du modèle SimBio (partie taux des processus).

j	Procédé	Taux du procédé
1	Croissance hétérotrophe aérobique	$\mu_{H,max}\left(\frac{S_S}{S_S+K_S}\right)\left(\frac{S_O}{S_O+K_{OH}}\right)X_{BH}$
2	Croissance hétérotrophe anoxique (NO_3^-)	$\eta_g\mu_{H,max}\left(\frac{S_S}{S_S+K_{S2}}\right)\left(\frac{K_{OH2}}{S_O+K_{OH2}}\right)\left(\frac{S_{NO}}{S_{NO}+K_{NO}}\right)X_{BH}$
3	Croissance hétérotrophe anoxique (NO_2^-)	$\eta_{g2}\mu_{H,max}\left(\frac{S_S}{S_S+K_{S3}}\right)\left(\frac{K_{OH3}}{S_O+K_{OH3}}\right)\left(\frac{S_{NI}}{S_{NI}+K_{NI}}\right)X_{BH}$
4	Croissance nitritantes aérobique	$\mu_{AI,max}\left(\frac{S_{NH}}{S_{NH}+K_{NH}}\right)\left(\frac{S_O}{S_O+K_{OA}}\right)X_{BAI}$
5	Croissance nitratantes aérobique	$\mu_{AA,max}\left(\frac{S_{NI}}{S_{NI}+K_{ANI}}\right)\left(\frac{S_O}{S_O+K_{OA2}}\right)X_{BAA}$
6	Mort hétérotrophe	$b_H X_{BH}$
7	Mort nitritrantes	$b_{AI}X_{BAI}$
8	Mort nitratrantes	$b_{AA}X_{BAA}$
9	Ammonification	$k_A S_{ND} X_{BH}$
10	Hydrolyse	$k_H\frac{X_S/X_{BH}}{K_X+X_S/X_{BH}}\left[\left(\frac{S_O}{S_O+K_{OH}}\right)+\eta_H\left(\frac{K_{OH2}}{S_O+K_{OH2}}\right)\left(\frac{S_{NO}}{S_{NO}+K_{NO3}}\right)+\eta_H\left(\frac{K_{OH3}}{S_O+K_{OH3}}\right)\left(\frac{S_{NI}}{S_{NI}+K_{NI}}\right)\right]X_{BH}$
11	Hydrolyse azote	$\rho_8(X_{ND}/X_S)$

- **Partie 2 Description en détails du modèle développé**

Tableau A2.3 Matrice de Gujer du modèle développé (partie processus considérés).

j	Processus
1	Croissance aérobie de la biomasse hétérotrophe
2	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur le nitrate
3	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur le nitrite
4	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur l'oxyde nitrique
5	Croissance anoxique de la biomasse hétérotrophe sur l'oxyde nitreux
6	Oxydation de l'ammoniac en hydroxylamine
7	Croissance aérobie de la biomasse nitritante
8	Oxydation de l'oxyde nitrique en nitrite
9	Réduction de l'oxyde nitrique en oxyde nitreux
10	Réduction de l'acide nitreux en oxyde nitreux
11	Croissance aérobie de la biomasse nitratante
12	Mort de la biomasse hétérotrophe
13	Mort de la biomasse nitritante
14	Mort de la biomasse nitratante
15	Ammonification
16	Hydrolyse du substrat particulaire biodégradable
17	Hydrolyse de l'azote organique particulaire

Tableau A2.4 Matrice Gujer du modèle développé (partie stœchiométrie des composants solubles).

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
j	S_B	S_{O_2}	S_{NO}	$S_{B,N}$	S_{NH_4}	S_{ALK}	S_{PO_4}	S_{NH_2OH}	S_{NO_2}	S_{N_2O}	S_{NO_3}	S_{N_2}
1	$\frac{-1}{Y_{OHO}}$	$\frac{-(1-Y_{OHO})}{Y_{OHO}}$			$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$					
2	$\frac{-1}{\eta_{YOHO,Ax} * Y_{OHO}}$				$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$		A		-A	
3	$\frac{-1}{\eta_{YOHO,Ax} * Y_{OHO}}$		C		$-i_{N_XBio}$	B	$-i_{P_XBio}$		- C			
4	$\frac{-1}{\eta_{YOHO,Ax} * Y_{OHO}}$		- C		$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$			C		
5	$\frac{-1}{\eta_{YOHO,Ax} * Y_{OHO}}$				$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$			- C		C
6		-8/7			-1	-1/14		1				
7		$\frac{-\left(\frac{12}{7}-Y_{AOB}\right)}{Y_{AOB}}$	$\frac{1}{Y_{AOB}}$		$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$	$\frac{-1}{Y_{AOB}}$				
8		-4/7	-1			-1/14			1			
9			-4			-1/14		-1	1	4		
10						1/14		-1	-1	2		
11		$\frac{-(8/7-Y_{NOB})}{Y_{NOB}}$			$-i_{N_XBio}$	$-\frac{i_{N_XBio}}{14}$	$-i_{P_XBio}$		$\frac{-1}{Y_{AOB}}$		$\frac{1}{Y_{AOB}}$	
12							$i_{P_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{P_XBio,lys}$					
13							$i_{P_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{P_XBio,lys}$					
14							$i_{P_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{P_XBio,lys}$					
15				- 1	1	1/14						
16	1											
17				1								
	DCO soluble biodégradable (gDCO/m³)	Oxygène dissous (gO_2/m^3)	Oxyde nitrique (gN/m³)	Azote organique soluble (gN/m³)	Azote ammoniacal (gN/m³)	Alcalinité (mole/m³)	Orthophosphates (gP/m³)	Hydroxylamine (gN/m³)	Nitrite (gN/m³)	Oxyde nitreux (gN/m³)	Nitrate (gN/m³)	Diazote dissout (gN/m³)

A= $\frac{1-\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}}{\frac{8}{7}*\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}}$ B= $\frac{1-\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}}{\frac{14}{7}*4*\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}} - \frac{i_{N_XBio}}{14}$ C=$\frac{1-\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}}{\frac{4}{7}*\eta_{YOHO,Ax}*Y_{OHO}}$

Tableau A2.5 Matrice de Gujer du modèle développé (partie stœchiométrie des composants particulaires).

i	13	14	15	16	17	18
j	X_{OHO}	X_{AOB}	$X_{U,E}$	X_{NOB}	X_{CB}	$X_{CB,N}$
1	**1**					
2	**1**					
3	**1**					
4	**1**					
5	**1**					
6						
7		**1**				
8						
9						
10						
11				**1**		
12	**- 1**		$f_{XU_Bio,lys}$		$1 - f_{XU_Bio,lys}$	$i_{N_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{N_XBio,lys}$
13		**- 1**	$f_{XU_Bio,lys}$		$1 - f_{XU_Bio,lys}$	$i_{N_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{N_XBio,lys}$
14			$f_{XU_Bio,lys}$	**-1**	$1 - f_{XU_Bio,lys}$	$i_{N_XBio} - f_{XU_Bio,lys} * i_{N_XBio,lys}$
15						
16					**- 1**	
17						**- 1**
	Biomasse hétérotrophe (gDCO/m^3)	**Biomasse nitritante (gDCO/m^3)**	**DCO particulaire inerte issue de la mort cellulaire (gDCO/m^3)**	**Biomasse nitratante (gDCO/m^3)**	**DCO particulaire biodégradable (gDCO/m^3)**	**Azote organique particulaire (gN/m^3)**

Tableau A2.6 Matrice de Gujer du modèle développé (partie taux des processus).

j	Taux du processus
1	$\mu_{OHO,Max} * \frac{S_B}{K_{SB,OHO} + S_{B,Org}} * \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,OHO} + S_{O_2}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,OHO} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,OHO} + S_{PO_4}} * X_{OHO}$
2	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2} * \mu_{OHO,Max} * \frac{S_B}{K_{SB,OHO,R2} + S_{B,Org}} * \frac{K_{I,O_2,OHO,R2}}{K_{I,O_2,OHO,R2} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO_3}}{K_{NO_3,OHO} + S_{NO_3}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,OHO} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,OHO} + S_{PO_4}} * X_{OHO}$
3	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3} * \mu_{OHO,Max} * \frac{S_B}{K_{SB,OHO,R3} + S_{B,Org}} * \frac{K_{I,O_2,OHO,R3}}{K_{I,O_2,OHO,R3} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO_2}}{K_{NO_2,OHO} + S_{NO_2}} * \frac{K_{I,NO,OHO,R3}}{K_{I,NO,OHO,R3} + S_{NO}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,OHO} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,OHO} + S_{PO_4}} * X_{OHO}$
4	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4} * \mu_{OHO,Max} * \frac{S_B}{K_{SB,OHO,R4} + S_{B,Org}} * \frac{K_{I,O_2,OHO,R4}}{K_{I,O_2,OHO,R4} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO}}{K_{NO,OHO} + S_{NO} + S_{NO}{}^2/K_{I,NO,OHO,R4}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,OHO} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,OHO} + S_{PO_4}} * X_{OHO}$
5	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5} * \mu_{OHO,Max} * \frac{S_B}{K_{SB,OHO,R5} + S_{B,Org}} * \frac{K_{I,O_2,OHO,R5}}{K_{I,O_2,OHO,R5} + S_{O_2}} * \frac{S_{N_2O}}{K_{N_2O,OHO} + S_{N_2O}} * \frac{K_{I,NO,OHO,R5}}{K_{I,NO,OHO,R5} + S_{NO}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,OHO} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,OHO} + S_{PO_4}} * X_{OHO}$
6	$\frac{\mu_{AOB,Max}}{Y_{AOB}} * \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,AOB,AMO} + S_{O_2}} * \frac{S_{NH_3}}{K_{NH_3,AOB} + S_{NH_3}} * X_{AOB}$
7	$\mu_{AOB,Max} * \frac{S_{NH_4}}{K_{I,NH_4,AOB} + S_{NH_4}} * \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,AOB} + S_{O_2}} * \frac{S_{NH_2OH}}{K_{NH_2OH,AOB} + S_{NH_2OH}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,AOB} + S_{PO_4}} * X_{AOB}$
8	$\frac{\mu_{AOB,Max}}{Y_{AOB}} * \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,AOB} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO}}{K_{NO,AOB,HAO} + S_{NO}} * X_{AOB}$
9	$\eta_{\mu AOB,R9} * \frac{\mu_{AOB,Max}}{Y_{AOB}} * \frac{S_{NH_2OH}}{K_{NH_2OH,AOB} + S_{NH_2OH}} * \frac{S_{NO}}{K_{NO,AOB} + S_{NO}} * X_{AOB}$
10	$\eta_{\mu AOB,R10} * \frac{\mu_{AOB,Max}}{Y_{AOB}} * \frac{S_{NH_2OH}}{K_{NH_2OH,AOB} + S_{NH_2OH}} * \frac{S_{HNO_2}}{K_{HNO_2,AOB} + S_{HNO_2}} * DO_{Haldane} * X_{AOB}$
11	$\mu_{NOB,Max} * \frac{S_{NO_2}}{K_{NO_2,NOB} + S_{NO_2}} * \frac{S_{O_2}}{K_{O_2,NOB} + S_{O_2}} * \frac{S_{NH_4}}{K_{NH_4,NOB} + S_{NH_4}} * \frac{S_{PO_4}}{K_{PO_4,NOB} + S_{PO_4}} * X_{NOB}$
12	$b_{OHO} * X_{OHO}$
13	$b_{AOB} * X_{AOB}$
14	$b_{NOB} * X_{NOB}$
15	$q_{am,OHO} * S_{B,N} * X_{OHO}$
16	$q_{XCB_SB,hyd} * \frac{X_{CB}/X_{OHO}}{K_{XCB,hyd} + X_{CB}/X_{OHO}} * \left(\frac{S_{O_2}}{K_{O_2,OHO,R1} + S_{O_2}} + \eta_{qhyd,Ax} * \frac{K_{O_2,OHO,R1}}{K_{O_2,OHO,R1} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO_3} + S_{NO_2} + S_{NO} + S_{N_2O}}{K_{NO_3,OHO} + S_{NO_3} + S_{NO_2} + S_{NO} + S_{N_2O}}\right) * X_{OHO}$
17	$q_{XCB_SB,hyd} * \frac{X_{CB,N}}{X_{CB}} * \frac{X_{CB}/X_{OHO}}{K_{XCB,hyd} + X_{CB}/X_{OHO}} * \left(\frac{S_{O_2}}{K_{O_2,OHO,R1} + S_{O_2}} + \eta_{qhyd,Ax} * \frac{K_{O_2,OHO,R1}}{K_{O_2,OHO,R1} + S_{O_2}} * \frac{S_{NO_3} + S_{NO_2} + S_{NO} + S_{N_2O}}{K_{NO_3,OHO} + S_{NO_3} + S_{NO_2} + S_{NO} + S_{N_2O}}\right) * X_{OHO}$

- **Partie 3 Résultats pour le modèle de nitrification par biofiltration**

Tableau A2.7 Valeur par défaut et espace d'échantillonnage attribuée aux paramètres pour l'analyse de sensibilité du modèle en nitrification. (A : (Bernier et al., 2014b), B : WEST® ; C :(Pocquet et al., 2016), D : (Hiatt et Grady, 2008),E : (USEPA, 1989), F :(Ohashi et al., 1981), G :(Henze et al., 2000b), H :(Lang et al., 2016))

Paramètres	Symboles	Unités	Valeurs par défaut	Espaces attribuées	Référence
Débit d'air de référence pour le calcul de k_La	Air_ref	Nm^3/j	44 980	20%	A
Facteur de la solubilité des composants gazeuses dans l'eau usée	β_{sol}	-	0,95	20%	A
Taux d'échange entre les couches de biofilm	k_{exc}	1/j	1	50%	-
Facteur de réduction de la diffusion des composants dans le biofilm	f_D	-	0,7	20%	A
Facteur de la réduction de transfert gaz-liquide issue d'encrassement des diffuseurs	F	-	0,95	20%	A
Facteur de conversion de la DCO en DBO_5 en sortie	i_{COD_BOD}	gO_2/gO_2	0,65	20%	B
Facteur de conversion de la DCO particulaire en MES en sortie	i_{TSS_COD}	g/gO_2	0,75	20%	A
Constant de demi-saturation en HNO_2 pour la biomasse AOB	$K_{HNO2,\ AOB}$	gN/m^3	0,004	20%	C
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I,\ NO,\ OHO,\ R5}$	gN/m^3	0,075	20%	D
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,\ NO,\ OHO,\ R4}$	gN/m^3	0,3	20%	D
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2 en anoxie	$K_{I,\ NO,\ OHO,\ R3}$	gN/m^3	0,5	20%	D
Constante d'inhibition en oxygène pour la réduction du HNO_2 en N_2O	$K_{I,\ O2,\ AOB}$	gO_2/m^3	0,8	20%	C
Constante de limitation en NH_4^+ pour la croissance de la biomasse AOB	$K_{I,\ NH4,\ AOB}$	gN/m^3	$1*10^{-12}$	20%	C
Constante de demi-saturation en N_2O pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{N2O,\ OHO}$	gN/m^3	0,05	20%	D
Constante de demi-saturation en NH_2OH pour la biomasse AOB	$K_{NH2OH,\ AOB}$	gN/m^3	0,018*	20%	-
Constante de demi-saturation en NH_3 pour la biomasse AOB	$K_{NH3,\ AOB}$	gN/m^3	0,004*	20%	-
Constante de demi-saturation en NH_4^+ pour la biomasse NOB	$K_{NH4,\ NOB}$	gN/m^3	0,05	20%	A

Constante de demi-saturation en NH_4^+ pour la biomasse hétérotrophe	$K_{NH4, OHO}$	gN/m^3	0,05	20%	A
Constante de demi-saturation en NO_2^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO2, OHO}$	gN/m^3	0,2	20%	D
Constante de demi-saturation en NO_2^- pour la biomasse NOB	$K_{NO2, AOB}$	gN/m^3	0,2	20%	A
Constante de demi-saturation en NO_3^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO3, OHO}$	gN/m^3	0,2	20%	A
Constante d'affinité en NO de l'oxydation NO en N_2O par la biomasse AOB	$K_{NO, AOB, HAO}$	gN/m^3	0,0003	20%	C
Constante d'affinité en NO de la réduction du NO en N_2O par la biomasse AOB	$K_{NO, AOB, NN}$	gN/m^3	0,008	20%	C
Constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO, OHO}$	gN/m^3	0,05	20%	D
Constante de demi-saturation en oxygène de la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{O2, OHO}$	gO_2/m^3	0,1	20%	D
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I, O2, OHO, R5}$	gO_2/m^3	0,1	20%	D
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I, O2, OHO, R4}$	gO_2/m^3	0,1	20%	D
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{I, O2, OHO,R3}$	gO_2/m^3	0,1	20%	D
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{I, O2, OHO, R2}$	gO_2/m^3	0,1	20%	D
Constante d'affinité en oxygène de l'oxydation de NH_3 en NH_2OH par la biomasse AOB	$K_{O2, AOB, AMO}$	gO_2/m^3	1,5	20%	H
Constante de demi-saturation en oxygène pour la biomasse AOB	$K_{O2, AOB}$	gO_2/m^3	0,3	20%	H
Constante de l'effet d'oxygène pour la réduction du HNO_2 en N_2O	$K_{O2, AOB, ND}$	gO_2/m^3	0,5	20%	C
Constante de demi-saturation en oxygène pour la biomasse NOB	$K_{O2, NOB}$	gO_2/m^3	0,6	20%	A
Constante de demi-saturation en orthophosphates pour la biomasse autotrophe	$K_{PO4, AUT}$	gP/m^3	0,01	20%	A
Constante de demi-saturation en orthophosphates pour la biomasse hétérotrophe	$K_{PO4, OHO}$	gP/m^3	0,01	20%	A

Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{SB, OHO}$	gO_2/m^3	20	20%	A
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB, OHO, R5}$	gO_2/m^3	40	20%	D
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB, OHO, R4}$	gO_2/m^3	20	20%	D
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB, OHO, R3}$	gO_2/m^3	20	20%	D
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB, OHO, R2}$	gO_2/m^3	20	20%	D
Constante de demi-saturation en DCO particulaire biodégradable pour la vitesse d'hydrolyse	$K_{XCB,hyd}$	gO_2/gO_2	0,03	20%	G
Facteur de réduction du transfert gaz-liquide d'oxygène dans la zone de surverse de lit de média	k_La_R	-	0,032	20%	A
Coefficient de transfert d'oxygène au débit d'air de référence pour le calcul de k_La	k_La_ref	Nm^3/h	81,9	20%	A
Constante A dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	A	-	2	20%	F
Constante B' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	B'	-	4,23	20%	F
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,3333	20%	F
Constante K' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	K'	-	0,51	20%	F
Constante m' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	m'	-	0,833	20%	F
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	0,6	20%	F
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,075	50%	-
Rendement de la biomasse AOB	Y_{AOB}	gO_2/gN	0,21	20%	A
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,67	20%	A
Rendement de la biomasse NOB	Y_{NOB}	gO_2/gN	0,06	20%	A
Taux de mortalité de la biomasse AOB	b_{AOB}	1/j	0,17	20%	A

Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,62	20%	G
Taux de mortalité de la biomasse NOB	b_{NOB}	1/j	0,17	20%	A
Fraction de la biomasse transformée en DCO inerte lors de la mort bactérienne	$f_{XUE,bio,lys}$	-	0,08	20%	A
Facteur d'empilement du média	β	-	1	20%	A
Quantité d'azote dans la biomasse	i_{N_XBio}	gN/gO_2	0,086	20%	G
Quantité d'azote dans les produits de la mort bactérienne	$i_{N_XBio,lys}$	gN/gO_2	0,06	20%	G
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	0,015	20%	A
Quantité de phosphore dans les produits de la mort bactérienne	$i_{P_XBio,lys}$	gP/gO_2	0,015	20%	A
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,08	20%	G
Taux d'hydrolyse	$q_{XCB_SB,hyd}$	1/j	3	20%	G
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,945**	20%	A
Constante pour le diffuseur d'air et la configuration du système dans l'équation pour le calcul de k_La	m	-	0,85	20%	E
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse AOB	$\mu_{AOB,Max}$	1/j	0,8	20%	A
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	6	20%	G
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse NOB	$\mu_{NOB,Max}$	1/j	1	20%	A
Facteur de réduction du taux d'hydrolyse en anoxie	$\eta_{qhyd,\ Ax}$	-	0,4	20%	D
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,\ Ax,\ R2}$	-	0,28	20%	D
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,\ Ax,\ R3}$	-	0,16	20%	D
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en	$\eta_{\mu OHO,\ Ax,\ R4}$	-	0,35	20%	D

anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO					
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le N_2O	$\eta_{\mu OHO,\ Ax,\ R5}$	-	0,35	20%	D
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,\ Ax}$	-	0,9	20%	D
Facteur de correction du taux de réduction de l'oxyde nitrique en oxyde nitreux	$\eta_{\mu AOB,\ R10}$	-	0,25	20%	C
Facteur de correction du taux de réduction de l'acide nitreux en oxyde nitreux	$\eta_{\mu AOB,\ R9}$	-	0,0015	20%	C
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	133600**	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur $K_{XCB,hyd}$	$\theta_{KXCB,hyd}$	-	1,072	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur b_{AOB}	θ_{bAOB}	-	1,029	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur b_{OHO}	θ_{bOHO}	-	1,029	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur b_{NOB}	θ_{bNOB}	-	1,029	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur $q_{OHO,\ am}$	$\theta_{qOHO,am}$	-	1,072	20%	G
Coefficient de l'effet de la température sur $q_{XCB_SB,hyd}$	$\theta_{qXCB_SB,hyd}$	-	1,072	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur k_La	θ_{kLa}	-	1,005	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur $\mu_{AOB,\ Max}$	$\theta_{\mu AOB,Max}$	-	1,078	20%	A
Coefficient de l'effet de la température sur $\mu_{OHO,\ Max}$	$\theta_{\mu OHO,Max}$	-	1,072	20%	G
Coefficient de l'effet de la température sur $\mu_{NOB,\ Max}$	$\theta_{\mu NOB,Max}$	-	1,09	20%	A
Taux d'échange de média pendant le traitement	k_{mix_t}	1/j	2	50%	-
Taux d'échange de média pendant le lavage	k_{mix_l}	1/j	20	20%	-
Constante empirique x dans l'équation de coefficient de filtration	x	-	1	20%	A
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	3	20%	A

Constante empirique z dans l'équation de coefficient de filtration	z	-	0,375	20%	A

*Valeurs pré-ajustées aux conditions standard (20°C, pH=7) (Anthonisen et al., 1976)
**Valeurs adaptées du modèle SimBio (Bernier et al., 2014).

Figure A2.1 Résultats de l'analyse de sensibilité globale pour l'oxygène dissous en sortie du modèle en nitrification.

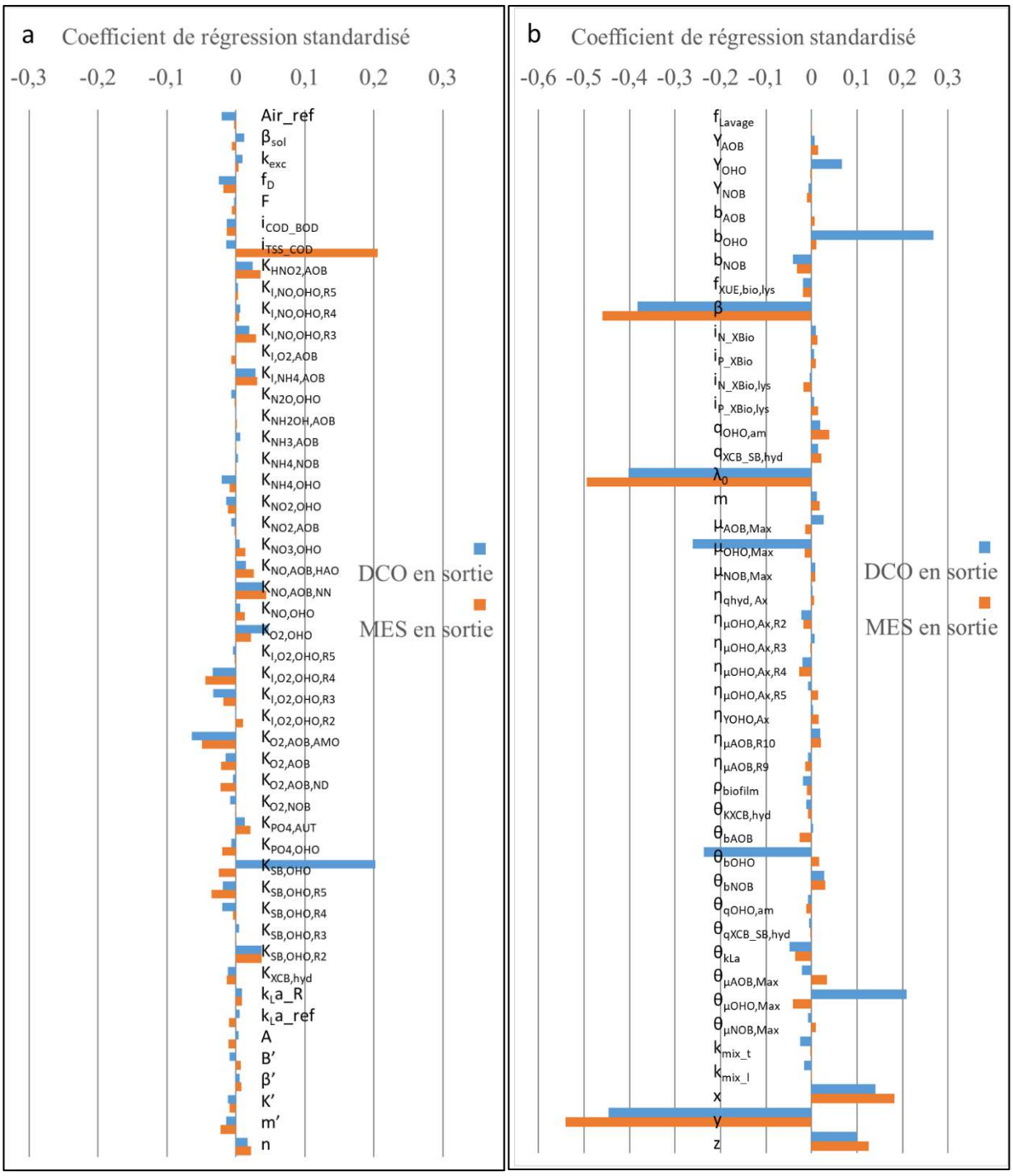


Figure A2.2 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les concentrations en DCO et en MES en sortie du modèle en nitrification (Colonnes bleues : DCO en sortie ; colonnes oranges : MES en sortie).

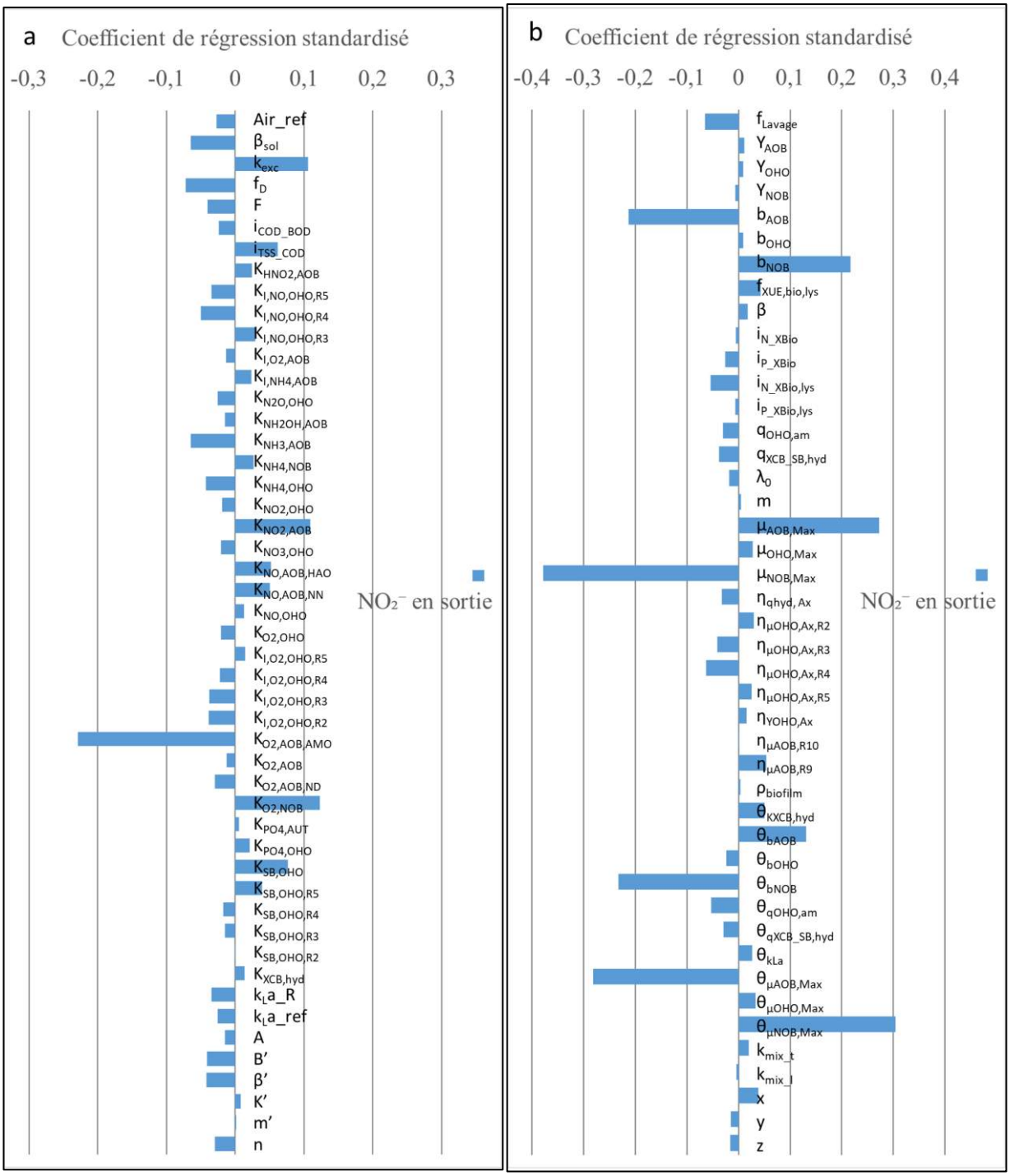


Figure A2.3 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour la concentration en NO_2^- en sortie du modèle en nitrification.

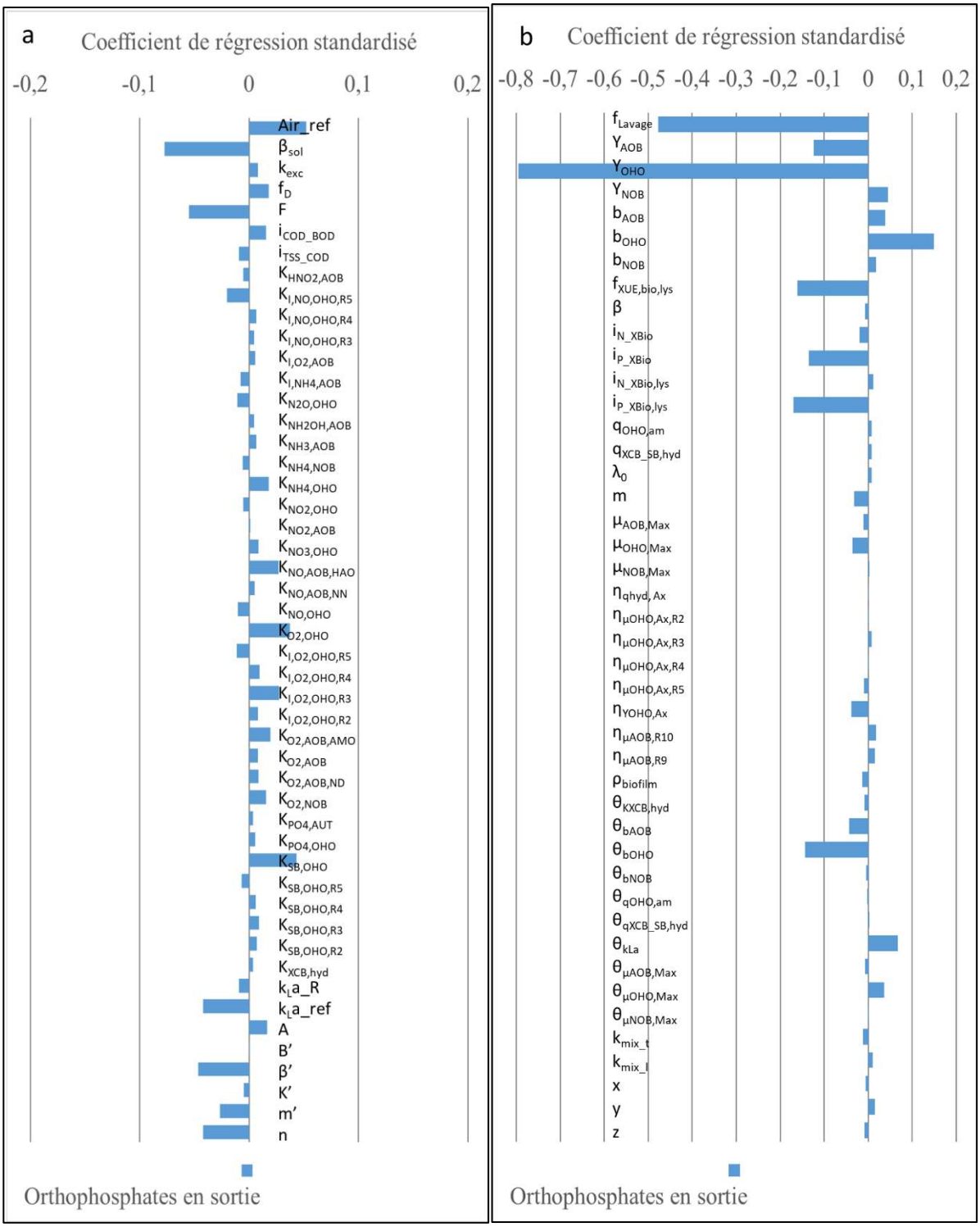


Figure A2.4 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour la concentration en orthophosphates en sortie du modèle en nitrification.

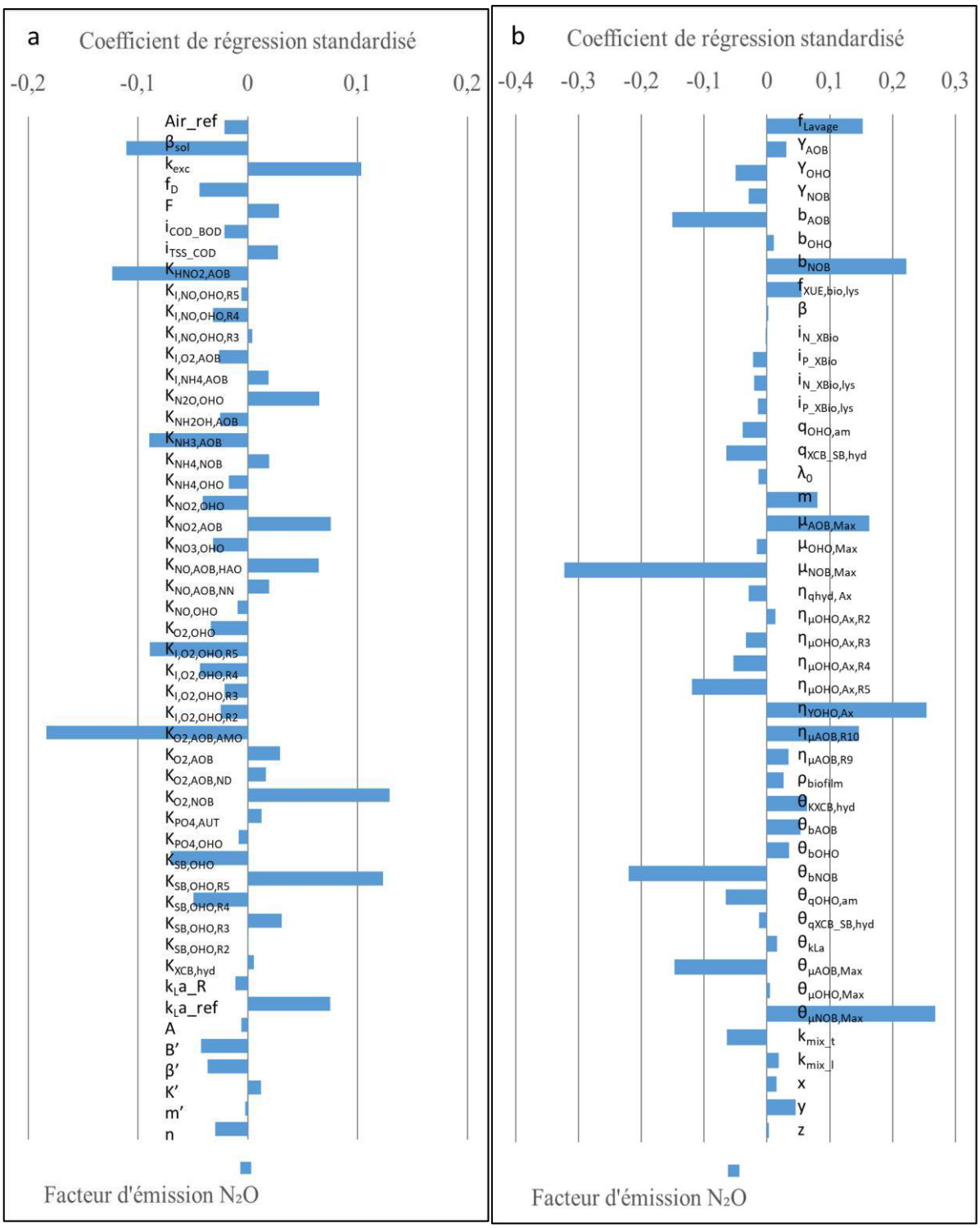


Figure A2.5 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour le facteur d'émission de N_2O en sortie du modèle en nitrification.

Tableau A2.8 Coefficients de détermination (R^2) obtenus par l'analyse de sensibilité globale pour les variables en sortie du modèle en nitrification

Variables en sortie	Coefficients de détermination (R^2)
NH_4^+	0,97
NO_3^-	0,97
NO_2^-	0,67
DO	0,95
DCO	0,90
MES	0,87
Orthophosphates	0,97
Facteurs d'émission de N_2O	0,60

Partie 4 Résultats pour le modèle de post-dénitrification par biofiltration

Tableau A2.9 Valeur par défaut et espace d'échantillonnage attribuée aux paramètres pour l'analyse de sensibilité globale du modèle en post-dénitrification. (A :(Bernier et al., 2014a); B :(Hiatt et Grady, 2008), C :(Henze et al., 2000b); D: (Ohashi et al., 1981))

Nom de paramètres	Symboles	Unités	Valeurs par défaut	Espaces attribuées	Références
Taux d'échange entre les couches de biofilm	k_{exc}	1/j	1	50%	-
Facteur de réduction de la diffusion des composants dans le biofilm	f_D	-	0,7	20%	A
Facteur de conversion de la DCO particulaire en MES en sortie	i_{TSS_COD}	g/gO_2	0,75	20%	-
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R5}$	gN/m^3	0,075	50%	B
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R4}$	gN/m^3	0,3	50%	B
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R3}$	gN/m^3	0,5	50%	B
Constante de demi-saturation en N_2O pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{N2O,OHO}$	gN/m^3	0,05	50%	B
Constante de demi-saturation en NO_2^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO2,OHO}$	gN/m^3	0,2	50%	B
Constante de demi-saturation en NO_3^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO3,OHO}$	gN/m^3	0,2	50%	B
Constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO,OHO}$	gN/m^3	0,05	50%	B
Constante de demi-saturation en oxygène de la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{O2,OHO}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R5}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R4}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R3}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R2}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{SB,OHO}$	gO_2/m^3	20	20%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB,OHO,R5}$	gO_2/m^3	40	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	20	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	20	50%	B

hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie					
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	20	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO particulaire biodégradable pour la vitesse d'hydrolyse	$K_{XCB,hyd}$	gO_2/gO_2	0,03	20%	C
Constante de demi-saturation en NO_3^- pour la réduction du nitrate en ammonium	$K_{NO3,red}$	gN/m^3	0,1	20%	B
Constante A dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	A	-	2	20%	D
Constante B' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	B'	-	4,23	20%	D
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,3333	20%	D
Constante K' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	K'	-	0,51	20%	D
Constante m' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	m'	-	0,833	20%	D
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	0,6	20%	D
Fraction de biofilm enlevé pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,15	50%	-
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,67	20%	C
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,62	50%	C
Fraction de la biomasse transformée en DCO inerte lors de la mort bactérienne	$f_{XUE,bio,lys}$	-	0,08	20%	C
Facteur d'empilement du média	β	-	5	50%	A
Quantité d'azote dans la biomasse	i_{N_XBio}	gN/gO_2	0,086	20%	C
Quantité d'azote dans les produits de la mort bactérienne	$i_{N_XBio,lys}$	gN/gO_2	0,06	20%	C
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	0,01	20%	A
Quantité de phosphore dans les produits de la mort bactérienne	$i_{P_XBio,lys}$	gP/gO_2	0,01	20%	A
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,08	20%	C
Taux d'hydrolyse	$q_{XCB_SB,hyd}$	1/j	3	20%	C
Taux de réduction du nitrate en ammonium	$q_{NO3_NH4,red}$	1/j	0,1	20%	-
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,975	50%	A
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	6	20%	C
Facteur de réduction du taux d'hydrolyse en anoxie	$\eta_{qhyd,\ Ax}$	-	0,4	20%	C
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	0,28	50%	B
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,16	50%	B
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,35	50%	B

hétérotrophe en réduisant le NO					
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le N_2O	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5}$	-	0,35	50%	B
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,9	50%	B
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	133600	20%	A
Taux d'échange de média pendant le traitement	k_{mix_t}	1/j	2	50%	-
Taux d'échange de média pendant le lavage	k_{mix_l}	1/j	20	50%	-
Constante empirique x dans l'équation de coefficient de filtration	x	-	1	50%	A
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	1,88	50%	A
Constante empirique z dans l'équation de coefficient de filtration	z	-	0,4	50%	A

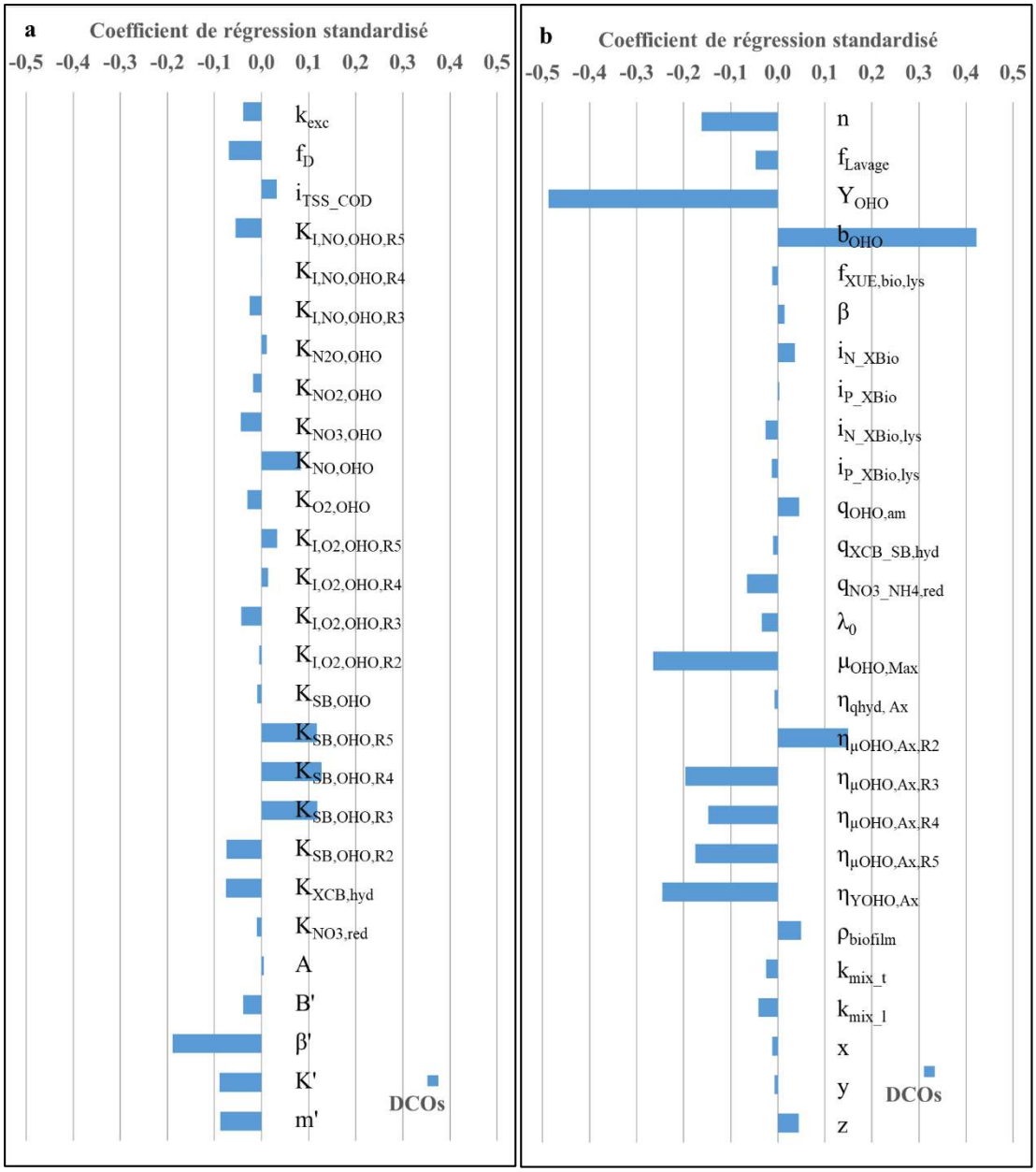


Figure A2.6 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour la concentration en DCOs en sortie du modèle en post-dénitrification.

Tableau A2.10 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur l'enlèvement des nitrates et des nitrites.

Paramètres	Symbole	Unité	Coefficient de régression		
			NO_3^-	NO_2^-	DCO soluble
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R2}$	gO_2/m^3	-0,128	0,095	-0,005
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB,OHO,R5}$	gO_2/m^3	0,015	0,086	0,117
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	-0,068	0,026	0,128
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	-0,094	0,234	0,119
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	0,185	-0,143	-0,075
Constante de demi-saturation en DCO particulaire biodégradable pour la vitesse d'hydrolyse	$K_{XCB,hyd}$	gO_2/gO_2	-0,132	0,018	-0,075
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,000	-0,025	-0,189
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	-0,051	0,024	-0,162
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,235	0,053	-0,047
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,520	0,657	-0,487
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	-0,039	-0,064	0,422
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	-0,047	0,032	-0,265
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	-0,259	0,236	0,149
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,079	-0,282	-0,197
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,048	0,015	-0,148
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le N_2O	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5}$	-	-0,030	0,102	-0,176
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,408	0,362	-0,246

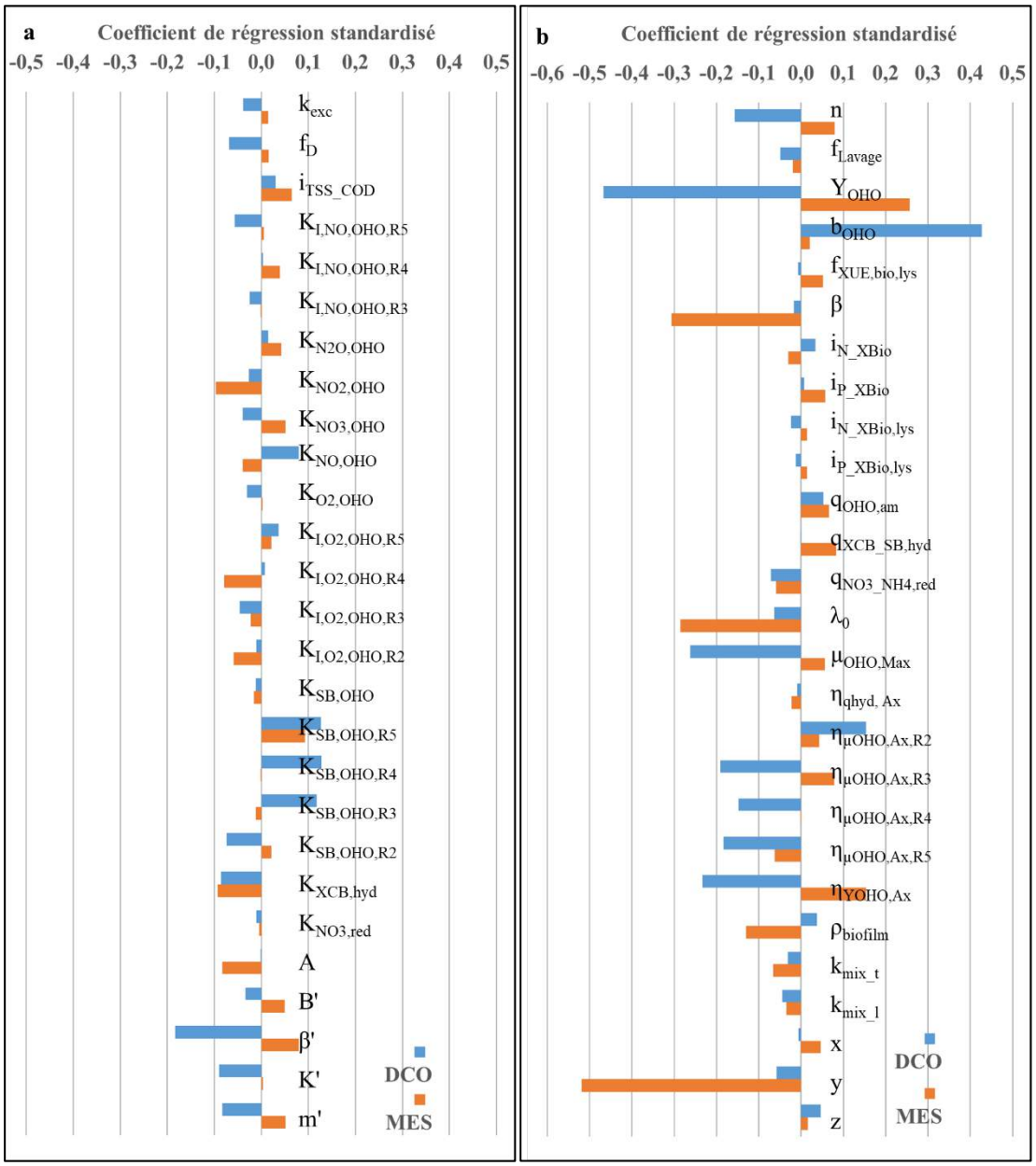


Figure A2.7 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les concentrations en DCO et en MES en sortie du modèle en post-dénitrification (Colonnes bleues : DCO en sortie ; colonnes oranges : MES en sortie).

Tableau A2.11 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur la performance de filtration

Paramètres	Symbole	Unité	Coefficient de régression	
			DCO	MES
Facteur d'empilement du média	β	-	-0,017	-0,306
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	-0,063	-0,286
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	0,037	-0,130
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	-0,058	-0,519

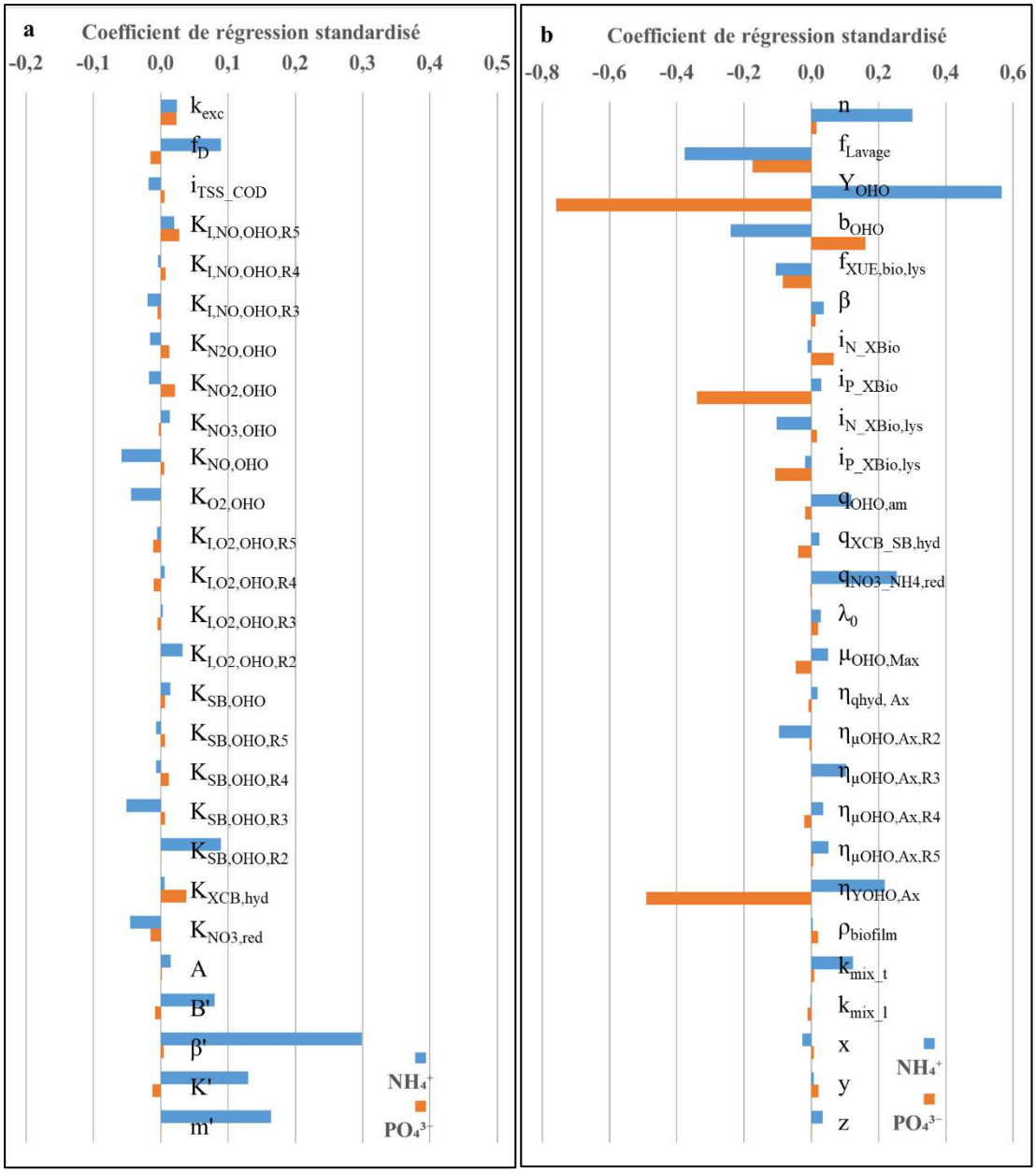


Figure A2.8 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les concentrations en NH_4^+ et en PO_4^{3-} en sortie du modèle en nitrification (Colonnes bleues : NH_4^+ en sortie ; colonnes oranges : PO_4^{3-} en sortie).

Tableau A2.12 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur la consommation des orthophosphates et des ammoniums.

Paramètres	Symbole	Unité	Coefficient de régression	
			PO_4^{3-}	NH_4^+
Fraction de la biomasse transformée en DCO inerte lors de la mort bactérienne	$f_{XUE,bio,lys}$	-	-0,085	-0,105
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	-0,34	0,030
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	-0,003	0,253
Taux de réduction du nitrate en ammonium	$q_{NO3_NH4,red}$	1/j	-0,018	0,119
Taux d'échange de média pendant le traitement	k_{mix_t}	1/j	0,009	0,124
Quantité d'azote dans les produits de la mort bactérienne	$i_{N_XBio,lys}$	gN/gO_2	0,017	-0,103
Quantité de phosphore dans les produits de la mort bactérienne	$i_{P_XBio,lys}$	gP/gO_2	-0,107	-0,019

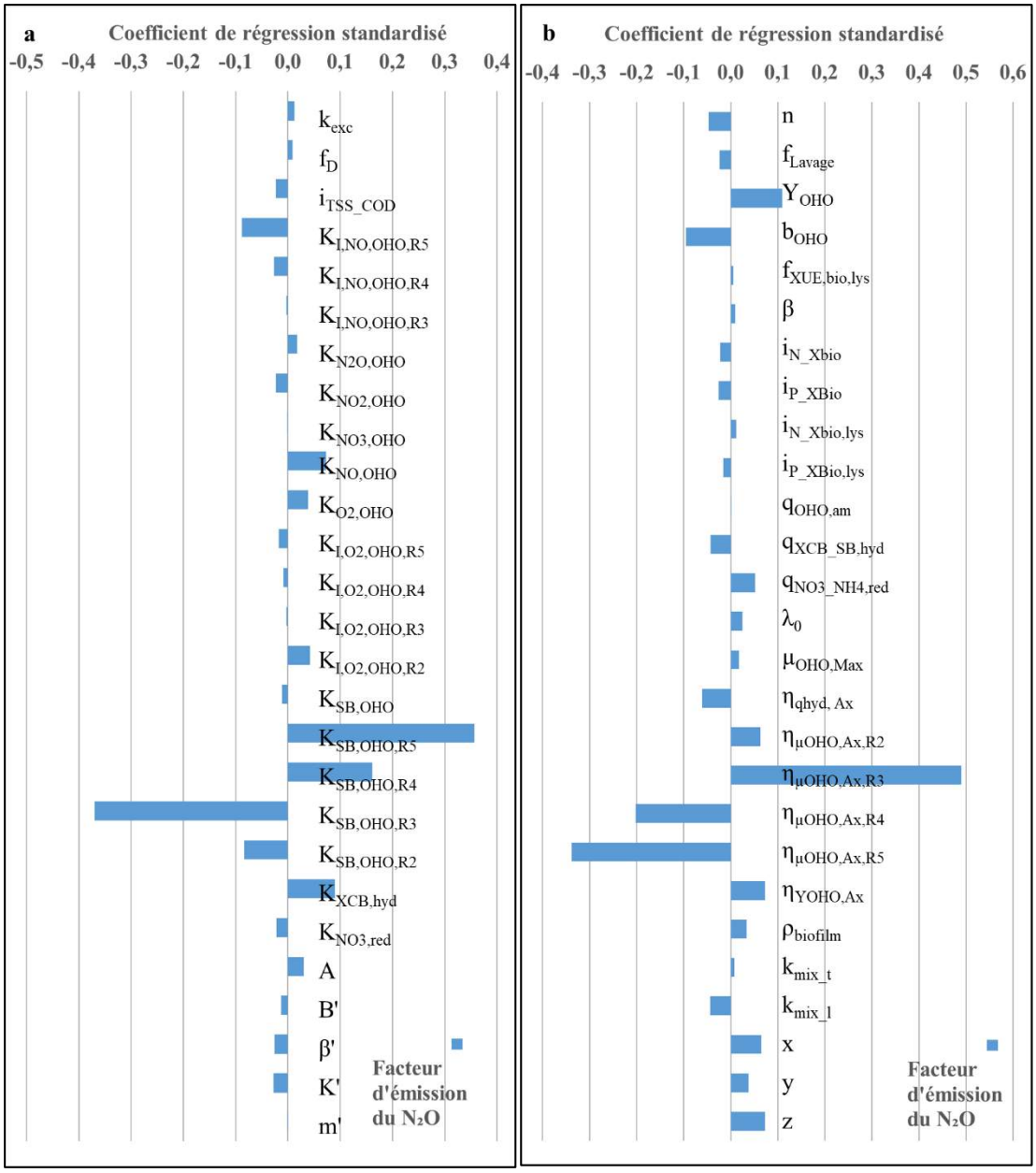


Figure A2.9 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour le facteur d'émission du N_2O du modèle en post-dénitrification.

Tableau A2.13 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur la production/consommation de N_2O.

Paramètres	Symbole	Unité	Coefficient de régression Facteur d'émission de N_2O
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB,OHO,R5}$	gO_2/m^3	0,356
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	0,162
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	-0,370
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,110
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,490
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	-0,202
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le N_2O	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5}$	-	-0,338

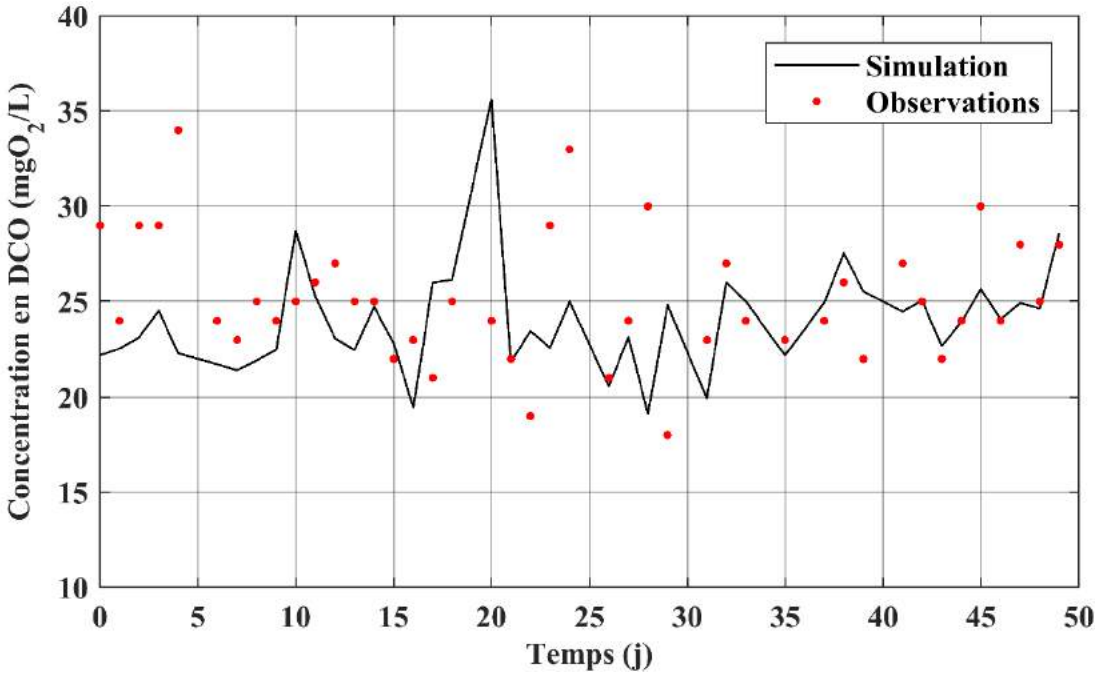


Figure A2.10 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification sur la concentration en DCO en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

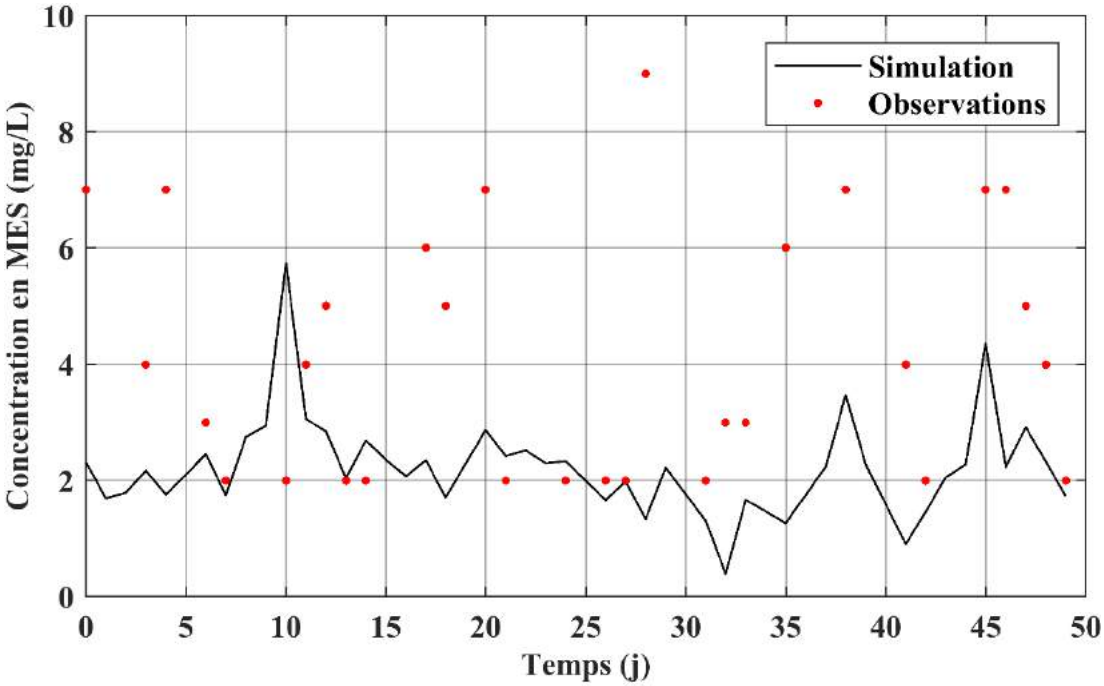


Figure A2.11 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification sur la concentration en MES en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

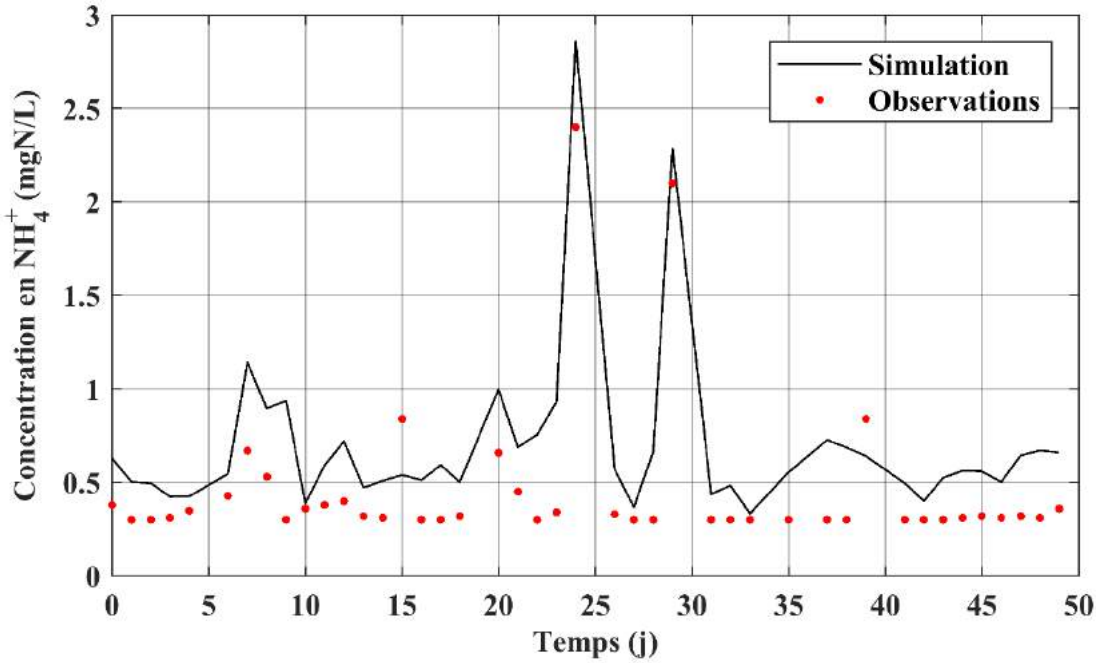


Figure A2.12 Résultats de calibration du modèle en post-dénitrification sur la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

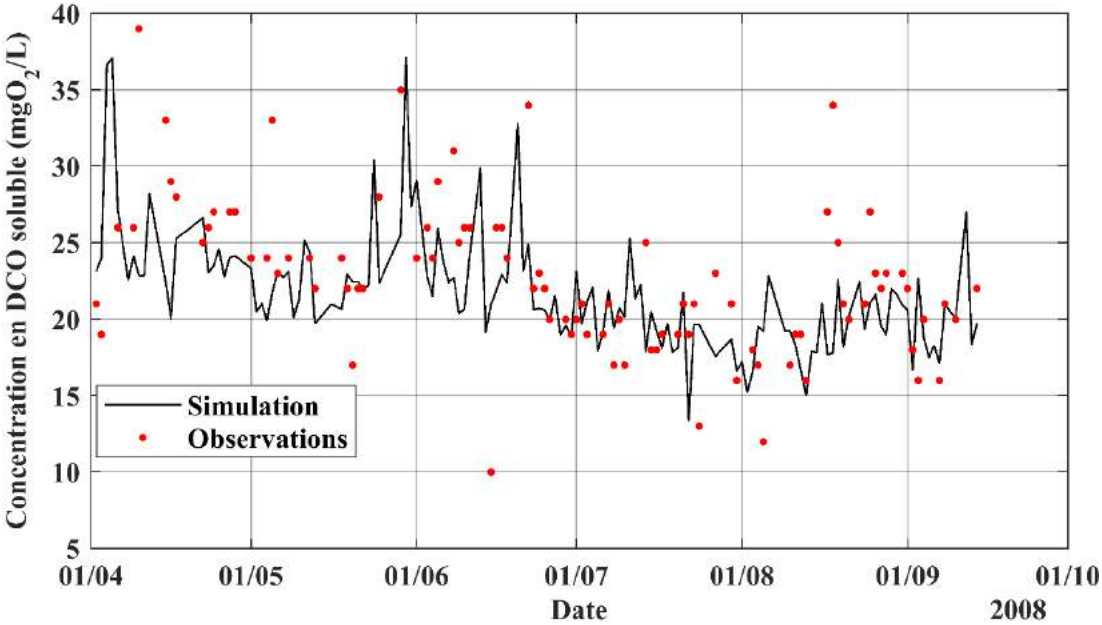


Figure A2.13 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 sur la concentration en DCO soluble en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

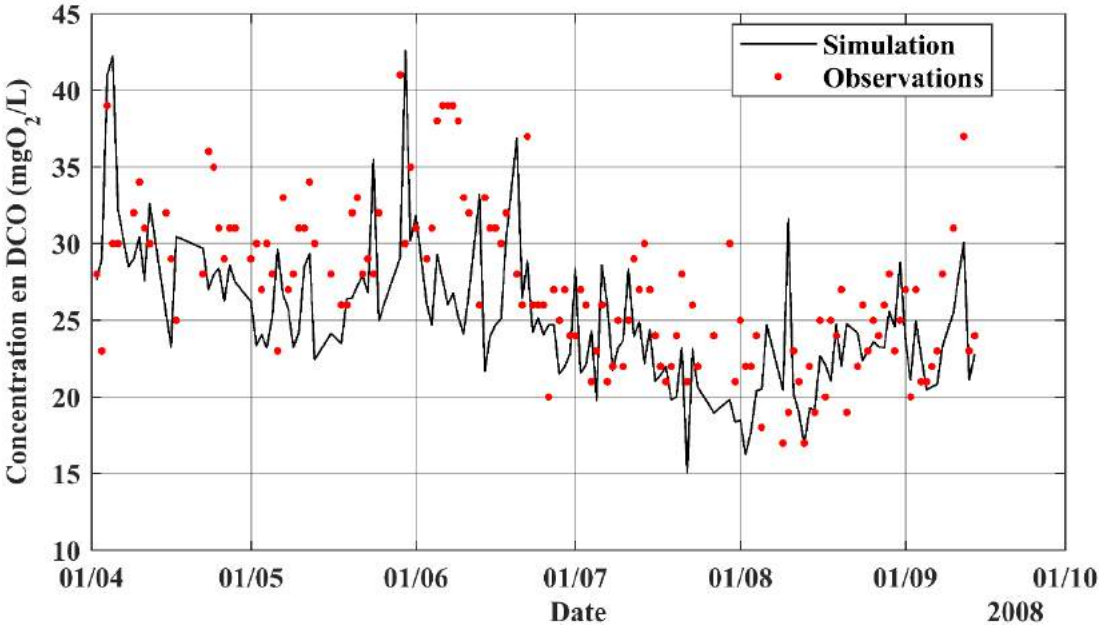


Figure A2.14 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 sur la concentration en DCO en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

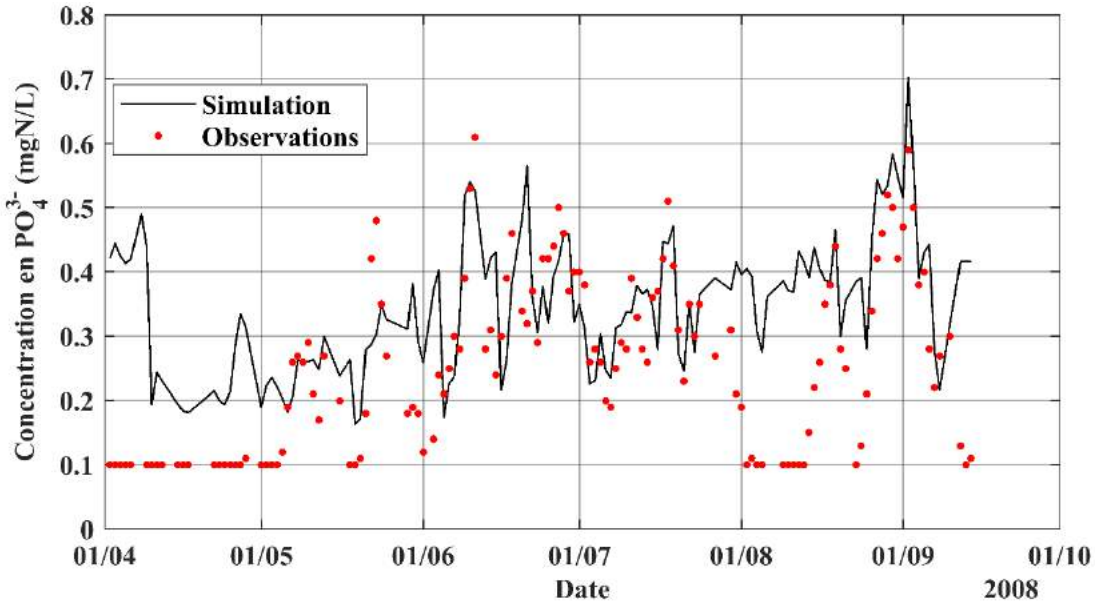


Figure A2.15 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 sur la concentration en PO_4^{3-} en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

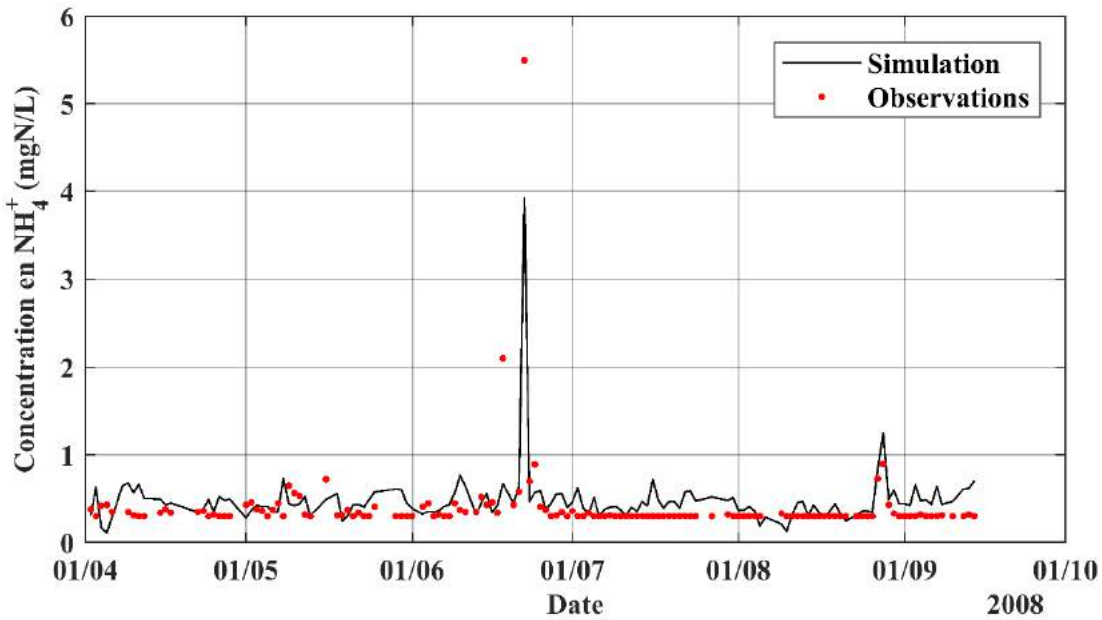


Figure A2.16 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 sur la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

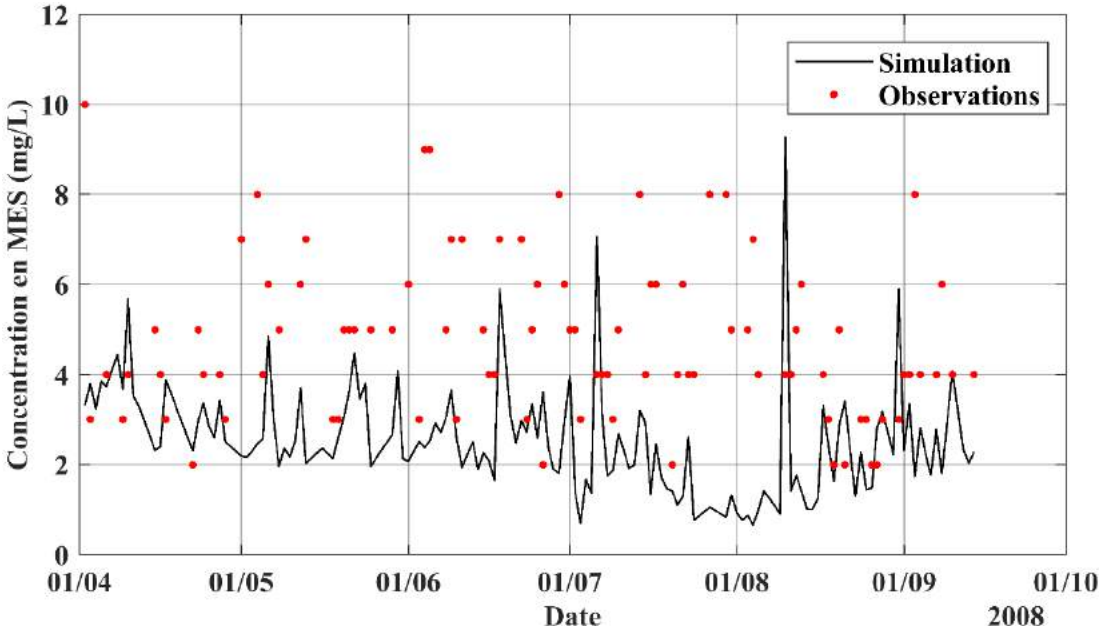


Figure A2.17 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification d'avril à mi-septembre 2008 sur la concentration en MES en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

- **Résultats de la deuxième période de validation du modèle en post-dénitrification**

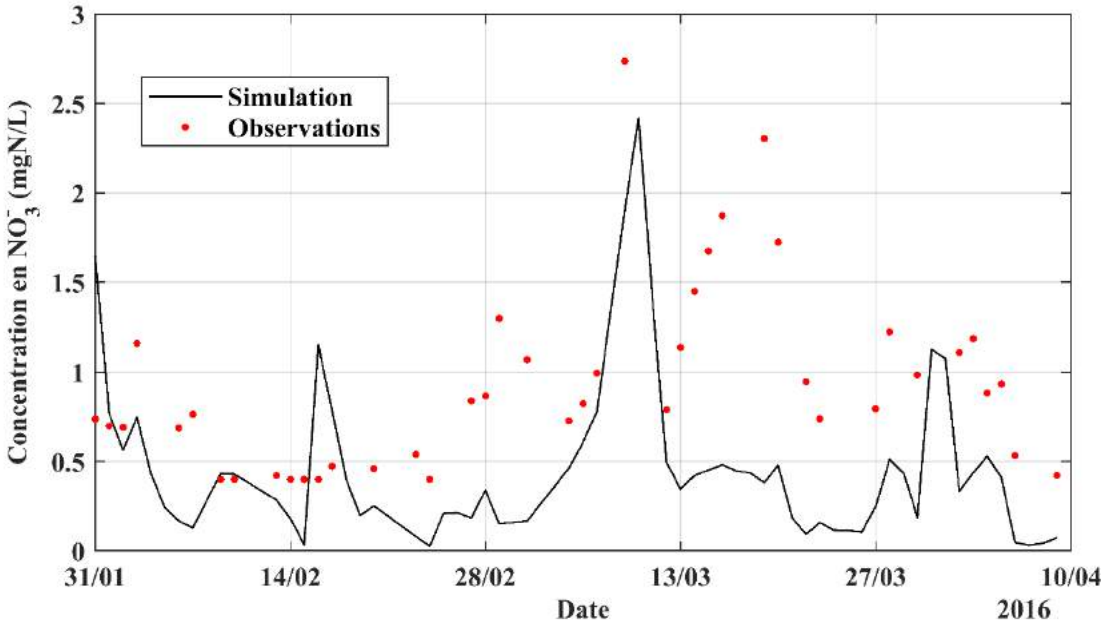


Figure A2.18 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril sur la concentration en NO_3^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

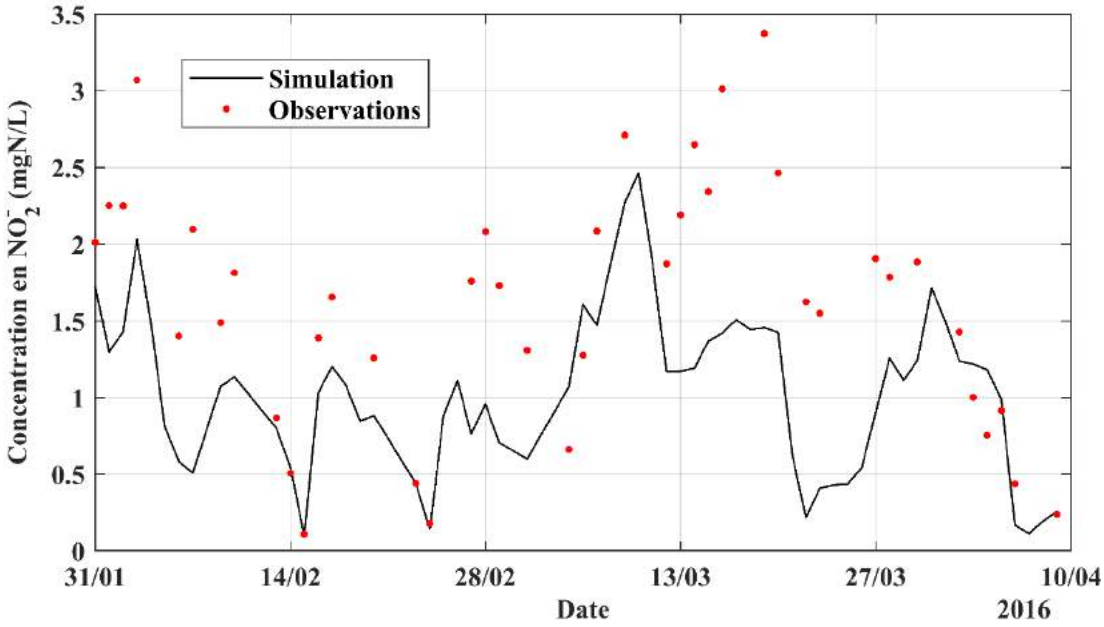


Figure A2.19 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril sur la concentration en NO_2^- en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

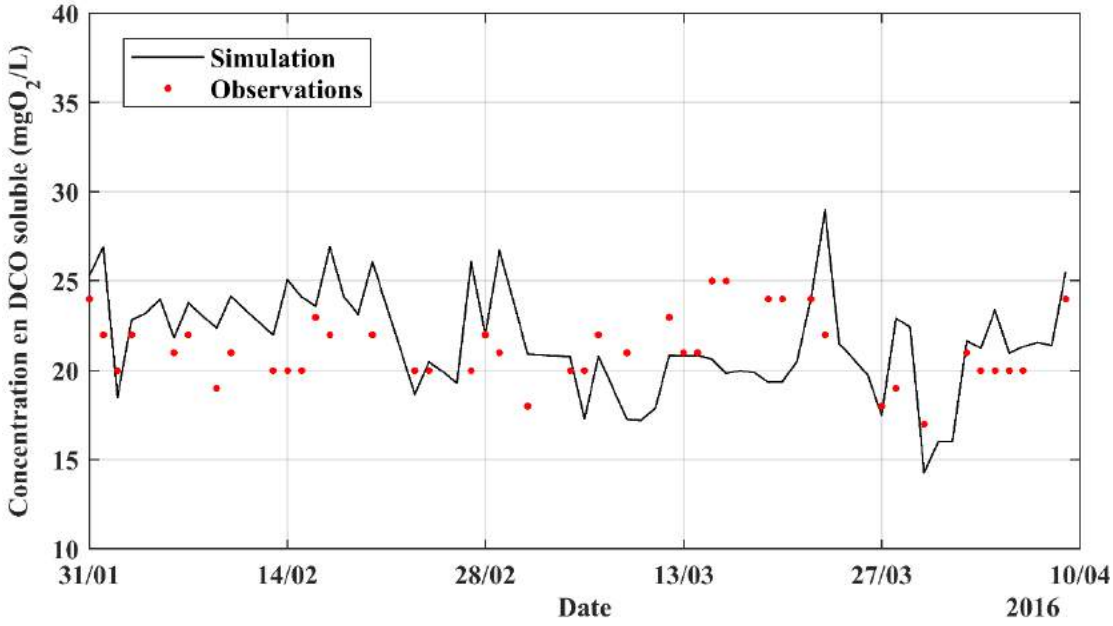


Figure A2.20 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 sur la concentration en DCO soluble en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

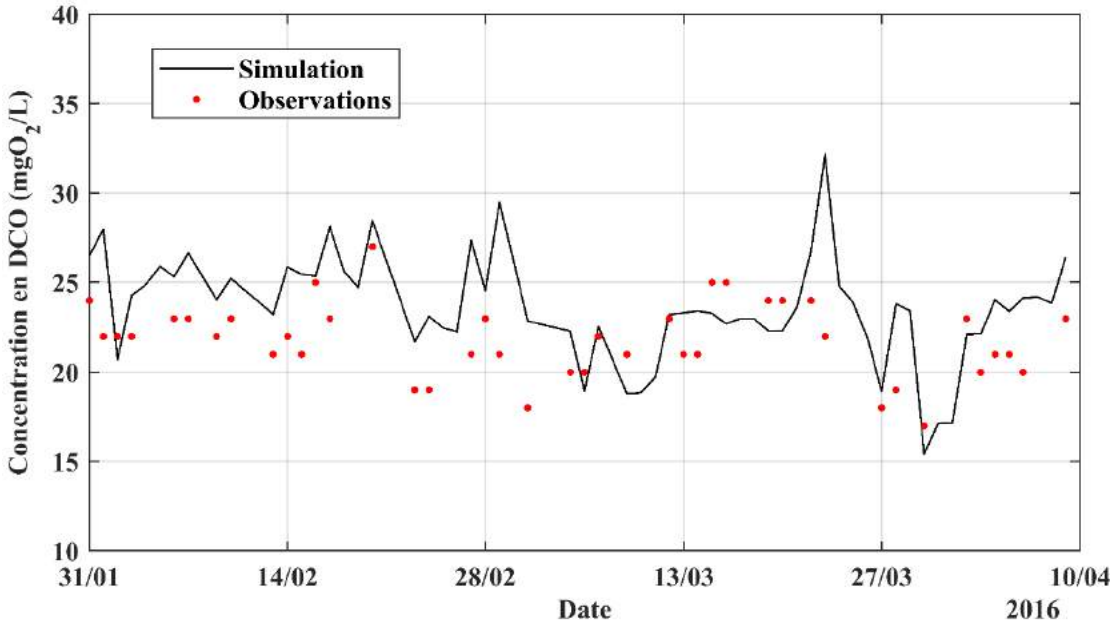


Figure A2.21 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 sur la concentration en DCO en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

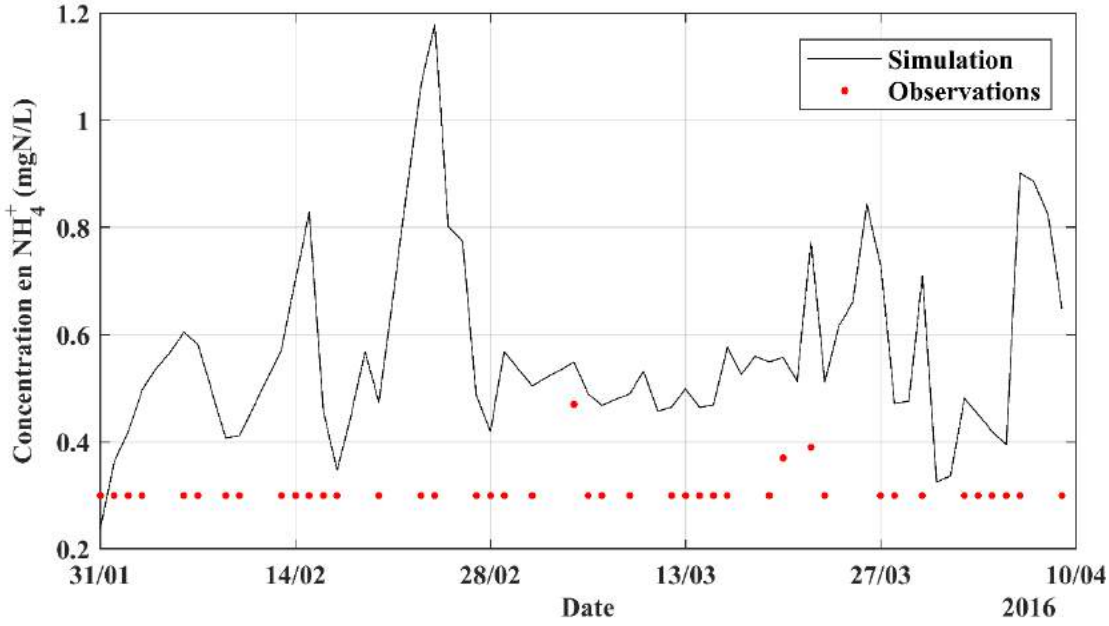


Figure A2.22 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 sur la concentration en NH_4^+ en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

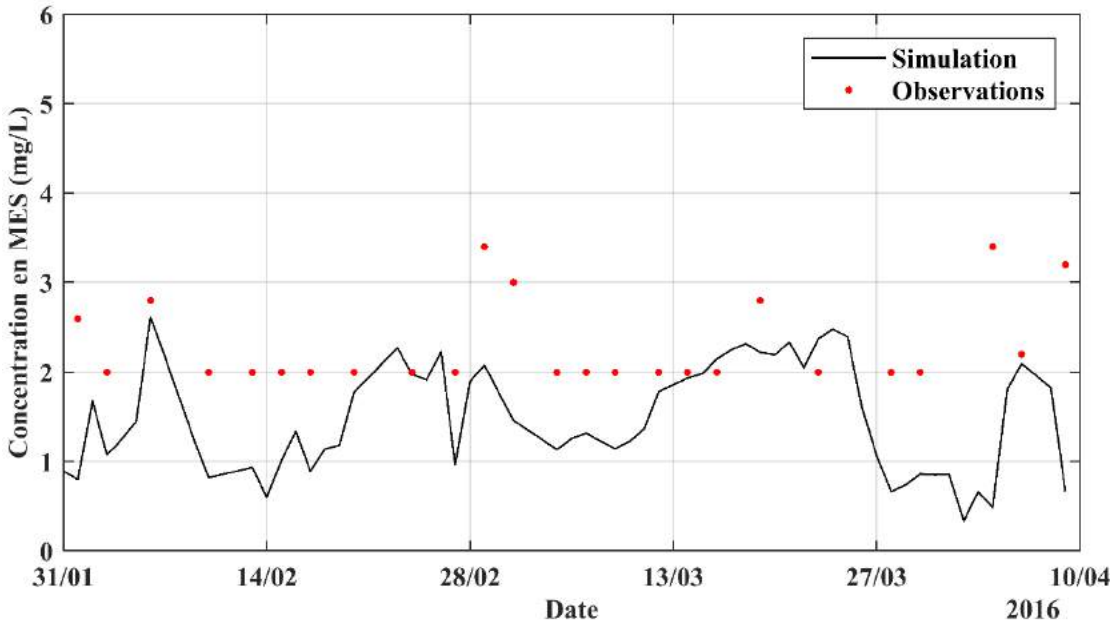


Figure A2.23 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 sur la concentration MES en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

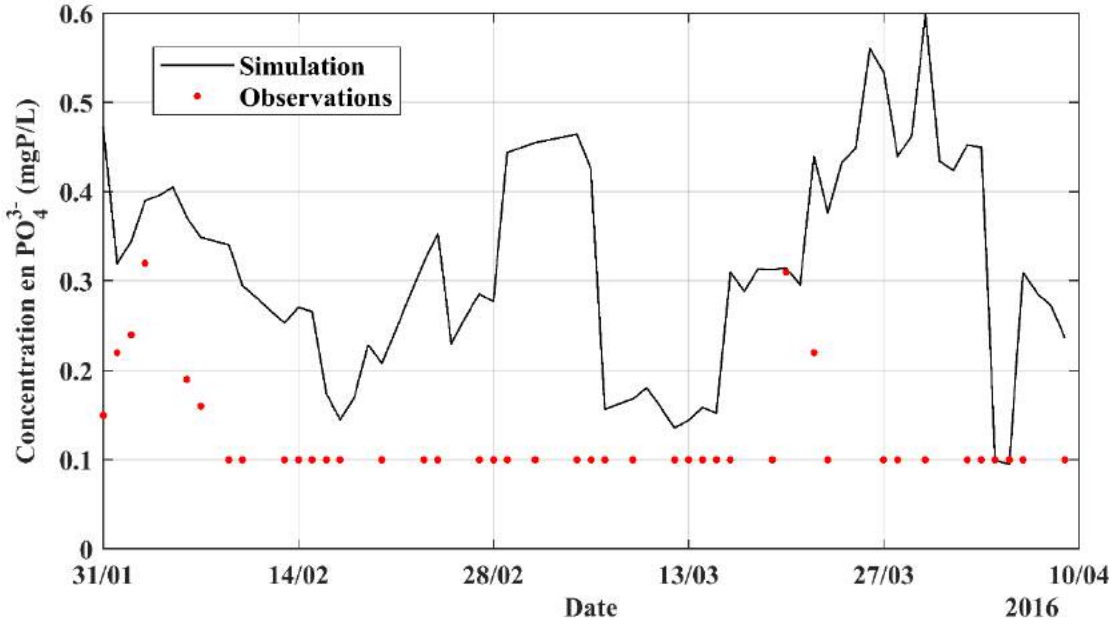


Figure A2.24 Résultats de validation du modèle en post-dénitrification de février à mi-avril 2016 sur la concentration en orthophosphates en sortie de l'étage de post-dénitrification (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Partie 5 Résultats pour le modèle de pré-dénitrification par biofiltration

Tableau A2.14 Valeur par défaut et espace d'échantillonnage attribuées aux paramètres choisis pour l'analyse de sensibilité globale du modèle en pré-dénitrification. (A :(Bernier et al., 2014a); B :(Hiatt et Grady, 2008), C :(Henze et al., 2000b); D:(Ohashi et al., 1981))

Nom de paramètre	Symbole	Unité	Valeur par défaut	Espace attribuée	Référence
Taux d'échange entre les couches de biofilm	k_{exc}	1/j	1	50%	-
Facteur de réduction de la diffusion des composants dans le biofilm	f_D	-	0,7	20%	A
Facteur de conversion de la DCO particulaire en MES en sortie	i_{TSS_COD}	g/gO_2	0,75	20%	-
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R5}$	gN/m^3	0,075	50%	B
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R4}$	gN/m^3	0,3	50%	B
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R3}$	gN/m^3	0,5	50%	B
Constante de demi-saturation en N_2O pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{N2O,OHO}$	gN/m^3	0,05	50%	B
Constante de demi-saturation en NO_2^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO2,OHO}$	gN/m^3	0,2	50%	B
Constante de demi-saturation en NO_3^- pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO3,OHO}$	gN/m^3	0,2	50%	B
Constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO,OHO}$	gN/m^3	0,05	50%	B
Constante de demi-saturation en oxygène de la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{O2,OHO}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R5}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R4}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R3}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R2}$	gO_2/m^3	0,1	20%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe en aérobie	$K_{SB,OHO}$	gO_2/m^3	20	20%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le N_2O en anoxie	$K_{SB,OHO,R5}$	gO_2/m^3	40	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	20	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	20	50%	B

hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie					
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	20	50%	B
Constante de demi-saturation en DCO particulaire biodégradable pour la vitesse d'hydrolyse	$K_{XCB,hyd}$	gO_2/gO_2	0,03	20%	C
Constante A dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	A	-	2	20%	D
Constante B' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	B'	-	4,23	20%	D
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	0,333	20%	D
Constante K' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	K'	-	0,51	20%	D
Constante m' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	m'	-	0,833	20%	D
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	0,6	20%	D
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,5	50%	-
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,67	20%	C
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,62	20%	C
Fraction de la biomasse transformée en DCO inerte lors de la mort bactérienne	$f_{XUE,bio,lys}$	-	0,08	20%	C
Facteur d'empilement du média	β	-	5,7	50%	A
Quantité d'azote dans la biomasse	i_{N_XBio}	gN/gO_2	0,086	20%	C
Quantité d'azote dans les produits de la mort bactérienne	$i_{N_XBio,lys}$	gN/gO_2	0,06	20%	C
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	0,01	50%	A
Quantité de phosphore dans les produits de la mort bactérienne	$i_{P_XBio,lys}$	gP/gO_2	0,01	50%	A
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,08	20%	C
Taux d'hydrolyse	$q_{XCB_SB,hyd}$	1/j	3	50%	C
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	0,945	50%	A
Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	6	20%	C
Facteur de réduction du taux d'hydrolyse en anoxie	$\eta_{qhyd,\ Ax}$	-	0,4	50%	C
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	0,28	50%	B
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,16	50%	B
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,35	50%	B
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le N_2O	$\eta_{\mu OHO,Ax,R5}$	-	0,35	50%	B

Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,9	50%	B
Masse volumique du biofilm	$\rho_{biofilm}$	gO_2/m^3	133600	50%	A
Taux d'échange de média pendant le traitement	k_{mix_t}	1/j	2	50%	-
Taux d'échange de média pendant le lavage	k_{mix_l}	1/j	20	50%	-
Constante empirique x dans l'équation de coefficient de filtration	x	-	1	50%	A
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	1,88	50%	A
Constante empirique z dans l'équation de coefficient de filtration	z	-	0,4	50%	A

Tableau A2.15 Coefficients de détermination (R^2) obtenus dans l'analyse de sensibilité globale pour les variables en sortie du modèle en pré-dénitrification.

Variable en sortie	Coefficient de détermination (R^2)
NO_3^-	0,82
NO_2^-	0,61
DCO	0,80
DCOs	0,66
MES	0,87
Orthophosphates	0,91
NH_4^+	0,94
NTK	0,90

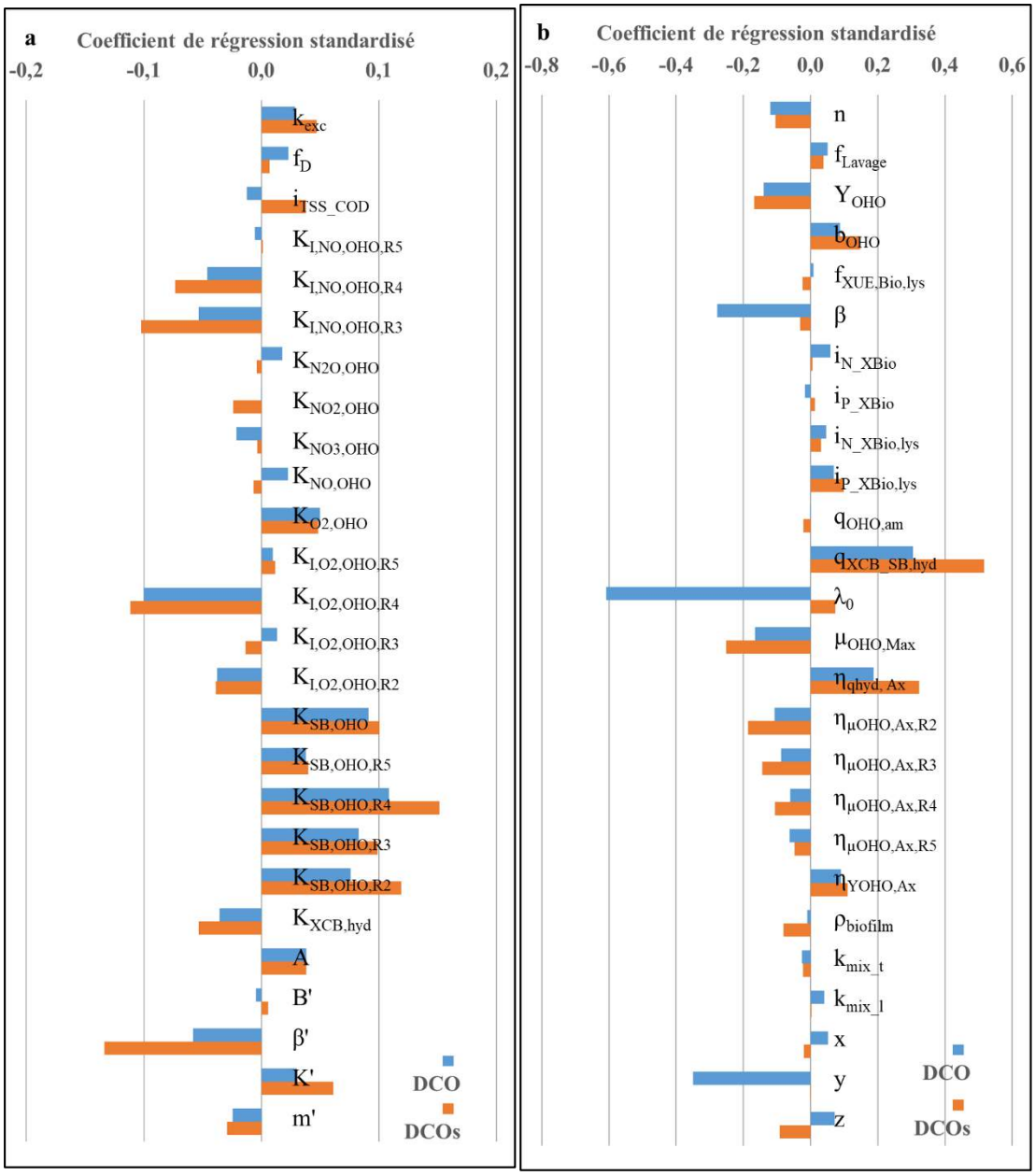


Figure A2.25 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables DCO et DCOs en sortie du modèle en pré-dénitrification. (Colonnes bleues : la DCO en sortie ; colonnes oranges : la DCOs en sortie).

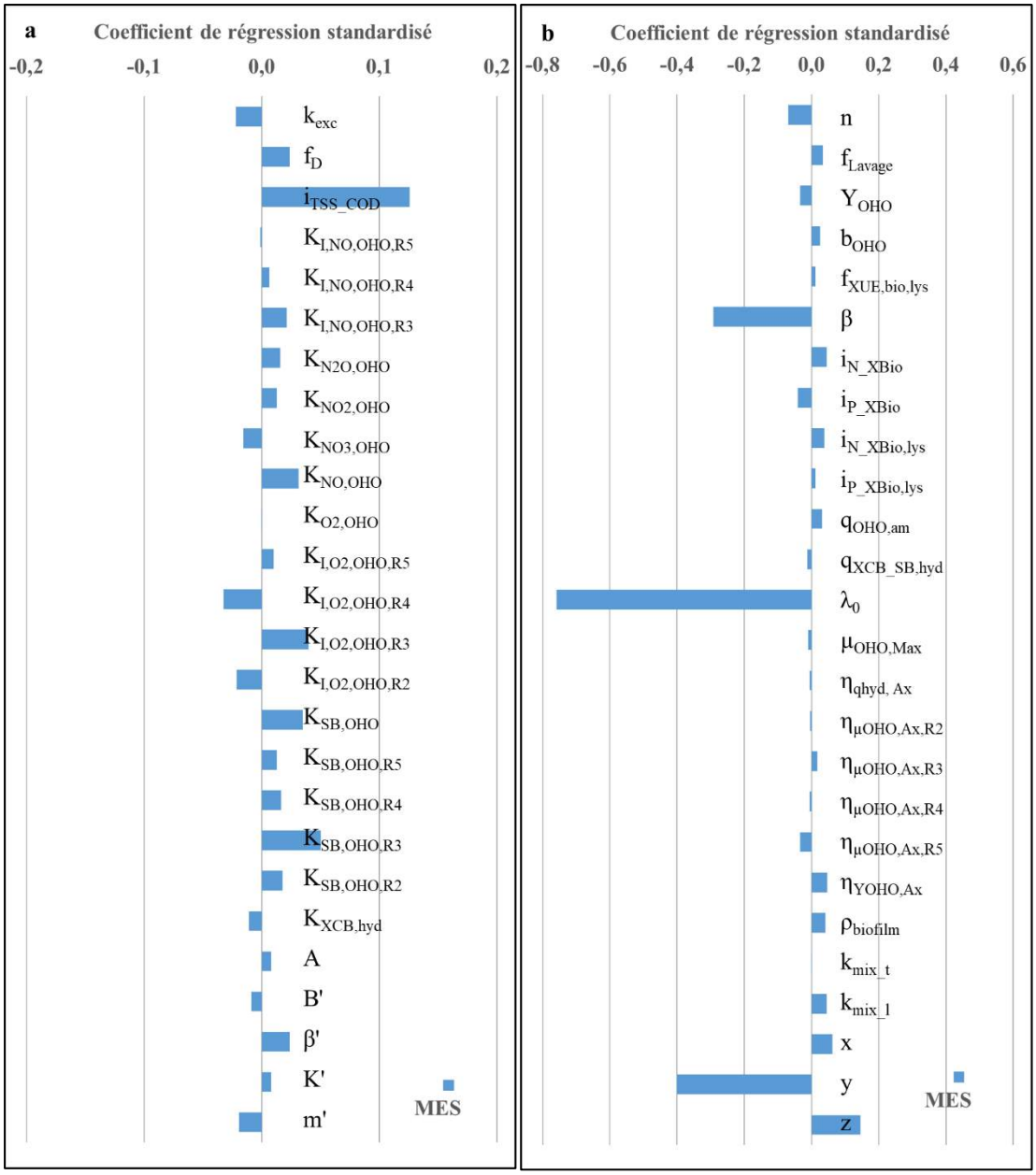


Figure A2.26 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour la variable MES en sortie du modèle en pré-dénitrification.

Tableau A2.16 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur l'enlèvement des nitrates et des nitrites dans l'étage de pré-dénitrification.

Paramètre	Symbole	Unité	Coefficient de régression				
			NO_3^-	NO_2^-	DCOs	DCO	MES
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant NO en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R4}$	gN/m^3	0,011	-0,119	-0,046	-0,073	0,006
Constante d'inhibition en NO pour la biomasse hétérotrophe consommant NO_2^- en anoxie	$K_{I,NO,OHO,R3}$	gN/m^3	-0,070	0,026	-0,053	-0,102	0,021
Constante de demi-saturation en NO pour la biomasse hétérotrophe en anoxie	$K_{NO,OHO}$	gN/m^3	-0,085	0,142	0,023	-0,007	0,031
Constante d'inhibition en oxygène de la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{I,O2,OHO,R4}$	gO_2/m^3	-0,052	-0,032	-0,100	-0,111	-0,033
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO en anoxie	$K_{SB,OHO,R4}$	gO_2/m^3	-0,005	0,134	0,109	0,152	0,017
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_2^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R3}$	gO_2/m^3	-0,039	0,219	0,083	0,099	0,050
Constante de demi-saturation en DCO soluble biodégradable pour la biomasse hétérotrophe consommant le NO_3^- en anoxie	$K_{SB,OHO,R2}$	gO_2/m^3	0,137	-0,197	0,076	0,119	0,018
Constante β' dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	β'	-	-0,010	-0,062	-0,058	-0,134	0,024
Constante n dans l'équation de calcul du nombre de Sherwood	n	-	-0,022	-0,018	-0,119	-0,105	-0,069
Fraction de biofilm enlevée pendant un lavage	f_{Lavage}	-	0,360	0,258	0,050	0,038	0,035
Rendement de la biomasse hétérotrophe	Y_{OHO}	gO_2/gO_2	0,290	0,106	-0,140	-0,168	-0,033
Taux de mortalité de la biomasse hétérotrophe	b_{OHO}	1/j	0,028	0,086	0,088	0,148	0,025
Facteur d'empilement du média	β	-	-0,089	-0,093	-0,277	-0,031	-0,291
Taux d'hydrolyse	$q_{XCB_SB,hyd}$	1/j	-0,230	-0,246	0,304	0,517	-0,013
Coefficient de filtration sur le filtre propre	λ_0	1/j	-0,195	-0,082	-0,608	0,074	-0,758

Taux spécifique maximal de croissance de la biomasse hétérotrophe	$\mu_{OHO,Max}$	1/j	-0,070	0,002	-0,165	-0,251	-0,010
Facteur de réduction du taux d'hydrolyse en anoxie	$\eta_{qhyd,\ Ax}$	-	-0,160	-0,069	0,188	0,323	-0,006
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_3^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R2}$	-	-0,300	0,338	-0,106	-0,186	-0,004
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO_2^-	$\eta_{\mu OHO,Ax,R3}$	-	0,023	-0,224	-0,087	-0,144	0,017
Facteur de réduction de la vitesse de croissance en anoxie de la biomasse hétérotrophe en réduisant le NO	$\eta_{\mu OHO,Ax,R4}$	-	0,074	-0,200	-0,060	-0,106	-0,006
Facteur de correction du rendement hétérotrophe en anoxie	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0,447	0,109	0,091	0,109	0,047
Constante empirique y dans l'équation de coefficient de filtration	y	-	-0,082	-0,075	-0,350	0,000	-0,400

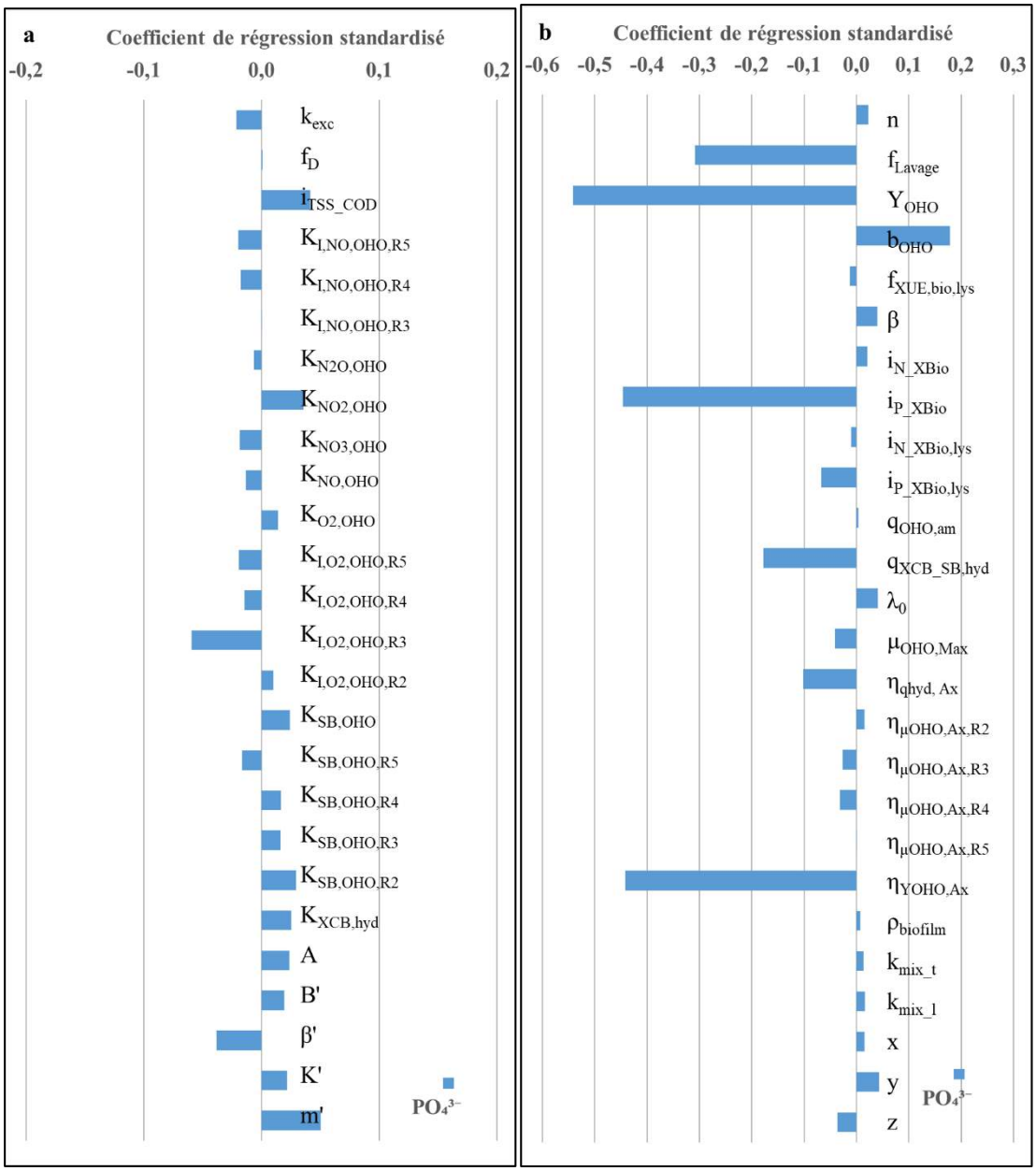


Figure A2.27 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour la variable PO_4^{3-} en sortie du modèle en pré-dénitrification.

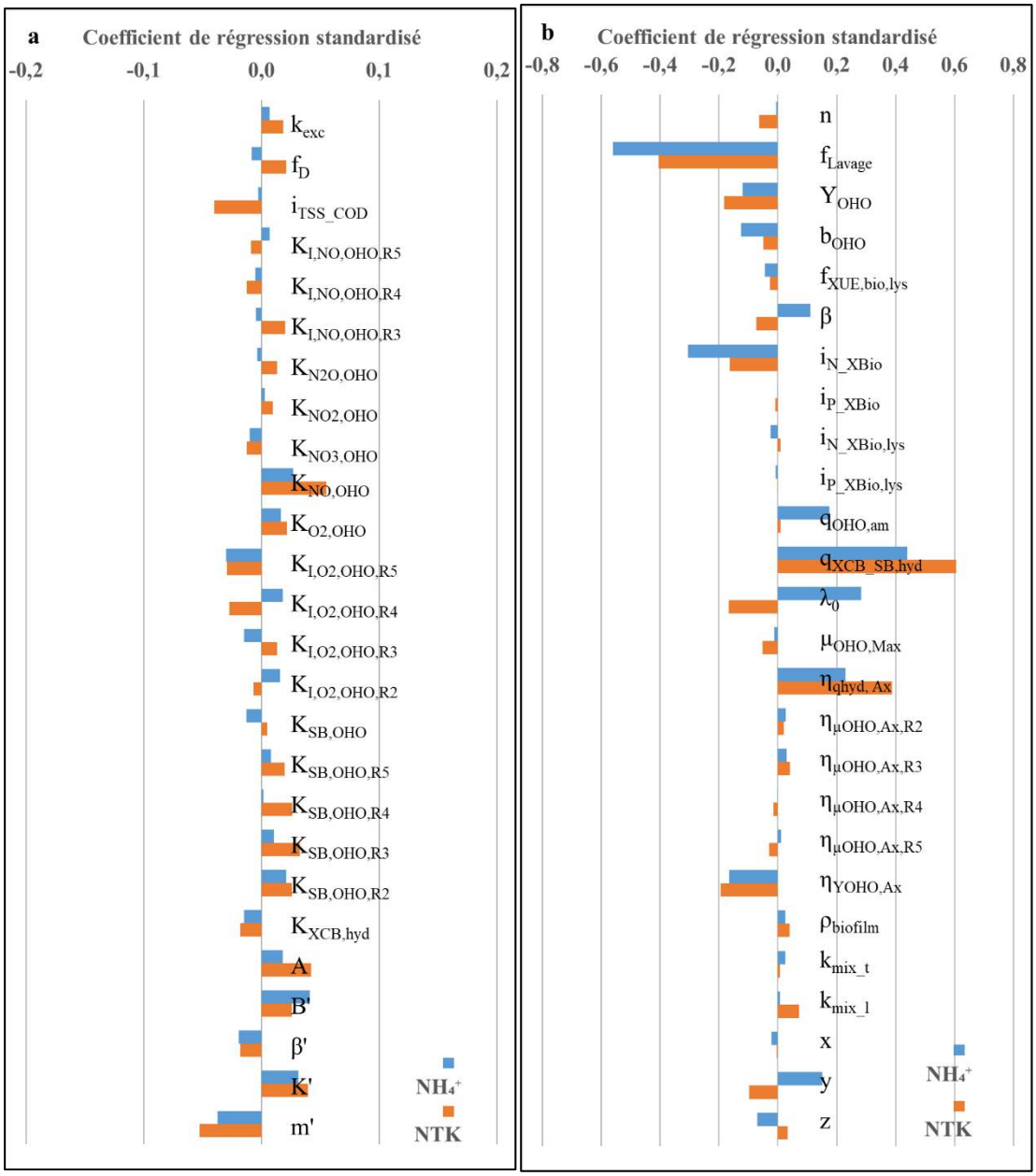


Figure A2.28 Résultats de l'analyse de sensibilité globale obtenus pour les variables NH_4^+ et NTK en sortie du modèle en pré-dénitrification. (Colonnes bleues : le NH_4^+ en sortie ; colonnes oranges : le NTK en sortie).

Tableau A2.17 Paramètres inclus dans le groupe de calibration sur la performance de la filtration et des consommations du NH_4^+ et du PO_4^{3-} dans l'étage de pré-dénitrification.

Paramètre	Symbole	Unité	Coefficient de régression		
			PO_4^{3-}	NH_4^+	NTK
Quantité d'azote dans la biomasse	i_{N_XBio}	gN/gO_2	0,021	-0,306	-0,163
Quantité de phosphore dans la biomasse	i_{P_XBio}	gP/gO_2	-0,446	-0,009	0,001
Taux d'ammonification	$q_{OHO,am}$	1/j	0,003	0,175	0,009

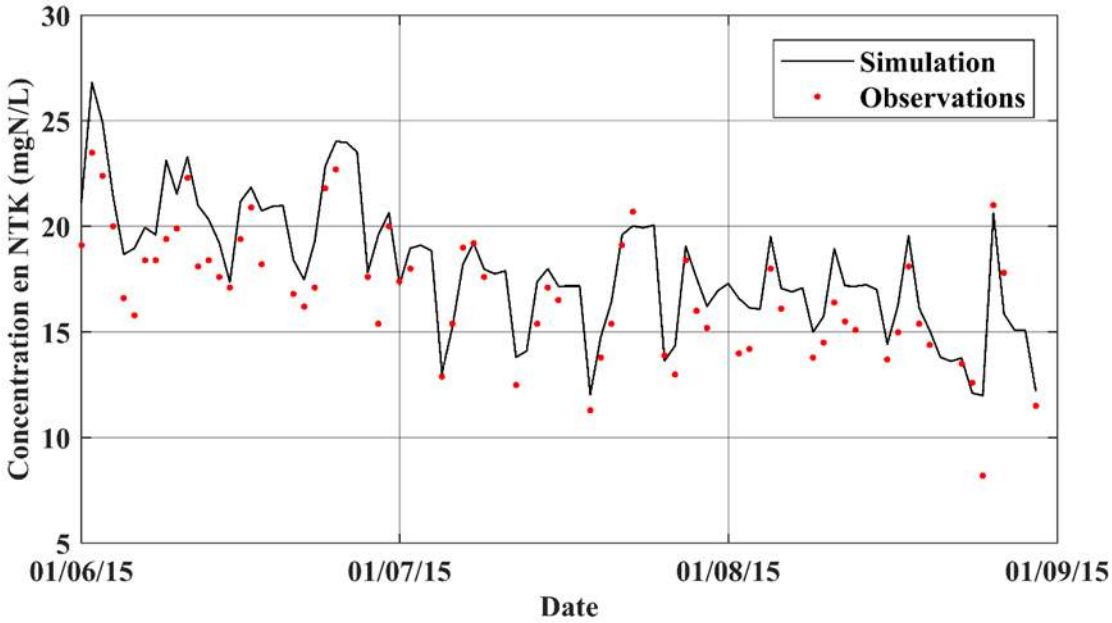


Figure A2.29 Résultats de calibration en pré-dénitrification de la concentration en NTK en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

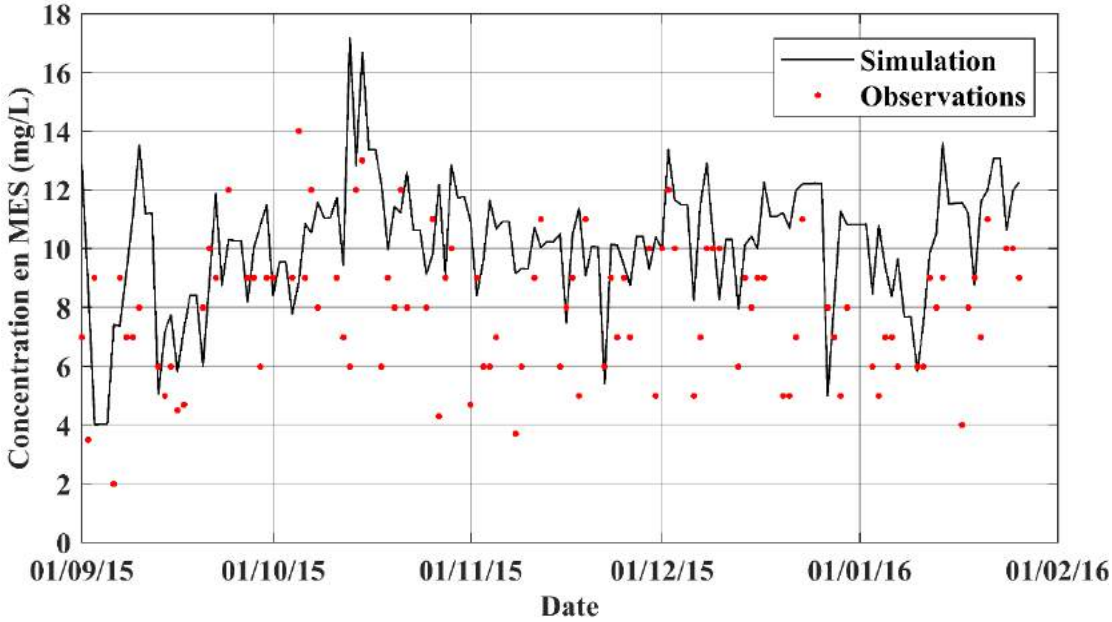


Figure A2.30 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en MES en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

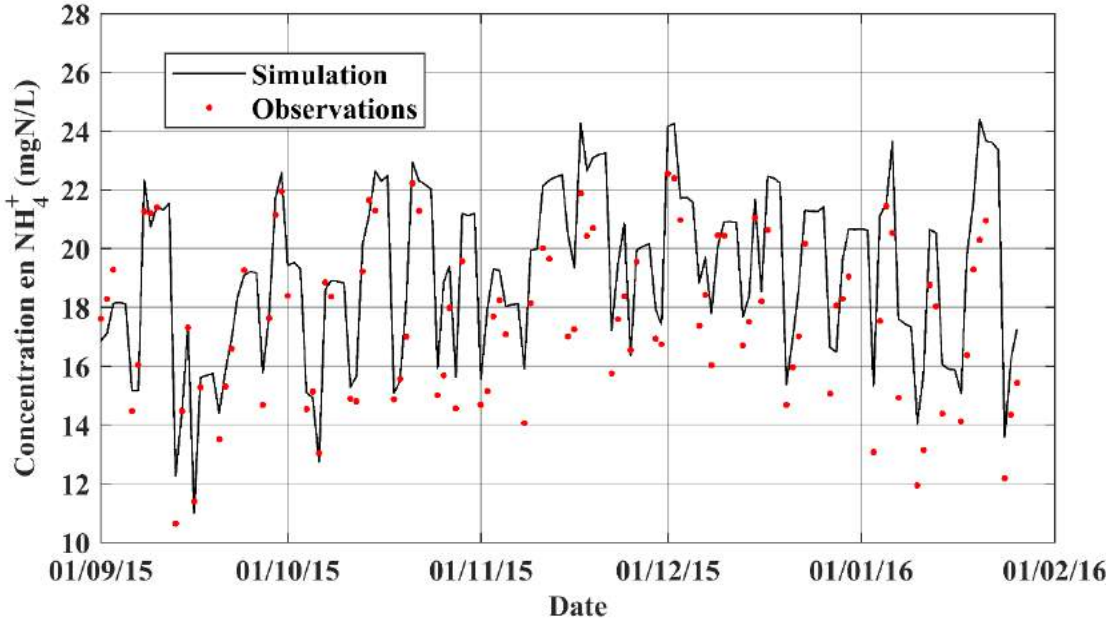


Figure A2.31 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en NH_4^+ en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

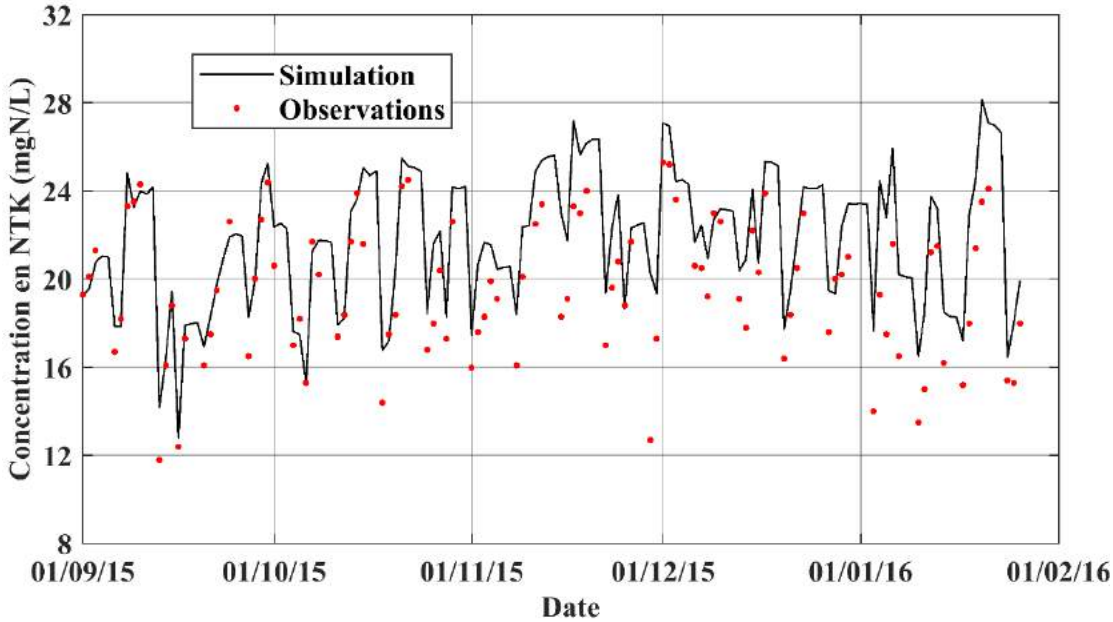


Figure A2.32 Résultats de validation en pré-dénitrification de la concentration en NTK en sortie (points rouges : observations ; ligne noire : résultats de simulation).

Références

Bernier, J., Rocher, V., & Lessard, P. (2014a). Modelling headloss and two-step denitrification in a full-scale wastewater post-denitrifying biofiltration plant. *Journal of Environmental Engineering and Science, 9*(3), 171-180.

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014b). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300.

Henze, M., Gujer, W., Mino, T., & van Loosdrecht, M. C. M. (2000b). *Activated Sludge Models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. IWA Publishing, Londres, Royaume-Uni.

Hiatt, W. C. et Grady, C. P. L. J. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification, and denitrification. *Water Environment Research, 80*(11), 2145-2156.

Lang, L., Pocquet, M., Ni, B. J., Yuan, Z., & Spérandio, M. (2016). Comparison of different 2-pathway models for describing the combined effect of DO and nitrite on the nitrous oxide production by ammonia-oxidizing bacteria. *Water Science & Technology, 75*(3), 491-500.

Ohashi, H., Sugawara, T., Kikuchi, K.-I., & Konno, H. (1981). Correlation of liquid-side mass transfer coefficient for single particles and fixed beds. *Journal of Chemical Engineering of Japan, 14*(6), 433-438.

Pocquet, M., Wu, Z., Queinnec, I., & Sperandio, M. (2016). A two pathway model for N_2O emissions by ammonium oxidizing bacteria supported by the NO/N_2O variation. *Water Research, 88*, 948-959.

USEPA. (1989). *Design manual: Fine pore aeration systems*, Cincinnati, Ohio, Etats-Unis.

Annexe 3 Informations supplémentaires de Chapitre 5

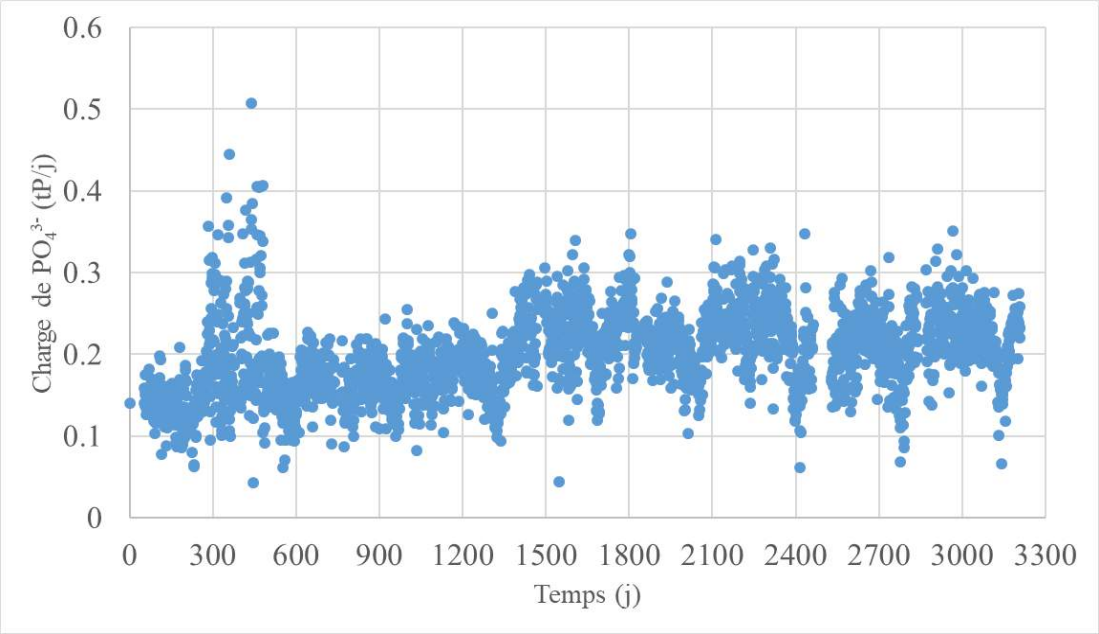


Figure A3.1 Charge de PO_4^{3} en entrée de décanteur primaire de la station Seine Centre 2000-2008. (Période de la calibration : jours 0-1650 ; Période de la validation : jours 1651-3229).

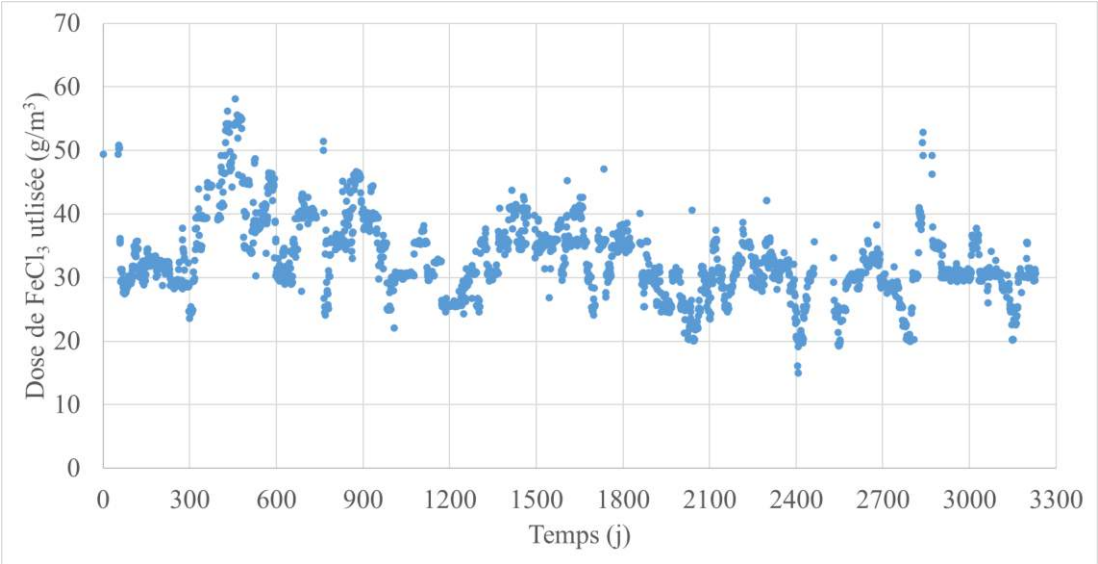


Figure A3.2 Dose de $FeCl_3$ utilisée par la station Seine Centre 2000-2008. (Période de la calibration : jours 0-1650 ; Période de la validation : jours 1651-3229).

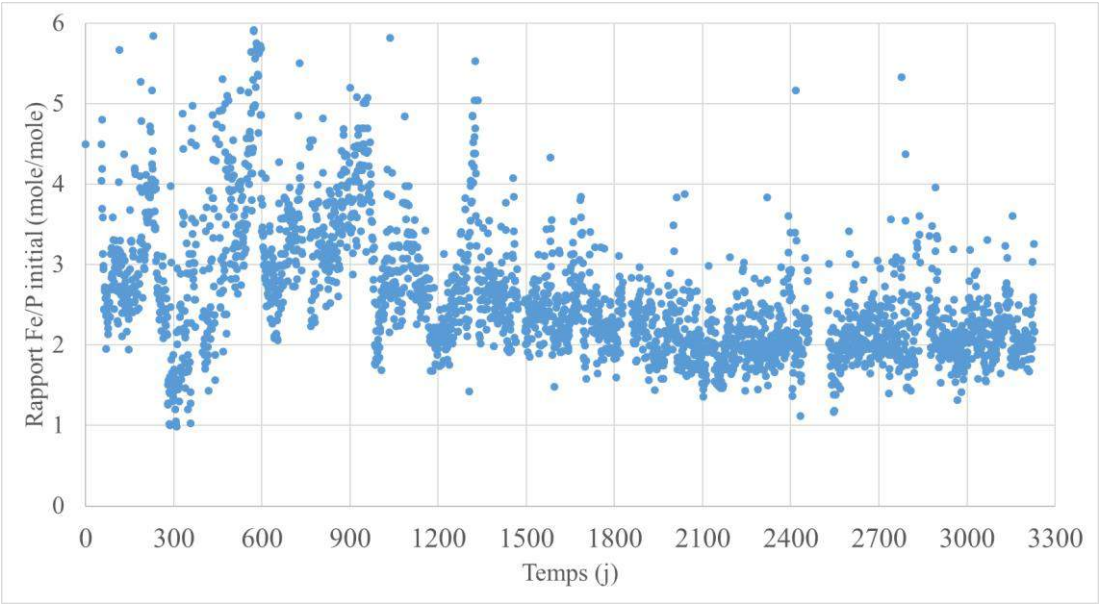


Figure A3.3 Rapport molaire Fe/P initial utilisé par la station Seine Centre 2000-2008. (Période de la calibration : jours 0-1650 ; Période de la validation : jours 1651-3229).

Annexe 4 Informations supplémentaires de Chapitre 7

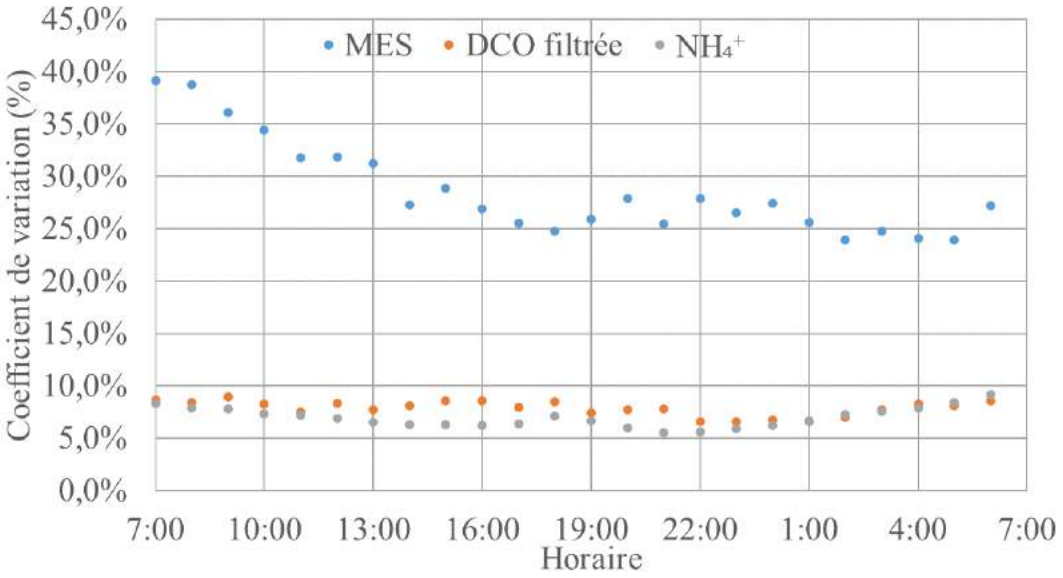


Figure A4.1 Coefficients de variation des répartitions horaires de la concentration en MES des eaux prétraitées et des concentrations en la DCO filtrée et en NH_4^+en sortie de tamisage de la filière BRM de la station Seine Aval pour la période de mi-avril 2018 à mi-avril 2019.

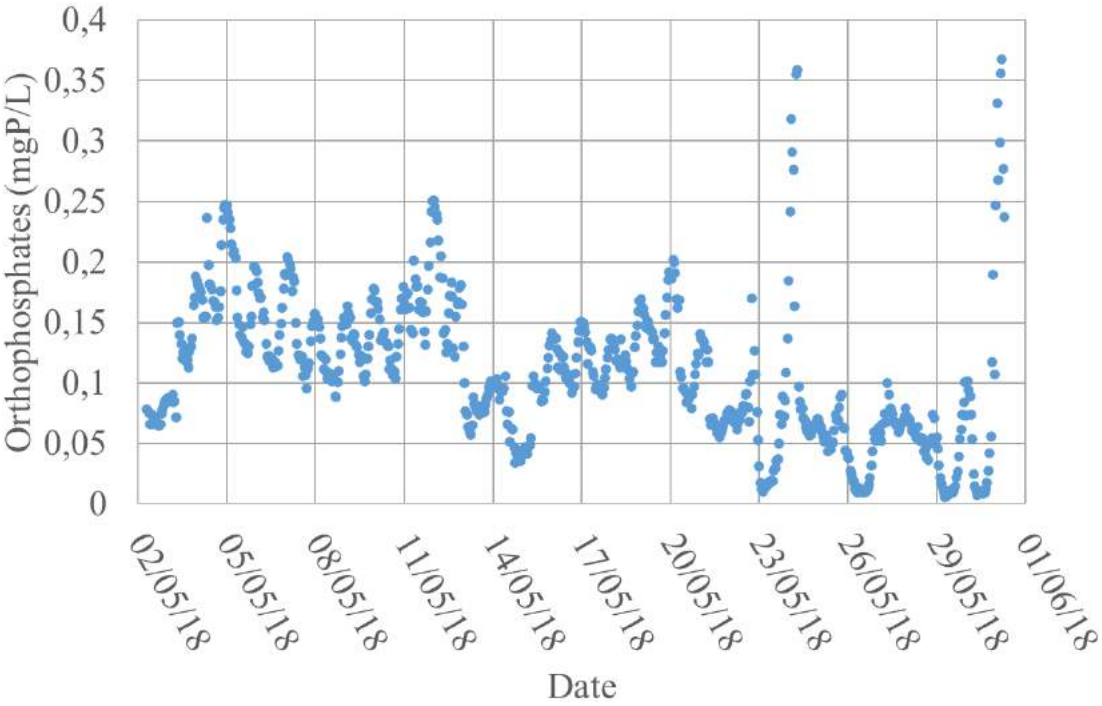


Figure A4.2 Résultats de simulation de la concentration en PO_4^{3-}en sortie de la décantation primaire de la station Seine Aval avec le dosage de $FeCl_3$ actuellement utilisé pour le mode de double décantation de la station pour la période de 2 à 30 mai 2018.

Tableau A4.1 La qualité de l'eau en sortie de l'étage de pré-dénitrification prédite par le modèle filière et celle observée dans la station pour la période de 2 à 30 mai 2018.

Variables	Unités	Observations		Simulation	
		Moyenne	Ecart-type	Moyenne	Ecart-type
DCO	mgO_2/L	58,52	13,53	53,00	11,49
DCOs	mgO_2/L	39,46	8,15	32,23	5,94
MES	mg/L	18,53	6,89	16,62	5,33
NO_x^-	mgN/L	2,19	0,36	2,20	1,09
NO_3^-	mgN/L	1,83	0,39	1,97	1,05
NO_2^-	mgN/L	0,32	0,09	0,23	0,06
NH_4^+	mgN/L	19,67	3,01	19,66	3,06
PO_4^{3-}	mgP/L	0,38	0,13	0,51	0,14

Tableau A4.2 La qualité de l'eau en sortie de l'étage de nitrification prédite par le modèle filière et celle observée dans la station pour la période de 2 à 30 mai 2018.

Variables	Unités	Observations		Simulation	
		Moyenne	Ecart-type	Moyenne	Ecart-type
DCO	mgO_2/L	38,21	5,62	39,25	7,32
DCOs	mgO_2/L	26,34	3,84	24,59	4,02
MES	mg/L	12,52	2,96	10,65	3,35
NO_3^-	mgN/L	19,15	2,3	20,28	3,30
NO_2^-	mgN/L	0,26	0,1	0,41	0,13
NH_4^+	mgN/L	1,23	1,09	1,33	0,49
PO_4^{3-}	mgP/L	0,45	0,09	0,40	0,10

Tableau A4.3 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de traitement primaire de la filière biofiltration de la station Seine Aval pour chaque scénario testé.

Variables	Unités	SC0	SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6
DCO	mgO_2/L	118,9	118,9	118,9	118,9	118,9	118,9	121,2
DCO soluble	mgO_2/L	75,6	75,6	75,6	75,6	75,6	75,6	75,6
MES	mg/L	41,5	41,5	41,5	41,5	41,5	41,5	43,0
PO_4^{3-}	mgP/L	0,67	0,67	0,67	0,67	0,67	0,67	1,22

Tableau A4.4 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de l'étage de pré-dénitrification de la station Seine Aval pour chaque scénario testé.

Variables	Unités	SC0	SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6
DCO	mgO_2/L	53,0	54,0	51,4	53,4	53,0	55,1	53,5
DCOs	mgO_2/L	32,2	32,2	31,4	32,7	32,2	34,1	32,1
MES	mg/L	16,6	17,5	16,1	16,6	16,6	16,8	17,1
NH_4^+	mgN/L	19,7	21,2	18,6	20,5	19,6	19,6	19,7
NO_3^-	mgN/L	1,97	1,01	2,46	1,35	2,06	0,56	1,91
NO_2^-	mgN/L	0,23	0,19	0,25	0,22	0,23	0,15	0,23
PO_4^{3-}	mgP/L	0,51	0,52	0,51	0,52	0,51	0,50	0,91

Tableau A4.5 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de l'étage de nitrification de la station Seine Aval pour chaque scénario testé.

Variables	Unités	SC0	SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6
DCO	mgO_2/L	39,3	39,8	38,8	39,2	39,3	39,5	39,6
DCOs	mgO_2/L	24,6	24,6	24,6	24,6	24,6	24,5	24,6
MES	mg/L	10,7	11,1	10,3	10,6	10,7	10,9	10,9
NH_4^+	mgN/L	1,33	1,32	1,32	3,27	1,17	1,43	1,34
NO_3^-	mgN/L	20,3	20,7	19,9	18,1	20,5	18,8	20,3
NO_2^-	mgN/L	0,41	0,40	0,39	0,73	0,38	0,44	0,39
PO_4^{3-}	mgP/L	0,40	0,40	0,40	0,40	0,40	0,38	0,73

Tableau A4.6 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie l'étage de post-dénitrification de la station Seine Aval pour chaque scénario testé.

Variables	Unités	SC0	SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6
DCO	mgO_2/L	49,8	50,5	49,1	42,1	53,5	47,5	49,8
DCOs	mgO_2/L	41,5	41,7	41,1	35,0	44,9	39,5	41,3
MES	mg/L	6,23	6,60	6,05	6,06	6,40	5,95	6,38
NH_4^+	mgN/L	0,69	0,68	0,70	2,78	0,54	0,83	0,69
NO_3^-	mgN/L	1,70	1,63	1,68	3,36	1,47	1,40	1,65
NO_2^-	mgN/L	0,97	0,91	0,97	2,70	0,67	0,93	0,95
PO_4^{3-}	mgP/L	0,32	0,32	0,32	0,35	0,32	0,32	0,59

Tableau A4.7 Résultats de simulation de la qualité de l'eau en sortie de traitement par biofiltration de la station Seine Aval pour chaque scénario testé.

Variables	Unités	SC0	SC1	SC2	SC3	SC4	SC5	SC6
DCO	mgO_2/L	45,1	45,7	44,6	41,1	47,1	43,7	45,3
DCOs	mgO_2/L	33,8	33,7	33,6	30,5	35,6	32,2	33,7
MES	mg/L	8,54	8,98	8,25	7,94	8,65	8,64	8,73
NH_4^+	mgN/L	0,98	0,98	0,99	2,99	0,84	1,13	0,99
NO_3^-	mgN/L	10,2	10,5	10,0	9,7	10,3	9,9	10,2
NO_2^-	mgN/L	0,72	0,67	0,71	1,83	0,55	0,69	0,69
PO_4^{3-}	mgP/L	0,35	0,36	0,36	0,37	0,35	0,35	0,65

Supporting information for article

Comprehensive modelling of a full-scale nitrifying biofilter unit: Calibration and validation under different treatment configurations (Supporting information)

Jialu Zhu [1, 2, *], Jean Bernier [1], Sam Azimi [1], André Pauss [2], Vincent Rocher [1] and Peter A. Vanrolleghem [3]

[1] SIAAP, Direction Innovation et Environnement, 82 avenue Kléber, 92700, Colombes, FRANCE

[2] Sorbonne Universités, EA 4297 TIMR UTC/ESCOM, UTC, CS 60319, 60203 Compiègne cedex, France

[3] modelEAU, Université Laval, Département de génie civil et de génie des eaux, 1065 Avenue de la Médecine, Québec, QC, G1V 0A6, Canada

[*] Corresponding author, E-mail address: jialu.zhu@utc.fr

Table S1 Average influent characteristics of the nitrification stage for the simulated periods (year 2009 and mid-April to mid-October 2017)

	Inflow	COD	TSS	NH_4^+	NO_3^-	NO_2^-	PO_4^{3-}	Temperature
Unit	1000. m3/j	mg O2/L	mg/L	mg N/L	mg N/L	mg N/L	mg P/L	°C
2009	1,635 ± 274	93 ± 28	36 ± 19	36 ± 7	4.3 ± 1.6	0.5 ± 0.4	0.4 ± 0.2	19 ± 3
Number of observations	360	347	347	347	347	347	347	360
2017	1,861 ± 269	62 ± 17	21 ± 9	18 ± 4	4.7 ± 1.8	0.6 ± 0.4	0.7 ± 0.4	21 ± 2
Number of observations	180	178	179	179	177	177	179	180

Table S2 List of parameters chosen for effluent TSS and COD calibration.

Parameters	Symbol	Unit	SRC	
			effluent COD	effluent TSS
Conversion ratio for COD to TSS in biofilm	i_{TSS_COD}	gTSS/gCOD	-0.01	0.21
Media packing factor	β	-	-0.38	-0.46
Clean media filter coefficient	λ_0	1/d	-0.4	-0.49
x constant in filtration equation	x	-	0.14	0.18
y constant in filtration equation	y	-	-0.45	-0.54
Soluble biodegradable organic carbon half-saturation constant for heterotrophic biomass	$K_{SB,\ OHO}$	gO_2/m^3	0.20	-0.02
Maximum specific growth rate for heterotrophic biomass	$\mu_{OHO,\ Max}$	1/d	-0.26	-0.015
Decay rate for nitrite heterotrophic biomass	b_{OHO}	1/d	0.27	0.01
Temperature correction factor for heterotrophic biomass growth rate	$\Theta_{\mu OHO}$	-	0.21	0.04
Temperature correction factor for heterotrophic biomass decay rate	Θ_{bOHO}	-	-0.24	0.02

Table S3 List of parameters chosen for effluent NH_4^+, DO and NO_3^- calibration.

Parameters	Symbol	Unit	SRC		
			effluent NH_4^+	effluent DO	effluent NO_3^-
Constant for air diffuser and system configuration for real k_La calculation	m	-	-0.14	0.13	0.13
Airflow rate reference for real k_La calculation	Air_Ref	Nm^3/h	0.33	-0.31	-0.33
k_La reduction factor outside the media bed	k_La _R	-	0.01	0.21	-0.01
k_La reference for real k_La calculation	k_La _Ref	1/d	-0.39	0.34	0.40
Gas solubility reduction factor in wastewater	β_{Sol}	-	-0.41	0.61	0.42
Fouling factor for aeration	F	-	-0.22	0.19	0.22
β' constant in Sherwood number equation	β'	-	-0.27	-0.29	0.28

n constant in Sherwood number equation	n	-	-0.26	-0.25	0.27
Backwash biofilm removal fraction	f_{BW}	-	-0.35	0.08	0.33
Maximum specific growth rate for ammonium oxidizing biomass	$\mu_{AOB, Max}$	1/d	-0.11	-0.09	0.09
Biofilm dry density	ρ_Biofilm	gCOD/m^3	-0.21	0.01	0.21

Table S4 ***List of parameters chosen for effluent NO_2^- calibration.***

Parameters	Symbol	Unit	SRC
			effluent NO_2^-
AOB affinity constant for O2 (AMO reaction)	$K_{O_2, AOB1}$	gO_2/m^3	-0.23
Oxygen half-saturation constant for nitrite oxidizing biomass	$K_{O_2, NOB}$	gO_2/m^3	0.12
Maximum specific growth rate for nitrite oxidizing biomass	$\mu_{NOB, Max}$	1/d	-0.38
nitrite half-saturation constant for nitrite oxidizing biomass	$K_{NO_2, NOB}$	gN/m^3	0.11
Decay rate for nitrite oxidizing biomass	b_{NOB}	1/d	0.22

Table S5 ***List of parameters chosen for effluent PO_4^{3-} calibration.***

Parameters	Symbol	Unit	SRC
			effluent PO_4^{3-}
Mass of phosphorous per mass of COD in biomass	i_{P_XBio}	gP/gCOD	-0.13
Mass of phosphorous per mass of COD in products from biomass	$i_{P_XBio, lys}$	gP/gCOD	-0.17
Yield of ammonium oxidizing biomass	Y_{AOB}	gCOD/gN	-0.12
Yield of heterotrophic biomass	Y_{OHO}	$gCOD/gO_2$	-0.79
Fraction of active biomass contributing to biomass debris	$f_{XUE,bio,lys}$	-	0.16

Table S6 ***List of parameters chosen for N_2O emission factor calibration.***

Parameters	Symbol	Unit	SRC
			N_2O emission factor
AOB affinity constant for HNO_2	$K_{HNO2,AOB}$	gN/m^3	-0.12
Soluble biodegradable COD half-saturation constant for heterotrophic biomass reducing N_2O	$K_{SB,OHO,N2O}$	gN/m^3	0.12
Anoxic yield factor of heterotrophic biomass	$\eta_{YOHO,Ax}$	-	0.25
Anoxic growth reduction factor for heterotrophic biomass reducing N_2O	$\eta_{\mu OHO,N2O}$	-	-0.12
Reduction factor for the ND pathway	η_{ND}	-	0.15

Table S7 Simulated biofilm thicknesses along the media height

Media height	0.5 m	1 m	1.5 m	2 m	2.5 m	3 m	3.5 m
2009 (μm) (n= 103683)	104 ± 18	101 ± 18	98 ± 18	94 ± 17	92 ± 17	90 ± 17	89 ± 17
2017 (μm) (n= 51843)	95 ± 14	89 ± 14	82 ± 13	77 ± 12	73 ± 12	70 ± 12	69 ± 12

Table S8 Statistical score results for daily energy consumption for aeration and pumping in the nitrification stage from mid-April to mid-October of year 2017

Statistical scores	Aeration	Pumping
Validated number of observations	180	180
Observed mean (MWh/d)	82.86	74.51
ME (MWh/d)	1.97	0.50
MAE (MWh/d)	2.60	0.73
RMSE (MWh/d)	3.50	1.03

Table S9 Default and calibrated model parameters values

Parameters	symbol	Default value[a]	Calibrated value	unit
Constant for air diffuser and system configuration for real k_La calculation	m	0.85	0.940	-
Mass of phosphorous per mass of COD in biomass	i_{P_XBio}	0.015	0.020	gP/gCOD
Mass of phosphorous per mass of COD in products from biomass	$i_{P_XBio,lys}$	0.015	0.020	gP/gCOD
Conversion ratio for COD to TSS in biofilm	i_{TSS_COD}	0.75	0.727	gTSS/gCOD
Geometric coefficient of the media bed	β	1	0.508	-
Filter coefficient for clean filter	λ_0	0.945[c]	0.430	1/d
x constant in filter equation	x	1	1.574	-
y constant in filter equation	y	3	1.422	-
z constant in filter equation	z	1	0.375	-
Airflow rate reference for real k_La calculation	Air_Ref	44,980	44,500	Nm^3/d
k_La reduction factor outside the media bed	k_La _R	0.032	0.027	-
k_La reference for real k_La calculation	k_La _Ref	81.9	116[a]	1/h
Diffusion reduction factor in the biofilm layers	f_D	0.7	0.6	-
Hydroxylamine half-saturation constant for ammonium oxidizing biomass	$K_{NH_2OH,\ AOB}$	0.9	0.018	gN/m^3
Free ammonia half-saturation constant for ammonium oxidizing biomass	$K_{NH_3,\ AOB}$	0.2	0.004	gN/m^3
Nitrite half-saturation constant for nitrite oxidizing biomass	$K_{NO_2,\ NOB}$	0.2	0.163	gN/m^3
Oxygen half-saturation constant for nitrite oxidizing biomass	$K_{O_2,\ NOB}$	0.6	0.793	gO_2/m^3
Soluble biodegradable COD half-saturation constant for heterotrophic biomass	$K_{SB,\ OHO}$	20	19.403	$gCOD/m^3$
Decay rate for nitrite oxidizing biomass	b_{NOB}	0.17	0.182	1/d
Maximum specific growth rate for ammonium oxidizing biomass	$\mu_{AOB,\ Max}$	0.8	0.790	1/d
Maximum specific growth rate for nitrite oxidizing biomass	$\mu_{NOB,\ Max}$	1	0.569	1/d
Gas solubility reduction factor in wastewater	β_{Sol}	0.95	0.913	-
Biofilm dry density	$\rho_{Biofilm}$	133,600[c]	126,161	$g\ COD/m^3$
Backwash biofilm removal fraction	f_{BW}	0.075	0.098	-
Temperature correction factor for heterotrophic biomass decay rate	Θ_{bOHO}	1.029	1.12	-

Temperature correction factor for oxygen transfer rate	Θ_{K_La}	1.005	1.01	-
Temperature correction factor for ammonium oxidizing biomass maximum specific growth rate	$\Theta_{\mu NOB, Max}$	1.09	1.1	-

[a] Sources: Ohashi *et al.*, 1981; Hiatt & Grady, 2008; Bernier *et al.*, 2014; Pocquet *et al.*, 2016

[b] Calibrated K_La reference value for year 2009 (The value used for year 2017 is 98.6 (1/h)).

[c] Default values adapted from original values found in the original model (Bernier *et al.*, 2014).

Figure S1 Daily ammonium loads and simulated biofilm thickness on beads in the first 0.5-meter of the media bed under different treatment configurations. a. Configuration before upgrade b. Current configuration. (Black line: biofilm thickness; red dots: ammonium load)

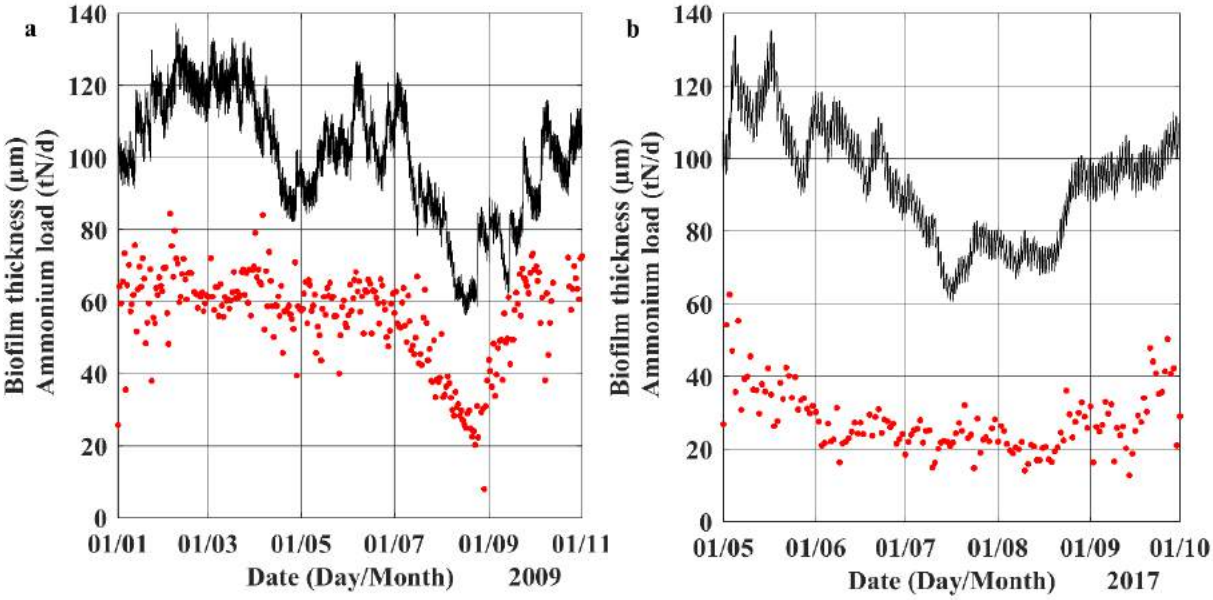
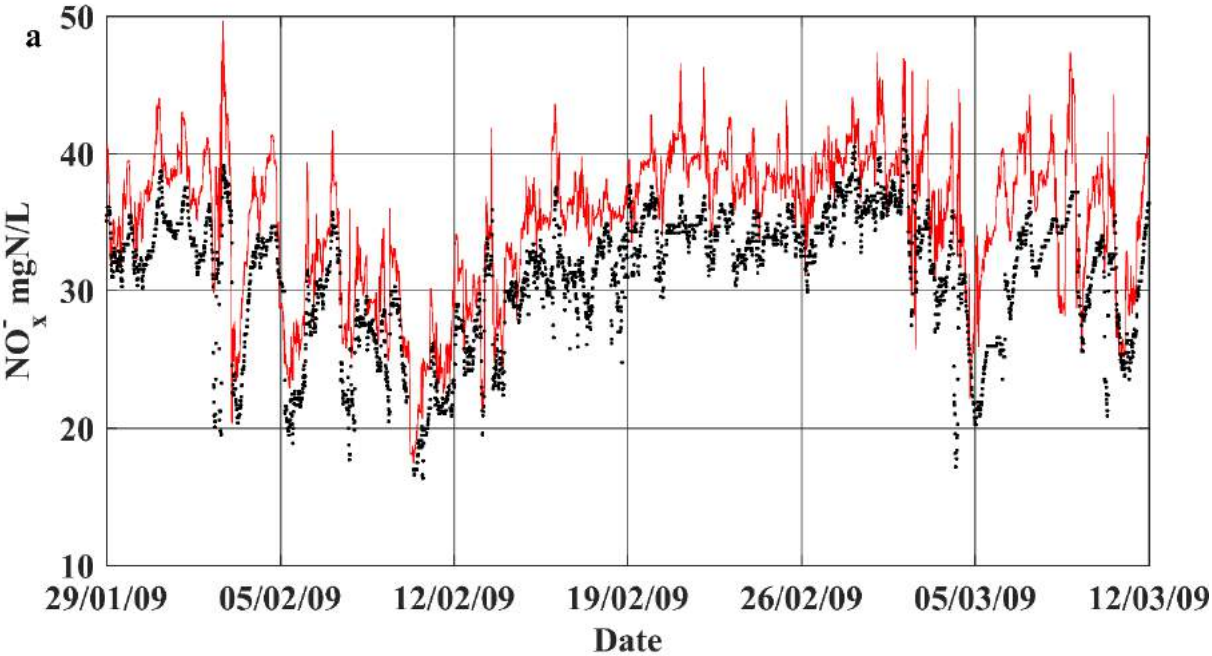
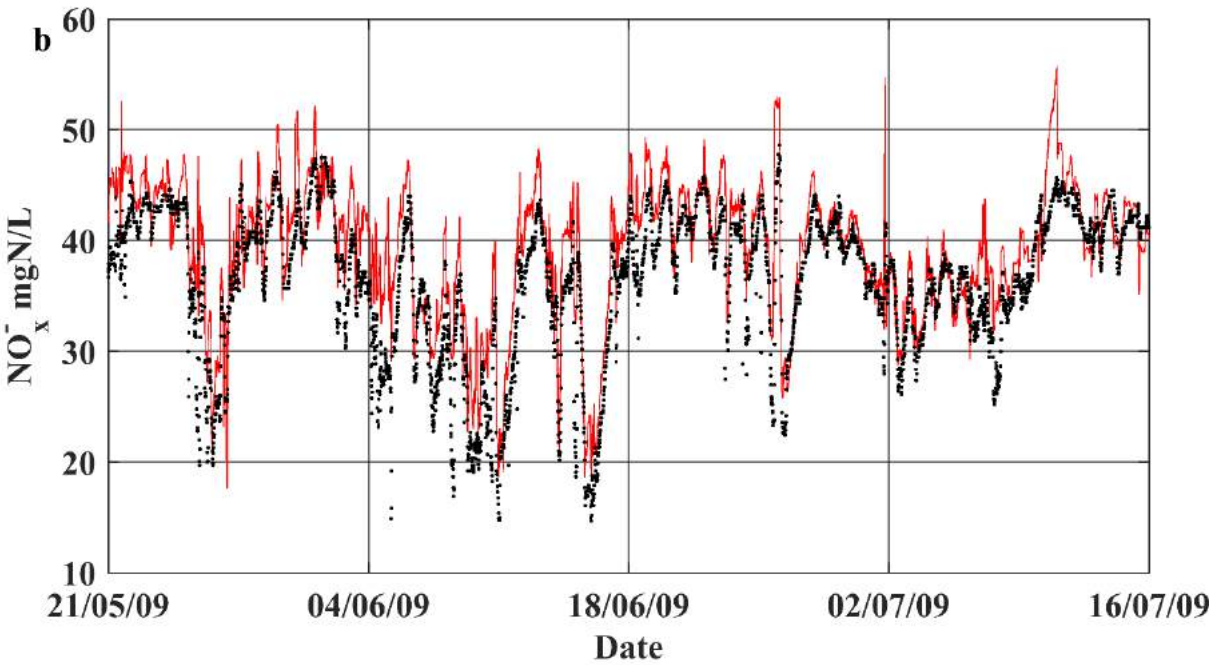
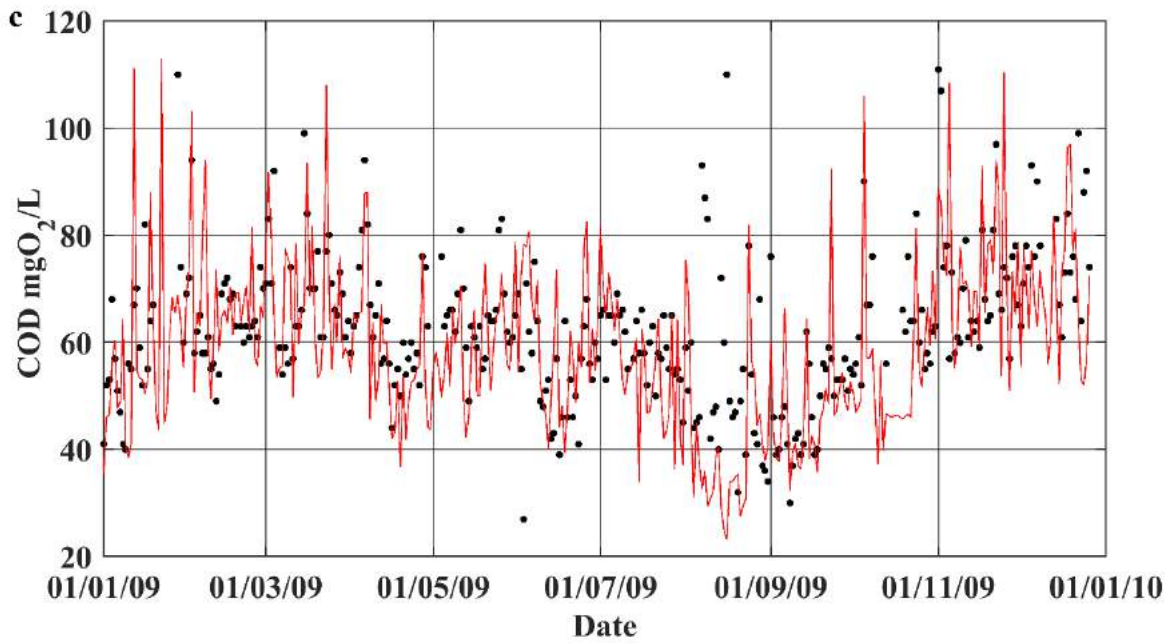


Figure S2 Simulation results (red line) and observations (black dots) for the effluent of the nitrification stage in 2009 (a. NO_x from late-January to mid-March; b. NO_x from late-May to mid-July; c.COD; d. TSS)




b
60
50
40
30
20
10
NO$_x^-$ mgN/L
21/05/09
04/06/09
18/06/09
02/07/09
16/07/09
Date


c
120
100
80
60
40
20
COD mgO$_2$/L
01/01/09
01/03/09
01/05/09
01/07/09
01/09/09
01/11/09
01/01/10
Date

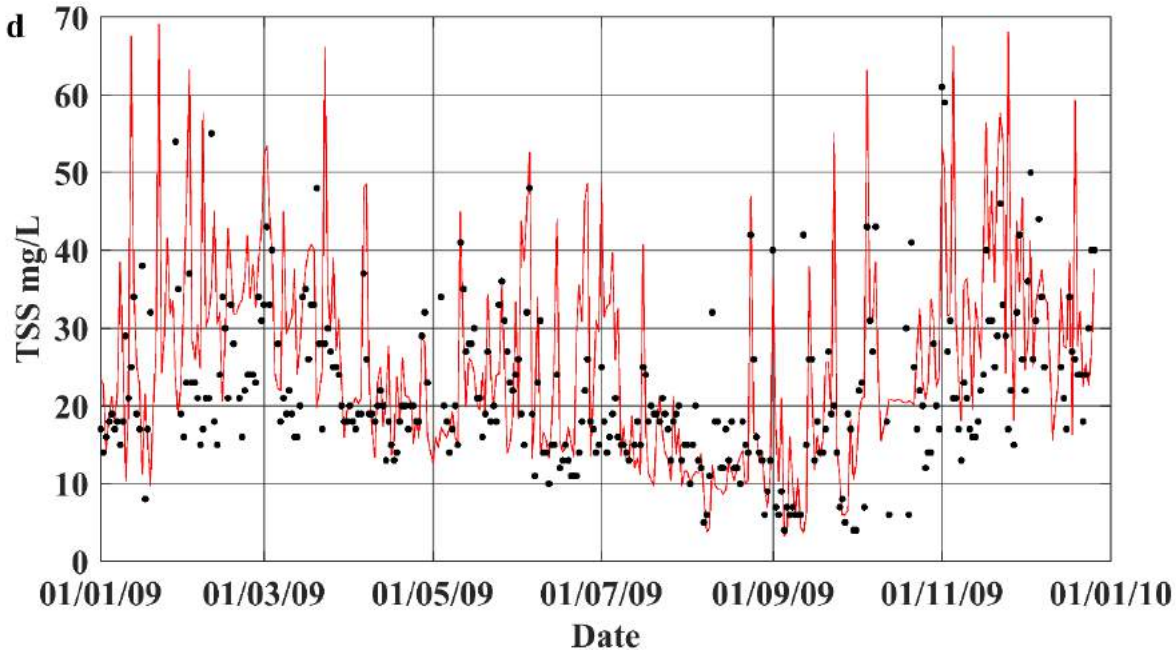
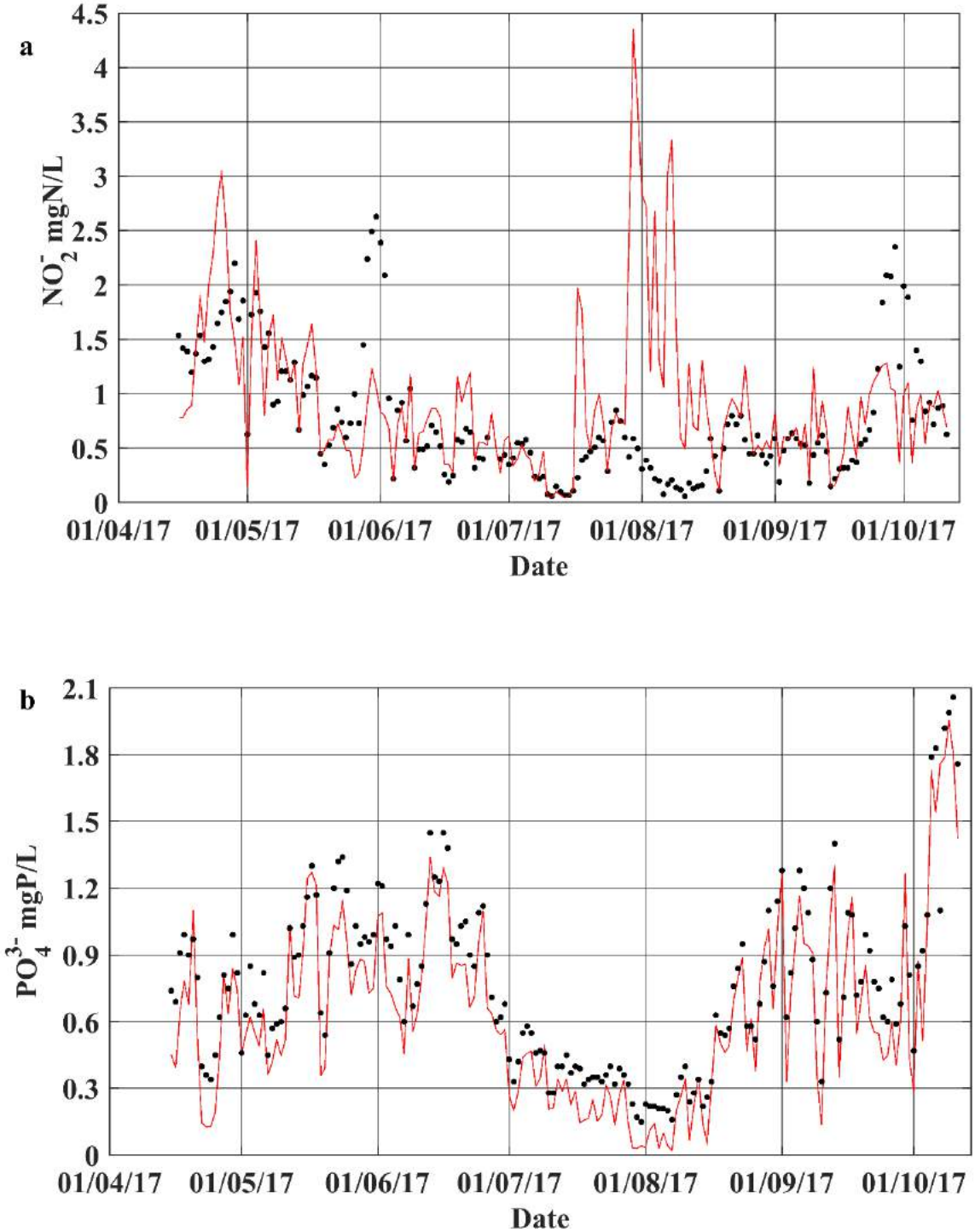
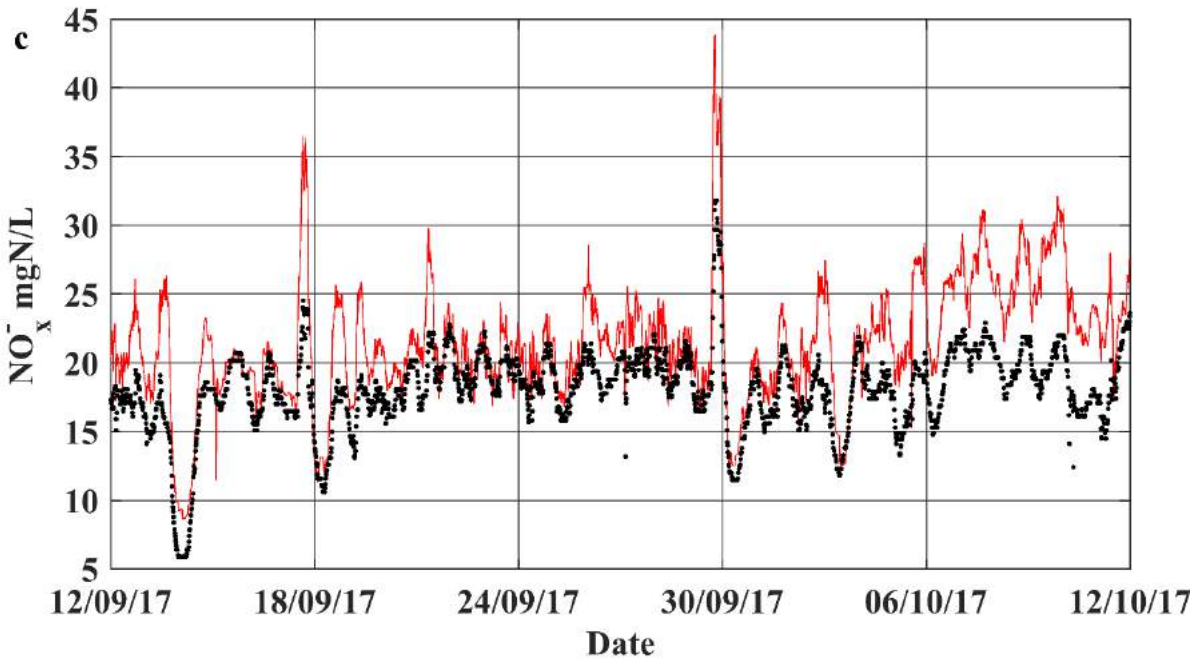
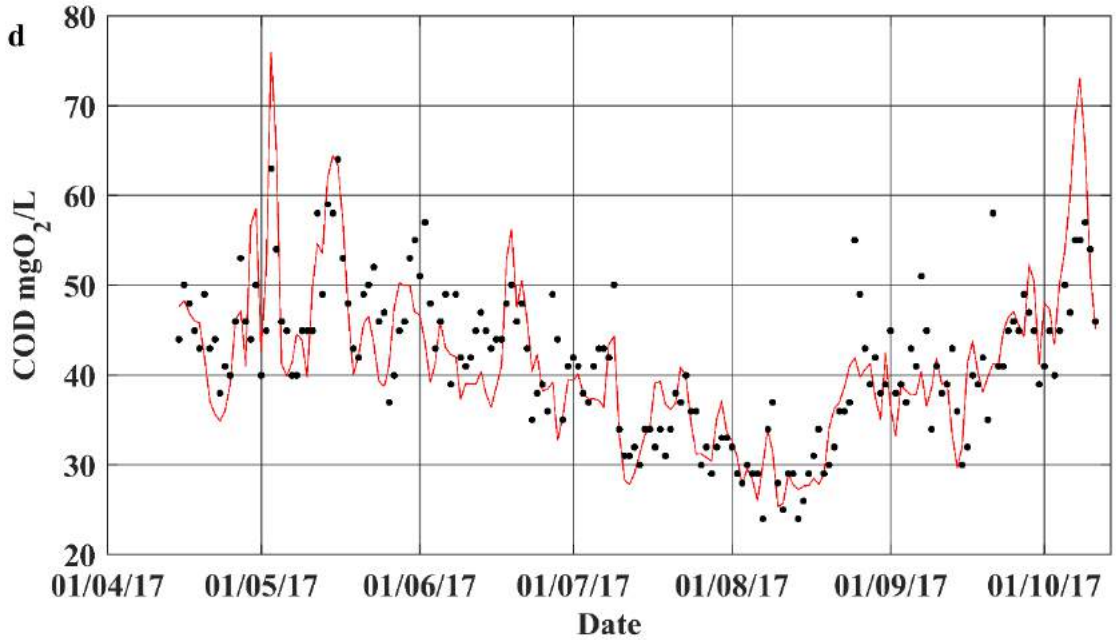
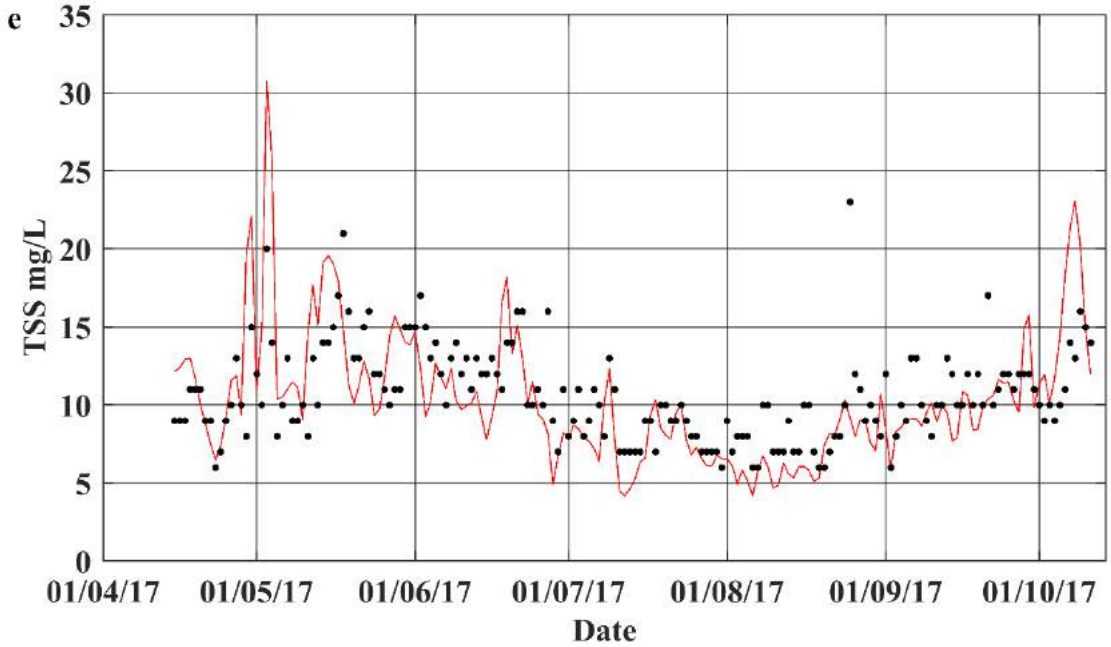

d
70
60
50
40
30
20
10
0
TSS mg/L
01/01/09
01/03/09
01/05/09
01/07/09
01/09/09
01/11/09
01/01/10
Date

Figure S3 Simulation results (Red line) and observations (black dots) for the effluent of the nitrification stage in 2017 (a. NO_2^-; b. PO_4^{3-}; c. NO_x; d. COD; e. TSS)




c
45
40
35
30
25
20
15
10
5
NO$_x^-$ mgN/L
12/09/17
18/09/17
24/09/17
30/09/17
06/10/17
12/10/17
Date


d
80
70
60
50
40
30
20
COD mgO$_2$/L
01/04/17
01/05/17
01/06/17
01/07/17
01/08/17
01/09/17
01/10/17
Date


e
35
30
25
20
15
10
5
0
TSS mg/L
01/04/17
01/05/17
01/06/17
01/07/17
01/08/17
01/09/17
01/10/17
Date

Equation S1 Calculation of the evolution of the filter coefficient during filtration (Ives, 1970)

$$\lambda = \lambda_0 * \left(1 + \frac{\beta * \sigma}{\varepsilon_0}\right)^y * \left(1 - \frac{\sigma}{\varepsilon_0}\right)^z * \left(1 - \frac{\sigma}{\sigma_u}\right)^z$$

Where

λ is the filter coefficient (1/d)

λ_0 is the filter coefficient for clean filter (1/d)

β is the geometric coefficient of the filter (-)

ε_0 is the porosity of clean filter media bed (-)

σ is the specific deposit (m^3 deposit/ m^3 media)

σ_u is the ultimate specific deposit (m^3 deposit/ m^3 media)

x, y, z are empiric exponents (x=1; y=3; z=1; Bernier et al., 2014)

Equation S2 Boundary layer thickness estimation (Ohashi *et al.*, 1981 and Vigne *et al.*, 2010)

$$L_L = \frac{d_p}{Sh}$$

Where

L_L is the boundary layer thickness (mm)

d_p is the characteristic length (diameter) of the filtering media (mm)

Sh is the Sherwood number (-)

Sherwood number (Sh) can be calculated by the following equation:

$$Sh = A + K' * (B' * Re^{m'})^n * Sc^{\beta'}$$

Where

A is a constant (value = 2)

K' is a constant (value = 0.51)

B' is a constant (value = 4.23)

M' is a constant (value = 5/6)

n is a constant (value = 0.6)

β' is a constant (value = 1/3)

Re is the Reynolds number (-)

Sc is the Schmidt number (-)

The Reynolds number can be calculated by the following equation:

$$Re = \frac{d_p * u}{v * \varepsilon_0}$$

Where

u is the velocity of the liquid (m/s)

v is the kinematic viscosity of the liquid (m^2/s)

ε_0 is the porosity of clean filter media bed (-)

The Schmidt number can be calculated by the following equation:

$$Sc = \frac{v}{D_{w,i}}$$

Where

$D_{w,i}$ is the diffusion coefficient of soluble component i in water (m^2/s)

Note: In this work, an average value of the diffusion coefficient was used. The average value was calculated based on the diffusion coefficient values of each soluble component in the model.

Equation S3 Aeration energy estimation (Wu et *al.*, 2005)

$$E_{aeration} = 0.024 \int \frac{Q_{air} * \Delta P}{\eta}$$

Where

$E_{aeration}$ is the cumulative aeration energy (kWh)

Q_{air} is the air flow delivered by compressors (m^3/d)

ΔP is the differential pressure between the input and the output of the compressor (Pa)

η is the overall efficiency of the compressors (-)

0.024 is a factor to convert from W.d to kWh (-)

Equation S4 Pumping energy estimation (Gernaey et *al.*, 2006)

$$E_{pump} = n_{pumps} * 0.024 \int \frac{\left(K' * Q_{fluid}^2 + H_{geo}\right) * Q_{fluid} * g * \rho}{\eta}$$

Where

E_{pump} is the cumulative pumping energy (kWh)

n_{pump} is the number of active pumps (-)

K' is the coefficient accounting for the energy requirements of the friction headloss, minor losses and velocity head (d^2/m^5)

H_{geo} is the geometric height of the pump (m)

Q_{fluid} is the bulk liquid flow rate delivered by the pump (m^3/d)

g is the gravity acceleration (m/s^2)

ρ is the density of the fluid (kg/m^3)

η is the overall efficiency of the pump (-)

0.024 is the conversion constant for W.d to kWh (-)

Note: For equation S3 and S4, only the bulk liquid flow rate and the air flow rate are considered as variables, the rest of the terms in the equations are fixed as parameters obtained or deduced from equipment technical manuals.

Equation S5 Calculation of statistical scores (Hauduc *et al.*, 2015)

$$ME = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_i - O_i)$$

$$MAE = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}|P_i - O_i|$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(P_i - O_i)^2}$$

$$Janus\ coefficient = {}^{RMSE_{Validation}}/_{RMSE_{Calibration}}$$

Where

n is the number of observations.

P_i is the model prediction value at time step i.

O_i is the observation value at time step i.

Equation S6 Aeration control equations adapted from the technical documentation of the nitrification stage

Air flow rate imposed by feed-forward control loop:

$$Q_{air,FF} = k_a * Q_{water,in}\left(C_{NH4,in} - C_{NH4,set}\right)/1000 + k_b * N_{Cell}$$

Where

$Q_{air,FF}$ is the air flow rate proposed by Feed-Forward control for the stage (Nm^3/d)

k_a is the air flow required per kg of ammonium load ($Nm^3/kgN\text{-}NH_4^+$)

$Q_{water,\ in}$ is the influent water flow rate for the stage (m^3/d)

$C_{NH4,\ in}$ is the influent ammonium concentration ($mgN\text{-}NH_4^+/L$)

$C_{NH4,set}$ is the effluent ammonium concentration set-point fixed by the operator ($mgN\text{-}NH_4^+/L$)

k_b is the compensatory air flow rate considering the efficiency of the aeration system (Nm^3/d)

N_{cell} is the number of active treatment cells (1-6)

Air flow rate correction by Feed-Back control:

$$Y_{air,FB,t} = k_{fb}\left(\frac{F_1 * Q_{water,in}\left(C_{NH4,out} - C_{NH4,set}\right)}{1000} + S_t\right)$$

$$Q_{air,FB,t} = \min\left[240000 * N_{Cell}, \max\left(-240000 * N_{Cell}, Y_{air,FB,t}\right)\right]$$

Where

$Y_{air,FB,t}$ is the calculated temporary air flow rate (Nm^3/d)

k_{fb} is the equivalence factor to transfer ammonium load to air flow for feed-back loop ($Nm^3/kgN\text{-}NH_4^+$)

F_1 is a constant (-)

$Q_{water,\ in}$ is the influent water flow rate for the stage (m^3/j)

$C_{NH4,\ in}$ is the influent ammonium concentration ($mgN\text{-}NH_4^+/L$)

$C_{NH4,set}$ is the effluent ammonium concentration set-point ($mgN\text{-}NH_4^+/L$)

S_t is the smoother variable ($kgN\text{-}NH_4^+/d$)

N_{cell} is the number of active treatment cells (1-6)

$Q_{air,FB,t}$ is the correction air flow rate calculated by feed-back loop (Nm^3/d)

Note: the controlled air flow rate is changed each 300s.

The smoother variable S_t is calculated by the following equations:

$$S_t = \lambda * S_{t-1} + \frac{1-\lambda}{kf_b} * Q_{air,FB,t-1}$$

Where

λ is the smoother coefficient (-)

kf_b is the equivalence factor to transfer ammonium load to air flow for feed-back loop (Nm^3/kgN-NH_4^+)

$Q_{air,FB,t-1}$ is the controlled air flow rate calculated by the feed-back loop in the last time cycle (Nm^3/d)

S_{t-1} is the smoother variable calculated in the last time cycle (kgN-NH_4^+/d)

Air flow rate for each biofilter:

$$Q_{air,filter} = \min\left[33600, \max\left(96000, \frac{(Q_{air,FF} + Q_{air,FB,t})}{N_{filter}}\right)\right]$$

$Q_{air,FF}$ is the air flow rate imposed by feed-forward loop for the stage (Nm^3/d)

$Q_{air,FB,t}$ is the correction air flow rate calculated by feed-fack loop (Nm^3/d)

N_{filter} is the number of active treatment filters (1-84)

References

Bernier, J., Rocher, V., Guerin, S., & Lessard, P. (2014). Modelling the nitrification in a full-scale tertiary biological aerated filter unit. *Bioprocess and Biosystems Engineering, 37*(2), 289-300. https://doi.org/10.1007/s00449-013-0996-1

Gernaey, K. V., Nopens, I., Vrecko, D., Alex, J., & Dudley, J. (2006). An updated proposal for including further detail in the BSM2 PE calculation. Internal BSM2 Task Group document. London, UK: IWA.

Hiatt, W. C., & Grady, C. P. L. Jr. (2008). An updated process model for carbon oxidation, nitrification, and denitrification. *Water Environment Research, 80*(11), 2145-2156. https://doi.org/10.2175/106143008X304776

Hauduc, H., Neumann, M. B., Muschalla, D., Gamerith, V., Gillot, S., & Vanrolleghem, P.A. (2015). Efficiency criteria for environmental model quality assessment: A review and its application to wastewater treatment. *Environmental Modelling & Software, 68*, 196-204. https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2015.02.004

Ives K.J. (1970). Rapid filtration. *Water Research, 4*(3), 201-223. https://doi.org/10.1016/0043-1354(70)90068-0

Ohashi, H., Sugawara, T., Kikuchi, K. I., & Konno, H. (1981). Correlation of liquid-side mass transfer coefficient for single particles and fixed beds. *Journal of Chemical Engineering of Japan, 14*(6), 433-438. https://doi.org/10.1252/jcej.14.433

Pocquet, M., Wu, Z., Queinnec, I., & Spérandio, M. (2016). A two pathway model for N_2O emissions by ammonium oxidizing bacteria supported by the NO/N_2O variation. *Water Research, 88*, 948-959. https://doi.org/10.1016/j.watres.2015.11.029

Wu, Y., Chen, Q., & Liu, S. (2005). *Fans and Compressors* (1st ed.). Beijing, China: Tsinghua University Press. (In Chinese)