

Modélisation du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires - Calibration et validation à l'échelle industrielle d'un modèle simple à une dimension

Jean Bernier, Sabrina Guérin, Sam Azimi
et Vincent Rocher, SIAAP,
Direction du Développement et de la Prospective
Paul Lessard, Université Laval,
Département de Génie Civil et de Génie des
Eaux - Québec (Canada)

Ce projet collaboratif, mené entre le SIAAP et l'Université Laval à Québec dans le cadre du programme de recherche Mocopée (MOdélisation, COntôle et OptiMisation des Procédés d'Épuration des Eaux - <http://mocopée.com>) vise à développer des modèles mathématiques capables de prédire le fonctionnement des procédés d'épuration des eaux résiduaires urbaines. Cette étude s'intéresse plus particulièrement au procédé de décantation primaire. Des modifications relativement simples ont été apportées à un modèle de décantation à une dimension afin de simuler le comportement d'un décanteur primaire physico-chimique lamellaire. Ces modifications concernent en premier temps le fractionnement des matières en suspension en plusieurs variables composites et d'état, afin de pouvoir simuler des polluants autres que les MeS. Un réacteur de floculation, à l'intérieur duquel l'effet du chlorure ferrique sur l'abattement de la DCOs et des PO_4^{3-} est simulé, est ensuite ajouté au modèle en amont du bassin de décantation. Le modèle est ensuite calibré et validé sur un jeu de données de huit ans obtenues sur l'étage de décantation primaire de la station Seine-Centre, située à Colombes en Île-de-France. Les résultats pour la plupart des variables simulées sont d'une précision relativement semblable entre la période de calibration et de validation. De même, les prédictions du modèle sont généralement près des observations et suivent les tendances observées sur l'eau en sortie du procédé. Bien que calibré sur une plage de concentrations injectées en $FeCl_3$ constituée en majorité de valeurs élevées, le modèle parvient à simuler correctement l'étage de décantation primaire étudié et ce, malgré sa relative simplicité.

ABSTRACT

Modelling the chemically assisted primary lamellar settling process: calibration and validation of a simple 1D model at the full-size scale.

This project is led in collaboration between SIAAP and Université Laval under the scope of the Mocopée research program (MOdeling, COntrol and OptiMization of wastewater treatment ProcEssEs), aiming to develop mathematical models to simulate the behaviour of

different Wastewater Treatment Plants (WWTP) processes. The current study focuses on the primary clarifying process. Simple modifications were made to a one-dimensional clarifier model in order to simulate the behaviour of a physico-chemical lamellar primary settler. Modifications to the clarifier model were first made to be able to make predictions on several composite and state variables other than TSS. A flocculation reactor model, where the effect of ferric chloride on sCOD and PO_4^{3-} removal is simulated, was then added before the settling tank itself. The model

was then calibrated and validated on a long-term, eight years dataset obtained on the full-size primary settling stage of a WWTP located near Paris, France. Results show that calibration and validation simulations have a relatively similar accuracy for most variables. Likewise, the model is generally close to measurements and follows observed trends at the effluent of the process. Although the model could benefit from the use of a dataset with a wider range of $FeCl_3$ concentrations, it is able to correctly simulate the studied primary settling stage, despite its relative simplicity.

L'évolution de la réglementation, qui impose un retour à une qualité écologique élevée des milieux récepteurs, conduit à devoir gérer les stations d'épuration avec un niveau d'exigence important et stable dans le temps, et ce tout en optimisant la pérennité des ouvrages et en minimisant les coûts. Il s'agit donc d'une tâche complexe qui nécessite l'utilisation de modèles mathématiques comme outils de gestion et d'aide à la décision.

Dans ce contexte, le SIAAP (Service Public de l'Assainissement Francilien), l'IRSTEA (Institut National de Recherche en Sciences et Technologies pour l'Environnement et l'Agriculture) et l'UTC (Université de Technologie de Compiègne) se sont rapprochés pour construire le programme de recherche Mocopée: MOdélisation, Contrôle et Optimisation des Procédés d'Épuration des Eaux (www.mocopee.com). Ce programme, qui rassemble des chercheurs de laboratoires universitaires, des ingénieurs-chercheurs de centres de recherche nationaux et quelques partenaires industriels, s'intéresse notamment aux questions relatives à la modélisation du fonctionnement des procédés d'épuration et au contrôle commande des procédés de traitement. Dans le cadre de la première phase de ce programme (2014-2017), une large action dédiée à la construction de modèles de prédiction du fonctionnement des décanteurs physico-chimiques et à leur application dans un but d'optimisation des injections de réactifs coagulant-floculant a été engagée par l'Université Laval (Département de Génie Civil et de Génie des Eaux) et le SIAAP (Direction du Développement et de la Prospective). L'originalité et le point fort de cette action résident dans le fait que toutes les données nécessaires aux étapes de calibration et validation des modèles sont acquises directement à l'échelle industrielle. Plus précisément, les bases de données sont acquises en mettant en place des suivis analytiques à l'entrée et la sortie des ouvrages sur des périodes de plusieurs mois et en menant des expérimentations ponctuelles visant à apporter des données complémentaires.

Cet article technique présente des principaux résultats et principales conclusions obtenus pour la modélisation du fonctionnement de décanteurs physico-chimiques

lamellaires, situés en position primaire dans la file de traitement des eaux et fonctionnant avec des injections de chlorure ferrique. Pour rappel, la décantation physico-chimique est, comme son nom l'indique, un procédé de séparation solide-liquide utilisé pour retirer une partie des particules en suspension d'une eau usée. Comparativement à la décantation conventionnelle, dans ce cas-ci une certaine combinaison de sels métalliques et de polymères est ajoutée et mélangée à l'eau en étapes successives en amont du bassin de décantation (Metcalf & Eddy, 2003). Ces réactifs favorisent de manière importante la coagulation et la floculation des particules par le biais de plusieurs mécanismes différents. Ils produisent ainsi des matières en suspension plus grosses, plus lourdes et donc plus faciles à décanter (Ødegaard, 1998, Kilander *et al.*, 2006). Les sels métalliques fréquemment utilisés ont également la propriété de réagir avec les ions de phosphate présents dans l'eau usée et d'ainsi produire différentes formes de précipités phosphorés, précipités qui peuvent ensuite être décantés en même temps que les autres MeS (Szabó *et al.*, 2008). Les décanteurs physico-chimiques peuvent donc aussi être utilisés pour réaliser un enlèvement partiel du phosphore. Les efficacités d'abatement rapportées dans la littérature sont de 60-90 % pour les MeS et de 65-95 % pour le phosphore, comparativement à respectivement 50-70 % et 5-10 % pour la décantation conventionnelle (De Feo *et al.*, 2008).

Ce document est scindé en trois parties. La première partie dresse un bilan des différents modèles disponibles dans la littérature technico-scientifique. La deuxième partie est consacrée aux aspects méthodologiques. Elle comporte une description de l'ouvrage de traitement étudié et de la base de données utilisée pour les étapes calibration et la validation et présente le modèle mathématique employé. La troisième partie est consacrée à la présentation des résultats obtenus lors d'étapes de calibration et validation du modèle.

Modèles disponibles dans la littérature technico-scientifique

Bien que plusieurs études aient été menées dans le passé quant à l'efficacité du pro-

céder et à comment l'améliorer, seules quelques-unes se sont concentrées sur sa modélisation. Tay (1982) a proposé un modèle empirique très simple comprenant un seul paramètre pour estimer l'efficacité d'enlèvement des MeS d'un décanteur. L'auteur précise que son modèle est capable de reproduire à la fois des données observées sur des décanteurs conventionnels, lamellaires et physico-chimique, en modifiant simplement la valeur du seul paramètre utilisé. Ratnaweera & Lindholm (2002) ont quant à eux développé des modèles de régression basés sur la turbidité en entrée, le débit d'eau usée et le pH en sortie pour déterminer et contrôler la dose optimale d'alun à injecter en fonction de la turbidité désirée à la sortie de deux unités de décantation physico-chimique de taille industrielle. La stratégie ainsi proposée a permis d'obtenir des valeurs de turbidité plus stables que celles atteintes en utilisant la stratégie de dosage empirique normale en vigueur aux STEPs concernées, tout en utilisant légèrement moins d'alun. Tik *et al.* (2013) ont de leur côté utilisé un modèle à une dimension consistant en une version quelque peu modifiée du travail de Takács *et al.* (1991). Ces modifications ont surtout consisté en l'ajout de deux fonctions continues servant à décrire l'effet de la dose d'alun ajoutée sur la fraction non-décantable des MeS ainsi que sur leur vitesse de chute maximale. Leur modèle a été calibré sur un jeu de données récoltées sous diverses conditions de MeS en entrée et d'alun dosé, après quoi il a été utilisé pour évaluer diverses stratégies de contrôle du dosage de réactifs. De manière plus fondamentale, les modèles de population (Coufort *et al.*, 2007) peuvent également être utilisés pour simuler l'effet du mélange et de l'ajout de réactifs sur la distribution des tailles de particules. Bien qu'en théorie cette distribution soit fortement liée à celle des vitesses de chute, et par extension à l'efficacité de décantation, la plupart des travaux présentés dans la littérature se sont surtout arrêtés à essayer d'estimer correctement les tailles de particules. Les modèles de population sont en effet reconnus comme étant relativement complexes et nécessitant plusieurs hypothèses simplificatrices pour bien fonctionner (Thomas *et al.*, 1999), tandis que la relation entre taille et vitesse de chute de particule n'est

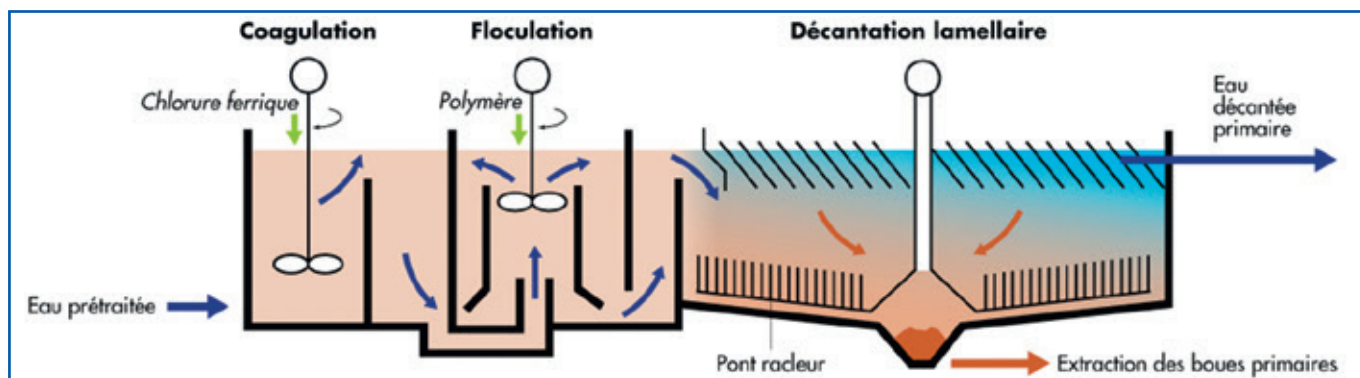


Figure 1: schéma de fonctionnement des décanteurs physico-chimiques lamellaires de la station Seine Centre (Colombes) - Densadeg® (Technologie Degrémont).

apparemment pas facilement quantifiable (Gregory, 1997).

Pour ce qui est de la précipitation des phosphates, quelques modèles ont aussi été proposés, la plupart pour le chlorure ferrique. En général, plusieurs réactions décrivant les interactions possibles entre les ions ferriques, phosphates et l'eau sont considérées, et les concentrations finales de chaque composant sont déterminées à l'aide de constantes d'équilibre. Certaines de ces constantes sont fixées à partir de valeurs issues de la littérature scientifique, tandis que d'autres sont utilisées comme paramètre de calibration. Les modèles proposés par Fytianos *et al.* (1998) et Takács *et al.* (2006) font par exemple partie de cette catégorie, chacun d'eux considérant un jeu de réactions chimiques légèrement différent. Smith *et al.* (2008) ont de leur côté proposé un modèle basé sur l'hypothèse que le phosphate est enlevé de l'eau par un mécanisme de complexation en surface des hydroxydes de fer. Dans ce cas, l'élimination du PO_4^{3-} est influencée par les concentrations de réactifs et les constantes d'équilibre, mais également par la quantité de sites réactifs en surface des hydroxydes. Ce nombre de sites peut être relié mathématiquement à l'âge de la solution de chlorure ferrique utilisée ou aux vitesses de mélange durant l'injection pour expliquer et simuler de possibles différences d'efficacité d'abatement du PO_4^{3-} à des doses de FeCl_3 similaires.

La plupart des travaux résumés ici ont été réalisés à partir de données issues de bassins de décantation à l'échelle pilote ou industrielle dans le cas de la simulation des MeS. Pour le PO_4^{3-} par contre, la calibration des différents modèles a principalement été faite à l'aide de données laboratoire, hormis pour Takács *et al.* (2006) qui ont présenté des résultats sur une STEP de taille industrielle. Même dans ce dernier cas, les résultats de simulation et d'ob-

servations ne sont comparés que sur la base d'une moyenne annuelle. Peu d'expériences sur la simulation concomitante de l'enlèvement des MeS et des phosphates dans un décanteur physico-chimique à grande échelle n'ont donc été rapportés pour l'instant. Le but de ce travail est donc de présenter une modification relativement simple faite à un modèle de décantation des eaux usées à une dimension afin de prendre en compte la dose de chlorure ferrique utilisée sur son efficacité d'enlèvement. Ce modèle est calibré et validé sur un jeu de données obtenu à long terme sur une STEP à grande échelle.

Matériel et méthodes

Description de la STEP

Un étage de décantation primaire physico-chimique à grande échelle a été étudié. Celui-ci constitue une partie du traitement effectué à la STEP Seine-Centre, située à Colombes en Île-de-France. La station est composée d'une première étape de dégrillage et dessablage/déshuilage, suivi de la décantation primaire étudiée. Des traitements secondaires et tertiaires sont ensuite effectués par trois étages de biofiltration. L'étape de décantation primaire consiste en neuf Densadeg® (Tech-

nologie Degrémont, figure 1), qui sont des décanteurs lamellaires précédés par deux bassins de mélange en série, utilisés dans l'ordre pour l'injection de sels métalliques et de polymère. Bien que ce type d'équipement permette de retourner une partie des boues soutirées en tête de traitement, cette fonction n'est pas utilisée à Seine-Centre. Plus précisément, chaque décanteur est d'abord muni de deux bassins de mélange rapide de 75 m^3 chacun suivi d'un bassin de flocculation de 373 m^3 . Le bassin de décantation a quant à lui une surface de 225 m^2 et un volume liquide de 1640 m^3 . Les lamelles placées en sortie de bassin ont une surface horizontale projetée de 1512 m^2 . Les conditions optimales de dosage des produits chimiques sont déterminées par jar-tests effectués à fréquences variables, et l'injection se fait ensuite de manière proportionnelle au débit d'eau usée. En pratique toutefois, la concentration en polymère est presque toujours fixée à 1 mg/L , et seule la valeur de la concentration en chlorure ferrique varie. Le tableau 1 présente une description statistique des conditions d'opération importantes typiques. Toutes les concentrations présentées au tableau 1, sauf pour le FeCl_3 , sont mesurées en amont du dessableur/déshuileur. En se basant sur les masses moyennes de sable et de

Tableau 1 : Conditions d'exploitation de l'étage de décantation primaire de Seine-Centre entre 2000 et 2008 (n est le nombre de données, D1-5-9 sont les déciles 1, 5 et 9, \bar{x} est la moyenne et S est l'écart-type)

Condition d'opération	N	D1	D5	D9	\bar{x}	S
Unités en fonction (-)	2999	3	3	4,75	3,45	1,13
Débit par unité (m^3/j)	2992	67100	80400	85700	78600	8200
FeCl_3 (mg/L)	3032	25,5	31,3	40,1	32,7	6,1
MeS (mg/L)	3010	145	212	300	220	66
DCO (mgO_2/L)	3011	254	360	486	367	95
DCOs (mgO_2/L)	2065	76	118	157	117	33
PO_4^{3-} (mgP/L)	3010	1,8	2,5	3,3	2,5	0,6
P_{tot} (mgP/L)	3011	3,8	5,0	6,4	5,1	1,2

graisse qui y sont enlevées, les valeurs de MeS et de DCO totale à l'entrée des décanteurs devraient être de 5 à 6 % inférieures aux valeurs du tableau 1. Les débits imposés par unité sont très stables, puisque le nombre de décanteurs en fonctionnement est modifié selon le débit devant être traité.

Jeux de données utilisées pour la construction du modèle

Les jeux de données utilisées lors de cette étude consistent en l'analyse de plusieurs paramètres décrivant la qualité des eaux usées, réalisée sur des échantillons composites 24h récoltés en amont des dessableurs et en sortie de décantation primaire. Ces paramètres incluent la DCO, la DCO filtrée (simplifié en DCOs), les MeS, le NTK, le NH_4^+ , le Ptot, le PO_4^{3-} et le pH. Toutes ces mesures sont normalement effectuées de 5 à 7 jours par semaine. Les conditions d'exploitation telles que les débits d'eau, de boues et de réactifs sont mesurées sur l'étage de décantation complet. Les MeS contenues dans les boues soutirées sont aussi mesurées de 2 à 5 jours par semaine. Ces données sont disponibles pour les années 2000 à 2008. Toutes les analyses sont effectuées au laboratoire d'analyse physico-chimique de la Direction du Développement et de la Prospective du SIAAP (Accréditation COFRAC n° 1-1452, portée disponible sur www.cofrac.fr).

Description du modèle utilisé

Le modèle utilisé est une version légèrement modifiée de celui proposé par Takács *et al.* (1991), à l'origine pour la décantation secondaire. La configuration par défaut à 10 couches suggérée dans l'article original est aussi utilisée dans ce cas-ci, puisque très peu d'information sur le comportement hydraulique des décanteurs est disponible. Pour prendre en compte la présence de lamelles, leur surface horizontale projetée est ajoutée à celle du bassin de décantation dans le modèle. Afin de ne pas affecter le volume d'eau contenu dans le bassin par cet ajout artificiel de surface de décantation, la hauteur des décanteurs est diminuée de manière à conserver le même volume qu'en pratique et pour conserver un temps de résidence similaire.

Les modifications apportées au modèle proposé par Takács *et al.* (1991) sont les

suivantes :

- (1) La première modification faite au modèle est proposée par Gernaey *et al.* (2001) : la décomposition des MeS en variables particulières utilisées dans l'ASM1 (Henze *et al.*, 1987) et l'inclusion de termes d'advection dans chaque couche pour les composants solubles, eux aussi décrits par les variables ASM1 associées. Ceci permet au modèle de fournir des prédictions sur plusieurs variables autres que les MeS.
- (2) La deuxième modification est la simplification de l'équation décrivant la vitesse de chute des particules, en considérant celle-ci simplement constante dans toutes les couches. Cette simplification est effectuée d'une part puisque la présence des quatre zones de décantation considérées pour construire l'équation originale n'est pas aussi définitive en décantation primaire qu'en secondaire (Matko *et al.*, 1996). D'autre part, tel qu'expliqué plus loin, le jeu de données disponibles décrivant l'enlèvement des MeS ne permet pas de calibrer proprement une telle équation.
- (3) La troisième modification apportée est de considérer que les particules inertes possèdent une vitesse de chute plus élevées que leur équivalent organique. Le but est dans ce cas-ci d'expliquer l'augmentation observée du rapport DCO/MeS entre l'entrée et la sortie des décanteurs, les particules inertes n'étant comptabilisées que dans la mesure des MeS, pas de la DCO.
- (4) Une quatrième modification est faite pour prendre en compte l'effet du dosage de réactifs sur plusieurs variables durant le traitement. Pour simplifier les mécanismes relativement complexes impliqués dans la décantation physico-chimique, un réacteur de floculation, à l'intérieur duquel toutes les réactions sont considérées se produire, est placé en amont du modèle de décantation. Encore une fois, par manque d'informations sur l'hydraulique réelle de ces bassins sur Seine-Centre, ce réacteur est considéré être parfaitement mélangé. La première réaction y ayant lieu est la coagulation partielle de la DCO soluble en DCO particulaire. Il y a en effet une diminution de DCOs observée entre l'entrée et la

sortie du traitement. Ce phénomène a été attribué à la coagulation par Gernaey *et al.* (2001) dans leur étude de modélisation, phénomène qu'ils proposent de décrire par une cinétique d'ordre 1. Bien que cette étude ait porté sur la décantation primaire classique, le même mécanisme est utilisé dans ce cas-ci, suggérant que la coagulation de la DCOs n'est pas affectée, ou du moins limitée par la plage de dosage de chlorure ferrique utilisée à Seine-Centre.

La seconde réaction se produisant dans le bassin de floculation est la précipitation des phosphates. Puisqu'il n'y a que peu d'informations disponibles quant à la nature des mécanismes impliqués durant l'enlèvement du PO_4^{3-} à Seine-Centre, un modèle simple comportant une seule réaction globale est utilisé, tel que proposé par Henze *et al.* (1999) pour l'abattement non-biologique du phosphore dans l'ASM2d. Le mécanisme proposé dans l'ASM2d est toutefois la formation directe de FePO_4 , produit qui est réputé apparaître principalement lorsque le dosage initial du fer par rapport au phosphore est équimolaire ou inférieur. Puisque l'injection de chlorure ferrique à Seine-Centre est largement au-dessus de cette condition (99 % du jeu de données est soumis à un rapport molaire initial de 1,4 ou plus), un produit final de réaction différent doit être considéré. Plusieurs études sur le sujet des réactions entre le PO_4^{3-} et le Fe^{3+} à concentrations élevées en fer ont trouvé des produits finaux de réaction différents. Fytianos *et al.* (1998) ont suggéré que le $\text{Fe}_{2,5}\text{PO}_4(\text{OH})_{4,5}$ était probablement le produit final de la réaction, tandis que Takács *et al.* (2006) ont utilisé $\text{Fe}_{1,6}\text{H}_2\text{PO}_4(\text{OH})_{3,8}$ dans leur modèle, en spécifiant que cette formulation devrait rester valide jusqu'à un dosage molaire de 1,6 Fe/P. Lente *et al.* (2000) ont observé en conditions laboratoires que le précipité formé en présence de ce qu'ils ont appelé un large excès de fer était composé de 4 atomes de fer par atome de P. Szabo *et al.* (2008) ainsi que El Samrani *et al.* (2004) suggèrent plutôt que le rapport Fe/P du précipité formé varie en fonction du rapport Fe/P dosé. Les premiers indiquent que la quantité de fer dans le produit final augmente de manière proportionnelle avec la dose de FeCl_3 injectée. Les seconds observent au contraire d'abord une augmentation rapide du ratio

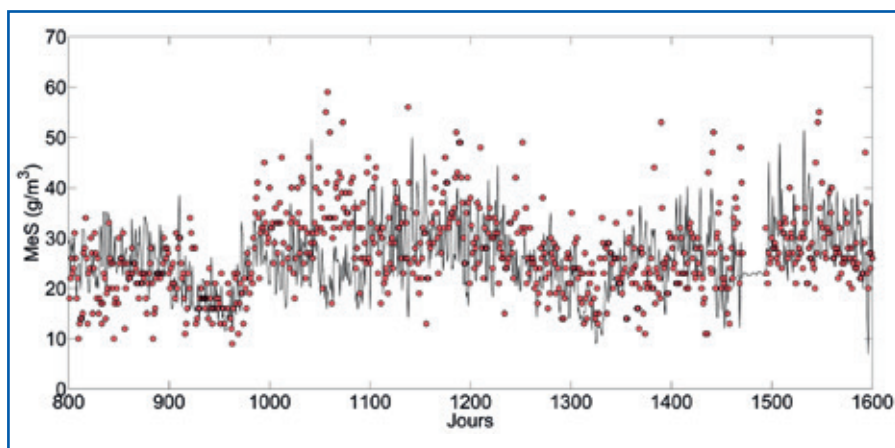


Figure 2: Résultats partiels de calibration des MeS en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points: observations, ligne: simulation).

Fe/P du précipité, suivie d'une diminution lente jusqu'à ce que tout le phosphore soit enlevé de l'eau usée. Afin de garder le modèle simple, et puisque la plupart de ces études rapportent un précipité de rapport molaire Fe/P entre 2 et 4 pour les plages de conditions d'exploitation en vigueur à Seine-Centre, le produit de réaction proposé par Fytianos et al. (1998) a été d'abord supposé. À cause de l'incertitude quant à la nature exacte du précipité final, sa stœchiométrie a été considérée comme étant un paramètre modifiable durant la calibration du modèle. Un précipité de $Fe_{\alpha}PO_4(OH)_{3(\alpha-1)}$ a donc été considéré, avec une valeur par défaut de α de 2,5. Une seule réaction est donc supposée se produire, ce qui implique également que celle-ci se produit assez rapidement pour qu'il n'y ait pas apparition de produits intermédiaires. Des variables solubles et particulaires additionnelles ont été ajoutées au modèle pour y inclure tous les composants associés à cette réaction. Des variables décrivant la présence de phosphore soluble et particulaire sous forme autre que le phosphate ont également été incluses pour simuler l'enlèvement du P total, de manière similaire au NTK dans l'ASM1.

Finalement, bien que l'effet de la dose de réactifs sur l'enlèvement des MeS devait à l'origine être inclus dans le modèle, l'efficacité d'abattement observée sur le procédé est demeurée quasi-constante pour toute la période étudiée, peu importe la concentration de chlorure ferrique injectée. Les 10^{èmes} et 90^{èmes} percentiles sur l'efficacité d'enlèvement sont respectivement de 79,9 et 91,7 % pour tout le jeu de données, tandis que leur équivalent pour la dose de fer utilisée est de 25,6 et 40,1 mgFeCl₃/L. Cette variation d'efficacité semble plus aléatoire qu'autre chose, puisque le coefficient de corrélation entre ces deux variables

n'est que de 0,16. Aucune équation n'est donc présentement incluse au modèle pour décrire ce phénomène, du moins jusqu'à ce qu'un jeu de données plus riche en information ne soit disponible pour le faire correctement. De manière similaire, le pH est quasiment constant en entrée de décantation ($7,94 \pm 0,15$) et diminue en moyenne de moins de 4 % durant le traitement. Son effet n'a pas été intégré au modèle, bien qu'il soit reconnu dans la littérature comme ayant un impact important sur la coagulation.

Méthodes de calibration et validation du modèle

Calibration du modèle. Le modèle est d'abord calibré sur environ la moitié du jeu de données disponible de 2000 à 2008 (les 1650 premiers jours sur 3230). La quantité moyenne de MeS et de DCO enlevée par les dessableurs-déshuileurs est soustraite des données en entrée pour prendre en compte le fait que celles-ci ne sont pas récoltées directement en amont des décanteurs. La vitesse de chute moyenne des particules ainsi que la fraction non-décantable des MeS en entrée sont calibrées en premier afin d'avoir une correspondance aussi bonne que possible sur la mesure de MeS et de DCO en sortie. Les constantes cinétiques des réactions se produisant dans le bassin de floculation ainsi que la stœchiométrie du précipité Fe-OH-PO₄ produit sont ensuite calibrées pour faire correspondre les simulations aux mesures de DCOs et de PO₄³⁻. Le fractionnement de la DCO en parties solubles et particulaires est déterminé à partir du rapport moyen entre les mesures de DCOs et DCO sur toute la période de calibration. Les fractions organiques de l'azote et « non-phosphates » du phosphore sont déterminées respectivement par la différence moyenne entre le NTK et le NH₄⁺, et le Ptot et le PO₄³⁻. Les

fractions solubles et particulaires de ces deux derniers composants sont calibrées de manière à avoir une bonne correspondance du modèle avec le NTK et le Ptot en sortie de procédé.

Validation du modèle. Le modèle est ensuite validé sur le reste du jeu de données de 2000 à 2008. La précision du modèle est évaluée de manière qualitative et quantitative durant la calibration et la validation, en utilisant des scores statistiques décrivant l'importance des erreurs de prédiction. L'erreur moyenne, l'erreur moyenne absolue et le coefficient de Janus sont utilisés à cette fin (Hauduc, 2010).

Résultats et discussion

Résultats de calibration

Cas des MeS. Les résultats de calibration du modèle sont présentés par la figure 2 pour les MeS. Aux fins de clarté, seule la sortie des décanteurs pour une partie de la période simulée est présentée. Tel que visible sur la figure 2, les prédictions et les observations varient presque constamment d'un jour à l'autre. Le modèle n'arrive donc que rarement à simuler une concentration de sortie parfaitement égale à ce qui est mesuré. Les prédictions arrivent tout de même à varier autour et avec la même amplitude que les observations la plupart du temps. De même, les variations saisonnières légères sont bien reproduites. Ces variations sont dues en grande partie à celles observées en entrée de procédé. Les observations particulièrement élevées ou faibles ne sont par contre pas simulées correctement. Ceci pourrait être dû en partie à des changements dans le temps de la vitesse moyenne de chute des particules, par variation naturelle et/ou sous l'effet d'un changement de dosage de chlorure ferrique. Malheureusement, aucun de ces facteurs ne peut être quantifié et implanté dans le modèle actuellement.

Cas de la DCOs. La figure 3 montre les résultats de simulation pour la DCO soluble, encore une fois pour une partie de la période de calibration. Excepté en de rares occasions et autour des jours 900-950, le modèle demeure près de la plupart des observations en DCOs. Les variations saisonnières à l'entrée du procédé sont ici aussi responsables de la plupart des changements de concentrations observés en

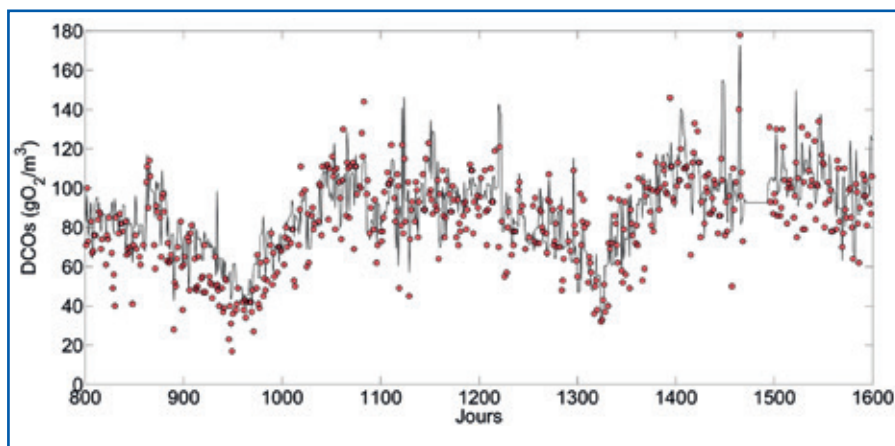


Figure 3 : Résultats partiels de calibration de la DCOs en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points: observations, ligne: simulation).

sortie. L'utilisation d'une simple cinétique de premier ordre pour représenter la coagulation de la DCOs semble donc fournir des résultats relativement corrects dans ce cas, malgré l'utilisation de différentes doses de $FeCl_3$.

Cas des ortho-phosphates. La figure 4 montre les résultats partiels de calibration sur les phosphates. La période illustrée dans ce cas-ci est différente que pour les deux autres figures. La limite de quantification de l'analyse associée a en effet augmenté à partir du jour 700, et une bonne partie des mesures effectuées entre les jours 800 à 1600 se trouvent précisément sous ou sur cette limite. De fait, cette période est peu intéressante du point de vue simulation. Tel qu'affiché en figure 4, deux périodes successives de pics de concentration en phosphates en sortie se produisent autour des jours 275-350 et 400-450. Durant ces périodes, une augmentation importante de la concentration en entrée se produit, tandis que la dose de chlorure ferrique injectée est augmentée, mais seulement après un certain délai. Hors de ces périodes, la sortie mesurée se situe quasiment constamment à ou sous la limite de quantification. Hormis pour la partie du jeu de données située après le jour 700, dans la figure 4, le modèle parvient à bien prédire les concentrations observées, quoiqu'en surestimant quelques pics. Ceci pourrait être dû à l'utilisation d'un seul produit final de réaction entre le fer et les phosphates dans le modèle, alors qu'il semblerait que la nature de celui-ci soit variable en fonction du ratio molaire Fe/P initial (El Samrani et al., 2004). Ainsi, durant ces pics où le ratio Fe/P dosé varie de manière

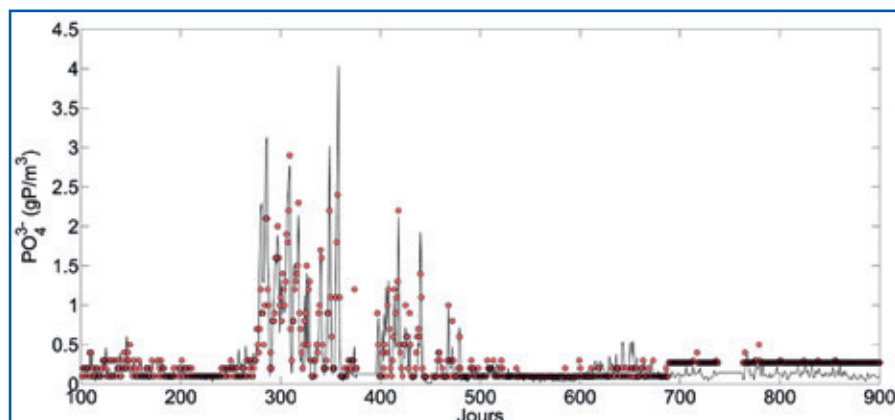


Figure 4 : Résultats partiels de calibration du PO_4^{3-} en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points: observations, ligne: simulation).

importante, le précipité formé pourrait être différent de la forme considérée, ce qui mènerait parfois à une erreur de prédiction.

Synthèse sur la calibration. Le tableau 2 résume les résultats des différents scores statistiques calculés pour la période de calibration pour toutes les variables simulées. Dans tous les cas, l'erreur moyenne (EM) est très faible, indiquant un biais négligeable du modèle. Les erreurs moyennes absolues (EMA) montrent toutefois que l'ampleur de l'erreur est différente pour chaque variable. L'EMA sur les MeS n'est ainsi que de $7,7 \text{ g/m}^3$, mais comparativement à la moyenne observée en sortie, ceci demeure relativement élevé (30 %). Il en va

de même pour les PO_4^{3-} , pour lesquels l'EMA et l'observation moyenne ($0,34 \text{ gP/m}^3$) sont toutes les deux faibles. Le contraire se produit plutôt pour la DCO et la DCOs, pour lesquels l'EMA et la moyenne observée sont plus élevées (EMA formant respectivement 14 et 15 % de la moyenne observée). Les erreurs de simulation sur le NTK sont très faibles, principalement parce que cette variable est très peu affectée par la

décantation.

Les valeurs calibrées et de référence pour les paramètres du modèle sont présentées dans le tableau 3. Pour la vitesse moyenne de chute des particules, les références proviennent de Lessard et Beck (1988) qui ont eux aussi utilisé une valeur unique, mais dans un décanteur classique. Lessard et Beck ont toutefois attribué une valeur différente de vitesse selon la nature des eaux en entrée de procédé: 24 et 48 m/j pour des eaux brutes et des eaux de pluie sans ajout de coagulants, et 240 m/j pour un mélange d'eau brute et de retour de surnageant de boues, qui selon les auteurs contiennent des particules rapidement décantées. Dans ce cas-ci, la valeur calibrée est de 92 m/j,

ce qui se situe entre une eau usée normale sans ajout de coagulant et une eau usée facilement décantable. La valeur par défaut de la fraction non-décantable des MeS en entrée a été fixée à 10 % à partir d'observations faites lors d'une courte campagne d'échan-

Tableau 2 : Résultats des scores statistiques pour les périodes de calibration et validation pour toutes les variables simulées

Variable	Calibration			Validation			Janus
	N	EM	EMA	n	EM	EMA	
MeS (g/m^3)	1484	0,2	7,7	1376	-1,4	7,8	1,03
DCO (gO_2/m^3)	1486	-1,8	16,3	1386	-8,4	22,6	1,36
DCOs (gO_2/m^3)	1022	3,3	12,1	963	-1,0	15,1	1,26
NTK (gN/m^3)	1025	0	1,2	966	-0,2	1,7	1,47
PO_4^{3-} (gP/m^3)	1488	-0,1	0,1	1395	0	0,2	1,25
Ptot (gP/m^3)	1022	0	0,2	967	-0,1	0,2	1,10

Tableau 3 : Valeurs de référence et calibrées des paramètres modifiés

Paramètre	Symbole	Référence	Calibrée
Vitesse moyenne de chute (m/j)	V_0	24, 48 et 240	92
Amplification de la vitesse de chute pour les particules inorganiques (-)	$f_{VO,I}$	-	2,8
Fraction indécantable des MeS en entrée (-)	f_{NS}	0,10	0,126
Constante de coagulation de la DCOs (j^{-1})	$k_s COD$	1,249	68
Constante de précipitation du PO_4^{3-} ($m^3/g.j$)	k_{PREC}	-	400
Produit final de précipitation $Fe-PO_4^{3-}$ (-)	-	$Fe_{2,5}PO_4(OH)_{4,5}$	$Fe_{2,3}PO_4(OH)_{3,9}$

tillonnage. Cette campagne a été effectuée en 2013 sur l'eau entrant sur l'étage de décantation d'une autre usine du SIAAP (Seine-Aval, Achères), mais qui peut raisonnablement être considérée similaire à celle de Seine-Centre dans la mesure où les deux usines drainent des bassins-versants aux caractéristiques identiques (urbain dense, principalement résidentiel). Cette étude a consisté à effectuer plusieurs séries de jar-tests après ajout de différentes doses de $FeCl_3$, et à mesurer entre autre chose les MeS résiduelles. La valeur calibrée a été légèrement augmentée par rapport à celle issue de ces expériences pour améliorer quelque peu la précision du modèle (Mèche et Gonçalves, 2013). La constante de vitesse pour la coagulation de la DCOs a été fixée à une valeur de 1,249 par Gernaey et al. (2001). La valeur calibrée ici est donc beaucoup plus élevée, ce qui serait normalement dû à une augmentation de l'importance de la coagulation par l'injection de chlorure ferrique et de polymères. Les mécanismes d'enlèvement des phosphates utilisés dans le modèle sont basés sur ceux de Henze et al. (1999), qui ne proposent pas de valeur par défaut pour les constantes de vitesse de réaction. Celles-ci sont par contre réputées se dérouler rapidement (Lente et al., 2000), donc une valeur relativement élevée par rapport à celle pour la DCOs a été utilisée. Le produit final de réaction entre le fer et les phosphates a été légèrement modifié de sa nature initialement considérée pour calibrer le modèle sur les observations de Seine-Centre. Dans ce cas, 2,3 atomes de

Fe^{3+} réagissent avec un atome de PO_4^{3-} , plutôt que 2,5. Enfin, le facteur d'amplification de la vitesse de chute des particules inorganiques n'est malheureusement pas un paramètre pour lequel des valeurs par défaut ont pu être trouvées dans la littérature. Il a donc été fixé à 2,8 afin d'avoir une correspondance correcte sur la DCO après avoir calibré les MeS et la DCOs.

Résultats de validation

Cas des MeS. La figure 5 présente les résultats de simulation sur les MeS pour une partie de la période de validation de 2000-

2008. Le comportement du modèle est dans ce cas relativement similaire à ce qui était observé en calibration. Les scores d'EM et d'EMA sont à ce titre à peu près similaires sur les deux périodes (tableau 2) et le coefficient de Janus est près de 1, signe de performances semblables entre calibration et validation. *Cas de la DCOs.* La même conclusion s'applique à la DCOs, pour laquelle les performances du modèle sont en apparence semblables entre la validation (figure 6) et la calibration. Une fois de plus, les prédictions demeurent près du nuage de point observés principal, et les variations saisonnières sont bien simulées. Il y a toutefois une période durant la validation qui n'est pas affichée à la figure 6 (jours 2500-2600) pendant laquelle la DCOs en sortie est presque égale à celle en entrée, comme

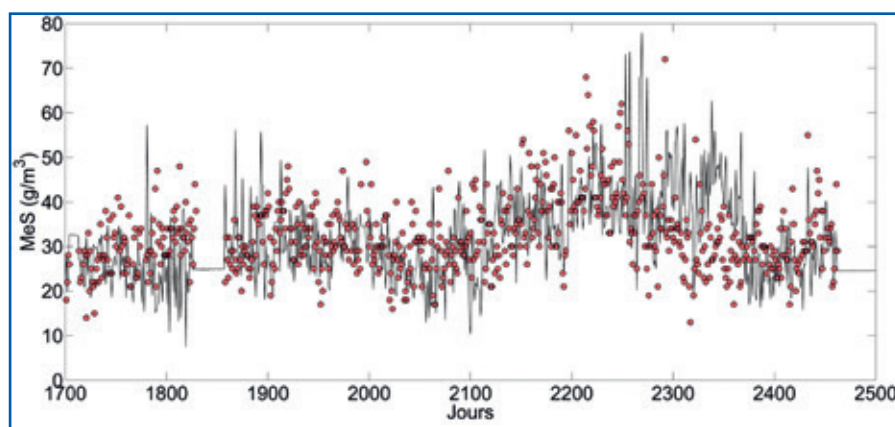


Figure 5 : Résultats partiels de validation des MeS en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points : observations, ligne : simulation).

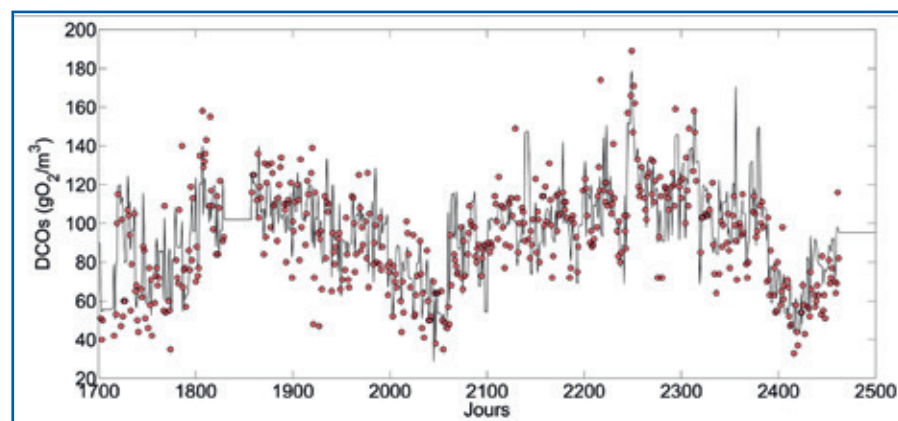


Figure 6 : Résultats partiels de validation de la DCOs en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points : observations, ligne : simulation).

si la coagulation s'était arrêtée malgré l'injection continue de chlorure ferrique. Tant la DCO que la DCOs sont alors sous-estimées, le modèle n'arrivant pas à reproduire ce phénomène. Les résultats d'EMA sont donc légèrement supérieurs pour la validation que pour la calibration, et le coefficient de Janus est supérieur à 1, pour les deux variables.

Cas des ortho-phosphates. Les résultats partiels de validation sont montrés par la figure 7 pour les concentrations de PO_4^{3-} en sortie. Durant cette période, l'injection de réactifs est mieux contrôlée, du moins du

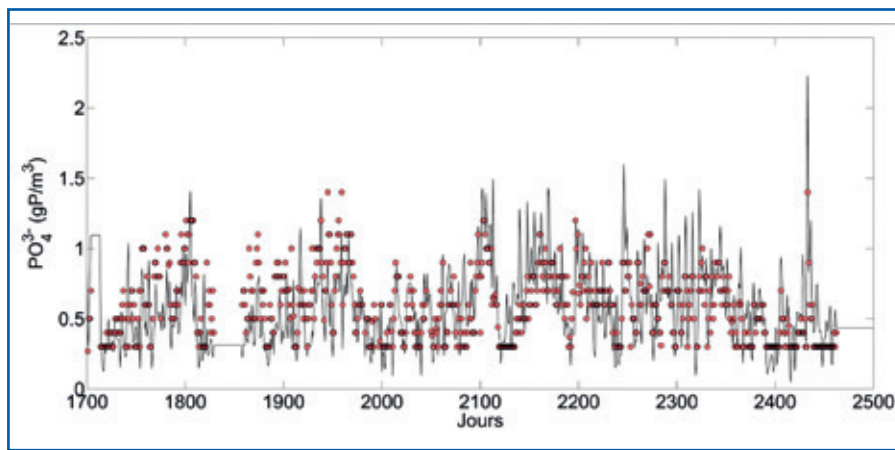


Figure 7: Résultats partiels de validation du PO_4^{3-} en sortie de décantation primaire en 2000-2008 (points: observations, ligne: simulation).

point de vue des phosphates. Les pics en sortie sont en effet d'intensité moindre, et la concentration frôle moins régulièrement la limite de quantification. Le modèle arrive à bien détecter la présence de pics, mais a tendance à sous-estimer un peu leur intensité en début de période, puis à la surestimer vers la fin. Ceci produit une légère augmentation du score d'EMA par rapport à la calibration, pour un coefficient de Janus de 1,25.

Les résultats de simulation en validation pour les autres variables sont affichés uniquement sous forme de scores au tableau 2. Les résultats de DCO sont logiquement impactés par ceux en DCOs et sont donc eux aussi un peu moins bons qu'en calibration. Les résultats en phosphore total, composé d'une fraction soluble et d'une autre particulaire, sont à mi-chemin entre ceux du PO_4^{3-} et ceux des MeS. L'EMA est à peu près stable et

le coefficient de Janus est de 1,10. Pour le NTK, l'EMA augmente légèrement dans l'absolu, mais de manière importante par rapport à la valeur obtenue en calibration. Le coefficient de Janus est donc assez élevé à 1,47.

Conclusions et perspectives

Un modèle relativement simple pour simuler le comportement journalier des MeS, de la DCO, la DCOs, le PO_4^{3-} , le NTK et le phosphore total dans un procédé de décantation physico-chimique primaire à grande échelle a été présenté. Les résultats de calibration montrent que celui-ci est capable de fournir des prédictions proches des concentrations observées en sortie de traitement pour la majorité du jeu de données utilisé. Les résultats de validation sont similaires à ceux de la calibration, et les erreurs de prédiction n'augmen-

tent que peu lors du passage entre les deux périodes. Étant donné l'efficacité d'enlèvement des MeS quasi-constante pour tout le jeu de données disponible, l'effet de la dose de chlorure ferrique injectée n'a pas pu être intégré au modèle. Celui-ci parvient tout de même à faire des prédictions oscillant majoritairement dans le nuage de points formé par les observations. Autrement, l'utilisation de mécanismes de réactions simples parvient à produire des résultats de simulation de précision généralement adéquate sur la DCOs et les PO_4^{3-} . Des travaux visant à améliorer le modèle et à en valider l'utilisation sur davantage de procédés à grande échelle sont présentement en cours dans le cadre du programme Mocopée (www.mocopee.com). Ceux-ci devraient inclure l'utilisation de données pendant lesquelles les décanteurs ont des efficacités d'abattement des MeS variables, afin d'ajouter une ou plusieurs équations reliant cette efficacité à la dose de réactifs. De même, l'utilisation de données provenant de sondes (turbidimètres, PO_4^{3-}) devrait permettre de calibrer/valider le modèle sur des dynamiques observées à court terme. Enfin, l'adaptation du modèle à la décantation tertiaire physico-chimique ainsi qu'à l'utilisation d'autres types de produits coagulants, et en particulier l'Alufer qui tend à se substituer au chlorure sur certaines STEP, permettra d'en élargir l'utilité. ■

Références bibliographiques

- Coufort C., Bouyer D., Liné A. et Haut B. (2007) Modelling of flocculation using a population balance equation. *Chemical Engineering and Processing* 46: 1264-1273.
- De Feo G., De Gisi S. et Galasso M. (2008) Definition of a practical multi-criteria procedure for selecting the best coagulant in a chemically assisted primary sedimentation process for the treatment of urban wastewater. *Desalination* 230: 229-238.
- El Samrani A.G., Lartiges B.S., Montargès-Pelletier E., Kazpard V., Barrès O. et Ghanbaja J. (2004) Clarification of municipal sewage with ferric chloride: the nature of coagulant species. *Water Research* 38: 756-768.
- Fytianos K., Voudrias E. et Raikos N. (1998) Modelling of phosphorus removal from aqueous and wastewater samples using ferric iron. *Environmental Pollution* 101: 123-130.
- Germaey K., Vanrolleghem P.A. et Lessard P. (2001) Modeling of a reactive primary clarifier. *Water Science and Technology* 43(7): 73-81.
- Gregory J. (1997) The density of particle aggregates. *Water Science and Technology* 36(4): 1-13.
- Hauduc, H. (2010) Modèles biocinétiques de boues activées de type ASM: analyse théorique et fonctionnelle, vers un jeu de paramètres par défaut. Thèse de doctorat, Université Laval, Québec, Canada.
- Henze M., Grady C.P.L., Gujer W., Marais G.v.R et Matsuo, T. (1987) A general model for single-sludge wastewater treatment systems. *Water Research* 21(5): 505-515.
- Henze M., Gujer W., Takahashi M., Tomonori M., Wentzel M.C., Marais G.v.R. et Van Loosdrecht C.M. (1999) Activated sludge model no.2D, ASM2D. *Water Science and Technology* 39(1): 165-182.
- Kilander J., Blomström S. et Rasmuson A. (2006) Spatial and temporal evolution of floc size distribution in a stirred square tank investigated using PIV and image analysis. *Chemical Engineering Science* 61: 7651-7667.
- Lente G., Magalhães M.E.A. et Fábian I. (2000) Kinetics and mechanism of complex formation reactions in the iron(III)-phosphate ion system at large iron(III) excess. Formation of a tetranuclear complex. *Inorganic Chemistry* 39: 1950-1954.
- Lessard P. et Beck M.B. (1988) Dynamic modeling of primary sedimentation. *Journal of Environmental Engineering* 114(4): 753-769.
- Matko T., Fawcett N., Sharp A. et Stephenson T. (1996) Recent progress in the numerical modelling of wastewater sedimentation tanks. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers* 74(B): 245-258.
- Mèche P. et Gonçalves A. (2013) Effet de la dose de fer sur la sédimentation des MeS: essais en jarrests sur les eaux brutes de SAV (Seine-Aval). Rapport interne, Colombes, France.
- Metcalf et Eddy (2003) *Wastewater engineering: treatment and reuse*. 4th edition. McGraw-Hill, New York, USA.
- Ødegaard H. (1998) Optimised particle separation in the primary step of wastewater treatment. *Water Science and Technology* 37(10): 43-53.
- Ratnaweera H., Lei L. et Lindholm O. (2002) Simulation program for wastewater coagulation. *Water Science and Technology* 46(4-5): 27-33.
- Smith S., Takács I., Murthy S., Daigger G.T. et Szabó A. (2008) Phosphate complexation model and its implications for chemical phosphorus removal. *Water Environment Research* 80(5): 428-438.
- Takács I., Patry G.G. et Nolasco D. (1991) A dynamic model of the clarification-thickening process. *Water Research* 10: 1263-1271.
- Takács I., Murthy S. et Fairlamb P.M. (2006) Chemical phosphorus removal model based on equilibrium chemistry. *Water Science and Technology* 52(10): 549-555.
- Szabo A., Takács I., Murthy S., Daigger G.T., Licskó I. et Smith S. (2008) Significance of design and operational variables in chemical phosphorus removal. *Water Environment Research* 80(5): 407-416.
- Tay JH A. (1982) Development of a settling model for primary settling tanks. *Water Research* 16: 1413-1417.
- Thomas D.N., Judd S.J. et Fawcett N. (1999) Flocculation modelling: a review. *Water Research* 33: 1579-1592.
- Tik S., Langlois S. et Vanrolleghem P. (2013) Establishment of control strategies for chemically enhanced primary treatment based on online turbidity data. Proceedings of the 11th IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation (ICA2013), septembre 2013, Narbonne, France.