
Post-doctorat / Ingénieur de recherche - 12 mois

Modélisation et assimilation de données pour le traitement des eaux usées (projet PHOSTWIN)

Objectifs et Contexte scientifique

On propose d'établir et de calibrer un modèle déterministe simplifié décrivant le fonctionnement d'une station d'épuration à boue activée. L'algorithme de calibration se basera sur une stratégie d'assimilation de données à partir des données disponibles mesurées en ligne, et permettra en routine de reconstruire les variables non mesurées. La modélisation décrira en particulier les mécanismes d'absorption biologique et d'adsorption physico-chimiques du phosphate et les autres phénomènes majeurs en jeu dans le bassin.

Cette modélisation précise permettra dans un deuxième temps de proposer des stratégies de pilotage permettant d'optimiser les contributions respectives des déphosphatations biologiques et physico-chimiques. L'objectif étant de rejeter des eaux ayant une concentration résiduelle la plus faible possible en phosphate, tout en maintenant un traitement aussi complet que possible de l'azote.

Contexte administratif

Le CRITT GPTE de l'INSA Toulouse et l'Institut de Mathématiques de Toulouse (IMT) collaborent depuis 4 ans. Ils ont développé avec succès un algorithme de contrôle pour optimiser le traitement de l'azote et diagnostiquer quotidiennement l'état du bassin. Cette solution associe un automate innovant qui pilote le dispositif d'aération de la station (module AERATION, automate Inflex développé à l'INSA et en service depuis 10 ans sur plusieurs dizaines de stations) et un code de calcul (module DIAGNOSTIC). L'approche repose sur la détection de points singuliers sur les signaux oxygène et rédox et sur l'interrogation d'une bibliothèque de corrélations liant les formes des profils oxygène et rédox et l'état d'avancement des réactions biologiques. Une licence a été déposée pour ce logiciel, qui est actuellement commercialisé par une société toulousaine.

Le projet PHOSTWIN vise à proposer un pilotage éliminant efficacement le phosphore, tout en maintenant un traitement correct de l'azote. Ce projet est cofinancé par l'Agence de l'Eau Adour-Garonne (Toulouse) et par AMIES (Agence pour les Mathématiques en Interaction avec l'Entreprise et la Société). La signature du contrat doit être effectuée avant fin 2024.

Etapes du projet

L'approche envisagée se décline au fil de 5 étapes.

Etape 1 : simplification du modèle

Le fonctionnement biologique d'une boue activée peut être décrit de manière relativement détaillée par le modèle ASM, reconnu à l'échelle internationale et faisant consensus. Le modèle complet décrit l'évolution de nombreuses espèces chimiques et bactériennes, et son écriture nécessite plusieurs dizaines d'équations différentielles ordinaires (EDO) non linéaires couplées. Néanmoins, selon l'objectif, la prise en compte de l'ensemble des équations peut s'avérer non pertinent et limitatif. Notre approche consiste à sélectionner les équations indispensables et à réduire le nombre de paramètres.

On considérera 3 états possibles du bassin de boue activée :

- aérobie : présence d'O₂ liée à l'aération,
- anoxie : absence d'O₂ et présence de NO₃,
- anaérobie : absence d'O₂ et de NO₃.

Les mécanismes associés à ces 3 états, seront ceux liés au traitement de l'azote (nitrification et dénitrification) et au traitement du phosphate (absorption biologique et adsorption sur hydroxydes de fer). Dans chacun de ces états, on proposera une simplification des mécanismes à l'oeuvre, qui équivaut à fixer des constantes de réactions au lieu de les faire dépendre des concentrations. De plus, certaines quantités varient à une échelle de temps de plusieurs semaines (comme la température de l'eau, qui influe sur les constantes de réaction, ainsi que la quantité de biomasse) et seront considérées comme constantes. Ce modèle simplifié sera constitué d'EDO linéaires (ou en tout cas présentant moins de non-linéarités) dans chacun des régimes identifiés. Les simulations directes de ce modèle simplifié seront confrontées qualitativement aux mesures disponibles. Cela permettra d'affiner les mécanismes que l'on peut simplifier ou non.

Etape 2 : Calibration du modèle avec les données expérimentales.

Dans cette deuxième étape, on procédera à une assimilation des données disponibles afin de calibrer les différents paramètres du modèle. On s'appuiera sur des données de mesures complètes

obtenues sur une station sur-équipée à titre expérimental pendant plus de 3 ans. Les mesures de phosphate ne sont pas disponibles en routine mais pour l'élaboration du modèle elles seront utilisées. Si le modèle ne reproduit pas fidèlement les données, on reprendra la simplification (étape 1) afin d'arriver à des résultats satisfaisants. L'assimilation de données sera effectuée par une méthode variationnelle, avec une minimisation L2 des écarts aux mesures. Certaines sondes ne sont pas parfaitement calibrées et leur étalonnage dérive dans le temps, il faudra donc prendre des précautions et sans doute ajouter des constantes d'étalonnage dans les paramètres à identifier. Une étude préliminaire a montré que les nombreux paramètres sont délicats à estimer dans leur ensemble. Pour rendre plus robuste cette estimation on incorporera également dans la fonction objectif des constantes mesurées sur les signaux : valeur des plateaux en O₂, vitesse de montée/descente de NH₄ et NO₃...

Etape 3 : Identifiabilité de la concentration en NH₄, NO₃, PO₄

En routine, les concentrations en NH₄, NO₃ et PO₄ ne sont pas mesurées. Les seules quantités mesurées sont le débit entrant, l'oxygène dissous et le rédox. Cependant, en ce qui concerne le NH₄ et le NO₃, on peut identifier des instants où ces deux espèces chimiques ont disparu du bassin car les profils O₂ et rédox présentent respectivement un point singulier détectable. Cela permet de donner une condition initiale fiable. Pour le phosphore les phénomènes sont plus complexes : les bactéries déphosphatantes absorbent du phosphate en condition aérobie, en rejettent un peu en phase anoxique et en rejettent une grande quantité en phase anaérobie. Il y a donc 3 constantes réactives associées au PO₄ : vitesse de déphosphatation aérobie, de rephosphatation anoxique et de rephosphatation anaérobie. On étudiera dans quelle mesure l'évolution de la concentration en PO₄ peut être reconstruite, au moins par ses variations qualitatives, et idéalement de façon quantitative. Ces variables reconstruites fournissent potentiellement des consignes de pilotage l'installation.

Etape 4 : Stratégie de pilotage théorique

On mettra en place une stratégie de pilotage optimal de l'aération du bassin. Dans un premier temps, on supposera le terme source connu (en volume et concentrations) et constant dans le temps. Le pilotage optimal consistera à proposer une stratégie périodique assurant une élimination complète de l'azote et un niveau de phosphore le plus bas possible. Dans un deuxième temps, on supposera le terme source connu mais variable temporellement. Une stratégie optimale sera également cherchée dans ce contexte. Il ressort des travaux de la thèse d'Erika Varga (2022) que l'amélioration de la déphosphatation biologique nécessite en général d'allonger le temps total d'aération (donc augmenter la consommation électrique), et un compromis devra être trouvé entre la qualité du traitement et la dépense énergétique.

Etape 5 : Stratégie de pilotage effectif

En situation réelle, le terme source n'est pas connu précisément et la stratégie de pilotage ne peut pas être décidée à partir de sa connaissance. Le pilotage en temps réel doit adapter les commandes d'aérateur en fonction des signaux O₂ et redox mesurés.

Calendrier prévisionnel

Les étapes 1 et 2 se mèneront de front – pendant 4 à 6 mois. Il s'agit de développer un modèle et le code d'assimilation de données correspondant.

L'étape 3 sera basée sur une étude numérique à l'aide des codes produits précédemment. Dans le cas où la conclusion est négative (non identifiabilité quantitative du PO₄ et des constantes réactives associées) il faudra envisager plusieurs scénarios selon les valeurs relatives des constantes. Cette étape sera alors à mener en parallèle des étapes 4 et 5, pour déterminer si une stratégie de pilotage peut être proposée, en fonction des constantes réactives identifiées, ou même indépendamment de ces constantes réactives dans le cas où elles ne sont pas identifiables. Ces dernières étapes occuperont les 4 à 5 derniers mois du projet.

Livrables attendus

- articles dans des revues scientifiques
- un code de simulation effectif (jumeau numérique opérationnel)
- un code implémentant la stratégie de pilotage effectif

Outils mathématiques

Le projet proposé comprend des composantes de : modélisation, calcul numérique, assimilation de données, commande optimale.

Pour mener à bien l'étude, il faudra développer un code, idéalement avec le langage Python. Par ailleurs, certaines notions mathématiques seront utilisées pendant le projet :

- modélisation de phénomène à l'aide d'EDO (équations différentielles ordinaires), résolution numérique de ces équations - étape 1
- assimilation de données variationnelle. Il s'agit de calibrer un modèle déterministe (ici : un modèle EDO) à partir d'observations. Il s'agit d'optimisation sous contrainte, la fonction à optimiser étant l'écart avec les mesures, et la contrainte étant le modèle EDO. - étapes 2 et 3
- commande optimale. Il s'agit de trouver le terme source dans un modèle pour optimiser une fonction objectif (ici : la quantité résiduelle de phosphore et d'azote), les outils mathématiques sont proches de l'assimilation de données. - étapes 4 et 5

Contact : jerome.fehrenbach@math.univ-toulouse.fr