

Conférence
de clôture
du projet
CoMinGreat

Modélisation/simulation de la station d'épuration et des post-traitements

Thi Mai Lan Duong & Olivier Potier
(CNRS – Laboratoire LRGP – Université de Lorraine)

Introduction

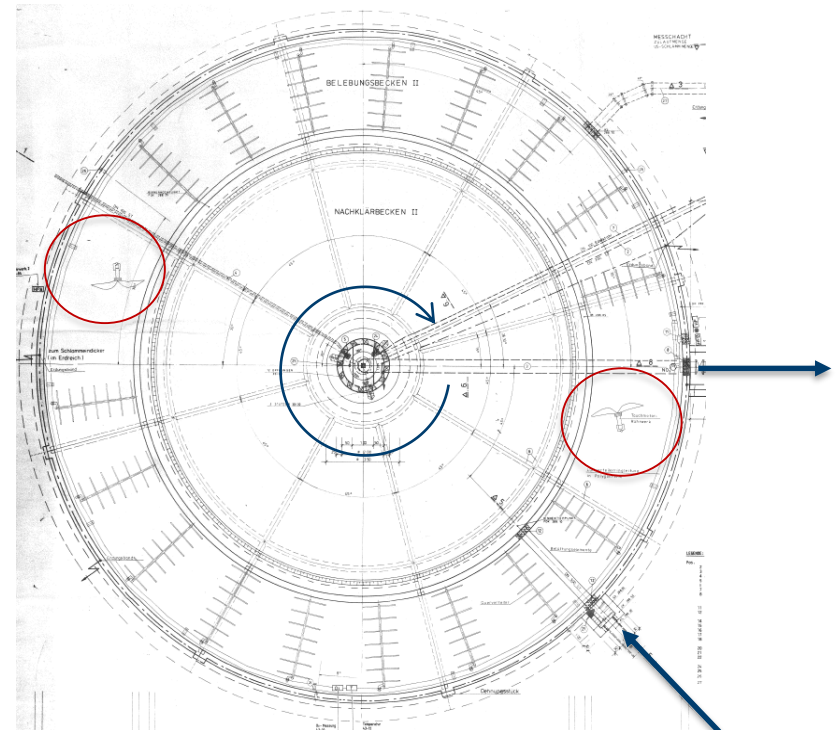
- Objectif : modélisation et simulation de l'élimination des micropolluants dans la station d'épuration (STEP) de Bliesen et des systèmes de post-traitement

Systèmes à simuler	
Station d'épuration	Réacteur biologique + clarificateur
Post-traitements	Ligne 1 : Constructed Wetland (Filtre planté)
	Ligne 2 : PhotoFenton + Constructed Wetland
	Ligne 3 : Colonne de charbon actif
	Ligne 4 : Ozonation + Colonne de charbon actif

Base de modélisation

- Modèle Hydrodynamique :
 - \Rightarrow configuration du programme de la simulation
 - Méthodologie :
 - Recherche bibliographique
 - Simulation de Mécanique des fluides numérique (CFD)
 - Traçage numérique (Distribution du Temps de Séjour)
- Modèle Cinétique :
 - Equation modélisant l'élimination des micropolluants
- Modèle de Transfert de gaz-liquide (ozone)

Modélisation de la STEP de Bliesen



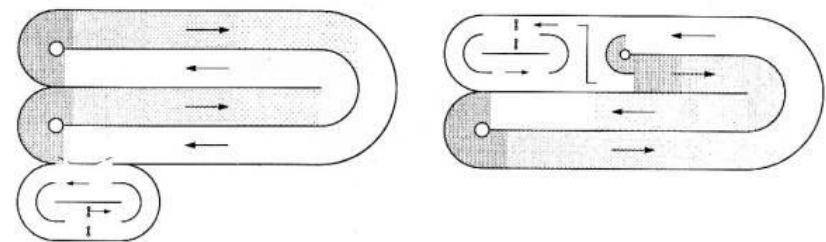
Réacteur biologique (anneau extérieur) et clarificateur (intérieur)

Modélisation de la STEP de Bliesen

1. Difficulté et opportunité de simulation

Difficulté de la simulation du réacteur biologique de la STEP de Bliesen :

- Réacteur carrousel mais « de petite taille »: Réacteur simple en termes de construction mais complexe dans son comportement hydrodynamique
- Fonctionnement hybride dans lequel les conditions aérobies et anoxiques alternent dans le temps (important de tenir compte de cela, car les réactions sont différentes pour certains MP)
- Peu d'études dans la littérature
- Pour bien construire le modèle compartimental → Simulation de Mécanique des Fluides Numérique (CFD)



Carrousel/racetrack/raceway/oxidation ditch
Généralement de grands réacteurs pour STEP avec
des conditions aérobies et anoxiques alternées par zone

Modélisation de la STEP de Bliesen

2. Modèle Hydrodynamique

- Modèle hydrodynamique choisi :

Modèle des réacteurs parfaitement agités en série (series of CSTRs) en boucle

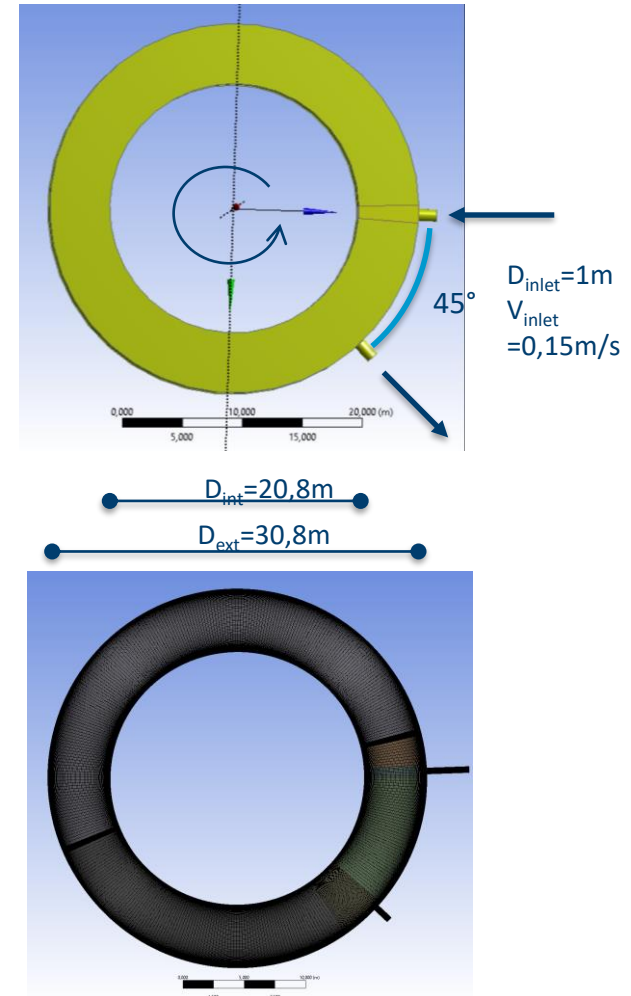
→ Simulation supplémentaire : Simulation de Mécanique des Fluides Numérique (CFD)

Résolution des équations de Navier-Stokes pour décrire l'évolution des fluides dans le réacteur

The mass balance equations for each phase give:

$$\rho_g \left[\frac{\partial(\alpha_g)}{\partial t} + \text{div}(\alpha_g \vec{U}_g) \right] = \text{div} \left(\frac{\mu_{t,g}}{0.75} \vec{\nabla}(\alpha_g) \right) \quad (1)$$

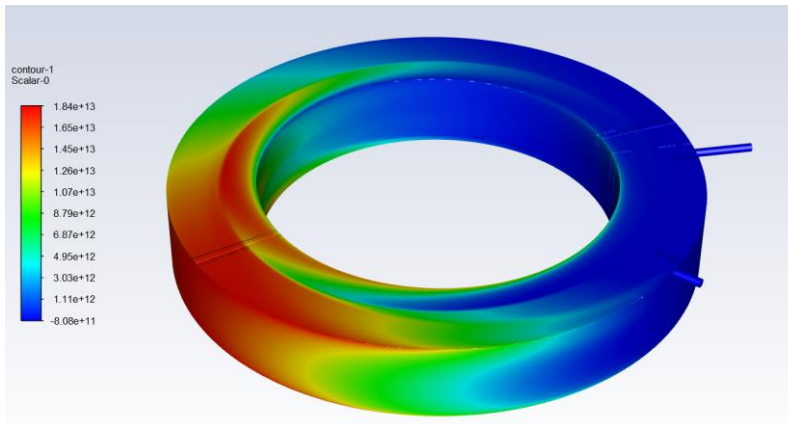
$$\rho_l \left[\frac{\partial(\alpha_l)}{\partial t} + \text{div}(\alpha_l \vec{U}_l) \right] = -\text{div} \left(\frac{\mu_{t,g}}{0.75} \vec{\nabla}(\alpha_g) \right) \quad (2)$$



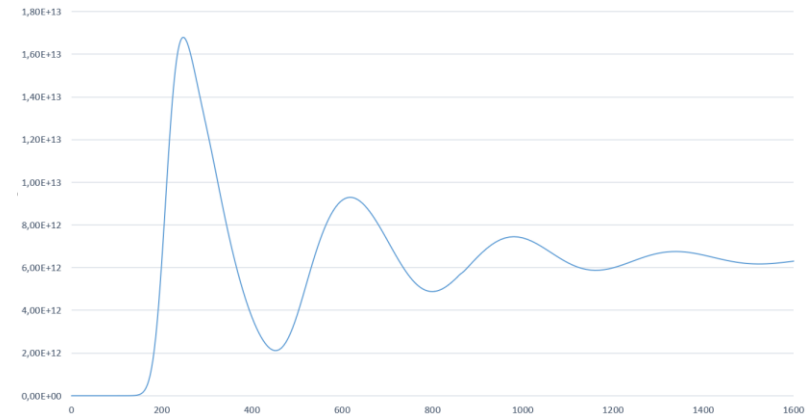
Modélisation de la STEP de Bliesen

2. Modèle Hydrodynamique

La distribution du temps de séjour (RTD), traçage numérique



Évolution de la concentration du traceur en fonction du temps



L'équation de transport de la concentration du traceur

$$\frac{\partial(\alpha_l \rho_l C_l)}{\partial t} + \text{div}(\alpha_l \rho_l \vec{U}_l C_l) = \text{div} \left[\alpha_l \left(\rho_l D_l + \frac{\mu_{t,l}}{Sc_{t,l}} \right) \vec{\nabla}(C_l) \right]$$

→ Dédution du nombre de RPA en série pour le réacteur biologique

Modélisation de la STEP de Bliesen

3. Modèle Cinétique

Équation cinétique d'élimination des micropolluants :

$$r_{MP} = -k_{biol} \cdot C_{TSS} \cdot C_{MP}$$

r ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$) : Vitesse d'élimination

k_{biol} ($\text{L}\cdot\text{g}_{TSS}^{-1}\cdot\text{h}^{-1}$) : Constante d'élimination

C_{MPs} ($\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$) : Concentration en micropolluants dissous

C_{TSS} ($\text{g}_{TSS}\cdot\text{L}^{-1}$) : Concentration de biomasse totale

Comparaison de la constante d'élimination k_{biol} avec la bibliographie

k_{biol} ($\text{Lg}^{-1}\text{h}^{-1}$)	Simulation à partir de données exp	Plosz et al., 2010	Mazioti et al., 2015	Suarez et al., 2010	Joss et al., 2006	Abegglen et al., 2009
SMX	0,022	0,017		0,0125	0,2458	0,0079
BZT	0,0071		0,0092			
DCF	0,0115 & 0,00038			0,05 & <0,0017	0,00417	0,00083

Constante d'élimination k_{biol} de différents micropolluants pour STEP

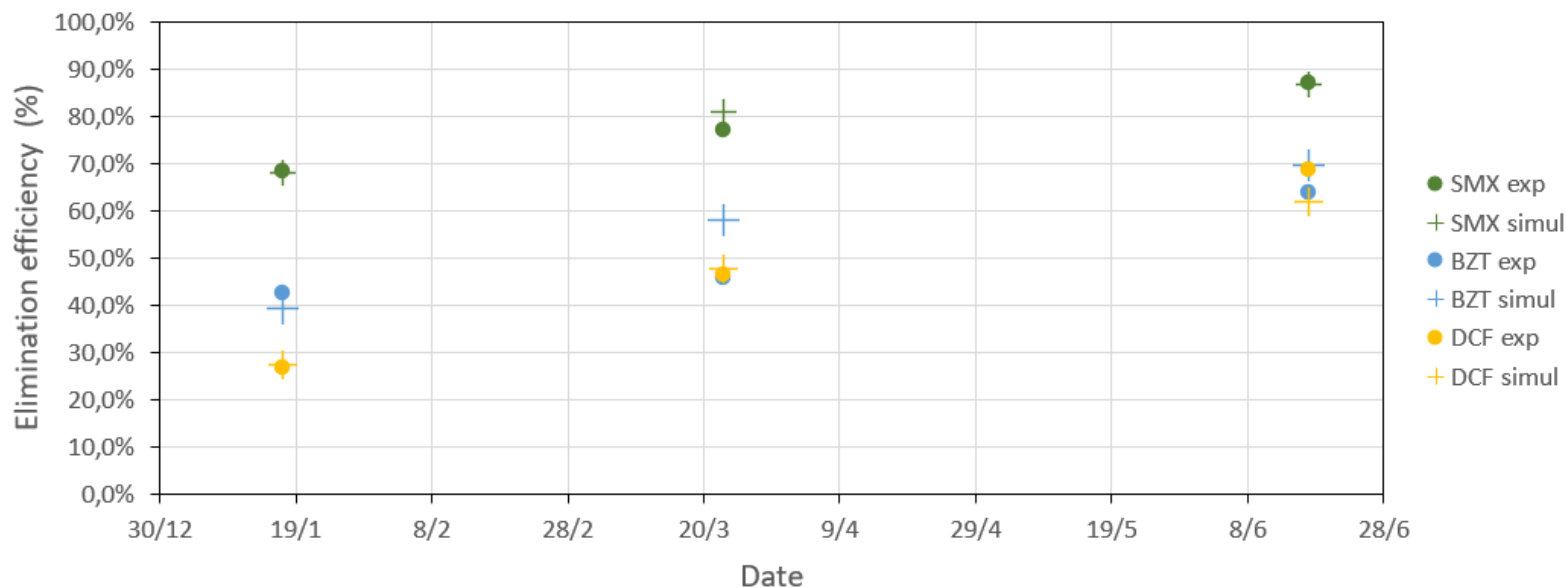
	Simulation à partir de données exp	H, Rana, 2019	Plosz et al., 2010	Mazioti et al., 2015	Suarez et al., 2010	Joss et al., 2006	Abegglen et al., 2009	Wick et al., 2009	Xue et al., 2010
AMPA	0,01054								
Atenolol	0,024							0,046-0,079	
Benzotriazole	0,0071	0,121		0,0092					
Bezafibrate	0,011					0,0875-0,125	0,032-0,725		
Caffeine	0,8 & 0,168								0,0037 & 0,00077
Carbamazepine	0,00176 & 0,00088	<0,004	0,208		<0,014 & <0,0075		<0,0002		
Ciprofloxacin	0,045 & 0,01068		0,023 & 0,0054						
DEET	0,01694 & 0,00847								0,0002 & 0,0001
Diclofenac	0,0115 & 0,00038	0,032			0,05 & <0,0017	0,00417	0,00083		
Estrone	0,0085 & 0,00015				7,083 & 0,125				
Glyphosate	0,0078								
Ibuprofen	0,85 & 0,06375				0,833 & 0,0625				
Lidocaine	0,0015								
MCPP	0,00484								
Metoprolol	0,0058 & 0,00116							0,0145-0,0167	0,00002 & 0,000004
Sucralose	0,00144								
Sulfamethoxazole	0,022	0,195	0,017 & 0,017		0,0125	0,2458	0,0079		
Sulfamethoxazole-acetyl	0,2					0,246-0,317			
Terbutryn	0,0127								

Modélisation de la STEP de Bliesen

4. Résultats

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées)

	Débit (m ³ /j)	SMX exp	SMX simul	Ecart (%)	BZT exp	BZT simul	Ecart (%)	DCF exp	DCF simul	Ecart (%)
17/01/2022	4807	68,5%	68,2%	0,3%	42,8%	39,3%	3,5%	26,9%	27,6%	-0,7%
23/03/2022	2425	77,2%	81,0%	-3,8%	45,8%	58,3%	-12,4%	46,4%	47,9%	-1,5%
17/06/2022	1592	87,2%	86,7%	0,5%	64,0%	69,8%	-5,8%	68,7%	62,0%	6,7%



<5% : Très bon
 5-10% : Bon
 10-15% : Assez bon
 15-30% : Moyen
 >30% : Valeur approchée
 (ordre de grandeur)

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) de la STEP

Micropolluants	17/01/2022			23/03/2022			25/05/2022			17/06/2022		
	Eff exp	Eff simul	Ecart (%)	Eff exp	Eff simul	Ecart (%)	Eff exp	Eff simul	Ecart (%)	Eff exp	Eff simul	Ecart (%)
AMPA				72,1%	62,5%	9,6%	74,4%	47,4%	27,0%	59,1%	71,9%	-12,8%
Atenolol	70,3%	65,6%	4,7%	83,8%	79,1%	4,7%	82,0%	67,8%	14,2%	81,2%	85,2%	-4,0%
Benzotriazole	42,8%	36,1%	6,7%	45,8%	53,3%	-7,5%	22,1%	37,4%	-15,3%	64,0%	64,0%	-0,03%
Bezafibrate	37,8%	46,6%	-5,5%	58,4%	63,5%	-3,2%	92,1%	44,8%	47,3%	88,2%	72,7%	15,9%
Caffeine				99,1%	99,3%	-0,2%	98,9%	97,4%	1,5%	99,4%	99,4%	0,0%
Carbamazepine	12,8%	9,5%	-2,3%	7,7%	18,1%	-18,9%	52,5%	15,9%	36,6%	38,1%	27,4%	1,4%
Ciprofloxacin	80,4%	68,8%	11,5%				64,9%	70,1%	-5,1%	98,9%	88,6%	10,3%
DEET	69,7%	50,2%	19,5%	48,7%	69,1%	-20,4%	61,6%	53,1%	9,7%	81,8%	76,3%	5,5%
Diclofenac	26,9%	32,1%	-3,5%	46,4%	49,0%	-4,1%	55,0%	31,9%	23,0%	68,7%	60,3%	4,7%
Estrone				50,8%	40,6%	5,1%	48,8%	30,5%	18,3%	27,7%	51,3%	-28,6%
Glyphosate	13,8%	38,2%	-24,4%				49,8%	39,6%	10,3%	94,8%	65,9%	28,9%
Ibuprofen				98,8%	99,3%	-0,5%	98,4%	97,0%	1,4%	98,3%	99,4%	-1,1%
Lidocaïne	33,4%	10,6%	22,7%	20,1%	19,9%	0,2%	18,7%	11,2%	7,5%	3,4%	29,4%	-25,9%
MCPP	29,0%	27,9%	1,1%									
Metoprolol	32,6%	21,6%	5,2%	5,3%	35,4%	-37,7%	58,9%	28,7%	30,1%	42,5%	45,8%	-11,3%
Sucralose				13,9%	18,9%	-16,9%	33,6%	19,0%	14,6%	33,9%	27,6%	-7,5%
Sulfaméthoxazole	68,5%	63,6%	4,9%	77,2%	77,6%	-0,4%	51,1%	64,9%	-13,9%	87,2%	84,1%	3,1%
Sulfaméthoxazole-acétyl	92,5%	94,2%	-1,7%	94,3%	97,0%	-2,7%	97,9%	94,5%	3,4%	99,0%	98,0%	1,0%
Terbutryn	45,3%	50,4%	-5,1%				79,3%	51,5%	27,8%	81,6%	76,8%	4,8%

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) de la STEP

Micropolluants	Écart absolu moyen
Caffeine	0,6%
Ibuprofen	1,0%
MCPP	1,1%
Sulfamethoxazole-acetyl	2,2%
Sulfamethoxazole	5,6%
Atenolol	6,9%
Benzotriazole	7,4%
Terbutryn	8,6%
Diclofenac	9,0%
Carbamazepine	9,8%
Sucralose	12,6%
Bezafibrate	13,4%
Ciprofloxacine	14,1%
AMPA	15,2%
Metoprolol	16,5%
DEET	17,4%
Lidocaine	18,7%
Estrone	19,2%
Glyphosate	21,2%

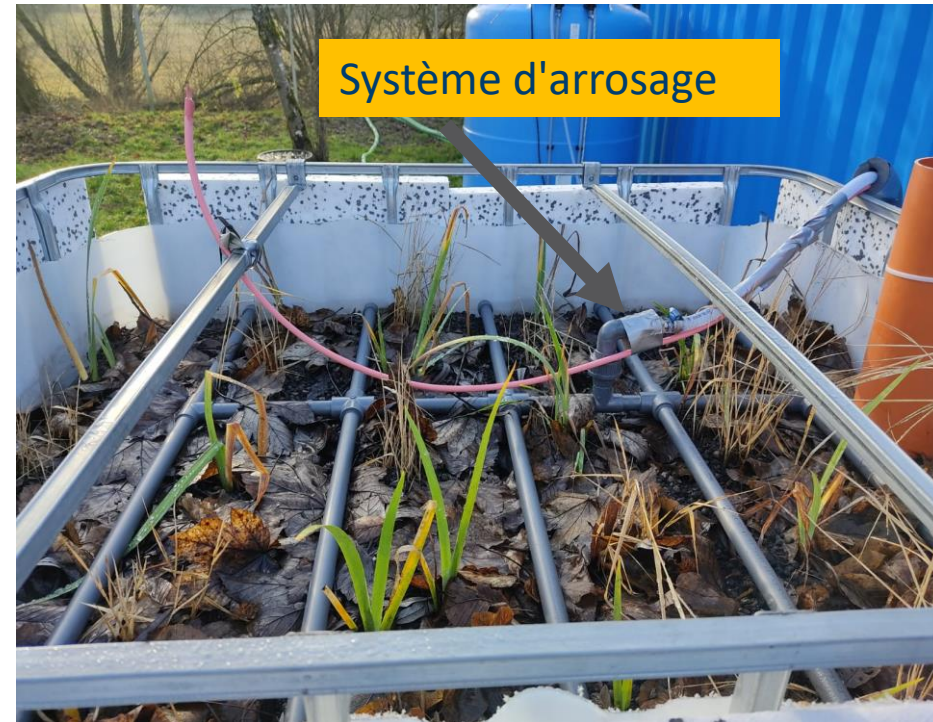
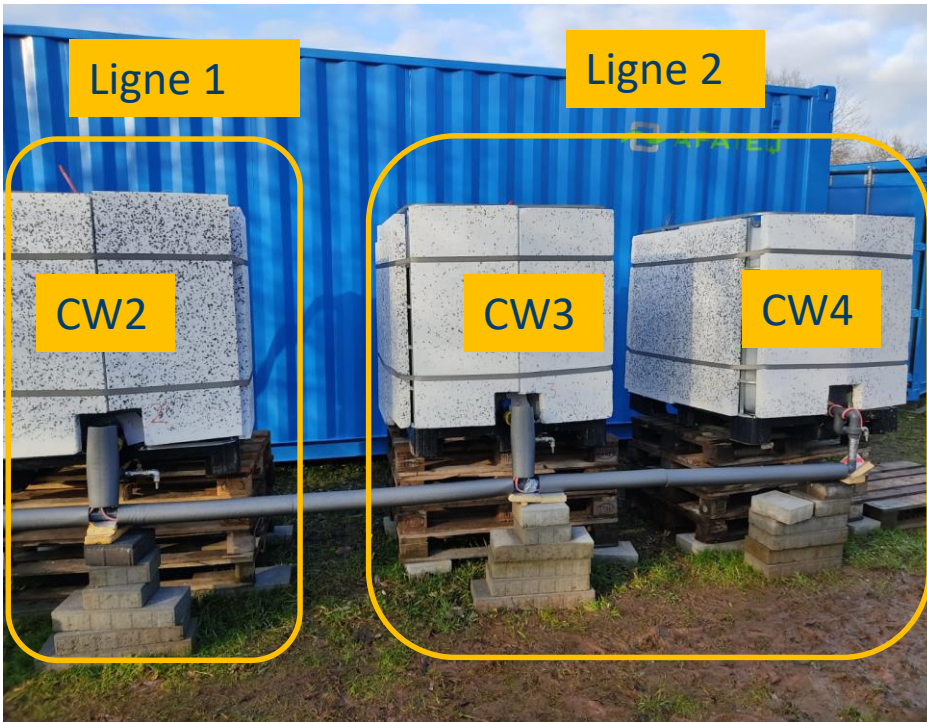
<5% : Très bon
5-10% : Bon
10-15% : Assez bon
15-30% : Moyen
>30% : Valeur approchée
(ordre de grandeur)

Modélisation des post-traitements

- Ligne 1 : Constructed Wetland (Filtre planté)**
- Ligne 2 : PhotoFenton + Constructed Wetland**
- Ligne 3 : Colonne de charbon actif**
- Ligne 4 : Ozone + Colonne de charbon actif**

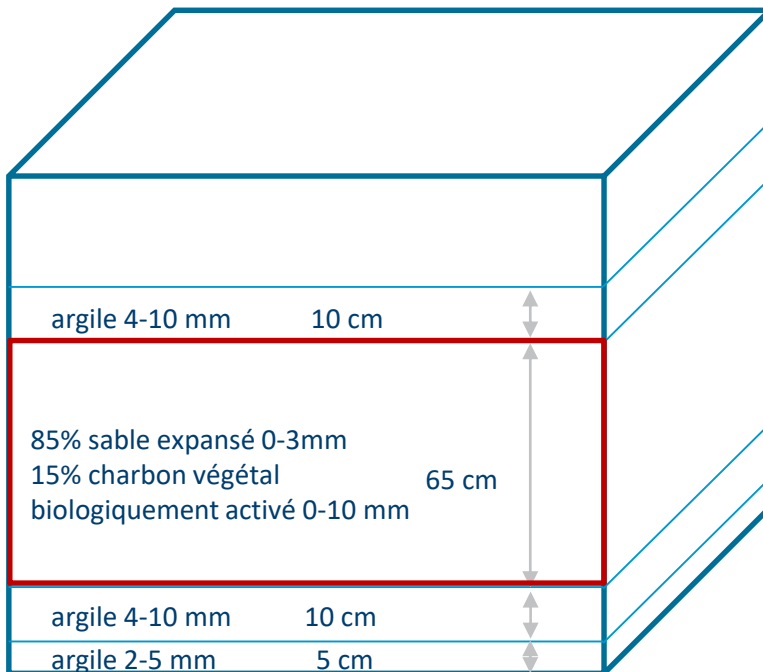
Modélisation des post-traitements

Ligne 1 : Constructed Wetland (Filtre planté)



Modélisation des post-traitements

Ligne 1 : Constructed Wetland (Filtre planté)



Modèle hydrodynamique :

- **Garnissage** (couche avec 85% de sable expansé + 15% de charbon végétal biologiquement activé)
- comparable à une série de RPA

Modèle cinétique : 2 modèles, adsorption et biodégradation (bactéries et plantes)

$$r = r_{AD} + r_{deg} = -(k_{AD} + k_{deg})C_{MP}$$

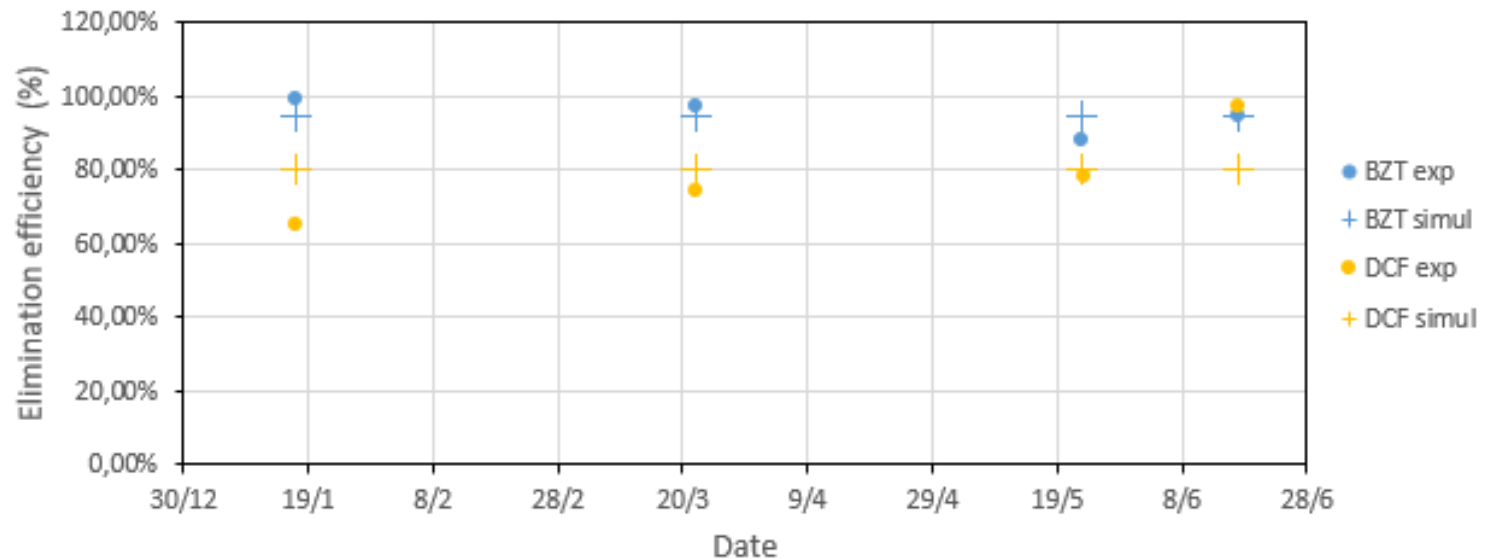
$$\rightarrow r = -k_{CW}C_{MP}$$

Modélisation des post-traitements

Ligne 1 : Constructed Wetland

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées)

	BZT						DCF					
	Ce exp (umol/m ³)	Cs exp (umol/m ³)	Cs simul (umol/m ³)	Eff exp (%)	Eff simul (%)	Ecart (%)	Ce exp (umol/m ³)	Cs exp (umol/m ³)	Cs simul (umol/m ³)	Eff exp (%)	Eff simul (%)	Ecart (%)
17/01/2022	14,2	0,13	0,76	99,1%	94,7%	4,4%	2,6	0,90	0,52	65,3%	80,1%	-14,8%
23/03/2022	9,7	0,26	0,52	97,3%	94,7%	2,6%	1,7	0,44	0,35	74,6%	80,1%	-5,5%
23/05/2022	5,8	0,70	0,31	87,9%	94,7%	-6,7%	1,3	0,28	0,27	78,8%	80,1%	-1,3%
17/06/2022	12,8	0,68	0,68	94,7%	94,7%	-0,01%	6,6	0,17	1,31	97,4%	80,1%	17,3%



Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) pour Constructed Wetland (Filtre planté)

Micropolluants	Écart absolu moyen
Iomeprol	0,6%
Diuron	0,8%
Bezafibrate	1,3%
Estrone	1,6%
Clarithromycin	2,1%
Tolytriazole	2,7%
Isoproturon	2,9%
Ibuprofen	3,2%
Caffeine	3,4%
Metoprolol	3,4%
Terbutryn	3,7%
Lidocaine	3,8%
Benzotriazole	3,8%
Atenolol	3,9%
Carbendazim	5,8%
Carbamazepine	6,9%
Diclofenac	8,7%
Sulfamethoxazole-acetyl	9,4%
AMPA	10,2%
Ciprofloxacine	10,8%
Glyphosate	19,3%

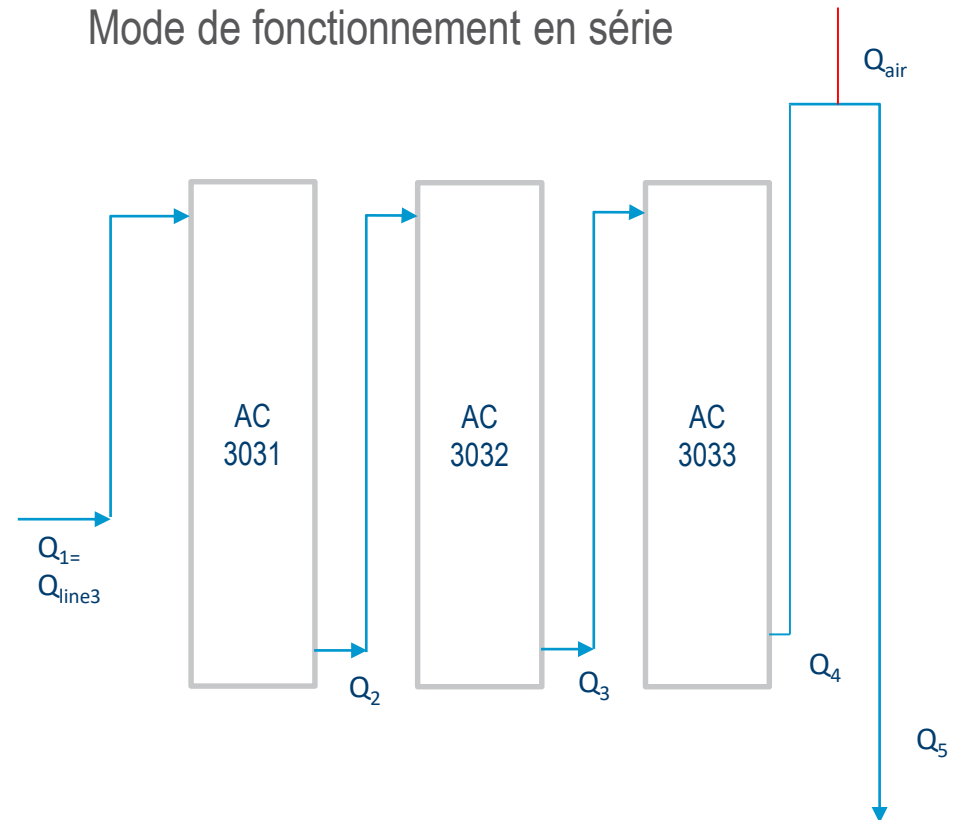
<5% : Très bon
5-10% : Bon
10-15% : Assez bon
15-30% : Moyen
>30% : Valeur approchée (ordre de grandeur)

Modélisation des post-traitements

Ligne 3 : Colonne de charbon actif

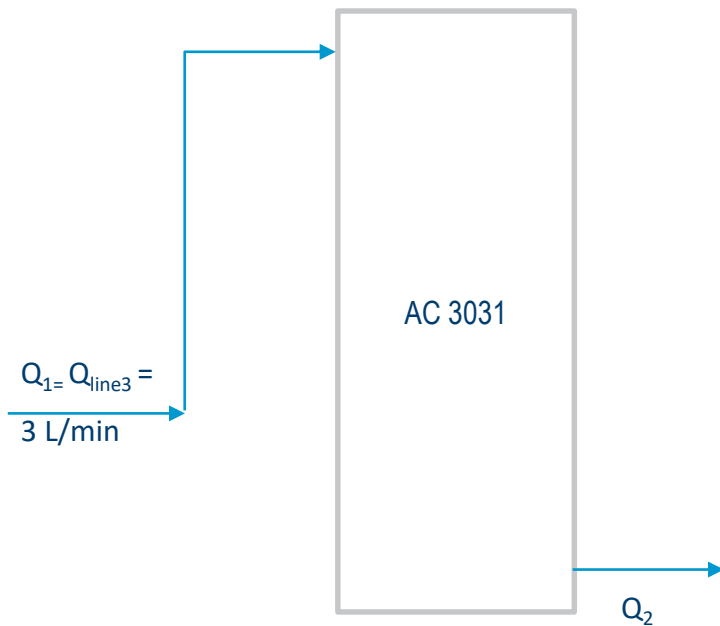


Mode de fonctionnement en série



Modélisation des post-traitements

Ligne 3 : Colonne de charbon actif



- **Modèle hydrodynamique** : chaque colonne est comparable à une cascade de RPA
- **Modèle cinétique** : adsorption isotherme (1^{er} ordre)

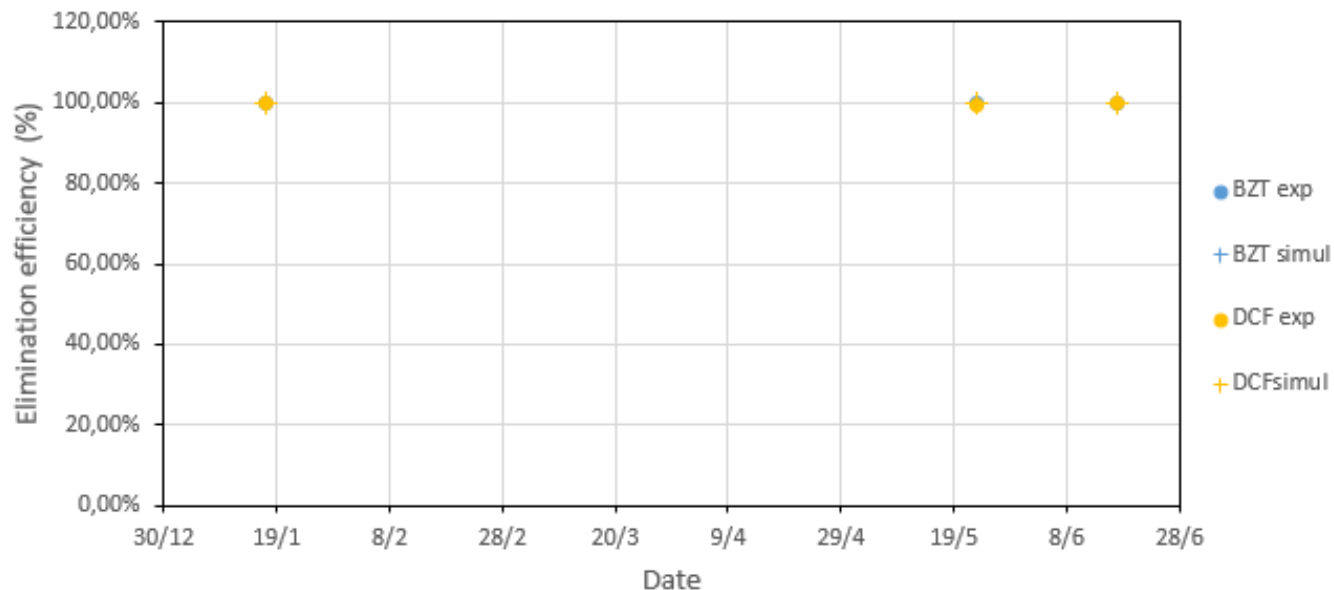
$$r_{AD} = k_{AD} C_{MP}$$

Modélisation des post-traitements

Ligne 3 : Colonne de charbon actif

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées)

	BZT						DCF					
	Ce exp (umol/m ³)	Cs exp (umol/m ³)	Cs simul (umol/m ³)	Eff exp (%)	Eff simul (%)	Gap (%)	Ce exp (umol/m ³)	Cs exp (umol/m ³)	Cs simul (umol/m ³)	Eff exp (%)	Eff simul (%)	Gap (%)
17/01/2022	14,2	0,05	0,045	99,7%	99,7%	-0,01%	2,6	0,006	0,0062	99,8%	99,8%	0,00%
23/05/2022	5,8	0,02	0,018	99,7%	99,7%	0,01%	1,3	0,007	0,0032	99,5%	99,8%	-0,25%
17/06/2022	12,8	0,02	0,041	99,9%	99,7%	0,18%	6,6	0,007	0,0157	99,9%	99,8%	0,14%



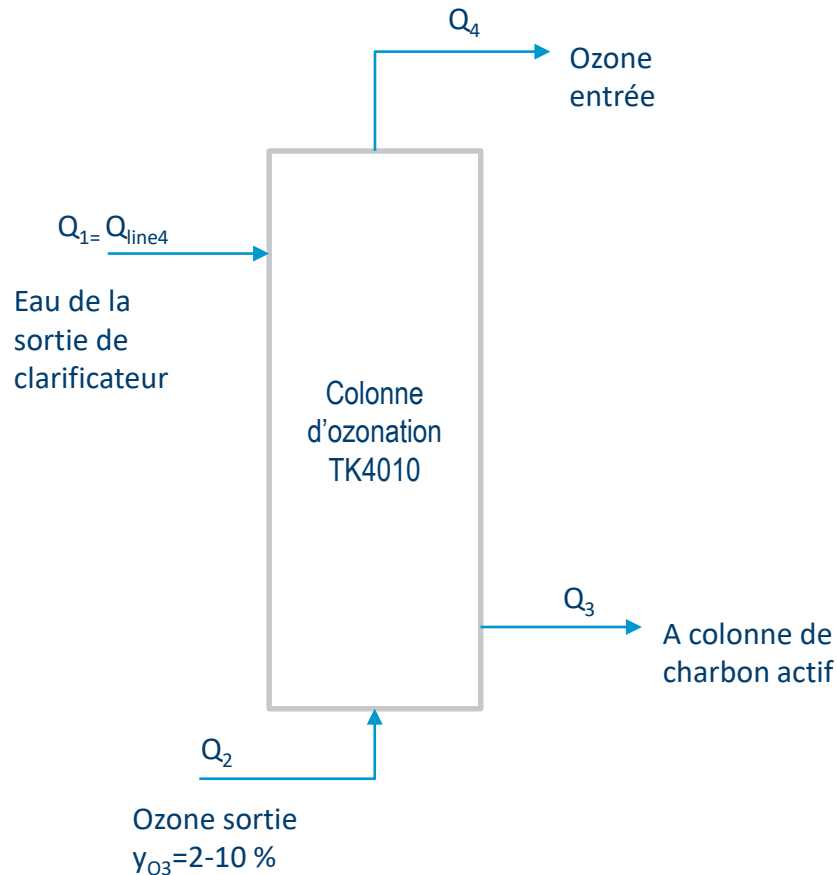
Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) pour Colonne de charbon actif

Micropolluants	Écart absolu moyen
Sucralose	0,02%
Iomeprol	0,02%
Terbutryn	0,03%
Flufenacet	0,03%
Metoprolol	0,05%
Benzotriazole	0,08%
Diclofenac	0,13%
Amidotrizoic acid	0,20%
Tolytriazole	0,37%
Diuron	0,83%
Carbamazepine	0,93%
Lidocaine	1,00%
Carbendazim	1,10%
Clarithromycin	1,30%
Estrone	1,64%
Bezafibrate	2,21%
Isoproturon	2,35%
Ibuprofen	2,68%
Atenolol	3,08%
Sulfamethoxazole-acetyl	3,79%
Caffeine	5,33%
Sulfamethoxazole	6,37%
DEET	9,10%
Ciprofloxacin	9,73%

<5% : Très bon
5-10% : Bon
10-15% : Assez bon
15-30% : Moyen
>30% : Valeur approchée
(ordre de grandeur)

Modélisation des post-traitements

Ligne 4 : Ozonation + GAC colonnes



- **Modèle hydrodynamique** : modèle du cascade de RPA

- **Modèle cinétique** :

- Cinétique de destruction des MPs par Ozone :

$$r_M = k_{O_3} C_{O_3} C_{MP} + k_{OH} C_{OH} C_{MP}$$

$$= C_{MP} C_{O_3} (k_{O_3} + k_{OH} R)$$

- Transfert de l'ozone :

$$-\frac{dC_{O_3}}{dt} = k_L a. (C_{O_3}^* - C_{O_3}). dV - k_d \cdot C_{O_3}$$

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) pour Ozonation et Colonne de charbon actif

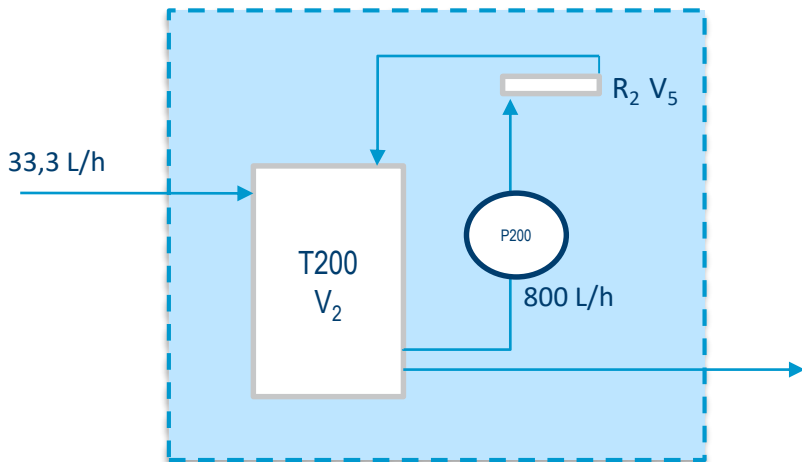
Micropollutants	Average absolute gap
Metoprolol	0,00%
Diclofenac	0,00%
Carbamazepine	0,00%
Lidocaine	0,00%
Diuron	0,00%
Carbendazim	0,00%
Sulfamethoxazole	0,00%
Clarithromycin	0,00%
Terbutryn	0,00%
Bezafibrate	0,00%
Atenolol	0,00%
Ibuprofen	0,00%
Sulfamethoxazole-acetyl	0,00%
Isoproturon	0,00%
Estrone	0,00%
Ciprofloxacin	0,00%
AMPA	0,00%
Flufenacet	0,01%
Sucralose	0,04%
Amidotrizoic acid	0,32%
Benzotriazole	0,47%
Iomeprol	0,90%
Caffeine	1,43%
Tolytriazole	1,73%
Glyphosate	3,16%
DEET	5,19%

Remarque : Pour certains MPs, le traitement par l'Ozone est suffisant et seuls quelques MP (en rouge) nécessitent un traitement complémentaire par les colonnes GAC

<5% : Très bon
5-10% : Bon
10-15% : Assez bon
15-30% : Moyen
>30% : Valeur approchée (ordre de grandeur)

Modélisation des post-traitements

Ligne 2 : PhotoFenton + Constructed Wetland



- **Modèle hydrodynamique:** chaque boucle est comparable à un RPA (Circulation interne rapide 800 L/h \gg 33,3 L/h)
 - Série de 3 RPAs avec une petite partie de régénération du Fe
- Données : Changement sur le système à la station
 - Adaptation pour l'utilisation des données de laboratoire
 - Valeur indicative

Efficacité d'élimination des micropolluants (différentes journées) pour PhotoFenton (batch)

<5%: Excellent
5-10%: Very good
10-15%: Good
15-30%: Fair
>30%: Poor

	Benzotriazole	Carbamazepine	Clarithromycin	DEET	Diclofenac
Case 1	0,04%	0,19%	0,46%	0,28%	0,02%
Case 2	0,31%	0,29%	0,66%	0,40%	0,05%
Case 3	0,10%	0,08%	0,19%	0,10%	0,02%
Case 4	0,16%	0,03%	0,02%	0,02%	0,02%
Case 5	0,06%	0,21%	0,64%	0,39%	0,07%
Case 6	0,05%	0,45%	0,91%	0,86%	0,04%
Case 7	0,56%	0,31%	0,69%	0,38%	0,69%
Case 8	0,06%	0,37%	0,50%	0,46%	0,04%
Écart absolu moyen	0,17%	0,24%	0,51%	0,36%	0,12%

Conclusion

- Les résultats montrent que les modèles choisis ainsi que la technique de simulation sont bien adaptés pour modéliser et simuler les procédés d'élimination des micropolluants dans les stations d'épuration
- Le travail a permis de faire évoluer les connaissances sur l'hydrodynamique de ce type de réacteur et de développer un nouveau modèle adapté à ses spécificités

Interreg



EUROPEAN UNION

Grande Région | Großregion

CoMinGreat

Fonds européen de développement régional | Europäischer Fonds für regionale Entwicklung



Merci de votre attention !



R

TU
P

Rheinland-Pfälzische
Technische Universität
Kaiserslautern
Landau

