



Département de formation doctorale en génie des procédés

Institut National
Polytechnique de Lorraine

École doctorale RP2E

Méthodologie d'optimisation dynamique et de commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 18 décembre 2001

pour l'obtention du

Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Lorraine
(spécialité Génie des Procédés)

par

Benoît CHACHUAT

Composition du jury

Président : M. C. Prost Professeur (IUT de Nancy-Brabois)

Rapporteurs : Mlle C.S. Adjiman Lecturer (Imperial College, U.K.)
M. D. Dochain Professeur (Université Catholique de Louvain, Belgique)
M. J. Ragot Professeur (ENSG – INPL)

Examinateurs : M. J.M. Audic Ingénieur de Recherche (Société ONDEO)
M. M. Fikar Docent (Université Slovaque de Technologie, Slovaquie)
M. M.A. Latifi Professeur (ENSIC – INPL)
M. N. Roche Professeur (IUT de Marseille)

Mis en page avec la classe `thloria`.

TABLE DES MATIÈRES

Table des figures	x
Liste des tableaux	xvi
Nontations	xix
Avant-propos	xxvii
Introduction Générale	1
1 Motivations	2
2 Objectifs de l'étude	7
3 Plan de l'étude	9
Partie I Optimisation dynamique du procédé	11
Chapitre 1 Formulation du problème d'optimisation	13
1.1 Modélisation des petites unités de traitement à boues activées	14
1.1.1 Modélisation du réacteur biologique	15
1.1.2 Modélisation du clarificateur	21
1.1.3 Modèle global de l'unité de traitement	26
1.1.4 Modèle simplifié de l'unité de traitement	27
1.1.5 Conclusions	28
1.2 Problèmes d'optimisation	29
1.2.1 Paramétrisation du problème	29
1.2.2 Minimisation des rejets d'azote total	30
1.2.3 Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur	33

1.3 Conclusions	37
Chapitre 2 Méthodes d'optimisation dynamique	39
2.1 Position du problème	40
2.2 Conditions nécessaires d'optimalité	44
2.2.1 Système différentiel paramétré continu sans contrainte	44
2.2.2 Système différentiel paramétré discontinu sans contrainte	46
2.2.3 Problèmes d'optimisation sous contraintes	50
2.3 Méthodes de résolution numériques	53
2.3.1 Méthodes de résolution indirectes	54
2.3.2 Méthodes de résolution directes	55
2.4 Conclusions	60
Chapitre 3 Fonctionnement optimal du procédé	63
3.1 Étude d'une unité de traitement existante	64
3.2 Résolution numérique des problèmes d'optimisation	66
3.2.1 Position du problème	66
3.2.2 Méthodes de résolution	68
3.2.3 Application de l'approche séquentielle	69
3.3 Fonctionnement optimal du procédé	76
3.3.1 Minimisation des rejets d'azote total	76
3.3.2 Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur	78
3.3.3 Comparaisons avec le mode de gestion actuel de l'unité	81
3.3.4 Conclusions	86
3.4 Simplification du problème d'optimisation	87
3.4.1 Simplification du modèle de fonctionnement	87
3.4.2 Réduction de la dimension du problème	94
3.4.3 Conclusions	99
3.5 Optimisation à long terme du procédé	99
3.5.1 Position du problème	100
3.5.2 Minimisation à long terme des rejets d'azote total	101
3.5.3 Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur	104
3.5.4 Conclusions	107
3.6 Conclusions et Perspectives	108

Partie II Mise en œuvre de la commande optimale en boucle fermée

111

Chapitre 4 Elaboration d'un modèle réduit de fonctionnement	115
4.1 Formulation du modèle réduit	117
4.1.1 Simplification des dynamiques lentes du modèle ASM 1	118
4.1.2 Simplifications complémentaires	125
4.1.3 Expression du modèle réduit	131
4.2 Observabilité du modèle réduit	132
4.2.1 Quelques notions d'observabilité	132
4.2.2 Application au modèle réduit	134
4.3 Identification paramétrique du modèle réduit	136
4.3.1 Notions d'identifiabilité structurelle	136
4.3.2 Identifiabilité structurelle du modèle réduit	137
4.3.3 Procédure d'identification paramétrique	139
4.3.4 Résultats de l'identification	141
4.4 Conclusions	149
Chapitre 5 Analyse de la sensibilité du modèle réduit	151
5.1 Détermination des politiques optimales d'aération	152
5.1.1 Minimisation des rejets d'azote total	152
5.1.2 Minimisation de la consommation énergétique	154
5.1.3 Conclusions	156
5.2 Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement	156
5.2.1 Notion de sensibilité	157
5.2.2 Position du problème	158
5.2.3 Système perturbé en conditions optimales nominales	160
5.2.4 Système perturbé en conditions optimales perturbées	163
5.2.5 Conclusions	167
5.3 Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération	167
5.3.1 Cas de la minimisation des rejets d'azote total	168
5.3.2 Cas de la minimisation de la consommation énergétique	174
5.4 Conclusions	180
Chapitre 6 Vers la commande optimale du procédé	181
6.1 Observateur d'état	182
6.1.1 Position du problème	182
6.1.2 Observation de l'état du modèle réduit	185

6.1.3	Application du filtre de Kalman étendu multi-taux	189
6.1.4	Conclusions	193
6.2	Estimation conjointe de l'état et des paramètres	195
6.2.1	Position du problème	195
6.2.2	Estimation <i>en ligne</i> des paramètres du modèle réduit	197
6.2.3	Applications de l'algorithme des moindres carrés non récursif	199
6.2.4	Conclusions	204
6.3	Commande optimale du procédé	205
6.3.1	Position du problème	206
6.3.2	Mise en œuvre de la commande prédictive	207
6.3.3	Commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées	210
6.4	Conclusions	215
Conclusions générales et perspectives		217
Bibliographie		221
Annexes		237
Annexe A Puissance consommée aux bornes de l'aérateur		239
Annexe B Point sur les exigences réglementaires		243
B.1	Charge journalière incidente comprise entre 120 et 600 kg DBO ₅ /j	244
B.2	Charge journalière incidente comprise entre 12 et 120 kgDBO ₅ /j	244
Annexe C Programmation Quadratique Successive		247
Annexe D Modélisation d'une unité de traitement existante		249
D.1	Configuration de l'unité de traitement	249
D.2	Mesures expérimentales	252
D.2.1	Caractérisation de l'effluent prétraité	252
D.2.2	Caractérisation de la liqueur mixte et des boues de recirculation	256
D.2.3	Caractérisation des rejets	257
D.2.4	Conclusions	260
D.3	Identification paramétrique des modèles mathématiques	260
D.3.1	Identifiabilité du modèle ASM 1	261
D.3.2	Procédure d'identification paramétrique	263

D.3.3	Identification paramétrique du modèle global	272
D.3.4	Identification paramétrique du modèle simplifié	277
D.4	Conclusions	281

TABLE DES FIGURES

1	Étapes du processus de dégradation biologique.	3
2	Configuration du procédé de traitement à boues activées.	3
3	Étapes du processus de dégradation biologique de l'azote.	4
1.1	Procédé de traitement à boues activées en bassin unique.	14
1.2	Intéractions entre les variables d'état du modèle ASM 1.	17
1.3	Illustration de l'effet du décanteur sur la concentration en azote soluble. . .	21
1.4	Bilans de matière dans les couches du clarificateur.	24
1.5	Illustration des paramètres d'optimisation.	30
3.1	Perturbations incidentes du procédé.	65
3.2	Approximations polynomiales des concentrations en <i>NGL</i> et en oxygène dissous.	69
3.3	Illustration de la raideur des systèmes d'état et adjoint.	73
3.4	Influence du pas de temps sur la précision des gradients.	74
3.5	Influence du mode d'interpolation sur la précision des gradients.	74
3.6	Convergence de l'algorithme de résolution.	76
3.7	Influence du nombre de cycles sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.	77
3.8	Profil optimal d'aération pour 36 cycles de fonctionnement.	78
3.9	Composition des rejets d'azote.	79
3.10	Concentrations rejetées en <i>DCO</i> , <i>DBO</i> ₅ et <i>MES</i> pour 36 cycles de fonctionnement.	79
3.11	Influence du nombre de cycles sur le taux d'aération minimal du réacteur. .	80
3.12	Profil optimal d'aération pour 15 cycles de fonctionnement.	80
3.13	Composition des rejets d'azote.	81
3.14	Concentrations rejetées en <i>DCO</i> , <i>DBO</i> ₅ et <i>MES</i> pour 15 cycles d'aération. .	82
3.15	Comparaison entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total.	83
3.16	Évolutions comparées des concentrations en biomasse dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total.	84
3.17	Comparaison entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique. . .	85

3.18	Évolutions comparées de la biomasse dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique.	85
3.19	Influence du nombre de cycle sur la concentration moyenne minimale d'azote total – Utilisation du modèle simplifié.	88
3.20	Profil optimal d'aération pour 39 cycles de fonctionnement – Utilisation du modèle simplifié.	88
3.21	Rejets d'azote pour 39 cycles d'aération – Utilisation du modèle simplifié.	89
3.22	Comparaison des politiques optimales de rejet calculées avec le modèle complet et le modèle simplifié.	89
3.23	Sensibilité de la politique optimale de rejet vis-à-vis des paramètres estimés.	90
3.24	Influence du nombre de cycle sur le taux minimal d'aération – Utilisation du modèle simplifié.	91
3.25	Profil optimal d'aération pour 22 cycles de fonctionnement – Utilisation du modèle simplifié.	91
3.26	Rejets d'azote pour 22 cycles d'aération – Utilisation du modèle simplifié.	92
3.27	Comparaison des politiques optimales calculées avec le modèle complet et le modèle simplifié.	92
3.28	Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des paramètres estimés.	93
3.29	Profil optimal d'aération pour 34 cycles de fonctionnement et représentation des taux d'aération par cycle – Cas de $N_c + 1$ paramètres d'optimisation.	96
3.30	Influence des simplifications de type $[a^k, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation des rejets d'azote total.	97
3.31	Influence des simplifications de type $[\bar{a}, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation des rejets d'azote total.	97
3.32	Profil optimal d'aération pour 18 cycles de fonctionnement et représentation des taux d'aération par cycle – Cas de 2 paramètres d'optimisation.	98
3.33	Influence des simplifications de type $[a^k, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation de la consommation énergétique.	98
3.34	Influence des simplifications de type $[\bar{a}, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation de la consommation énergétique.	98
3.35	Effets à long terme de la politique optimale d'aération du réacteur.	100
3.36	Profil optimal d'aération et répartition des taux d'aération pour 36 cycles de fonctionnement – Minimisation à long terme des rejets d'azote total.	102
3.37	Fonctionnement optimal de l'unité de traitement – Minimisation à long terme des rejets d'azote total.	103
3.38	Comparaison entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé – Minimisation à long terme des rejets d'azote total.	104
3.39	Profil optimal d'aération et répartition des taux d'aération pour 24 cycles de fonctionnement – Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur.	105
3.40	Fonctionnement optimal de l'unité de traitement – Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur.	106
3.41	Comparaison entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé – Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur.	107

4.1	Résultats de la méthode d'homotopie pour le modèle ASM 1, aux points d'équilibre hyperboliques, en régime permanent avec aération continue et sans aération.	120
4.2	Évolution des valeurs propres du modèle ASM 1 lors d'un cycle de fonctionnement, comprenant 1 heure d'aération et 1 heure d'arrêt.	121
4.3	Variations du débit et des concentrations incidents au cours de la surcharge.	122
4.4	Effets de la simplification des variables d'état lentes du modèle ASM 1 lors de la surcharge.	123
4.5	Comparaison des cinétiques de croissance bactérienne relatives aux biomasses hétérotrophe et autotrophe.	123
4.6	Influence de la simplification des dynamiques lentes sur les variables d'état du système.	124
4.7	Variations des paramètres θ_1 et θ_2 lors d'une forte perturbation incidente et pour différentes politiques d'aération.	127
4.8	Variations du paramètre K_{DCO} lors d'une forte perturbation incidente et pour différentes politiques d'aération.	127
4.9	Variations des paramètres θ_3 et θ_4 lors d'une forte perturbation incidente et pour différentes politiques d'aération.	130
4.10	Variations des paramètres θ_5 et K_{ND} lors d'une forte perturbation incidente et pour différentes politiques d'aération.	130
4.11	Résultats de l'identification paramétrique du modèle réduit sur un horizon de 8 heures – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.	144
4.12	Comparaison des termes cinétiques simplifiés du modèle réduit avec ceux du modèle ASM 1 – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.	145
4.13	Évolution comparée des modèles réduit et ASM 1 vis-à-vis d'une forte perturbation incidente et de différentes politiques d'aération – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.	146
4.14	Résultats de l'identification paramétrique du modèle simplifié sur un horizon de 8 heures – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.	148
4.15	Comparaison des taux de formation en ammoniaque et en composés organiques pour les modèles réduit et ASM 1 – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.	149
5.1	Influence du nombre de cycles d'aération sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.	153
5.2	Conditions optimales de fonctionnement pour 8 cycles d'aération.	153
5.3	Comparaison des conditions optimales de fonctionnement relatives aux modèles réduit et ASM 1 pour la minimisation des rejets d'azote total.	154
5.4	Influence du nombre de cycles sur le taux moyen minimal d'aération du réacteur.	155
5.5	Conditions optimales de fonctionnement pour 6 cycles d'aération.	155
5.6	Comparaison des conditions optimales de fonctionnement relatives aux modèles réduit et ASM 1 pour la minimisation de la consommation énergétique.	156
5.7	Sensibilité du critère de minimisation des rejets d'azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.	168

5.8	Comparaison des écarts relatifs du critère d'optimisation vis-à-vis de l'erreur sur le paramètre θ_1 pour le système perturbé en conditions optimales nominales et perturbées.	170
5.9	Sensibilité du profil de concentration en azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit en conditions optimales nominales.	171
5.10	Sensibilité du profil de concentration en azote total et des paramètres d'optimisation par rapport au paramètre θ_1	171
5.11	Sensibilité des paramètres d'optimisation vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.	173
5.12	Sensibilité du critère de minimisation de la consommation énergétique vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.	175
5.13	Comparaison des écarts relatifs de la contrainte de rejet d'azote total et du critère d'optimisation vis-à-vis de l'erreur sur le paramètre θ_1 pour le système perturbé en conditions optimales nominales et perturbées.	176
5.14	Sensibilité du profil de concentration en azote total et des paramètres d'optimisation par rapport au paramètre θ_1	177
5.15	Sensibilité du profil de concentration en azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.	178
5.16	Sensibilité des paramètres d'optimisation vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.	179
6.1	Observateur d'état d'un système dynamique.	183
6.2	Résultats de l'observation du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba}	191
6.3	Résultats de l'observation des états S_{ND}^{ba} et X_{DCO}^{ba} du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba}	192
6.4	Résultats de l'observation des états S_{ND}^{ba} et X_{DCO}^{ba} du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba}	194
6.5	Estimation conjointe de l'état et des paramètres d'un système dynamique par l'approche séquentielle.	197
6.6	Résultats de l'estimation <i>en ligne</i> des paramètres du modèle réduit lorsque les perturbations incidentes sont mesurées.	201
6.7	Résultats de l'estimation <i>en ligne</i> des concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in}	202
6.8	Résultats de l'estimation <i>en ligne</i> des paramètres et des perturbations du modèle réduit lorsque les concentrations incidentes ne sont pas mesurées.	203
6.9	Résultats de l'estimation <i>en ligne</i> des taux de formation interne et d'apport des composés X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba}	204
6.10	Résultats de l'observation des concentrations X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} lors de l'estimation conjointe de l'état et des paramètres du modèle réduit.	204
6.11	Schéma de principe de la commande prédictive.	208
6.12	Mise en œuvre de la commande prédictive non-linéaire du procédé.	210
6.13	Commande optimale du système d'aération en <i>boucle fermée</i>	211
6.14	Comparaison des résultats relatifs à la commande optimale en <i>boucle fermée</i> et à l'optimisation dynamique <i>hors ligne</i> du procédé.	212

6.15 Résultats de l'observation des concentrations X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} lors de l'opération.	212
6.16 Résultats de l'estimation <i>en ligne</i> des taux de formation interne et d'apport des composés X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} lors de l'opération.	213
6.17 Comparaison de la commande optimale en <i>boucle fermée</i> avec les modes de gestion habituels du procédé.	215
D.1 Schémas d'ensemble de la filière de traitement.	250
D.2 Configuration de l'étage de traitement biologique.	251
D.3 Configuration des cycles d'aération.	251
D.4 Débit et concentrations incidents moyens sur 1 journée.	253
D.5 Modélisation des perturbations incidentes.	254
D.6 Concentrations des prélèvements de boues du bassin d'aération et du recyclage.	256
D.7 Concentrations des prélèvements moyens sur l'effluent traité.	258
D.8 Comparaisons des concentrations mesurées et simulées par le modèle global pour la liqueur mixte et la boue de recirculation.	275
D.9 Comparaisons des valeurs mesurées et simulées avec le modèle global pour l'effluent traité.	276
D.10 Comparaisons des concentrations mesurées et simulées par le modèle simplifié pour la liqueur mixte et la boue de recirculation.	279
D.11 Comparaisons des valeurs mesurées et simulées avec le modèle simplifié pour l'effluent traité.	280

LISTE DES TABLEAUX

1.1	Variables d'état du modèle de dégradation biologique.	16
1.2	Cinétiques du modèle de dégradation.	18
1.3	Stœchiométrie des réactions du modèle de dégradation.	18
1.4	Paramètres stœchiométriques et cinétiques du modèle de dégradation	20
1.5	Paramètres du modèle de décantation.	23
1.6	Contraintes opératoires du système.	32
1.7	Prescriptions minimales pour les rejets dans les eaux de surface.	34
1.8	Expressions des contraintes réglementaires.	35
3.1	Paramètres estimés du modèle complet.	66
3.2	Paramètres estimés du modèle simplifié.	66
3.3	Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les durées minimales d'aération et d'arrêt.	90
3.4	Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les durées minimales d'aération et d'arrêt.	93
3.5	Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les rejets d'azote total.	93
3.6	Influence de la réduction du nombre de paramètres d'optimisation sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.	96
3.7	Influence de la réduction du nombre de paramètres sur la consommation énergétique de l'aérateur.	97
3.8	Influence du nombre de cycles d'aération par jour sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote, pour 60 jours d'optimisation.	102
3.9	Influence du nombre de jours sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote, pour 36 cycles d'aération par jour.	102
3.10	Influence du nombre de cycles d'aération par jour sur le taux minimal d'aération du réacteur, pour 60 jours d'optimisation.	105
3.11	Influence du nombre de jours sur le taux minimal d'aération du réacteur, pour 24 cycles d'aération par jour.	105
4.1	Valeurs par défaut des paramètres du modèle réduit.	141
4.2	Résultats de l'analyse de la sensibilité des paramètres du modèle réduit. . .	142

4.3	Résultat de l'identification – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.	143
4.4	Résultat de l'identification – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.	147
6.1	Initialisation de l'observateur de Kalman.	189
6.2	Conditions initiales du modèle de référence et de l'estimation.	190
6.3	Comparaison des différents modes de gestion des petites stations d'épuration à boues activées	214
B.1	Prescriptions minimales pour les collectivités de plus de 2 000 E.H.	244
B.2	Prescriptions minimales pour les collectivités de tailles comprises entre 200 et 2 000 E.H.	244
D.1	Modélisation des perturbations incidentes.	254
D.2	Comparaison des concentrations en DCO et DCO_s incidentes.	255
D.3	Comparaison des concentrations en NTK et NH_4 incidentes.	256
D.4	Paramètres cinétiques, stœchiométriques et de décantation par défaut.	264
D.5	Composition de l'influent par défaut.	264
D.6	Etat initial du système.	266
D.7	Poids donnés aux mesures lors de la procédure d'identification.	272
D.8	Analyse de la sensibilité des paramètres du modèle global.	273
D.9	Paramètres estimés du modèle global.	274
D.10	Analyse de la sensibilité des paramètres du modèle simplifié.	277
D.11	Influence du temps de séjour dans le clarificateur sur le résultat de l'identification du modèle simplifié.	278
D.12	Paramètres estimés du modèle simplifié.	278

Notations

Notations relatives au procédé de traitement des eaux

a^k	: Durée d'aération au cours du $k^{\text{ème}}$ cycle d'aération	s
A_O	: Apport d'oxygène	$\text{g.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
b_A	: Taux de mortalité des bactéries autotrophes	s^{-1}
b_H	: Taux de mortalité des bactéries hétérotrophes	s^{-1}
d	: Diamètre des turbines	m
D	: Taux de dilution	j^{-1}
e	: Épaisseur d'une couche de décantation	m
\mathcal{E}	: Énergie consommée	J
\mathcal{F}	: Fonction de rejet	g.m^{-3}
Fr	: Nombre de Froude	-
fr_{XI}	: Fraction de DCO inerte issue du décès de la biomasse	-
f_{ns}	: Fraction non décantable de composés particulaires en suspension	-
f_{SI}	: Fraction des composés solubles inertes dans la DCO totale	-
f_{SND}	: Fraction d'azote organique soluble dans l'azote total	-
f_{SNH}	: Fraction d'azote ammoniacal dans l'azote total	-
f_{SNO}	: Fraction de nitrate et de nitrite dans l'azote total	-
f_{SS}	: Fraction des composés solubles biodégradables dans la DCO totale	-
f_{XBA}	: Fraction de biomasse autotrophe active dans la DCO totale	-
f_{XBH}	: Fraction de biomasse hétérotrophe active dans la DCO totale	-
f_{XI}	: Fraction des composés particulaires inertes dans la DCO totale	-
f_{XND}	: Fraction d'azote organique particulaire dans l'azote total	-
f_{XS}	: Fraction des composés particulaires biodégradables dans la DCO totale	-
g	: Accélération de la pesanteur	9.81 m.s^{-2}
H	: Hauteur	m
i_{NBM}	: Proportion d'azote dans la biomasse	-

i_{NXI}	: Proportion d'azote dans les composés organiques inertes	-
k_{La}	: Coefficient de transfert d'oxygène	s^{-1}
K_{DCO}	: Constante d'affinité en substrat organique des bactéries hétérotrophes	$g.m^{-3}$
K_{ND}	: Constante d'affinité en substrat organique du processus d'hydrolyse de l'azote organique particulaire	$g.m^{-3}$
K_S	: Constante d'affinité en substrat soluble des bactéries hétérotrophes	$g.m^{-3}$
$K_{NH,A}$: Constante d'affinité en ammoniaque des bactéries autotrophes	$g.m^{-3}$
$K_{NH,H}$: Constante d'affinité en ammoniaque des bactéries hétérotrophes	$g.m^{-3}$
K_{NO}	: Constante d'affinité en nitrate des bactéries hétérotrophes (dé-nitrifiantes)	$g.m^{-3}$
$K_{O,A}$: Constante d'affinité en oxygène dissous des bactéries autotrophes	$g.m^{-3}$
$K_{O,H}$: Constante d'affinité en oxygène dissous des bactéries hétérotrophes	$g.m^{-3}$
K_X	: Constante d'affinité en substrat particulaire pour le processus d'hydrolyse	-
ℓ^k	: Durée du $k^{\text{ème}}$ cycle d'aération	s
\mathcal{N}	: Vitesse de rotation des turbines	$rad.s^{-1}$
N_a	: Indice de la couche d'alimentation	-
N_c	: Nombre de cycles	-
N_{cc}	: Nombre de couches de décantation	-
N_j	: Nombre de jours	-
N_p	: Nombre de puissance	-
Q	: Débit	$m^{-3}.s^{-1}$
\mathcal{P}	: Puissance consommée	W
ps	: Fraction des différents composés solubles par rapport aux composés solubles totaux S_t	-
p_x	: Fraction des différents composés particulaires par rapport aux composés particulaires totaux X_t	-
\mathcal{R}	: Taux de conversion des composés	$g.m^{-3}.s^{-1}$
Re	: Nombre de Reynolds	-
r_h	: Paramètre de sédimentation pour les suspensions fortement concentrées	$m^3.g^{-1}$
r_p	: Paramètre de sédimentation pour les suspensions faiblement concentrées	$m^3.g^{-1}$
S_{ALK}	: Alcalinité	$g.m^{-3}$
S	: Surface	m^2
S_I	: Concentration des composés organiques solubles inertes	$g.m^{-3}$
S_{ND}	: Concentration d'azote organique soluble biodégradable	$g.m^{-3}$
S_{NH}	: Concentration d'azote sous forme ammoniacale	$g.m^{-3}$
S_{NO}	: Concentration d'azote sous forme de nitrate et de nitrites	$g.m^{-3}$

S_O	: Concentration d'oxygène dissous	g.m^{-3}
S_O^{sat}	: Concentration d'oxygène dissous à saturation	g.m^{-3}
S_S	: Concentration des composés organiques solubles biodégradables	g.m^{-3}
S_t	: Concentration soluble totale	g.m^{-3}
t_b^k	: Instant d'arrêt de l'aérateur au cours du $k^{\text{ème}}$ cycle	s
t_c^k	: Instant final du $k^{\text{ème}}$ cycle d'aération	s
t_d	: Temps de transit de l'effluent dans le clarificateur	s
t_{\max}^{off}	: Durée d'arrêt maximale de l'aérateur	s
t_{\max}^{on}	: Durée de fonctionnement maximale de l'aérateur	s
t_{\min}^{off}	: Durée d'arrêt minimale de l'aérateur	s
t_{\min}^{on}	: Durée de fonctionnement minimale de l'aérateur	s
u_l	: Vitesse du liquide	m.s^{-1}
u_s	: Vitesse de sédimentation	m.s^{-1}
$u_{s,0}$: Vitesse théorique maximale de sédimentation	m.s^{-1}
$u'_{s,0}$: Vitesse effective maximale de sédimentation	m.s^{-1}
V	: Volume	m^3
\mathcal{V}^r	: Volume réactionnel	m^3
We	: Nombre de Weber	—
$X_{B,A}$: Concentration en biomasse autotrophes active	g.m^{-3}
$X_{B,H}$: Concentration en biomasse hétérotrophe active	g.m^{-3}
X_{DCO}	: Concentration des composés organiques biodégradables (solubles et particulaires)	g.m^{-3}
X_{ND}	: Concentration d'azote organique particulaire biodégradable	g.m^{-3}
$X_{N_{org}}$: Concentration d'azote organique biodégradable (soluble et particulaire)	g.m^{-3}
X_I	: Concentration des composés organiques particulaires intertes	g.m^{-3}
X_S	: Concentration des composés organiques particulaires biodégradables	g.m^{-3}
X_t	: Concentration particulaire totale	g.m^{-3}
X_t^{\max}	: Concentration limite de composés particulaires en suspension	g.m^{-3}
Y_A	: Rendement de conversion des bactéries autotrophes	—
Y_H	: Rendement de conversion des bactéries hétérotrophes	—

Lettre grecques

γ	: Tension superficielle	N.m^{-1}
η	: Viscosité	pa.s
$\eta_{NO,g}$: Fracteur de correction du taux de dénitrification en conditions d'anoxie	—
$\eta_{NO,h}$: Fracteur de correction du taux d'hydrolyse en conditions d'anoxie	—

κ_a	Taux d'ammonification	$\text{m}^3.\text{g}^{-1}.\text{s}^{-1}$
κ_h	Taux d'hydrolyse maximal	s^{-1}
μ	Masse volumique	$\text{kg}.\text{m}^{-3}$
μ_A	Taux de croissance maximal des bactéries autotrophes	s^{-1}
μ_H	Taux de croissance maximal des bactéries hétérotrophes	s^{-1}
ν	Coefficient stœchiométrique	—
ρ	Terme cinétique	$\text{g}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
Φ	Flux particulaire total	$\text{g}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
Φ_l	Flux particulaire associé au flux de liquide	$\text{g}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
Φ_s	Flux particulaire de sédimentation	$\text{g}.\text{m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
θ_1	Paramètre spécifique du modèle cinétique réduit	$\text{g}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
θ_2	Paramètre spécifique du modèle cinétique réduit	$\text{g}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
θ_3	Paramètre spécifique du modèle cinétique réduit	$\text{g}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
θ_4	Paramètre spécifique du modèle cinétique réduit	s^{-1}
θ_5	Paramètre spécifique du modèle cinétique réduit	$\text{g}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
ϑ	Taux de compression des boues	—

Indices et exposants

b	Bas
ba	Bassin d'aération
DCO	Demande chimique en oxygène
DBO_5	Demande biochimique en oxygène
dec	Décanteur secondaire
h	Haut
in	Influent, incident
max	Maximal
mes	Mesuré
MES	Matières en suspension
min	Minimal
NGL	Azote total
$purg$	Extraction des boues
rec	Recyclage des boues
(1)	Périodes de fonctionnement des turbines
(2)	Périodes d'arrêt des turbines

Notations générales

\mathcal{A}	: Matrice
\mathcal{B}	: Matrice hessienne du Lagrangien
\mathcal{C}	: Matrice de covariance
E	: Espérance
\mathcal{E}	: Fonction d'écart
f	: Fonction d'état
g	: Contrainte
\mathcal{G}	: Terme terminal du critère
h	: Fonction de sortie, composante principale
h'	: Fonction de sortie
\mathcal{H}	: Hamiltonien
\mathcal{H}	: Matrice d'homotopie
\mathcal{I}_{act}	: Ensemble des contraintes actives
\mathcal{J}	: Critère d'optimisation
\mathcal{K}_f	: Matrice de gain du filtre de Kalman étendu
L	: Dérivée de Lie
\mathcal{L}	: Terme intégral du critère
\mathcal{L}	: Lagrangien
ℓ	: Dimension du vecteur des paramètres de commande
m	: Dimension de la commande continue
n	: Dimension de l'état
N	: Nombre de points de collocation, ordre d'interpolation
n_s	: Nombre de modes du système hybride
N_m	: Nombre de mesures
N_p	: Nombre de points d'échantillonnage
p, p'	: Dimension du vecteur de sortie
\mathcal{O}	: Espace d'observation
\mathcal{P}	: Matrice de covariance de l'erreur d'estimation, polynôme
\mathcal{P}	: Densité de probabilité
q	: Dimension du vecteur des paramètres du modèle
\mathcal{Q}	: Matrice de changement de base
r	: Nombre de contraintes, paramètre d'homotopie, résidu
r_e	: Nombre de contraintes d'égalité
s	: Condition de commutation
s	: Variable de sensibilité
\mathcal{S}	: Écart normalisé du critère ou des contraintes
t	: Temps
\mathfrak{t}	: Distribution de Student
T_e	: Période d'échantillonnage
T_p	: Période de prédiction

T_u	: Horizon de commande
u	: Variable de commande
v	: Fonction scalaire ou vectorielle
\mathcal{V}, \mathcal{W}	: Ouvert, voisinage
\mathcal{V}	: Variété différentielle
\mathcal{W}	: Matrice de pondération
x	: Variable d'état
y, y'	: Variable de sortie
z	: Variable formelle
\emptyset	: Matrice nulle
$\mathbb{1}$: Matrice identité

Lettre grecques

α	: Niveau de confiance
δ	: Fonction de Dirac
ε	: Perturbation, relaxation
Γ	: Matrice de pondération
λ	: Variable adjointe, valeur propre
Λ	: Matrice diagonale
μ	: Facteur d'oubli
ν	: Multiplicateur de Lagrange ou de Khun-Tucker, nombre de degrés de liberté, incertitude de mesure, vecteur propre
ϕ	: Contrainte
σ	: Écart-type
τ	: Point de collocation, temps
θ	: Paramètre du modèle
ξ	: Fonction de mérite
ω	: Constante de pondération, erreur de modélisation

Indices et exposants

f	: Final, variable rapide
ϑ	: Critère d'optimisation
(k)	: $k^{\text{ème}}$ mode de fonctionnement du système hybride
L	: Borne inférieure
n	: Nominal
p	: Perturbé
s	: Variable lente

T	: Transposée matricielle
U	: Borne supérieure
0	: Initial
$-$: Avant l'instant
$+$: Après l'instant
$*$: Optimal
$\bar{}$: Valeur moyenne, grandeur augmentée
$\hat{}$: Valeur estimée
\sim	: Variable supplémentaire
\cdot	: Dérivée temporelle d'ordre 1
$\cdot\cdot$: Dérivée temporelle d'ordre 2

Abbréviations

ASM	: Modèle de boues activées (<i>Activated Sludge Model</i>)
BCI	: Itérations sur les conditions limites (<i>Boundary Condition Iterations</i>)
CPU	: Processeur (<i>Computing Process Unit</i>)
CVI	: Itérations sur le vecteur de commande (<i>Control Vector Iterations</i>)
CVP	: Paramétrisation du vecteur de commande (<i>Control Vector Parametrization</i>)
DAE	: Système d'équations algébro-différentielles (<i>Differential Algebraic Equations</i>)
DCO	: Demande Chimique en Oxygène
DCOs	: Demande Chimique en Oxygène des composés Solubles
DBO ₅	: Demande Biochimique en Oxygène sur 5 jours
E.H.	: Équivalent-HabitantModèle de boues activées
EKF	: Filtre de Kalman étendu (<i>Extended Kalman Filter</i>)
IAWQ	: Association internationale pour la qualité de l'eau (<i>International Association on Water Quality</i>)
IDP	: Programmation itérative dynamique (<i>Initial Value Problem</i>)
IVP	: Problème aux conditions initiales (<i>Initial Value Problem</i>)
IWA	: Association internationale de l'eau (<i>International Water Association</i>)
KKT	: Karush-Kuhn-Tucker
LHS	: Échantillonnage par carré latin (<i>Latin Hypercube Sampling</i>)
MCE	: Minimisation des la Consommation Énergétique
MES	: Matières En Suspension
MIDO	: Optimisation dynamique mixte (<i>Mixed-Integer Dynamic Optimization</i>)
MINLP	: Programmation non-liéaire mixte (<i>Mixed-Integer NonLinear Programming</i>)
MPC	: Commande prédictive (<i>Model-based Predictive Control</i>)

MR	: Minimisation des Rejets
NH ₄	: Azote ammoniacal
NGL	: Azote total
NLP	: Programmation non-liéaire mixte (<i>NonLinear Programming</i>)
NMPC	: Commande prédictive non-linéaire (<i>Nonlinear Model-based Predictive Control</i>)
NO ₃	: Nitrate
NRLS	: Moindres carrés non récursifs (<i>Non-Recursive Least Square</i>)
NTK	: Azote dit de Kjeldahl
ODE	: Système d'équations différentielles (<i>Ordinary Differential Equations</i>)
OUR	: Taux de consommation en oxygène dissous (<i>Oxygen Uptake Rate</i>)
RPA	: Réacteur Parfaitement Agité
SQP	: Programmation quadratique successive (<i>Successive Quadratic Programming</i>)
TPBVP	: Problème aux conditions limites partagées (<i>Two-Point Boundary Value Problem</i>)
α BB	: α -Branch and Bound

Avant-propos

Le 13 avril 1914, la section de Manchester de la Société de Chimie Industrielle de Londres est réunie dans les salons du Grand Hôtel sous la présidence de J. H. Hoseason pour une de ses séances habituelles. Au programme, une communication présentée par Ardern E. et Lockett W. au titre quelque peu énigmatique : "Expériences sur l'oxydation des eaux d'égout sans intervention de filtres".

Au départ, une observation des plus simples. Les auteurs insufflent de l'air dans des récipients contenant environ 2 litres d'eau d'égout, jusqu'à nitrification complète de l'azote. Cinq semaines sont nécessaires pour cette première expérience, délai bien trop long pour espérer une application industrielle. Mais contrairement à tant de leurs devanciers, Ardern et Lockett laissent décanter le liquide avant d'évacuer le surnageant, et conservent soigneusement le sédiment déposé au fond du vase. Le bécher rempli à nouveau, l'aération reconduite, et l'opération répétée plusieurs fois, "on trouva que la quantité de matière déposée augmentait et que le temps nécessaire pour parvenir à l'oxydation diminuait progressivement, jusqu'à ce qu'il soit finalement possible d'oxyder complètement un échantillon frais d'eau d'égout en moins de 24 heures" (Ardern et Lockett, 1914). Pour lui donner un nom, et faute d'un meilleur terme, le dépôt résultant de l'oxydation de l'effluent fut appelé boue activée.

Tiré de *Éléments pour une histoire des procédés de traitement des eaux résiduaires*,
(Boutin, 1985)

Introduction générale

Lasciate ogne speranza, voi ch'intrate
Vous qui entrez, laissez toute espérance

Inferno, Canto III
La divina commedia
DANTE ALIGHIERI

Dans la plupart des pays industrialisés ou en voie d'industrialisation, le traitement des eaux usées résultant de l'activité humaine est devenu une condition préalable au maintient d'une qualité satisfaisante des eaux de surface. Dès le XIX^e siècle, l'industrialisation et l'urbanisation ont donné lieu à un rapide développement de zones à fortes densités de population et le manque de moyens sanitaires adéquats fut la cause, à plusieurs reprises et dans différents pays, d'importantes épidémies. Suite à la vague de peste à Londres en 1857 (*the Great Plague*), le gouvernement britannique décida d'évacuer les eaux usées des villes au moyen de réseaux d'égout souterrains. Au cours de la décennie suivante, la plupart des grandes villes occidentales s'équipèrent également de systèmes sanitaires.

Suite à la construction des réseaux d'évacuation, l'augmentation des charges polluantes déversées dans le milieu naturel fut à l'origine d'une rapide dégradation de la qualité des eaux superficielles. Au début du XX^e siècle, de nombreux lacs, rivières et sources étaient ainsi très lourdement pollués et le problème relatif aux composés particulaires et organiques devenait manifeste. Les écosystèmes naturels étaient asphyxiés et largement altérés, au point que la vie aquatique était sérieusement menacée, sans compter les odeurs qui émanaient des lieux de déverse.

Paradoxalement, les premiers textes réglementaires légiférant sur le traitement des eaux usées ne firent leur apparition, dans la plupart des pays occidentaux, qu'au cours de la seconde moitié du XX^e siècle (Boutin, 1985). Ces textes ciblaient en premier lieu les problèmes majeurs, en mettant notamment l'accent sur la réduction des rejets des composés organiques biodégradables, et à moindre échelle d'ammoniaque, et donnèrent lieu au développement de dispositifs de traitement performants.

La quantité d'eaux usées traitée chaque jour en Europe occidentale est de l'ordre de 40 millions de mètres-cube (Vanrolleghem, 1994), et ne cesse de s'accroître. La manière la plus économique pour disposer de ces eaux est l'oxydation biologique, et le procédé à *boues activées* constitue, avec ses variantes, le mode de traitement le plus couramment mis en œuvre.

INTRODUCTION GENERALE

1 Motivations

Au cours des dernières décennies, les effets à long terme de l'eutrophisation des eaux de surface sont devenus manifestes. Les rejets de nutriments (azote, phosphore) favorisent le développement d'algues qui consomment de grandes quantités d'oxygène, causent des problèmes d'odeurs et perturbent les écosystèmes aquatiques. Un renforcement des exigences réglementaires est ainsi intervenu vis-à-vis de ces rejets au début des années 1990, avec la parution de la Directive Européenne 91/271 "*Eaux résiduaires urbaines*".

En raison des moyens financiers et techniques dont elles disposent, les grandes collectivités ne rencontrent, le plus souvent, pas de difficultés majeures pour mettre aux normes leurs installations de traitement. En revanche, les petites collectivités sont confrontées à d'importants problèmes techniques et économiques pour gérer leurs stations d'épuration, et la nouvelle réglementation pourrait compliquer plus encore leur situation. La mise aux normes de ces petites installations passe donc nécessairement par l'amélioration des performances et de la fiabilité du traitement d'une part, et la réduction des coûts opératoires d'autre part.

Fondements de l'épuration biologique des eaux usées

Les filières d'épuration modernes combinent généralement plusieurs étapes de traitement. L'effluent brut est d'abord pré-traité, afin d'éliminer les matériaux grossiers (dégrillage), les sables et les graisses (dessablage, déshuileage) et, dans certains cas, les particules plus fines (décantation primaire). Pour les eaux usées d'origine essentiellement domestique, l'effluent fait ensuite l'objet d'un traitement secondaire par voie biologique dans la plupart des cas (Eckenfelder, 1991). Sur certaines unités de grandes tailles, un traitement tertiaire est effectué afin d'affiner l'effluent, de le désinfecter (chloration) ou encore d'éliminer les odeurs résiduelles.

Les mécanismes fondamentaux impliqués dans le traitement biologique des eaux usées sont identiques pour l'ensemble des procédés (boues activées, lits bactériens, lagunages, etc...) (Tchobanoglous et Schroeder, 1985). Des micro-organismes, essentiellement des bactéries, dégradent les matières organiques et minérales présentes dans les eaux usées pour leur développement (métabolisme). Ces substances se présentent soit sous la forme de particules et colloïdes, soit sous la forme de molécules dissoutes. Les étapes du processus de dégradation sont schématisées sur la Fig. 1. En raison de leurs tailles importantes, les particules et macromolécules doivent être préalablement hydrolysées en composés plus simples, afin de pouvoir être assimilées, avec les substances dissoutes, par les bactéries. Chaque étape peut, selon la disponibilité en substrat, le régime hydraulique des réacteurs ou encore les conditions environnementales (température, etc.) être limitante pour le processus général de dégradation.

Dans les procédés de traitement biologiques, le métabolisme donne toujours lieu à la production de nouvelles cellules. Ce processus permet de maintenir une quantité suffisante de bactéries dans le système, mais peut néanmoins entraîner de graves dysfonctionnements lorsque la masse bactérienne est trop importante ; il est alors nécessaire d'extraire une partie des boues produites.

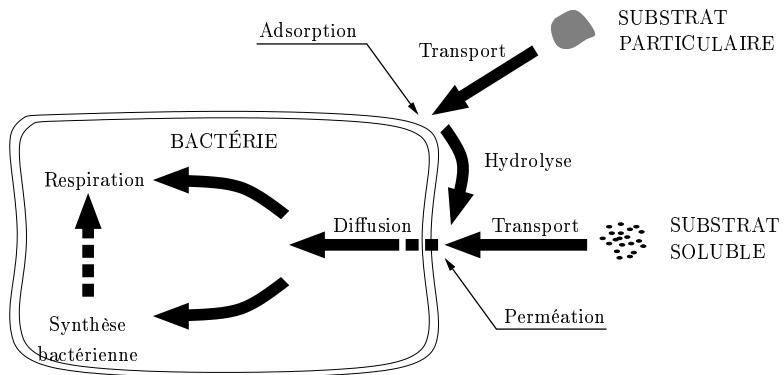


FIG. 1 – Étapes du processus de dégradation biologique.

Procédé de traitement à boues activées

Le procédé à boues activées constitue de loin le mode de traitement le plus utilisé pour l'épuration des effluents urbains. Un bassin à boues activées est un réacteur biologique, alimenté en continu et aéré, dans lequel une culture bactérienne est maintenue au contact de la pollution sous la forme de flocs en suspension (Fig. 2). Cette culture bactérienne, aussi appelée boue ou biomasse, est ensuite séparée gravitairement du liquide épuré dans un clarificateur. La majeure partie des boues épaissies est alors recyclée dans le bioréacteur pour y être mélangée avec l'eau usée incidente, et seule une faible partie est éliminée du système.

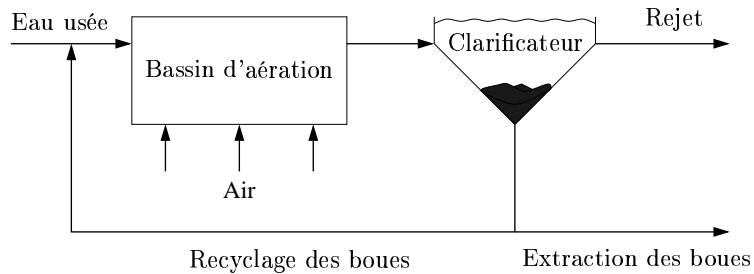


FIG. 2 – Configuration du procédé de traitement à boues activées.

Exclusivement destiné à la dégradation des matières organiques des eaux usées dans un premier temps, de nouvelles préoccupations ont nécessité l'extension du procédé à l'élimination des nutriments (composés azotés et phosphorés). Mais si l'oxydation des matières organiques ne constitue plus, à l'heure actuelle, un élément limitant de la qualité de l'eau épurée pour ce type de filières, l'amélioration de l'efficacité du traitement doit, en revanche, passer par un renforcement de la dégradation des pollutions azotées et phosphorées.

Sur les unités de traitement existantes, l'élimination du phosphore peut être obtenue relativement simplement en ajoutant un étage de précipitation chimique supplémentaire¹.

¹La précipitation chimique a cependant pour principaux inconvénients d'occasionner le rejet de réactifs chimiques dans le milieu naturel et d'augmenter la production de boues. Le traitement du phosphore par voie biologique est également possible, et semble être privilégié depuis quelques années notamment dans

INTRODUCTION GENERALE

L'élimination de l'azote est au contraire plus difficile à mettre en œuvre. Comme pour le traitement des composés organiques carbonés, la voie biologique se révèle la plus économique. Le processus de dégradation est similaire à celui observé dans le milieu naturel et se fait en deux étapes (Fig. 3) : l'oxydation aérobie de l'azote ammoniacal en nitrate par les bactéries autotrophes d'une part (nitrification) ; la réduction en conditions d'anoxie des nitrates en azote gazeux par les bactéries hétérotrophes d'autre part (dénitritification). La première étape requiert d'importantes quantités d'oxygène dissous, alors que l'absence d'oxygène dissous et la disponibilité de grandes quantités de carbone soluble biodégradable sont nécessaires pour la seconde.

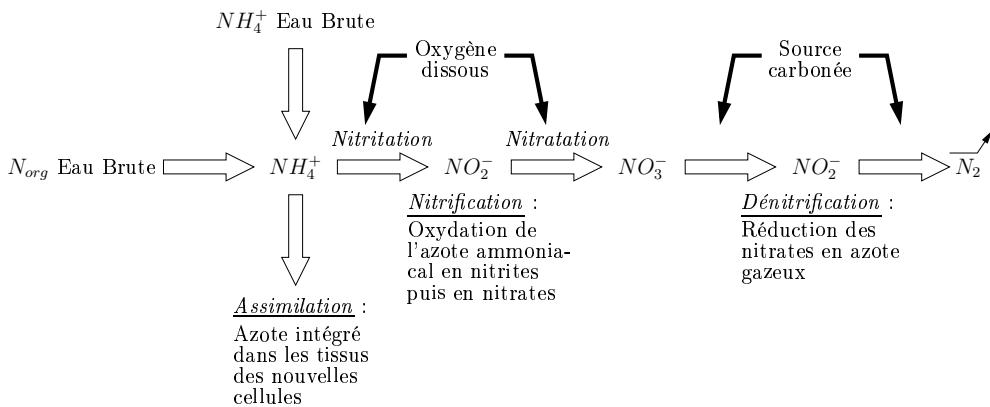


FIG. 3 – Étapes du processus de dégradation biologique de l'azote.

Différentes configurations du procédé à boues activées permettent de concilier ces conditions de fonctionnement antagonistes. Une façon de faire consiste à placer une zone d'anoxie en tête de station, et d'y recycler la liqueur mixte du bassin d'aération situé en aval. Ainsi, le carbone assimilable nécessaire au processus de dénitritification est directement apporté par l'eau usée incidente, et les nitrates par le biais du recyclage interne. Bien que le rendement d'élimination de l'azote soit particulièrement important, le besoin d'ouvrages de traitement supplémentaires et la consommation énergétique élevée (en raison du fort taux de recyclage interne), n'autorisent généralement l'application de ces dispositifs qu'aux unités de grandes tailles.

Le traitement de l'azote peut également être envisagé séquentiellement au sein d'un bassin unique, en prenant soin d'alterner des conditions de fonctionnement aérobies et anoxiques. Lorsque le temps de séjour de l'effluent dans le réacteur est important, *e.g.* pour les stations d'épuration fonctionnant à faible charge ou en aération prolongée, les rendements d'élimination sont élevés, typiquement de l'ordre de 70 à 90% (*e.g.* Héduit et al., 1990; Nakajima et Kaneko, 1991; Hao et Huang, 1996; Klapwijk et al., 1998).

Spécificité des petites unités de traitement

Pour les petites collectivités, *i.e.* de plusieurs centaines à quelques milliers d'équivalents-habitants (E.H.), les filières de traitement à boues activées sont le plus souvent constituées

les pays nordiques (*e.g.* Olsson et al., 1998), bien qu'il nécessite généralement la construction de bassins d'anaérobiose supplémentaires.

d'un réacteur biologique unique, agité et aéré séquentiellement au moyen d'aérateurs mécaniques de surface (turbines) (Fig. 2). Comme précisé ci-dessus, c'est l'alternance de l'aération qui permet d'assurer, dans ce cas, les processus de nitrification et de dénitrification au sein du bassin d'aération. Le traitement du phosphore n'est généralement pas pris en considération¹.

La situation de ces petites collectivités est actuellement des plus délicates. La Directive Européenne (et sa traduction en droit français²) prévoit, en effet, un renforcement de la qualité et de la fiabilité des traitements. Selon l'objectif de qualité du milieu récepteur, les normes de rejet fixées peuvent ainsi atteindre 10 mg.L^{-1} . Les performances prévues par ces textes sont telles que peu d'agglomérations peuvent les atteindre à l'heure actuelle. À cela s'ajoutent des difficultés économiques et un manque de personnel qualifié, qui ne permettent généralement pas d'avoir accès, à des coûts supportables, aux techniques d'épuration les plus pointues afin d'atteindre les objectifs fixés.

Le plus souvent, la gestion des petites stations d'épuration s'effectue au moyen de systèmes simples où l'expérience acquise sur le procédé est prépondérante et est largement intégrée. On peut parler, dans ce cas, plus de *conduite* que de *commande* de procédé.

- L'augmentation du débit de recyclage permet de délocaliser temporairement les boues accumulées dans le clarificateur vers le bassin d'aération. Ce type de commande est donc particulièrement intéressant en périodes de pluie, lorsque d'importantes quantités de boues sont stockées dans le clarificateur et menacent de se déverser dans le milieu naturel (Couillard et Zhu, 1992; Çakici et Bayramoğlu, 1995; Rouleau, 1997). Peu d'applications pratiques ont cependant été réalisées à grande échelle et, en pratique, les boues sont généralement recyclées à débit constant (compris entre 100 et 250% du débit moyen incident).
- Le processus d'extraction des boues permet de contrôler l'âge et la concentration des boues dans le système. Pour les unités de très petites tailles, des prélèvements hebdomadaires (ou bimensuels) sont effectués dans la plupart des cas, ce qui nécessite l'intervention d'un agent extérieur. Sur certaines unités de tailles plus importantes, l'extraction est plus régulière et les boues sont soit stockées temporairement dans une fosse, soit envoyées, le cas échéant, vers la filière *boues* et traitées directement sur site. En pratique, la fréquence et la quantité des prélèvements sont généralement basés sur des règles empiriques afin de maintenir une concentration en boues dans le bassin d'aération de l'ordre de $3 \text{ à } 5 \text{ g.L}^{-1}$ et un âge de boues compris entre 10 et 20 jours (Boutin et al., 1998).
- Le séquençage de l'aération est particulièrement important dans la mesure où il conditionne directement l'élimination des composés organiques et azotés. Pour une grande partie des stations d'épuration, les stratégies d'aération appliquées sont identiques d'un jour à l'autre. Si ce mode de gestion reste envisageable lorsque les variations de débit et de charge sont faibles (cas des réseaux séparatifs notamment), il apparaît en revanche clairement inadapté pour faire face aux fortes perturbations incidentes (cas des réseaux unitaires).

L'utilisation de méthodes d'asservissement de l'aérateur à la concentration en oxy-

¹On peut noter qu'il existe toutefois certaines géométries de bassin qui permettent de l'envisager, e.g. Trizone® de Degrémont, etc.

²loi n° 92-3 du 3 janvier 1992 sur l'eau et décrets d'application.

INTRODUCTION GENERALE

gène dissous, et mieux au potentiel redox, est à l'étude depuis une dizaine d'années et a débouché sur de nombreuses applications pratiques (Hédouit et al., 1990; Lefèvre et al., 1993; Wouters-Wasiak, 1994; Plisson-Sauné et al., 1996). La détection des instants de fin de nitrification et dénitrification par la mesure *en ligne* des concentrations en ammoniaque et en nitrate respectivement, ou encore par l'utilisation de respiromètres (Klapwijk et al., 1998), a également été proposée.

Malgré l'amélioration des dispositifs de commande, pour le contrôle des cycles d'aération en particulier, le dépassement des normes réglementaires de rejet reste fréquent, en période de pluie bien sûr, mais également par temps sec, et les coûts de fonctionnement sont élevés. Étant donné que le fonctionnement du système d'aération constitue 60 à 80% de la consommation énergétique des petites stations d'épuration (Vasel, 1988), une bonne maîtrise du coût et de la qualité du traitement passe nécessairement par une gestion plus adaptée de l'aération du réacteur biologique.

Commande du procédé de traitement à boues activées

Le traitement biologique de l'azote des eaux résiduaires urbaines met en jeu des processus de dégradation variés, et augmente notablement la complexité du procédé à boues activées. Pour les petites unités de traitement en particulier, l'interaction entre les processus d'oxydation des matières organiques, de nitrification et de dénitrification est permanente. Une conséquence importante de cette complexité est de rendre le procédé beaucoup plus sensible et vulnérable vis-à-vis des variations de débit, de concentration et de composition de l'influent, des changements de température, *etc.* Il a pu être constaté que les stations d'épuration, même bien instrumentées, ne peuvent satisfaire aux normes de rejet durant 8 à 9% du temps, sans compter les dysfonctionnements dont la durée reste inférieure à une journée (Steyer et Amouroux, 1995). La mise en œuvre de stratégies de commande performantes est donc impérative pour faire face aux perturbations, et améliorer la fiabilité et les performances du traitement.

Peu d'unités de traitement sont malgré tout équipées de moyens de contrôle automatiques, et lorsque c'est le cas, les technologies utilisées restent peu évoluées. Ce constat est d'ailleurs d'autant plus sévère que les stations d'épuration sont de petites tailles. Le procédé est ainsi fréquemment commandé manuellement, par des horloges ou par de simples contrôleurs proportionnels (Lindberg, 1997), et ce malgré les développements techniques et scientifiques récents dans les domaines de la modélisation et de l'instrumentation des stations d'épuration :

Modélisation des stations d'épuration – De nombreuses études portant sur la modélisation des mécanismes de dégradation biologiques dans les stations d'épuration ont été réalisées au cours des deux dernières décennies. Elles culminent dans la publication par l'IAWQ¹ des modèles ASM 1, ASM 2, et plus récemment ASM 3 (Henze et al., 1987; Gujer et al., 1995, 1999). L'utilisation largement répandue de ces modèles dans de multiples domaines d'application a permis de prouver leurs capacités de prédition.

La modélisation des processus de décantation/clarification a également fait l'ob-

¹International Association on Water Quality

2. Objectifs de l'étude

jet de nombreux travaux (Takács et al., 1991; Jeppsson, 1996; Ekama et al., 1997). L'application de ces modèles, en combinaison avec les modèles de dégradation biologiques, permet de décrire de façon détaillée le comportement dynamique des filières de traitement (Diehl et Jeppsson, 1998).

Instrumentation des stations d'épuration – Le manque de capteurs *en ligne* constituait, jusqu'à récemment, un des principaux obstacles à la commande en temps réel des unités de traitement (Van Impe et al., 1992). En plus des sondes à oxygène dissous et redox, de nouveaux capteurs sont aujourd'hui disponibles pour la mesure des concentrations en ammoniaque, nitrate et phosphate (Wacheux et al., 1993; Vanrolleghem, 1994; Wacheux et al., 1996; Lynggaard-Jensen et al., 1996). Ces capteurs qui ne nécessitent plus de prise d'échantillons ni de filtrations, sont robustes et ont des temps de réponse faibles, typiquement de l'ordre de 5 à 10 minutes. Le développement de capteurs respirométriques, permettant de mesurer l'activité biologique, ouvre également de larges perspectives (Spanjers et al., 1996, 1998). Enfin, les méthodes d'observation *en ligne* permettent d'estimer certaines grandeurs non mesurables (*e.g.* la concentration en biomasse) à partir de mesures plus facilement accessibles. Ces algorithmes, basés sur l'utilisation de modèles mathématiques et souvent désignés par le terme *capteur logiciel*, peuvent pallier le manque de capteurs disponibles dans certaines circonstances et sont donc particulièrement utiles pour la supervision et la commande des stations d'épuration.

Parallèlement, l'amélioration permanente des moyens de calcul, permet d'envisager l'application d'algorithmes de commande et d'optimisation performants à des modèles de complexité sans cesse croissante (*e.g.* commande adaptative, commande non-linéaire, commande prédictive, commande optimale, *etc.*). Ces développements rendent désormais possible l'utilisation de l'instrumentation, de la commande et de l'automatisation (ICA) de façon systématique pour la gestion des stations d'épuration.

2 Objectifs de l'étude

L'étude de la situation actuelle des stations d'épuration de petites tailles a montré que ces dernières font actuellement face à des difficultés tant techniques qu'économiques. Avec l'entrée en vigueur prochaine des nouvelles normes de rejet fixées par l'Union Européenne, une hausse des coûts d'exploitation à la charge des collectivités, ainsi que des pénalités financières en cas de dysfonctionnements, est inévitable. Cette situation est donc susceptible de se compliquer davantage.

L'objectif de ce travail est de proposer une méthodologie d'optimisation des petites unités de traitement à boues activées. L'approche développée comporte deux aspects distincts, (*i*) l'étude de l'optimisation dynamique et, (*ii*) la mise en œuvre de la commande optimale du procédé.

Optimisation dynamique du procédé

Les méthodes d'optimisation dynamique permettent de déterminer le profil de commande qui optimise un critère donné sous des contraintes spécifiées. Le *Principe du Maximum*

INTRODUCTION GENERALE

et le *Principe de Bellman* sont les deux principales théories connues dans le domaine. Proposées il y a plus de quarante ans, elles ont été appliquées avec succès à l'optimisation du fonctionnement dynamique de nombreux procédés chimiques, pétrochimiques, électrochimiques et biochimiques (*e.g.* Asrar et Moharir, 1991; Lee et Ramirez, 1994; Latifi et al., 1998; Fournier et al., 1999; Fikar et al., 1999, 2000; Chekhova et al., 2000; Edwin et Balchen, 2001; Ross et al., 2001). Le récent essor des techniques de calcul permet de les appliquer à des systèmes de complexité sans cesse croissante. Paradoxalement, ces méthodes n'ont que très peu été appliquées à des problèmes mettant en jeu des procédés de traitement des eaux usées (Ryckaert, 1998; Lukasse, 1999).

L'application de ces méthodes est ici envisagée afin de déterminer les profils optimaux d'aération des petites stations d'épuration à boues activées. Les problèmes étudiés sont de deux types :

- Le problème de la *minimisation des rejets* s'inscrit dans le cadre général de l'amélioration de la qualité des rejets des stations d'épuration. La prise de conscience de l'impact des rejets sur le milieu récepteur s'est soldé par un renforcement des normes réglementaires. Tout laisse d'ailleurs à penser que cette tendance sera amenée à se poursuivre dans les années à venir.
- Le problème de la *minimisation des coûts de fonctionnement* du procédé est également étudié pour répondre aux attentes des petites collectivités qui sont confrontées à un manque de moyens financiers et techniques évident. L'objectif de qualité du traitement est alors pris en compte indirectement par le biais de contraintes réglementaires de rejet.

Dans les deux cas, il s'agit d'évaluer le gain potentiel qui peut être obtenu par rapport aux modes de gestion habituels du procédé, *i.e.* d'étudier la faisabilité de la méthode.

Commande optimale du procédé

L'implémentation directe des profils optimaux d'aération calculés en *boucle ouverte* présente de nombreux inconvénients. Les larges variations des flux polluants incidents, les incertitudes des modèles mathématiques utilisés et les bruits de mesure peuvent en effet induire de fortes variations des conditions optimales de fonctionnement du procédé. Ces aspects nécessitent la mise en œuvre de schémas de commande en *boucle fermée*.

Plusieurs études récentes ont été réalisées sur ces aspects (Zhao et al., 1995; Isaacs, 1995; Lukasse et al., 1997, 1998; Nejjari et al., 1997, 1998; Weijers, 2000). Le plus souvent, le problème correspond à un problème d'optimisation quadratique qui est intégré dans un schéma de commande prédictive linéaire ou non-linéaire pour la poursuite d'une consigne ou d'un profil de référence préalablement définis. L'approche adoptée dans cette étude est différente. Les politiques optimales d'aération sont actualisées *en ligne* par la résolution d'un problème d'optimisation dynamique. Ceci rend nécessaire l'utilisation d'un modèle de fonctionnement réduit du procédé et l'application d'algorithmes d'observation (adaptatifs) afin d'estimer les variables d'état non mesurées et les paramètres du système.

3 Plan de l'étude

Ce mémoire s'articule autour de deux parties principales.

L'étude des conditions optimales de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées fait l'objet de la première partie. Les modèles mathématiques utilisés et les problèmes d'optimisation étudiés sont définis dans le premier chapitre. Une description des méthodes d'optimisation dynamique permettant de résoudre les problèmes hybrides et mixtes résultant est ensuite donnée dans le second chapitre ; l'application des méthodes d'optimisation directes est plus particulièrement détaillée. L'étude d'une unité de traitement existante est envisagée dans le troisième chapitre. Les conditions optimales de fonctionnement de cette unité à court et long termes sont successivement présentées et discutées pour les différents problèmes d'optimisation. Ces résultats doivent permettre de mettre en évidence les améliorations potentielles qui peuvent être apportées par l'application des méthodes d'optimisation dynamiques.

Les aspects relatifs à la mise en œuvre de la commande optimale du procédé sont traités dans la seconde partie du manuscrit. Les modèles complexes utilisés au cours de la première partie sont inadaptés pour une utilisation *en ligne*. Aussi, l'élaboration d'un modèle réduit est étudiée dans le quatrième chapitre. L'analyse des propriétés d'observabilité et d'identifiabilités structurelle et pratique de ce modèle vis-à-vis des grandeurs susceptibles d'être mesurées *en ligne* est effectuée dans ce même chapitre. Afin de tenir compte de l'imperfection du modèle réduit et des incertitudes relatives aux perturbations incidentes, le cinquième chapitre présente l'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement. Cette analyse est indispensable pour replacer les résultats obtenus dans un contexte de fonctionnement pratique du procédé. Ils permettent de détecter les variables d'état et les paramètres les plus influents du modèle et orientent donc l'application des méthodes d'observation et d'estimation du procédé. Ces méthodes sont présentées dans le dernier chapitre. Leur intégration dans un schéma de commande prédictive est envisagée, en vue d'une validation expérimentale. Enfin, les conclusions et perspectives de cette étude sont présentées.

Première partie

Optimisation dynamique du procédé

CHAPITRE 1

Formulation du problème d'optimisation

Ce qu'il y a d'imcompréhensible, c'est que le monde soit compréhensible

Conceptions scientifiques
ALBERT EINSTEIN

Pour les petites collectivités, le manque de moyens techniques et économiques est manifeste. Avec l'entrée en vigueur prochaine de la nouvelle réglementation (fin 2005), un renforcement des performances des petites stations d'épuration à boues activées qui les équipent est impératif, tant en terme de fiabilité et de qualité de traitement qu'en ce qui concerne le coût de fonctionnement du procédé.

La configuration de ces petites unités de traitement a déjà été précisée (Fig. 1.1). Dans la plupart des cas, le traitement des matières organiques et de l'azote s'effectue au sein d'un bioréacteur unique aéré par intermittence ; la biomasse présente dans le système est ensuite séparée de l'effluent épuré dans un clarificateur et recyclée en grande partie vers le bioréacteur, alors que seule une faible quantité de boues est extraite du système. Trois types de variables sont susceptibles d'être manipulées sur ce type d'unités : le séquençage de l'aération et les débits de recyclage et d'extraction des boues. Dans certains cas, un ajout de carbone facilement biodégradable (*e.g.* méthanol) est également possible durant les périodes d'anoxie pour favoriser la nitrification ; aucun ajout de ce type n'est cependant pris en compte dans cette étude.

- Les débits de recyclage et d'extraction ont une forte influence sur la répartition, la concentration ou encore l'âge des boues présentes dans le système. Le contrôle de ces débits s'inscrit donc essentiellement dans une logique de gestion à long terme du procédé, et n'a que peu de répercussions à court terme sur la qualité de l'effluent épuré.
- En revanche, le séquençage des périodes d'aération du réacteur permet d'assurer la dégradation des différentes formes azotées apportées par l'effluent ou produites par les réactions de dégradation, et conditionne ainsi directement la qualité de l'effluent épuré. D'autre part, la gestion des cycles d'aération constitue un enjeu économique

important puisque c'est le coût relatif au fonctionnement de l'aérateur qui représente l'essentiel du coût énergétique du traitement.

Les résultats de cette rapide analyse des différents points de contrôle du procédé indique clairement que l'amélioration de la qualité et du coût du traitement passe nécessairement par une gestion plus adaptée de l'aération du bioréacteur.

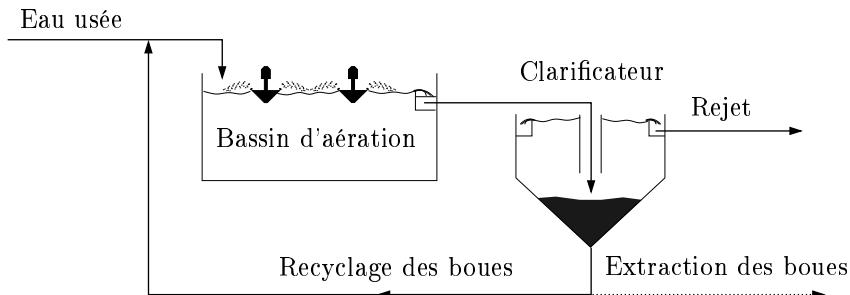


FIG. 1.1 – Procédé de traitement à boues activées en bassin unique.

Les nombreuses études entreprises depuis le début des années 1970 pour modéliser le procédé de traitement à boues activées se sont soldées par l'élaboration de modèles dynamiques pertinents. Avec le développement rapide des moyens de calcul, l'utilisation de ces modèles mathématiques prend aujourd'hui tout son intérêt pour améliorer la conception et la gestion des filières de traitement.

L'objectif de la première partie de ce document est d'évaluer le bénéfice qui peut être réalisé en optimisant les stratégies d'aération des petites stations d'épuration à boues activées, par rapport aux modes de gestion actuels du procédé (horloges ou asservissements) ; en d'autres termes, il s'agit d'établir la faisabilité de la méthode. Pour cela, l'application des méthodes d'optimisation dynamique est envisagée. Ces méthodes permettent de calculer les stratégies de commande (*e.g.* les cycles d'aération) qui optimisent un critère donné (*e.g.* rejets d'azote total, consommation énergétique, fiabilité du procédé, *etc...*) sous des contraintes spécifiées (*e.g.* contraintes opératoires, normes de rejet, *etc...*). La formulation générale du problème d'optimisation fait l'objet de ce premier chapitre. Les modèles utilisés pour déterminer les conditions optimales de fonctionnement sont présentés dans la partie 1.1. Les différents problèmes d'optimisation étudiés sont ensuite détaillés dans la partie 1.2.

1.1 Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

Les petites unités de traitement à boues activées sont constituées de deux entités principales (Fig. 1.1, p. 14) : d'une part, le réacteur au sein duquel la pollution incidente est dégradée et qui est régi par des mécanismes essentiellement biologiques ; d'autre part, le clarificateur dont la fonction est de séparer l'effluent traité de la biomasse et des autres composés particulaires, et pour lequel les mécanismes qui entrent en jeu sont essentiellement physiques.

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

Cette partie est consacrée à la modélisation du procédé de traitement à boues activées en bassin unique avec aération de surface. Les aspects relatifs à la modélisation du réacteur biologique et du clarificateur sont successivement présentés dans les paragraphes 1.1.1 et 1.1.2. Le modèle global résultant du couplage entre ces deux sous-modèles est décrit dans la partie 1.1.3. Pour terminer, un modèle de fonctionnement basé sur une description simplifiée des mécanismes de décantation/clarification est présenté dans la partie 1.1.4.

Dans un souci de clarté et dans la mesure du possible, les mêmes notations seront utilisées pour les différents modèles. En particulier :

- x désigne l'état du système,
- Q est relatif aux différents débits,
- les exposants (ou indices selon le cas) ba , in , rec , purg et dec sont utilisés pour désigner les grandeurs respectivement associées au bassin d'aération, à l'influent, au recyclage des boues, à l'extraction des boues et au clarificateur.

1.1.1 Modélisation du réacteur biologique

En 1983, l'association internationale IAWQ¹ a formé un groupe de travail afin d'encourager le développement et faciliter l'application des modèles mathématiques pour la conception et la gestion des stations d'épuration. L'un des principaux objectifs de ce groupe de travail consistait à élaborer un modèle qui soit à la fois simple et apte à reproduire de façon réaliste les processus de dégradation biologiques dans les bassins à boues activées. Ces travaux se sont soldés par la publication du modèle ASM 1 (Henze et al., 1987). Depuis, de nombreuses applications de ce modèle ont permis d'éprouver ses capacités de prédiction dans une large gamme de conditions opératoires (Jeppsson, 1996).

Le modèle ASM 1 décrit les mécanismes biologiques de dégradation des matières organiques, de nitrification et de dénitrification. Dans cette étude, deux simplifications classiques sont apportées au modèle original (*e.g.* Julien, 1997; Lindberg, 1998) :

- l'alcalinité S_{ALK} est omise puisqu'elle n'intervient pas dans les dynamiques des autres variables du modèle ;
- les composés particulaires inertes X_I et ceux résultant du décès de la biomasse X_P ne sont pas distingués.

Le modèle ASM 1 ainsi simplifié comprend 11 variables d'état (Tab. 1.1). Les *matières organiques* sont fractionnées en 6 composés différents : le substrat organique biodégradable (particulaire X_S et soluble S_S), le substrat organique inerte (particulaire X_I et soluble S_I) et la biomasse (hétérotrophe $X_{B,H}$ et autotrophe $X_{B,A}$). D'autre part, les *composés azotés* sont distingués en fonction de leur degré d'oxydation et répartis en 3 catégories : les formes organiques (solubles S_{ND} et particulières X_{ND}), les formes ammoniacales (S_{NH}) et les formes oxydées (S_{NO} , sans distinction des nitrates et des nitrites). Une variable d'état complémentaire représente la concentration en oxygène dissous dans le bassin d'aération (S_O). On peut remarquer par ailleurs que certaines variables d'état correspondent à des espèces chimiques existantes (*e.g.* S_{NH} , S_{NO} , S_O), alors que d'autres sont au contraire plus conceptuelles et ne peuvent pas être directement mesurées (*e.g.* $X_{B,H}$, $X_{B,A}$).

¹International Association on Water Quality, aujourd'hui International Water Association (IWA)

TAB. 1.1 – Variables d'état du modèle de dégradation biologique.

↓ Composé	Symbole	Unité
1. Matière organique soluble inerte	S_I	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
2. Substrat facilement biodégradable	S_S	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
3. Matière organique particulaire inerte	X_I	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
4. Substrat lentement biodégradable	X_S	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
5. Biomasse active hétérotrophe	$X_{B,H}$	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
6. Biomasse active autotrophe	$X_{B,A}$	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$
7. Azote sous forme de nitrates et de nitrites	S_{NO}	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$
8. Azote sous forme d'ammoniaque	S_{NH}	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$
9. Azote organique soluble biodégradable	S_{ND}	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$
10. Azote organique particulaire biodégradable	X_{ND}	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$
11. Oxygène dissous	S_O	$\text{g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$

Les variables d'état du modèle ASM 1 sont liées par 8 processus de dégradation. Ces interactions sont illustrées sur la Fig. 1.2, et une rapide description des processus de dégradation est donnée ci-après.

Croissance aérobie des micro-organismes hétérotrophes – Une fraction du substrat dégradé par les micro-organismes hétérotrophes est utilisée pour assurer le développement de la colonie bactérienne (phase d'anabolisme). Ce processus contribue généralement de façon prépondérante à la production de biomasse et à l'élimination du substrat. Il est ainsi naturellement limité par l'épuisement du substrat S_S , mais également par le manque d'oxygène dissous et d'ammoniaque¹.

Croissance anoxie des micro-organismes hétérotrophes – En l'absence d'oxygène, une partie des organismes hétérotrophes est en mesure d'utiliser les nitrates comme accepteurs terminaux d'électrons avec S_S comme substrat. Ce processus conduit à la production de biomasse hétérotrophe et d'azote gazeux par réduction des nitrates (dénitrification).

Croissance aérobie des micro-organismes autotropes – L'oxydation de l'ammoniaque en nitrates (nitrification) donne lieu à la production de biomasse autotrophe (en faible quantité cependant en raison du faible taux de conversion) et à la consommation d'oxygène dissous. Comme pour la croissance des hétérotrophes, de l'ammoniaque est utilisé au cours de la synthèse bactérienne pour fournir l'azote nécessaire, et est incorporé dans la masse cellulaire.

Mortalité des micro-organismes hétérotrophes et autotropes – La mortalité des organismes hétérotrophes et autotropes se produit de façon continue, indépendamment des conditions d'aération du milieu (conditions d'aérobiose, d'anoxie ou

¹Une extension du modèle ASM 1 est ici réalisée pour tenir compte de l'effet limitant de la concentration en azote ammoniacal dans le milieu sur la croissance aérobie des micro-organismes hétérotrophes. De l'azote ammoniacal est en effet intégré dans les nouveaux tissus lors de la synthèse bactérienne, en quantité suffisante pour provoquer une inhibition en cas de manque. Cette limitation est prise en compte par l'ajout du terme de commutation $\frac{S_{NH}}{K_{NH,H} + S_{NH}}$ dans les cinétiques ρ_1 et ρ_2 de croissance des micro-organismes hétérotrophes (Tab. 1.2)

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

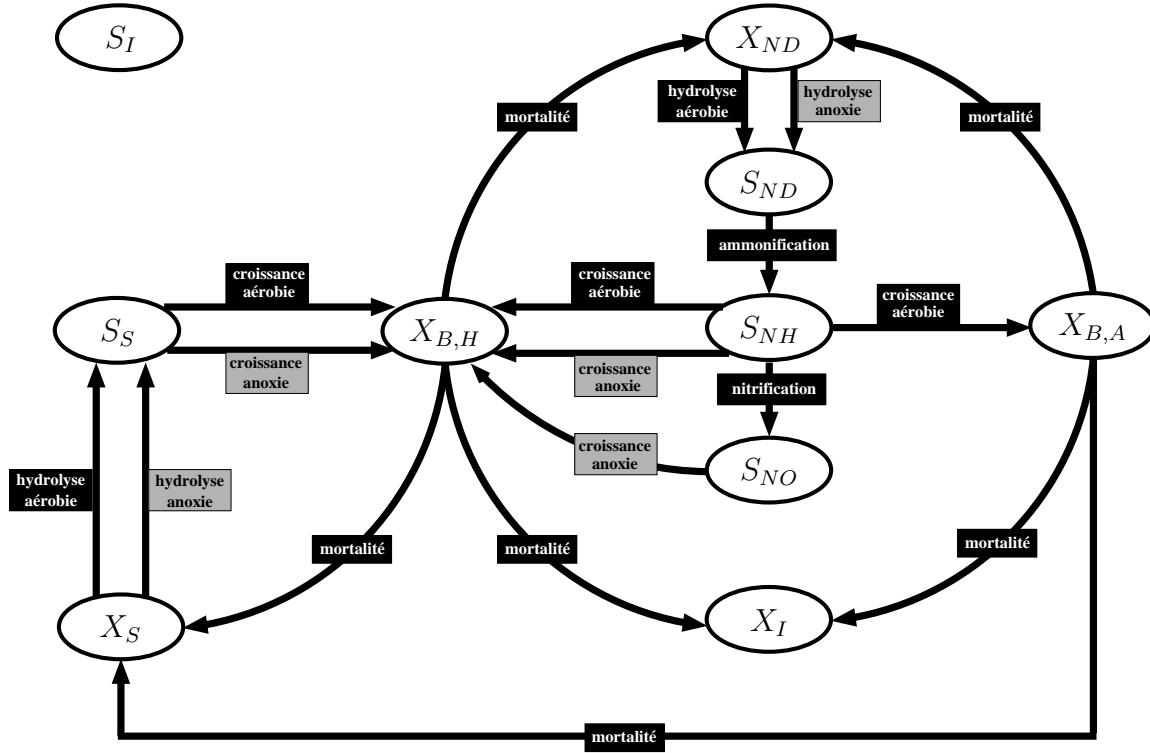


FIG. 1.2 – Intéractions entre les variables d'état du modèle ASM 1.

d'anaérobiose). Les cellules mortes sont transformées en DCO particulaire non biodégradable X_I et en substrat lentement biodégradable X_S . De façon similaire, la fraction d'azote organique contenue dans la masse cellulaire est restituée au milieu suite au décès de la biomasse et vient s'ajouter à la quantité déjà présente d'azote organique particulaire X_{ND} .

Ammonification de l'azote organique soluble – L'oxydation de l'azote organique soluble S_{ND} en azote ammoniacal est représentée par une cinétique d'ordre 1 par rapport à la biomasse hétérotrophe $X_{B,H}$, et ne dépend pas des conditions d'aération du milieu.

Hydrolyse de la matière organique – La modélisation du processus d'hydrolyse est basée sur des cinétiques de surface ; ce processus est effectif en conditions d'aérobiose comme en anoxie (un coefficient $\eta_{NO,h}$ est toutefois introduit pour rendre compte de la baisse du taux d'hydrolyse sous des conditions d'anoxie). Le modèle cinétique est d'ordre 1 par rapport à $X_{B,H}$ pour les faibles quantités de substrat absorbées, et sature lorsque cette quantité devient grande devant la concentration en biomasse présente dans le réacteur (ordre 0).

Hydrolyse de l'azote organique – Le taux de solubilisation de l'azote organique particulier est proportionnel au taux de solubilisation de la matière organique particulière, dans le rapport des quantités de biomasse susceptibles de dégrader ces composés.

Les expressions des cinétiques ρ_j , $j = 1 \dots 8$, des processus de dégradation figurent

Chapitre 1. Formulation du problème d'optimisation

dans le Tab. 1.2. On notera la présence du terme de commutation $\frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,H}+S_{NH}^{ba}}$ dans le processus de croissance aérobie des hétérotrophes, conformément aux modifications envisagées.

TAB. 1.2 – Cinétiques du modèle de dégradation.

↓ Processus	Cinétique, ρ_j (g.m ⁻³ .s ⁻¹)
1. Croissance aérobie des hétérotrophes	$\mu_H \frac{S_S^{ba}}{K_S+S_S^{ba}} \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,H}+S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} X_{B,H}^{ba}$
2. Croissance anoxie des hétérotrophes	$\mu_H \frac{S_S^{ba}}{K_S+S_S^{ba}} \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,H}+S_{NH}^{ba}} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO}+S_{NO}^{ba}} \eta_{NOg} X_{B,H}^{ba}$
3. Croissance aérobie des autotrophes	$\mu_A \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,A}+S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,A}+S_O^{ba}} X_{B,A}^{ba}$
4. Mortalité des hétérotrophes	$b_H X_{B,H}^{ba}$
5. Mortalité des autotrophes	$b_A X_{B,A}^{ba}$
6. Ammonification de l'azote organique soluble	$\kappa_a S_{ND}^{ba} X_{B,H}^{ba}$
7. Hydrolyse de la matière organique absorbée	$\kappa_h \frac{X_S^{ba}/X_{B,H}^{ba}}{K_X+X_S^{ba}/X_{B,H}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} + \eta_{NO,h} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO}+S_{NO}^{ba}} \right) X_{B,H}^{ba}$
8. Hydrolyse de l'azote organique absorbé	$\kappa_h \frac{X_{ND}^{ba}/X_{B,H}^{ba}}{K_X+X_{ND}^{ba}/X_{B,H}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} + \eta_{NO,h} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H}+S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO}+S_{NO}^{ba}} \right) X_{B,H}^{ba}$

Les coefficients stœchiométriques $\nu_{i,j}$, qui lient les différentes variables d'état du modèle, sont consignés dans le Tab. 1.3. Les lignes du tableau correspondent aux processus de dégradation et les colonnes aux variables d'état du modèle.

TAB. 1.3 – Stœchiométrie des réactions du modèle de dégradation.

Var. i	1.	2.	3.	4.	5.	6.	7.	8.	9.	10.	11.
→	S_I^{ba}	S_S^{ba}	X_I^{ba}	X_S^{ba}	$X_{B,H}^{ba}$	$X_{B,A}^{ba}$	S_{NO}^{ba}	S_{NH}^{ba}	S_{ND}^{ba}	X_{ND}^{ba}	S_O^{ba}
$j \downarrow$ Proc.	Coefficients stœchiométriques, $\nu_{i,j}$										
1.		$-\frac{1}{Y_H}$			1			$-i_{NBM}$			$-\frac{1-Y_H}{Y_H}$
2.		$-\frac{1}{Y_H}$			1		$-\frac{1-Y_H}{2.86 Y_H}$	$-i_{NBM}$			
3.						1	$\frac{1}{Y_A}$	$-\frac{1}{Y_A} -$ i_{NBM}			$\frac{-4.57 Y_A}{Y_A}$
4.		f_{RXI}	$1 - f_{RXI}$		-1				$i_{NBM} -$ $f_{RXI} i_{NXI}$		
5.		f_{RXI}	$1 - f_{RXI}$			-1			$i_{NBM} -$ $f_{RXI} i_{NXI}$		
6.								1	-1		
7.		1			-1				1	-1	
8.											

À partir de l'expression des cinétiques et des coefficients stœchiométriques, le taux de conversion \mathcal{R}_i de chaque composé est donné par la relation :

$$\mathcal{R}_i = \sum_{j=1}^8 \nu_{i,j} \rho_j, \quad i = 1 \dots 11 \quad (1.1)$$

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

où ρ_j désigne la cinétique du $j^{\text{ème}}$ processus et $\nu_{i,j}$, la stoechiométrie du $i^{\text{ème}}$ composé pour le processus j .

Le modèle cinétique résultant comporte 20 paramètres cinétiques et stoechiométriques, qui sont détaillés dans le Tab. 1.4. Les valeurs par défaut définies par Henze et al. (1987) et dans le *benchmark*¹ y sont reportées et des gammes de variations sont également données pour certains paramètres.

Le modèle du réacteur biologique est obtenu en effectuant de simples bilans de matière pour chaque composant. Les équations de bilan sont les suivantes :

$$\frac{dx_i^{ba}}{dt} = \frac{Q_{rec}}{\mathcal{V}^r} \cdot x_i^{rec} + \frac{Q_{in}}{\mathcal{V}^r} \cdot x_i^{in} - \frac{Q_{in} + Q_{rec}}{\mathcal{V}^r} \cdot x_i^{ba} + \mathcal{R}_i \quad (1.2)$$

où \mathcal{V}^r désigne le volume réactionnel et x_i^{ba} , x_i^{rec} et x_i^{in} , la concentration du composé i dans le bassin d'aération, dans le recyclage et dans l'influent respectivement, *e.g.* :

$$\mathbf{x}^{ba} = [S_I^{ba}, S_S^{ba}, X_I^{ba}, X_S^{ba}, X_{B,H}^{ba}, X_{B,A}^{ba}, S_{NO}^{ba}, S_{NH}^{ba}, S_{ND}^{ba}, X_{ND}^{ba}, S_O^{ba}]^T$$

La simplification qui consiste à identifier le volume réactionnel \mathcal{V}^r au volume total du réacteur biologique V^{ba} se justifie lorsque le régime hydraulique du bassin s'apparente à celui d'un réacteur parfaitement agité (RPA). Lors des séquences d'arrêt de l'aérateur, les flocs présents dans le réacteur décantent lentement, ce qui modifie alors la répartition de la biomasse et peut engendrer une modification du volume réactionnel. Toutefois, les travaux de Vaxelaire (1994) ont permis d'établir que cet effet reste limité dès lors que les périodes d'arrêt n'excèdent pas 2 heures (avec des temps de séjour de l'ordre d'une dizaine), ce qui est généralement le cas pour les petites unités fonctionnant en alternance. Ces résultats justifient donc l'hypothèse du RPA en période d'aération, comme en période d'arrêt de l'aérateur.

Le bilan relatif à la concentration en oxygène dissous compte un terme supplémentaire \mathcal{A}_O relatif à l'apport d'oxygène par les turbines :

$$\frac{dS_O^{ba}}{dt} = \frac{Q_{rec}}{\mathcal{V}^r} \cdot S_O^{rec} + \frac{Q_{in}}{\mathcal{V}^r} \cdot S_O^{in} - \frac{Q_{in} + Q_{rec}}{\mathcal{V}^r} \cdot S_O^{ba} + \mathcal{R}_O + \mathcal{A}_O \quad (1.3)$$

Sous sa forme générale, le terme d'apport d'oxygène s'écrit :

$$\mathcal{A}_O = k_{La} (\mathbf{x}^{ba}) \cdot (S_O^{sat} - S_O^{ba}) \quad (1.4)$$

où k_{La} représente le coefficient de transfert d'oxygène dissous dans le milieu et S_O^{sat} , la concentration en oxygène dissous à saturation. Le paramètre k_{La} dépend de l'état du milieu et en particulier de la concentration et de la respiration des boues dans le réacteur. L'influence de ces deux facteurs n'est cependant pas clairement établie et il n'est pas rare de trouver des résultats contradictoires dans la littérature (*e.g.* Vasel, 1988; Vaxelaire, 1994). Pour des raisons de simplicité, le paramètre k_{La} est ici supposé constant.

De façon générale, le modèle relatif au réacteur biologique s'exprime sous la forme d'un système différentiel affine en la commande :

$$\frac{d\mathbf{x}^{ba}}{dt} = \mathbf{f}_{ba} (\mathbf{x}^{ba}, \mathbf{x}^{rec}, \mathbf{x}^{in}) + u^{aer} \mathbf{g} (\mathbf{x}^{ba}) \quad (1.5)$$

¹Le *benchmark* est proposé dans le cadre de l'action européenne COST 624 ; pour plus d'information sur le benchmark, voir Alex et al. (1999) ou consulter le site web <http://www.ensic.u-nancy.fr/COSTWWTP/>.

TAB. 1.4 – Paramètres stœchiométriques et cinétiques du modèle de dégradation.

↓ Paramètre	Symbole	Unité	Valeurs par défaut		Valeurs du <i>benchmark</i>	Gamme de variation
			20°C	10°C		
<i>Paramètres stœchiométriques</i>						
Rendement de conversion des hétérotrophes	Y_H	$\text{g DCO} \cdot (\text{g DCO})^{-1}$	0.67	0.67	0.67	0.38 – 0.75
Rendement de conversion des autotrophes	Y_A	$\text{g DCO} \cdot (\text{g N})^{-1}$	0.24	0.24	0.24	0.07 – 0.28
Fraction de DCO inerte issue du décès de la biomasse	fr_{XI}	–	0.08	0.08	0.08	–
Proportion d'azote dans la biomasse	i_{NBM}	$\text{g N} \cdot (\text{g DCO})^{-1}$	0.086	0.086	0.08	–
Proportion d'azote dans les produits de la biomasse	i_{NXI}	$\text{g N} \cdot (\text{g DCO})^{-1}$	0.06	0.06	0.06	–
<i>Paramètres cinétiques</i>						
Taux de croissance spécifique maximal des hétérotrophes	μ_H	j^{-1}	6.0	3.0	4.0	0.60 – 13.2
Taux de mortalité des hétérotrophes	b_H	j^{-1}	0.62	0.20	0.30	0.05 – 1.6
Constante d'affinité en substrat des hétérotrophes	K_S	$\text{g DCO} \cdot \text{m}^{-3}$	20	20	10	5 – 225
Constante d'affinité en ammoniaque des hétérotrophes	$K_{NH,H}$	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$	0.05 (Julien, 1997)		–	
Constante d'affinité en oxygène des hétérotrophes	$K_{O,H}$	$\text{g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$	0.20	0.20	0.20	0.01 – 0.20
Constante d'affinité en nitrates des hétérotrophes dénitritifiants	K_{NO}	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$	0.50	0.50	0.50	0.10 – 0.50
Taux de croissance spécifique maximal des autotrophes	μ_A	j^{-1}	0.80	0.30	0.50	0.20 – 1.0
Taux de mortalité des autotrophes	b_A	j^{-1}	0.20	0.10	0.05	0.05 – 0.3
Constante d'affinité en ammoniaque des autotrophes	$K_{NH,A}$	$\text{g N} \cdot \text{m}^{-3}$	1.0	1.0	1.0	–
Constante d'affinité en oxygène des autotrophes	$K_{O,A}$	$\text{g O}_2 \cdot \text{m}^{-3}$	0.40	0.40	0.40	0.40 – 2.0
Facteur de correction pour la croissance anoxie des hétérotrophes	$\eta_{NO,g}$	–	0.8	0.8	0.8	0.6 – 1.0
Taux d'ammonification	κ_a	$\text{m}^3 \cdot (\text{g DCO})^{-1} \cdot \text{j}^{-1}$	0.08	0.04	0.05	–
Taux maximal spécifique d'hydrolyse	κ_h	$\text{g DCO} \cdot (\text{g DCO})^{-1} \cdot \text{j}^{-1}$	3.0	1.0	3.0	–
Constante d'affinité en substrat particulaire pour l'hydrolyse	K_X	$\text{g DCO} \cdot (\text{g DCO})^{-1}$	0.03	0.01	0.1	–
Facteur de correction pour l'hydrolyse en phase anoxie	$\eta_{NO,h}$	–	0.4	0.4	0.8	–

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

où u^{aer} désigne la variable de commande relative au système d'aération. Toutefois, comme l'apport d'oxygène est assuré par des aérateurs de surface de type *tout-ou-rien*, u^{aer} ne peut prendre que deux valeurs discrètes, 0 ou 1. Aussi, une façon plus adaptée de représenter le comportement du réacteur biologique consiste à définir deux modèles distincts :

$$\frac{d\mathbf{x}^{ba}}{dt} = \mathbf{f}_{ba}^{(1)}(\mathbf{x}^{ba}, \mathbf{x}^{rec}, \mathbf{x}^{in}) \quad \text{lors du fonctionnement de l'aérateur,} \quad (1.6a)$$

$$\frac{d\mathbf{x}^{ba}}{dt} = \mathbf{f}_{ba}^{(2)}(\mathbf{x}^{ba}, \mathbf{x}^{rec}, \mathbf{x}^{in}) \quad \text{lors des périodes d'arrêt,} \quad (1.6b)$$

où les instants de commutation entre les modes $\mathbf{f}_{ba}^{(1)}$ et $\mathbf{f}_{ba}^{(2)}$ du système correspondent aux instants d'arrêt et de mise en marche de l'aérateur. Le modèle du réacteur biologique s'exprime ainsi sous la forme d'un système *hybride discret/continu* (Barton et Pantelides, 1994). Une description générale de ce type de systèmes est donnée dans le Chapitre 2 (§ 2.2.2, p. 46).

1.1.2 Modélisation du clarificateur

Bien que les processus de dégradation et de séparation aient lieu dans des ouvrages différents, il est difficile de séparer leur dynamiques respectives. Il est de ce fait important d'adopter un modèle qui puisse rendre compte de ces interactions. Tenir compte des aspects liés à la décantation/clarification est d'ailleurs d'autant plus important que cela permet d'intégrer :

- les phénomènes de mélange dans le décanteur (Fig. 1.3) ;
- le processus d'accumulation de boue, voire de surverse du voile de boue, lorsque la station est surchargée (lors des épisodes pluvieux notamment).

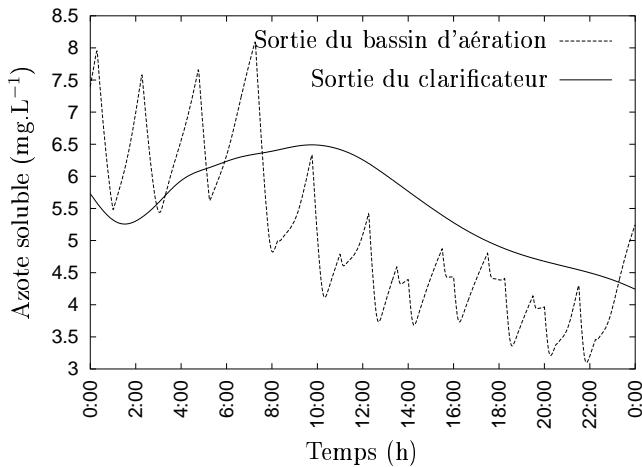


FIG. 1.3 – Illustration de l'effet du décanteur sur la concentration en azote soluble.

La grande majorité des modèles proposés dans la littérature reposent sur une représentation mono-dimensionnelle des processus de décantation (*e.g.* Laikari, 1989; Takács et al., 1991; Dupont et Henze, 1992; Härtel et Pöpel, 1992; Otterpohl et Freund, 1992; Jeppsson, 1996; Watts et al., 1996; Chancelier et al., 1997a,b). Ce type de modèle consiste à discréteriser le décanteur en couches horizontales homogènes. L'utilisation de modèles à

couches présente cependant certains inconvénients. La pertinence des résultats est en effet conditionnée, dans une large mesure, par le nombre de couches considéré, et il n'est pas garanti que la solution calculée vérifie l'équation de continuité (Diehl et Jeppsson, 1998). Malgré ces inconvénients, le modèle de Takács et al. (1991) est utilisé dans cette étude, dans la mesure où il fournit une description généralement satisfaisante du comportement du clarificateur (Grijspeerdt et al., 1995).

Les hypothèses adoptées pour la formulation du modèle de décantation sont les suivantes :

- (i) le décanteur est cylindrique ;
- (ii) les concentrations sont homogènes dans toute section horizontale ;
- (iii) la vitesse de sédimentation des particules ne dépend que de la concentration des composés particulaires dans la section considérée (théorie de Kynch) ;
- (iv) aucune réaction de dégradation n'a lieu au sein du décanteur ;
- (v) les phénomènes de dispersion des flocs sont négligeables.

Sous ces hypothèses, le flux total Φ de composés particulaires dans une section donnée du décanteur, qui résulte de la superposition du flux de liquide (Φ_l) et du sédimentation (Φ_s), est défini par :

$$\Phi = \Phi_l + \Phi_s \quad (1.7)$$

$$\text{avec : } \Phi_l = \begin{cases} X_t^{dec} u_{l,h} & \text{si } z < z_a \\ X_t^{dec} u_{l,b} & \text{si } z > z_a \end{cases} \quad (1.8)$$

$$\Phi_s = X_t^{dec} u_s (X_t^{dec}) \quad (1.9)$$

où X_t^{dec} désigne la concentration en boues dans la section considérée, $u_{l,h}$ et $u_{l,b}$ les vitesses ascendantes et descendantes du liquide dans le décanteur, u_s la vitesse de sédimentation et z_a la profondeur de l'alimentation du décanteur (axe z orienté vers le bas). Les flux ascendant $u_{l,h}$ et descendant $u_{l,b}$ de liquide dans le décanteur s'écrivent :

$$u_{l,h} = \frac{Q_{in} - Q_{purg}}{S^{dec}} \quad (1.10a)$$

$$u_{l,b} = \frac{Q_{rec} + Q_{purg}}{S^{dec}} \quad (1.10b)$$

où S^{dec} est la surface du décanteur. D'autre part, l'expression de la fonction de vitesse de sédimentation u_s en fonction de la concentration en solides est définie par (Takács et al., 1991) :

$$u_s = \max \left\{ 0; \min \left\{ u'_{s,0}; u_{s,0} \left[e^{-r_h X_t^{dec}(1-f_{ns})} - e^{-r_p X_t^{dec}(1-f_{ns})} \right] \right\} \right\} \quad (1.11)$$

où les paramètres de décantation v_0 , v'_0 , r_h , r_p , f_{ns} et X_t sont définis dans le Tab. 1.5.

Le décanteur est discréteisé en N_{cc} couches horizontales. L'évolution de la concentration des composés particulaires dans une couche intermédiaire i donnée vérifie :

$$\frac{dX_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} \Delta \Phi^i \quad (1.12)$$

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

TAB. 1.5 – Paramètres du modèle de décantation.

Paramètre	Symbole	Unité	Valeur par défaut (Takács et al., 1991)	Valeur du <i>benchmark</i> (Alex et al., 1999)
Vitesse maximale théorique de sédimentation	$u_{s,0}$	m.j^{-1}	712	474
Vitesse maximale effective de sédimentation	$u'_{s,0}$	m.j^{-1}	340	250
Paramètre de sédimentation pour les suspensions fortement concentrées	r_h	$\text{m}^3 \cdot \text{g}^{-1}$	$4.26 \cdot 10^{-4}$	$5.76 \cdot 10^{-4}$
Paramètre de sédimentation pour les suspensions faiblement concentrées	r_p	$\text{m}^3 \cdot \text{g}^{-1}$	$5.0 \cdot 10^{-3}$	$2.86 \cdot 10^{-3}$
Fraction non décantable des solides incidents	f_{ns}	—	$5.0 \cdot 10^{-4}$	$2.28 \cdot 10^{-3}$
Concentration limite des solides en suspension	X_t^{max}	g.m^{-3}	3 000	3 000

où $\Delta\Phi^i$ représente la différence de flux dans la $i^{\text{ème}}$ couche (*flux entrant* – *flux sortant*) et e l'épaisseur de cette couche. Les échanges entre deux couches adjacentes sont basés sur la théorie du flux limitant (Coe et Clevenger, 1916). Selon cette théorie, une accumulation de boues se produit dans une couche donnée lorsque la capacité de transfert de cette couche est inférieure à celle de la couche située immédiatement dessous. Les expressions des flux de sédimentation résultants, ainsi que celles des flux de liquide, sont précisées sur la Fig. 1.4.

Deux extensions classiques sont apportées au modèle de sédimentation (*e.g.* Jeppsson, 1996; Diehl et Jeppsson, 1998; Lindberg, 1998). Ces considérations sont nécessaires pour permettre le couplage du modèle de décantation avec le modèle du réacteur biologique.

- L'évolution dynamique de chaque composé particulaire X_I^{dec} , X_S^{dec} , $X_{B,H}^{dec}$, $X_{B,A}^{dec}$, X_{ND}^{dec} est considérée de manière indépendante. L'équivalence entre les concentrations en *DCO* et en *MES* de ces composés est obtenue *via* l'utilisation de facteurs de conversions (Gujer et al., 1995) :

$$X_t^{dec} = 0.75 (X_I^{dec} + X_S^{dec}) + 0.9 (X_{B,A}^{dec} + X_{B,H}^{dec}) \quad (1.13)$$

On peut remarquer que les composés particulaires azotés X_{ND}^{dec} ne figurent pas dans cette relation, puisqu'ils sont inclus dans les composés particulaires organiques X_S^{dec} . En définissant le vecteur \mathbf{p}_X^{dec} des fractions de X_I^{dec} , X_S^{dec} , $X_{B,H}^{dec}$, $X_{B,A}^{dec}$ et X_{ND}^{dec} dans X_t^{dec} , *e.g.* $X_I^{dec} = p_{X_I}^{dec} X_t^{dec}$, on peut alors considérer l'évolution dynamique de chacun de ces composés. Dans une couche intermédiaire i donnée, le bilan de matière s'écrit :

$$\frac{d\mathbf{p}_X^{dec,i} X_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} [\mathbf{p}_X^{dec,i-1} \Phi^{i-1} - \mathbf{p}_X^{dec,i} \Phi^i] \quad (1.14)$$

- Des considérations similaires sont utilisées pour décrire la fraction soluble de l'ef-

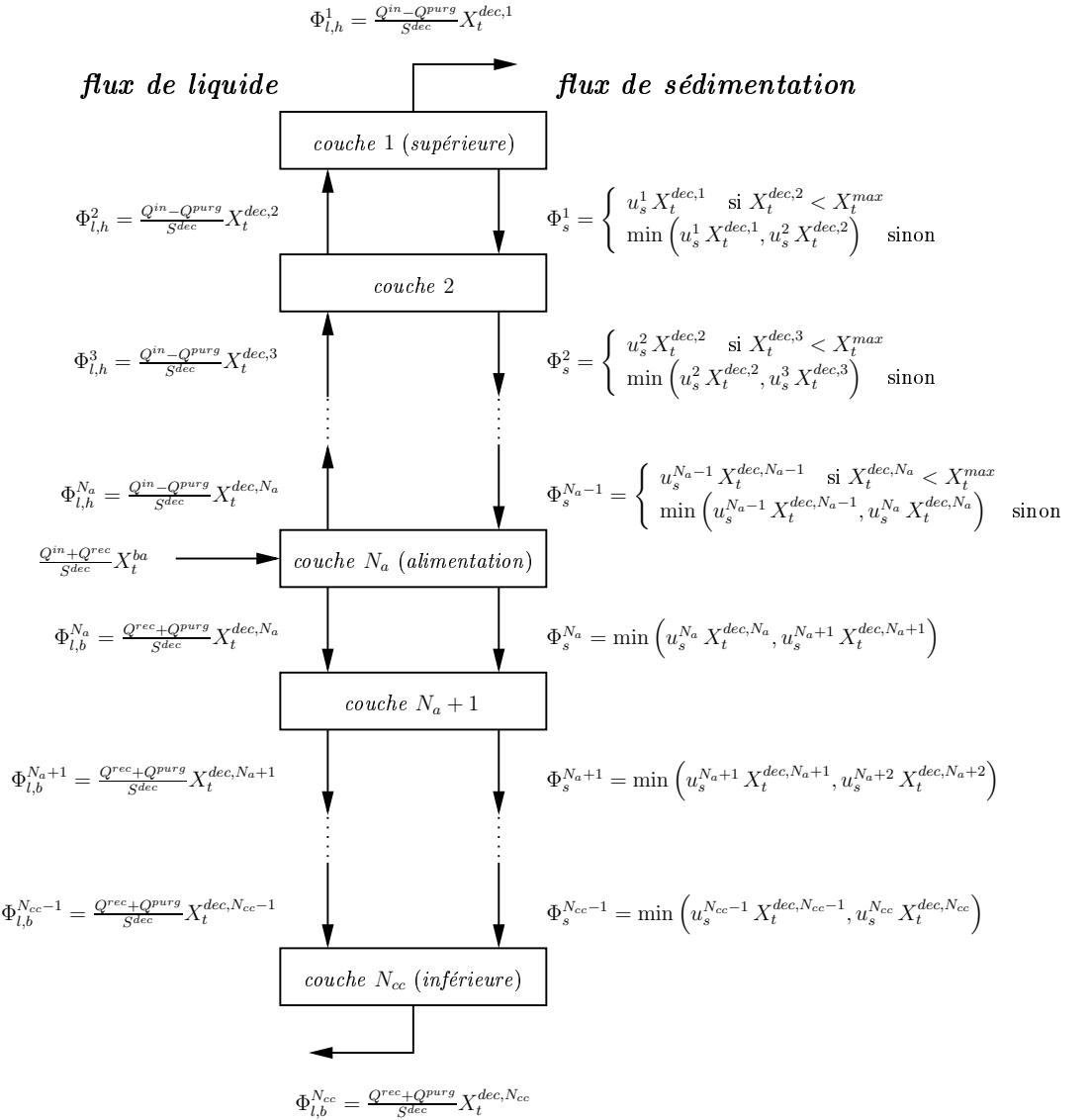


FIG. 1.4 – Bilans de matière dans les couches du clarificateur (Takács et al., 1991).

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

fluent ; S_t^{dec} représente la fraction soluble totale,

$$S_t^{dec} = S_I^{dec} + S_S^{dec} + S_{NO}^{dec} + S_{NH}^{dec} + S_{ND}^{dec}, \quad (1.15)$$

et le vecteur \mathbf{p}_S^{dec} permet de suivre l'évolution des différents composés solubles, à l'exception de la concentration en oxygène dissous résiduelle supposée entièrement consommée dans le clarificateur. Étant donné que les composés solubles ne sont pas soumis au flux de sédimentation, les bilans dans les différentes couches sont largement simplifiés.

En combinant les équations de bilan relatives aux composés particulaires et solubles avec celles qui décrivent l'évolution de leurs composants respectifs, il vient :

dans la partie supérieure ($1 \leq i \leq N_a - 1$) :

$$\frac{dX_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} \left[(X_t^{dec,i+1} - X_t^{dec,i}) u_{l,h} - \Phi_s^i + \Phi_s^{i-1} \right] \quad (1.16a)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_X^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e X_t^{dec,i}} \left[(\mathbf{p}_X^{dec,i+1} - \mathbf{p}_X^{dec,i}) u_{l,h} X_t^{dec,i+1} - (\mathbf{p}_X^{dec,i} - \mathbf{p}_X^{dec,i-1}) \Phi_s^{i-1} \right] \quad (1.16b)$$

$$\frac{dS_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} u_{l,h} [S_t^{dec,i+1} - S_t^{dec,i}] \quad (1.16c)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_S^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e S_t^{dec,i}} (\mathbf{p}_S^{dec,i+1} - \mathbf{p}_S^{dec,i}) u_{l,h} S_t^{dec,i+1} \quad (1.16d)$$

avec : $\Phi_s^i = \begin{cases} u_s^i X_t^{dec,i} & \text{si } X_t^{dec,i+1} \leq X_t^{max} \\ \min(u_s^{i+1} X_t^{dec,i+1}, u_s^i X_t^{dec,i}) & \text{sinon} \end{cases}$

$$\Phi_s^0 = 0$$

pour la couche d'alimentation (N_a) :

$$\frac{dX_t^{dec,N_a}}{dt} = \frac{1}{e} [(u_{l,b} + u_{l,h}) (X_t^{ba} - X_t^{dec,N_a}) - \Phi_s^{N_a} + \Phi_s^{N_a-1}] \quad (1.16e)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_X^{dec,N_a}}{dt} = \frac{1}{e X_t^{dec,N_a}} [(u_{l,b} + u_{l,h}) (\mathbf{p}_X^{ba} - \mathbf{p}_X^{dec,N_a}) X_t^{ba} - (\mathbf{p}_X^{dec,N_a} - \mathbf{p}_X^{dec,N_a-1}) \Phi_s^{N_a-1}] \quad (1.16f)$$

$$\frac{dS_t^{dec,N_a}}{dt} = \frac{1}{e} (u_{l,b} + u_{l,h}) (S_t^{ba} - S_t^{dec,N_a}) \quad (1.16g)$$

$$\frac{d\mathbf{p}_S^{dec,N_a}}{dt} = \frac{1}{e S_t^{dec,N_a}} (u_{l,b} + u_{l,h}) (\mathbf{p}_S^{ba} - \mathbf{p}_S^{dec,N_a}) S_t^{ba} \quad (1.16h)$$

avec : $\Phi_s^{N_a-1} = \begin{cases} u_s^{N_a-1} X_t^{dec,N_a-1} & \text{si } X_t^{dec,N_a} \leq X_t^{max} \\ \min(u_s^{N_a} X_t^{dec,N_a}, u_s^{N_a-1} X_t^{dec,N_a-1}) & \text{sinon} \end{cases}$

$$\Phi_s^{N_a} = \min(u_s^{N_a+1} X_t^{dec,N_a+1}, u_s^{N_a} X_t^{dec,N_a})$$

Chapitre 1. Formulation du problème d'optimisation

dans la partie inférieure ($N_a + 1 \leq i \leq N_{cc}$) :

$$\frac{dX_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} \left[\left(X_t^{dec,i-1} - X_t^{dec,i} \right) u_{l,b} - \Phi_s^i + \Phi_s^{i-1} \right] \quad (1.16i)$$

$$\frac{dp_X^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e X_t^{dec,i}} \left(p_X^{dec,i-1} - p_X^{dec,i} \right) \left[u_{l,b} X_t^{dec,i-1} + \Phi_s^{i-1} \right] \quad (1.16j)$$

$$\frac{dS_t^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e} u_{l,b} \left[S_t^{dec,i-1} - S_t^{dec,i} \right] \quad (1.16k)$$

$$\frac{dp_S^{dec,i}}{dt} = \frac{1}{e S_t^{dec,i}} \left(p_S^{dec,i-1} - p_S^{dec,i} \right) u_{l,b} S_t^{dec,i-1} \quad (1.16l)$$

$$\text{avec : } \Phi_s^i = \min \left(u_s^{i+1} X_t^{dec,i+1}, u_s^i X_t^{dec,i} \right)$$

$$\Phi_s^{N_{cc}} = 0$$

aux limites :

$$\mathbf{x}^{reg} = \begin{cases} \mathbf{p}_X^{dec,1} X_t^{dec,1} \\ \mathbf{p}_S^{dec,1} S_t^{dec,1} \end{cases} \text{ selon le cas} \quad (1.16m)$$

$$\mathbf{x}^{rec} = \begin{cases} \mathbf{p}_X^{dec,N_{cc}} X_t^{dec,N_{cc}} \\ \mathbf{p}_S^{dec,N_{cc}} S_t^{dec,N_{cc}} \end{cases} \text{ selon le cas} \quad (1.16n)$$

Au final, le modèle de décantation/clarification à couches se présente sous la forme :

$$\frac{d\mathbf{x}^{dec}}{dt} = \mathbf{f}_{dec} (\mathbf{x}^{dec}, \mathbf{x}^{ba}) \quad (1.17)$$

où $\mathbf{x}^{dec,i} = [X_t^{dec,i}, \mathbf{p}_X^{dec,iT}, S_t^{dec,i}, \mathbf{p}_S^{dec,iT}]^T$ représente l'état dans la $i^{\text{ème}}$ couche de sémentation, et $\mathbf{x}^{dec} = [\mathbf{x}^{dec,1T}, \dots, \mathbf{x}^{dec,N_{cc}T}]^T$, l'état complet du clarificateur.

1.1.3 Modèle global de l'unité de traitement

Le couplage des modèles de dégradation biologique et de décantation permet de formuler un modèle global de l'unité de traitement. Ces deux modèles, rappelons-le, se présentent sous la forme :

$$\begin{aligned} \text{Réacteur biologique : } \frac{d\mathbf{x}^{ba}}{dt} &= \mathbf{f}_{ba}^{(1)} (\mathbf{x}^{ba}, \mathbf{x}^{rec}) \text{ lors du fonctionnement de l'aérateur} \\ \frac{d\mathbf{x}^{ba}}{dt} &= \mathbf{f}_{ba}^{(2)} (\mathbf{x}^{ba}, \mathbf{x}^{rec}) \text{ lors des périodes d'arrêt} \\ \text{Clarificateur : } \frac{d\mathbf{x}^{dec}}{dt} &= \mathbf{f}_{dec} (\mathbf{x}^{dec}, \mathbf{x}^{ba}) \end{aligned}$$

La relation (1.16n) permet d'exprimer l'état \mathbf{x}^{rec} dans le recyclage en fonction de l'état $\mathbf{x}^{dec,N_{cc}}$ de la couche inférieure du clarificateur. Ainsi, il est possible d'écrire le modèle

1.1. Modélisation des petites unités de traitement à boues activées

global sous la forme générique (1.18) :

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) \text{ lors du fonctionnement de l'aérateur,} \quad (1.18a)$$

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) \text{ au cours des périodes d'arrêt.} \quad (1.18b)$$

où $\mathbf{x} = [\mathbf{x}^{baT}, \mathbf{x}^{decT}]^T$ désigne l'état du système, et où les modes $\mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}$ du système sont respectivement définis par $\mathbf{f}^{(1)} = [\mathbf{f}_{ba}^{(1)T}, \mathbf{f}_{dec}^T]^T$ et $\mathbf{f}^{(2)} = [\mathbf{f}_{ba}^{(2)T}, \mathbf{f}_{dec}^T]^T$.

Le modèle global résultant est un système différentiel constitué de $(11 + 12 N_{cc})$ équations différentielles, *i.e.* 131 équations pour 10 couches de décantation, et comporte 26 paramètres dont les valeurs par défaut sont précisées dans les Tab. 1.4 (p. 20) et 1.5 (p.23).

En raison de sa taille, l'utilisation du modèle global (1.18) pour le calcul des conditions optimales de fonctionnement des petites unités de traitement est susceptible de poser des problèmes, notamment de temps de calcul. Pour cette raison, la formulation d'un modèle de taille plus réduite est proposée dans la partie suivante.

1.1.4 Modèle simplifié de l'unité de traitement

Afin de réduire la taille du modèle global (1.18), il est possible d'adopter une description simplifiée des processus de décantation/clarification. Cette description suppose que :

- (i) les concentrations des **composés solubles** dans l'effluent traité sont les mêmes que dans le bassin d'aération, avec un délai t_d (réacteur piston)¹ :

$$x_i^{rej}(t + t_d) = x_i^{ba}(t), \quad i = 1, 2, 7, 8, 9 \quad (1.19a)$$

- (ii) les concentrations des **composés particulaires** dans l'effluent traité sont égales à une fraction constante f_{ns} de celles du bassin d'aération (avec également un délai t_d) :

$$x_i^{rej}(t + t_d) = f_{ns} x_i^{ba}(t), \quad i = 3, 4, 5, 6, 10 \quad (1.19b)$$

Les équations de bilan relatives au clarificateur s'écrivent :

$$(Q_{in} + Q_{rec}) \mathbf{x}^{ba} = (Q_{rec} + Q_{purg}) \mathbf{x}^{rec} + (Q_{in} - Q_{purg}) \mathbf{x}^{rej} \quad (1.20)$$

Compte tenu des relations (1.19a) et (1.19b), il est alors possible d'exprimer les concentrations \mathbf{x}^{rec} des composés solubles et particulaires dans le recyclage en fonction des concentrations \mathbf{x}^{ba} dans le bassin d'aération :

$$x_i^{rec}(t) = x_i^{ba}(t), \quad i = 1, 2, 7, 8, 9 \quad (1.21a)$$

$$x_i^{rec}(t) = \vartheta x_i^{ba}(t), \quad i = 3, 4, 5, 6, 10 \quad (1.21b)$$

¹Comme dans le cas du modèle de décantation à couches, la concentration résiduelle en oxygène dissous est supposé entièrement consommée dans le clarificateur, *i.e.* $S_O^{rej} = S_O^{rec} = 0$.

où le taux de compression ϑ des boues dans le clarificateur est défini par :

$$\vartheta = \frac{Q_{rec} + Q_{in} (1 - f_{ns}) + f_{ns} Q_{purg}}{Q_{rec} + Q_{purg}} \quad (1.22)$$

À partir des relations (1.21a) et (1.21b), il devient alors possible d'exprimer le modèle de l'unité de traitement sous la forme générique suivante :

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) \text{ lors du fonctionnement de l'aérateur,} \quad (1.23a)$$

$$\frac{dx}{dt} = \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) \text{ au cours des périodes d'arrêt.} \quad (1.23b)$$

où $\mathbf{x} = \mathbf{x}^{ba}$ désigne l'état du système. Le modèle simplifié résultant (1.23) compte 21 paramètres (les 20 paramètres cinétiques et stœchiométriques définis dans le Tab. 1.4 (p. 20), plus le paramètre f_{ns} défini dans l'équation (1.19b) et dont la signification est la même que pour le modèle à couche), mais ne comporte, en revanche, plus que 11 variables d'état.

1.1.5 Conclusions

Pour simuler le comportement dynamique des petites unités de traitement à boues activées, deux modèles de complexités différentes sont considérés. Les processus de dégradation biologiques sont basés, dans les deux cas, sur le modèle ASM 1, actuelle référence dans le domaine du traitement des eaux à boues activées. En revanche, ces modèles diffèrent par la manière dont les mécanismes de décantation/clarifications sont décrits. Le premier intègre un modèle de séparation à couches ; le second, moins détaillé, est basé sur de simples bilans de matière.

Ces modèles comportent cependant certaines lacunes. Les aspects relatifs au transfert d'oxygène en présence de boues notamment ne sont pris en compte, en raisons des nombreux résultats contradictoires qui subsistent dans la littérature à ce sujet. La description de l'hydrodynamique du réacteur biologique lors de l'arrêt des turbines d'aération (ici considéré comme un réacteur parfaitement agité) est également susceptible d'être améliorée, en intégrant par exemple les processus de décantation des flocs qui peuvent engendrer une répartition hétérogène des composés particulaires. D'autre part, les récentes améliorations apportées au modèle ASM 1 (modèle ASM 3, Gujer et al., 1999) ne sont pas prises en considération dans cette étude.

L'étude d'une unité de traitement existante a cependant permis de vérifier que ces deux modèles sont en mesure de donner une représentation fidèle du comportement dynamique des petites stations d'épuration à boues activées (*cf.* Annexe D, p. 249), et qu'ils sont par conséquent tout à fait aptes, malgré leurs lacunes, à être utilisés pour l'optimisation dynamique du procédé. La formulation des problèmes d'optimisation fait l'objet de la suite du chapitre.

1.2 Problèmes d'optimisation

Si l'on tente de hiérarchiser les problèmes technico-économiques rencontrés par les petites collectivités rurales, la nécessité d'assurer de manière fiable le **niveau de traitement requis** (rejets des composés carbonés et azotés), avec les problèmes relatifs au **coût énergétique du traitement** ainsi qu'au **coût de la main d'œuvre**, constituent les aspects les plus contraignants (Boutin et al., 1998). Deux types de problèmes d'optimisation sont ainsi envisagés dans cette étude :

- (i) la minimisation des rejets azotés ;
- (ii) la minimisation de la consommation énergétique du système.

Il est bien entendu possible de formuler d'autres problèmes d'optimisation, *e.g.* la recherche d'un compromis entre le coût et la qualité du traitement, l'amélioration de la fiabilité du traitement, *etc...*

La formulation mathématique des deux problèmes d'optimisation retenus fait l'objet de cette partie. Le choix des variables d'optimisation est détaillé dans le paragraphe 1.2.1. Les critères et contraintes de chaque problème sont ensuite précisés dans les paragraphes 1.2.2 et 1.2.3.

1.2.1 Paramétrisation du problème

Les différents points de contrôle des petites stations d'épuration à boues activées ont déjà été précisés. Parmi eux, la gestion des cycles d'aération apparaît particulièrement importante, étant donné que le réglage des séquences d'aération conditionne directement la qualité de l'effluent épuré et, en grande partie, le coût énergétique du traitement.

Un profil d'aération correspond à une succession de cycles, composés chacun d'une période durant laquelle le réacteur est aéré, suivie d'une période d'arrêt du système d'aération. Pour caractériser un profil d'aération sur un horizon de temps $[t_0, t_f]$ donné, il s'agit donc de définir le nombre N_c de cycles d'aération d'une part, et la durée des phases d'aération et d'arrêt de chaque cycle d'autre part.

Une séquence d'aération est déterminée par la donnée de 2 paramètres. De nombreuses combinaisons de paramètres sont envisageables pour cela. Il est possible, par exemple, de spécifier directement les instants de commutation de l'aérateur (mise en marche et arrêt), la durée des différentes phases d'aération et d'arrêt, ou encore la fraction d'aération et la durée de chaque cycle. Ces différentes combinaisons sont cependant toutes équivalentes du point du résultat de l'optimisation, dans la mesure où il est possible de passer de l'une à l'autre par de simples changements de variables (difféomorphismes) ; il s'agit le plus souvent de changements de variable linéaires. Le couple de paramètres adopté dans la suite de l'étude est constitué :

- (i) de la durée a^k d'aération au cours du $k^{\text{ème}}$ cycle,
- (ii) de la durée ℓ^k du $k^{\text{ème}}$ cycle de fonctionnement.

Chapitre 1. Formulation du problème d'optimisation

Les instants de commutation t_b^k et t_c^k entre les modes $\mathbf{f}^{(1)}$ et $\mathbf{f}^{(2)}$ du système différentiel sont alors donnés explicitement par les relations (1.24a) et (1.24b) :

$$t_b^k = \sum_{i=1}^{k-1} \ell^i + a^k \quad (1.24a)$$

$$t_c^k = \sum_{i=1}^k \ell^i \quad (1.24b)$$

Les paramètres d'optimisation N_c , a^k et ℓ^k , ainsi que les instants t_b^k et t_c^k de commutation sont illustrés sur la Fig. 1.5.

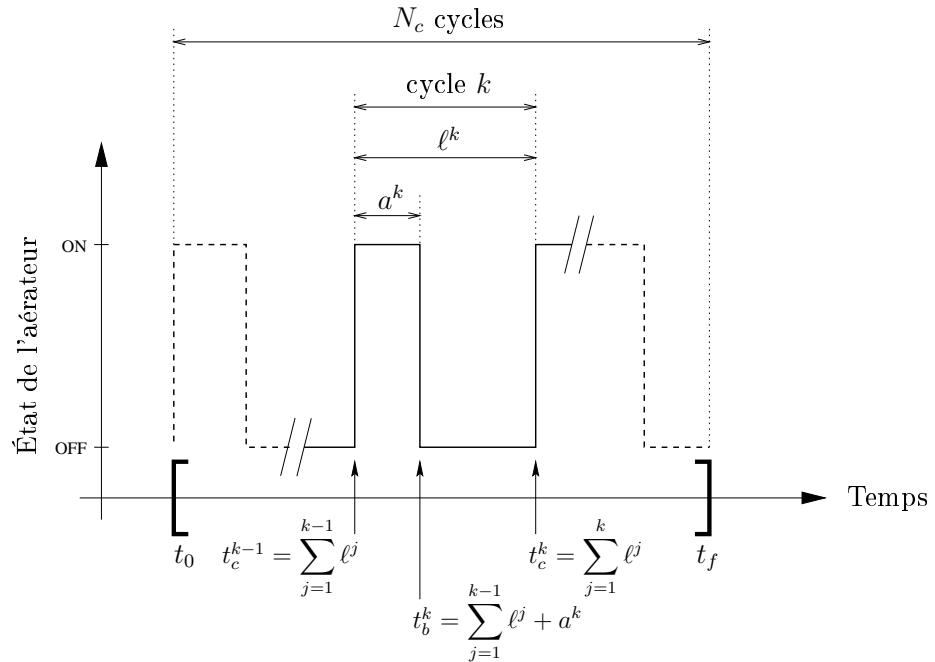


FIG. 1.5 – Illustration des paramètres d'optimisation.

1.2.2 Minimisation des rejets d'azote total

La première alternative étudiée pour améliorer les performances et la fiabilité des petites unités de traitement à boues activées consiste à calculer le profil d'aération du réacteur qui minimise les rejets d'azote total (NGL).

Expression du critère d'optimisation

Réduire les rejets d'azote total consiste à minimiser la concentration moyenne en NGL de l'effluent sur un horizon de temps $[t_0, t_f]$ donné. Mathématiquement, ceci revient à définir le critère d'optimisation \mathcal{J} du problème par :

$$\mathcal{J} = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(t) dt \quad (1.25)$$

où \mathcal{F}_{NGL} désigne la concentration en azote total de l'effluent. Ces rejets sont constitués en grande partie de composés solubles (nitrate, ammoniaque et azote organique soluble), mais contiennent également des composés particulaires (azote organique particulaire et fractions d'azote contenues dans la biomasse et les composés particulaires inertes) :

$$\mathcal{F}_{NGL} = S_{NO}^{rej} + S_{NH}^{rej} + S_{ND}^{rej} + X_{ND}^{rej} + i_{NXI} X_I^{rej} + i_{NBM} (X_{B,H}^{rej} + X_{B,A}^{rej}) \quad (1.26)$$

Selon le modèle mathématique utilisé pour représenter l'évolution dynamique du procédé, \mathcal{J} s'exprime ainsi sous l'une des deux formes suivantes :

– Cas du modèle global (1.18) :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} = & \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \left\{ S_t^{dec,1}(t) \left[p_{S_{NO}}^{dec,1}(t) + p_{S_{NH}}^{dec,1}(t) + p_{S_{ND}}^{dec,1}(t) \right] \right. \\ & + X_t^{dec,1}(t) \left[p_{X_{ND}}^{dec,1}(t) + \frac{i_{NXI}}{0.75} p_{X_I}^{dec,1}(t) \right. \\ & \left. \left. + \frac{i_{NBM}}{0.9} (p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t)) \right] \right\} dt \end{aligned} \quad (1.27a)$$

– Cas du modèle simplifié (1.23) :

$$\begin{aligned} \mathcal{J} = & \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \left\{ S_{NO}^{ba}(t) + S_{NH}^{ba}(t) + S_{ND}^{ba}(t) \right. \\ & + f_{ns} [X_{ND}^{ba}(t) + i_{NXI} X_I^{ba}(t) \\ & \left. + i_{NBM} (X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t))] \right\} dt \end{aligned} \quad (1.27b)$$

Dans le cadre de l'utilisation du modèle simplifié, la minimisation des rejets d'azote total est directement basée sur les concentrations à la sortie du bassin d'aération, et non à la sortie du clarificateur. Ceci est possible dans la mesure où aucun processus de mélange n'est pris en compte dans la représentation simplifié et permet de s'affranchir du délai t_d entre la sortie du bassin d'aération et le rejet (flux piston).

Contraintes du problème

En pratique, il est nécessaire de prendre des mesures d'exploitation dans la gestion des cycles d'aération. Des limites sont ainsi définies sur (i) les durées minimale t_{min}^{on} et maximale t_{max}^{on} de fonctionnement (sans interruption) des turbines et (ii) les durées minimale t_{min}^{off} et maximale t_{max}^{off} d'arrêt des turbines entre deux périodes d'aération successives.

- Les durées minimales d'aération et d'arrêt ont pour objectif de limiter le nombre maximal de démarriages horaires du système d'aération, et ceci afin de pérenniser le fonctionnement des équipements. Ces durées dépendent bien entendu du type de turbines utilisé (Burvingt, 1992). Lorsque les fonctions de brassage et d'aération du réacteur ne sont pas séparées (ce qui est très fréquent pour les petites unités de traitement), imposer une durée minimale d'aération suffisante est également nécessaire pour assurer la remise en suspension des boues décantées durant les périodes d'arrêt de l'aérateur. Dans le cas contraire, il est vraisemblable qu'une sous aération des boues conduirait, en quelques semaines seulement, à des dysfonctionnements importants du procédé. Considérer des durées minimales d'aération et d'arrêt de 15 minutes paraît un garde-fou minimum pour éviter ces désagréments.

- La durée maximale de fonctionnement de l'aérateur vise également à préserver le système d'aération. La valeur adoptée est ici de 120 minutes.
- Des périodes d'arrêt trop longues entraînent la décantation d'importantes quantités de boues dans le réacteur et peuvent éventuellement être à l'origine d'un passage des boues activées en conditions d'anaérobiose, ce qui n'est évidemment pas souhaitable pour le procédé. Afin de limiter ces phénomènes, une durée maximale d'arrêt de 120 minutes est spécifiée.

Les durées limites adoptées et l'expression des contraintes résultantes figurent dans le Tab. 1.6. Ces contraintes définissent des bornes sur les paramètres d'optimisation a^k et ℓ^k .

TAB. 1.6 – Contraintes opératoires du système.

Durée limite	Expression de la contrainte
$t_{\min}^{\text{on}} = 15 \text{ mn}$	$a^k - t_{\min}^{\text{on}} \geq 0, k = 1 \dots N_c$
$t_{\min}^{\text{off}} = 15 \text{ mn}$	$\ell^k - a^k - t_{\min}^{\text{off}} \geq 0, k = 1 \dots N_c$
$t_{\max}^{\text{on}} = 120 \text{ mn}$	$a^k - t_{\max}^{\text{on}} \leq 0, k = 1 \dots N_c$
$t_{\max}^{\text{off}} = 120 \text{ mn}$	$\ell^k - a^k - t_{\max}^{\text{off}} \leq 0, k = 1 \dots N_c$

Pour terminer, une contrainte supplémentaire est définie afin que la somme des cycles d'aération soit égale à l'horizon d'optimisation $[t_0, t_f]$ considéré :

$$\sum_{k=1}^{N_c} \ell^k = t_f - t_0 \quad (1.28)$$

où N_c représente le nombre de cycles d'aération sur l'horizon $[t_0, t_f]$.

Formulation du problème

Dans le cas le plus général, déterminer la politique d'aération qui minimise les rejets d'azote total consiste à résoudre le problème d'optimisation sous contraintes suivant :

$$\begin{aligned} \min_{N_c, a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}} \quad & \mathcal{J} = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\boldsymbol{x}) \, dt \\ \text{soumis à :} \quad & \left. \begin{aligned} \dot{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{f}^{(1)}(\boldsymbol{x}) && \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \dot{\boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{f}^{(2)}(\boldsymbol{x}) && \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \ell^k - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned} \right\} \quad k = 1 \dots N_c \\ & t_f = t_0 + \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k \end{aligned} \quad (1.29)$$

où les instants de commutation t_b^k et t_c^k entre les modes $\mathbf{f}^{(1)}$ et $\mathbf{f}^{(2)}$ du système différentiel sont explicitement définis par les relations (1.24a) et (1.24b). En raison de la nature du système différentiel (système hybride) et de la présence d'une variable entière (N_c), on est amené à résoudre un problème d'optimisation dynamique **hybride** et **mixte**. Les aspects relatifs à la résolution de tels systèmes sont abordés dans le Chapitre 2.

1.2.3 Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur

Le problème d'optimisation formulé dans la partie précédente est spécifiquement basé sur les performances du procédé (en terme de qualité d'effluent), et n'intègre pas l'aspect économique du traitement. Une alternative pour améliorer cette formulation consiste, par exemple, à rajouter des contraintes économiques au problème (1.29), de manière à ce que les profils d'aération calculés minimisent les rejets d'azote total, dans la limite d'un coût de fonctionnement maximal donné.

Afin d'améliorer plus encore les performances du procédé, une autre alternative consiste à minimiser le coût du traitement de façon spécifique. L'objectif de qualité du traitement est alors intégré sous la forme de contraintes de rejet. C'est la formulation de ce problème qui est ici proposée.

Expression du critère d'optimisation

Le coût d'exploitation d'une unité de traitement repose en grande partie sur le fonctionnement de l'aérateur du réacteur biologique, si bien que définir le fonctionnement le plus économique possible revient à minimiser la consommation énergétique \mathcal{E} du système d'aération :

$$\mathcal{E} = \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{P}(t) dt \quad (1.30)$$

Pour les stations de petites tailles plus spécifiquement, l'aération est généralement assurée par des turbines lentes, dont la vitesse de rotation est constante. La puissance dissipée \mathcal{P} dans le réacteur biologique dépend *a priori* des caractéristiques des boues, et notamment de leur viscosité. Toutefois, dans les conditions de fonctionnement des stations d'épuration ($1 \text{ g/L} \leq MES \leq 5 \text{ g/L}$) et pour un agitateur de surface ($1 \text{ m} \leq d \leq 4 \text{ m}$ et $30 \text{ rpm} \leq \mathcal{N} \leq 60 \text{ rpm}$), on montre que le fluide s'écoule en régime turbulent dans le réacteur (*cf.* Annexe A). Dans ces conditions, la puissance dissipée peut être considérée indépendante de la viscosité du milieu :

$$\mathcal{P} = k \mu \mathcal{N}^3 d^5 \quad (1.31)$$

où k est une constante (nombre de puissance), μ , la masse volumique du fluide, \mathcal{N} , la vitesse de l'agitateur et d , le diamètre de la turbine. Ainsi, la consommation énergétique du système d'aération est directement proportionnelle à la durée d'aération totale. Pour un nombre N_c donné de cycles de fonctionnement, la consommation énergétique s'exprime sous la forme suivante :

$$\mathcal{E} = \mathcal{P} \sum_{k=1}^{N_c} a^k \quad (1.32)$$

Chapitre 1. Formulation du problème d'optimisation

Le critère d'optimisation \mathcal{J} retenu pour minimiser la consommation énergétique du système d'aération correspond à la durée totale d'aération, normée par la durée totale des cycles :

$$\mathcal{J} = \sum_{k=1}^{N_c} a^k / \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k \quad (1.33)$$

Ce critère est adimensionnel et correspond au taux global d'aération sur l'horizon $[t_0, t_f]$ d'optimisation ; plus le taux d'aération est faible, plus la consommation énergétique est réduite.

Il est important de noter que certains aspects ne sont pas pris en compte dans l'expression du critère d'optimisation. En particulier, la surpuissance lors du démarrage du système d'aération n'est pas représentée. Il n'est pas tenu compte non plus des variations du coût de l'énergie en fonction des créneaux horaires (*e.g.* heures creuses, heures pleines). Ces éléments peuvent avoir un effet non négligeable sur les politiques optimales d'aération.

Contraintes du problème

Il ne s'agit pas, sous prétexte de réduire les coûts de fonctionnement, de négliger la qualité des rejets. Les normes de rejets prévues à terme par la *Directive Européenne du 21 mai 1991*, varient selon l'importance des rejets et la sensibilité du milieu récepteur. Une rapide synthèse des normes en vigueur pour les unités de traitement de petites tailles est proposée en Annexe B.

- Pour les matières en suspension (*MES*) et les matières oxydables (*DCO*, *DBO*₅), la réglementation impose les niveaux de rejet précisés dans le Tab. 1.7. Ces exigences définissent une concentration limite maximale **et** un rendement minimal d'épuration (qui devient contraignant lorsque l'effluent est peu concentré).

TAB. 1.7 – Prescriptions minimales pour les rejets dans les eaux de surface des collectivités dont la taille est comprise entre 200 et 10 000 E.H.

	Concentration maximale	Rendement
<i>DBO</i> ₅	25 mg.L ⁻¹	70%
<i>DCO</i>	125 mg.L ⁻¹	75%
<i>MES</i>	35 mg.L ⁻¹	90%

- Pour les substances azotées, des limitations sur les rejets en azote Kjeldahl¹ et les rejets en azote total (*NGL*) sont également définies. Plusieurs niveaux de sévérité sont distingués. Les seuils généralement en vigueur pour les stations d'épuration de taille supérieure à 2 000 E.H. sont de 10 ou 15 mg N.L⁻¹, selon l'objectif de qualité du milieu récepteur ; pour les unités de taille inférieure (entre 200 et 2 000 E.H.) seul un rendement d'élimination supérieur à 60% est requis.
- Pour les substances phosphorées enfin, les exigences réglementaires concernent encore peu les petites unités de traitement, et lorsque c'est le cas, un rendement moyen

¹somme des concentrations en azote organique et azote ammoniacal

de 80% d'élimination est généralement défini. L'élimination du phosphore sort cependant du cadre de cette étude et n'est donc pas prise en compte par la suite.

Les valeurs limites retenues dans cette étude concernent les rejets en NGL , DCO , DBO_5 et MES . Les rejets en NTK ne sont pas contraints de façon spécifique ; c'est la concentration maximale en NGL qui fait également office de limite supérieure pour la concentration en NTK . D'autre part, bien que la réglementation impose que les normes de rejet soient respectées en moyenne sur des échantillons de 2 heures seulement, ces concentrations maximales sont ici intégrées au problème d'optimisation sous la forme de contraintes instantanées. Les expressions de ces contraintes sont données dans le Tab. 1.8.

TAB. 1.8 – Expressions des contraintes réglementaires.

Concentration limite	Expression de la contrainte
$NGL_{\max} = 10 \text{ mg.L}^{-1}$	$\mathcal{F}_{NGL}(t) - NGL_{\max} \leq 0, \forall t \in [t_0, t_f]$
$DCO_{\max} = 125 \text{ mg.L}^{-1}$	$\mathcal{F}_{DCO}(t) - DCO_{\max} \leq 0, \forall t \in [t_0, t_f]$
$DBO_5_{\max} = 25 \text{ mg.L}^{-1}$	$\mathcal{F}_{DBO_5}(t) - DBO_5_{\max} \leq 0, \forall t \in [t_0, t_f]$
$MES_{\max} = 35 \text{ mg.L}^{-1}$	$\mathcal{F}_{MES}(t) - MES_{\max} \leq 0, \forall t \in [t_0, t_f]$

Les expressions des rejets de NGL , DCO , DBO_5 et MES sont données par :

– Cas du modèle complet (1.18) :

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{NGL} &= S_t^{dec,1}(t) \left[p_{S_{NO}}^{dec,1}(t) + p_{S_{NH}}^{dec,1}(t) + p_{S_{ND}}^{dec,1}(t) \right] \\ &\quad + X_t^{dec,1}(t) \left[p_{X_{ND}}^{dec,1}(t) + \frac{i_{NXI}}{0.75} p_{X_I}^{dec,1}(t) + \frac{i_{NBM}}{0.9} \left(p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t) \right) \right] \end{aligned} \quad (1.34a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{DCO} &= S_t^{dec,1}(t) \left[p_{S_I}^{dec,1}(t) + p_{S_S}^{dec,1}(t) \right] \\ &\quad + X_t^{dec,1}(t) \left[\frac{1}{0.75} \left(p_{X_I}^{dec,1}(t) + p_{X_S}^{dec,1}(t) \right) + \frac{1}{0.9} \left(p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t) \right) \right] \end{aligned} \quad (1.34b)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{DBO_5} &= 0.25 \left\{ S_t^{dec,1}(t) p_{S_S}^{dec,1}(t) \right. \\ &\quad \left. + X_t^{dec,1}(t) \left[\frac{1}{0.75} p_{X_S}^{dec,1}(t) + \frac{1 - fr_{XI}}{0.9} \left(p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t) \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (1.34c)$$

$$\mathcal{F}_{MES} = X_t^{dec,1}(t) \quad (1.34d)$$

– Cas du modèle simplifié (1.23) :

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{NGL} &= S_{NO}^{ba}(t) + S_{NH}^{ba}(t) + S_{ND}^{ba}(t) \\ &\quad + f_{ns} \left[i_{NXI} X_I^{ba}(t) + i_{NBM} \left(X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t) \right) + X_{ND}^{ba}(t) \right]\end{aligned}\quad (1.35a)$$

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{DCO} &= S_I^{ba}(t) + S_S^{ba}(t) \\ &\quad + f_{ns} \left[X_I^{ba}(t) + X_S^{ba}(t) + X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t) \right]\end{aligned}\quad (1.35b)$$

$$\mathcal{F}_{DBO_5} = 0.25 \left\{ S_S^{ba}(t) + f_{ns} \left[X_S^{ba}(t) + (1 - fr_{XI}) \left(X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t) \right) \right] \right\} \quad (1.35c)$$

$$\mathcal{F}_{MES} = f_{ns} \left[0.75 \left(X_I^{ba}(t) + X_S^{ba}(t) \right) + 0.9 \left(X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t) \right) \right] \quad (1.35d)$$

Pour le modèle simplifié, on peut remarquer les contraintes sont à nouveau basées sur les concentrations en sortie de bassin d'aération.

De manière à garantir la faisabilité de la politique optimale d'aération calculée, des contraintes opératoires sont également imposées. Ces contraintes sont bien entendu similaires à celles définies pour le problème (1.29) relatif à la minimisation des rejets d'azote total (Tab. 1.6, p. 32). La contrainte (1.28) est également considérée afin que la somme des cycles d'aération soit égale à l'horizon ($t_f - t_0$) d'optimisation.

Formulation du problème

Dans le cas le plus général, déterminer la politique d'aération qui minimise la consommation énergétique du système d'aération consiste à résoudre le problème d'optimisation hybride et mixte sous contraintes (1.36) :

$$\begin{aligned}\min_{N_c, a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}} \quad & \mathcal{J} = \sum_{k=1}^{N_c} a^k / \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k \\ \text{soumis à :} \quad & \begin{aligned} \dot{x} &= \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \dot{x} &= \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \ell^k - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned} \quad \left. \right\} k = 1 \dots N_c \\ & \begin{aligned} 0 &\leq NGL_{\max} - \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq DCO_{\max} - \mathcal{F}_{DCO}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq DBO_{5\max} - \mathcal{F}_{DBO_5}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq MES_{\max} - \mathcal{F}_{MES}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad \left. \right\} t \in [t_0, t_f] \\ t_f &= t_0 + \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k\end{aligned}\quad (1.36)$$

où les instants de commutation t_b^k et t_c^k entre les modes $\mathbf{f}^{(1)}$ et $\mathbf{f}^{(2)}$ du système différentiel sont explicitement définis par les relations (1.24a) et (1.24b).

1.3 Conclusions

La formulation des problèmes d'optimisation dynamique a fait l'objet de ce chapitre. Les modèles utilisés pour représenter le comportement dynamique du procédé sont basés sur le modèle ASM 1 de l'IAWQ, mais diffèrent dans la description du clarificateur. Le premier intègre un modèle à couches, et donne ainsi une description détaillée des processus de décantation/clarificateur ; en contrepartie, la taille du modèle résultant est importante (une centaine de variables d'état). L'autre, de taille plus réduite, est basé sur de simples bilans de matière dans le clarificateur.

Deux types de problèmes d'optimisation dynamique sont considérés pour améliorer le fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées. L'amélioration de la qualité du traitement est d'abord envisagée, indépendamment de l'aspect économique du procédé, en basant le problème sur la minimisation des rejets d'azote. Afin d'intégrer l'aspect financier du traitement, le second problème est spécifiquement basé sur la réduction de la consommation énergétique du système d'aération (turbines), et l'objectif de qualité est pris en compte sous la forme de contraintes. Dans les deux cas, les problèmes résultants sont des problèmes d'optimisation dynamique hybrides et mixtes. Les méthodes utilisées pour les résoudre sont présentées dans le chapitre suivant.

CHAPITRE 2

Méthodes d'optimisation dynamique

Ne t'inquiète pas si tu as des difficultés en maths, je peux t'assurer que les miennes sont bien plus importantes !

ALBERT EINSTEIN

L'optimisation du fonctionnement des procédés est une activité de recherche permanente dans les différents domaines du Génie des Procédés. L'optimisation qualifie la démarche qui consiste à améliorer une performance (exprimée au moyen d'un *critère*), par rapport à un état de référence, sous l'action d'un ou plusieurs paramètres (ou *variables d'optimisation*).

Cette optimisation peut être abordée par une démarche expérimentale de type essais-erreurs, qui consiste à trouver, de manière plus ou moins empirique, un meilleur mode de fonctionnement par une succession d'essais qui viennent compléter la connaissance du système. Ce type d'approche est très fréquent pour améliorer le fonctionnement des procédés, notamment en traitement des eaux.

Une seconde approche, plus rigoureuse, consiste à adopter une démarche d'optimisation conceptuelle. Il s'agit, dans ce cas, de déterminer les paramètres qui améliorent la performance du procédé par un calcul selon des règles précises (*algorithme*). Cette catégorie représente le très vaste ensemble des méthodes d'optimisation. Deux types d'optimisation peuvent être distinguées selon la nature des variables du problème.

- Lorsque le comportement du procédé est décrit par des relations algébriques entre les variables d'état et les paramètres du système, on parle d'optimisation *statique*; ce type d'optimisation est le plus fréquemment rencontré en Génie des Procédés.
- Lorsqu'au contraire le procédé présente une évolution temporelle, *i.e.* lorsque l'évolution dynamique du système est décrite par des relations d'état différentielles, on parle d'optimisation *dynamique*; les premières applications pratiques de ce type d'optimisation, plus complexe, ont concerné le calcul des trajectoires optimales de mise en orbite des satellites à la fin des années 1950.

Pour l'amélioration des performances des petites stations d'épuration à boues activées, c'est ce second type d'optimisation qui est envisagé.

2.1 Position du problème

L'objectif des méthodes d'optimisation dynamique est de déterminer le profil de commande $\mathbf{u}(t)$ et/ou les paramètres de commande \mathbf{p} qui minimisent (ou maximisent) un critère \mathcal{J} donné, tout en respectant des contraintes spécifiées. La commande optimale ainsi déterminée fait suivre à l'état $\mathbf{x}(t)$ du système une trajectoire $\mathbf{x}^*(t)$ qui doit appartenir à l'ensemble des trajectoires admissibles.

Optimisation dynamique des systèmes continus

L'application des méthodes d'optimisation dynamique nécessite de disposer de modèles mathématiques suffisamment représentatifs du comportement des procédés étudiés, mais aussi d'une complexité raisonnable par rapport à la difficulté de la résolution mathématique et numérique du problème. Classiquement, le comportement des procédés est décrit au moyen de systèmes différentiels continus de la forme (2.1a) :

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t), \quad t_0 \leq t \leq t_f \quad (2.1a)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ représente le vecteur d'état du système, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ le vecteur de commande et $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^\ell$ le vecteur des paramètres, et dont les n conditions initiales sont données :

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.1b)$$

Le choix du (ou des) critère(s) d'optimisation constitue la première étape d'un problème d'optimisation. Le plus souvent, le critère s'exprime sous la forme générale (2.2), dite forme de Bolza :

$$\mathcal{J}(\mathbf{u}(t), \mathbf{p}) = \overbrace{\mathcal{G}(\mathbf{x}(t_f), \mathbf{p}, t_f)}^{\text{objectif}} + \overbrace{\int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{x}(t), \mathbf{p}, t) dt}^{\text{moyens mis en œuvre}} \quad (2.2)$$

où la fonctionnelle $\mathcal{G}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ représente la contribution des conditions terminales, tandis que la fonctionnelle $\mathcal{L}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ correspond à une contribution d'accumulation temporelle.

La formulation la plus élémentaire d'un problème d'optimisation dynamique se résume ainsi par la forme générale suivante :

$$\min_{\mathbf{u}(t), \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_f), \mathbf{p}, t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) dt \quad (2.3a)$$

$$\text{soumis à : } \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) \quad (2.3b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.3c)$$

Le système (2.3) correspond néanmoins à un système sous contraintes (différentielles) puisque l'équation d'état (2.3b) est indissociable du critère d'optimisation.

Les méthodes d'optimisation dynamiques permettant de résoudre ce type de problèmes se répartissent en deux catégories :

- le Principe de Bellman (Bellman, 1957) ;
- le Principe du Maximum (Pontryagin et al., 1964) et les méthodes variationnelles (Smith, 1974; Bryson et Ho, 1975).

Proposées il y a plus de quarante ans, ces méthodes ont été appliquées pour optimiser le fonctionnement de nombreux procédés chimiques, électrochimiques et biochimiques. L'évolution permanente des moyens de calcul permet, depuis les années 1980, de les appliquer à des systèmes de complexité et d'intérêt industriel sans cesse croissants. Les résultats des méthodes variationnelles et ceux du Principe du Maximum reposent sur des bases théoriques similaires. Le Principe de Bellman possède, en revanche, des fondements théoriques sensiblement différents. Il est bien entendu possible de passer de l'une à l'autre. Le choix de l'une ou l'autre dépend le plus souvent de considérations techniques (moyens de calcul) et théoriques (nature et dimension du problème, non-linéarités, contraintes).

Il est important de préciser que ces trois méthodes ne donnent que des conditions nécessaires d'optimalité. Aussi, lorsque le problème d'optimisation est non-convexe, il n'est pas garanti d'atteindre l'optimum global, *i.e.* le minorant (ou majorant) de l'ensemble des optima locaux du problème. La plupart des méthodes permettant de déterminer l'optimum global d'un problème d'optimisation dynamique non convexe sont des extensions de méthodes initialement développées pour les problèmes d'optimisation statiques. En particulier, on peut citer :

- les méthodes d'optimisation stochastiques, *e.g.* algorithmes génétiques (Goldberg, 1989), recuit simulé (Kirkpatrick et al., 1983) et *Integrated Controlled Random Search –ICRS–* (Banga et Casares, 1987), simples d'utilisation et dont la popularité ne cesse d'augmenter, bien que la convergence vers l'optimum global soit, au mieux, asymptotique ;
- les méthodes déterministes de type *branch and bound* (*e.g.* Floudas et Visweswaran, 1990; Horst et Tuy, 1996; Zamora et Grossmann, 1998), qui permettent de générer une séquence convergente de bornes inférieures (obtenues en résolvant localement le problème) et supérieures (obtenues en relaxant le problème original) de l'optimum global du problème, et qui convergent en un nombre fini d'itérations ; la relaxation du problème original peut notamment être réalisée en construisant des sous-estimateurs convexes du problème, *e.g.* en appliquant la méthode αBB (Androulakis et al., 1995; Adjiman et al., 1998b,a) dans le cas des fonctions algébriques de classe \mathcal{C}^2 .

Les méthodes stochastiques sont directement transposables aux problèmes d'optimisation dynamique *via* la paramétrisation du profil $\mathbf{u}(t)$ de commande. En revanche, l'application des méthodes de décomposition est plus délicate. La principale difficulté réside dans la construction de sous-estimateurs convexes pour les contraintes différentielles. Ce point fait actuellement l'objet de nombreux travaux de recherche (*e.g.* Esposito et Floudas, 2000a,b; Papamichail et Adjiman, 2001a,b; Singer et Barton, 2001).

Optimisation dynamique des systèmes hybrides discrets/continus

Au cours des dernières années, l'étude des systèmes dynamiques hybrides discrets/continus (*hybrid discrete/continuous dynamic systems*) a attiré l'attention de la communauté de

Génie Chimique (Barton et Park, 1997). Il s'agit de systèmes dynamiques pour lesquels l'évolution continue est ponctuée par des changements discrets. L'industrie chimique regorge de systèmes de ce type, *e.g.* procédés *batch*, démarages et arrêts de pompes, discontinuités physico-chimiques (changements de phase de l'un des composants du système, *etc.*) ; c'est également le cas pour les problèmes étudiés dans ce travail (*cf.* Chapitre 1).

Les travaux de Barton font référence dans le domaine, tant au niveau de la simulation (*e.g.* Barton, 1992; Barton et Pantelides, 1994; Park et Barton, 1996), que de l'optimisation (*e.g.* Barton et al., 1998; Galán et Barton, 1998; Barton et al., 2000). L'utilisation de modèles du type (2.1) apparaît clairement inadaptée pour représenter le comportement des systèmes hybrides ; une description plus générale est ici nécessaire :

$$\mathcal{S} = \bigcup_k \mathcal{S}^k : \left\{ \begin{array}{l} \dot{\mathbf{x}}^{(k)} = \mathbf{f}^{(k)}(\mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{p}, t) \\ 0 = \mathcal{L}_j^{(k)}(\dot{\mathbf{x}}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}, \mathbf{p}, t) \\ \mathbf{0} = \mathcal{T}_j^{(k)}(\dot{\mathbf{x}}^{(k)}, \mathbf{x}^{(k)}, \mathbf{u}^{(k)}, \dot{\mathbf{x}}^{(j)}, \mathbf{x}^{(j)}, \mathbf{u}^{(j)}, \mathbf{p}, t) \end{array} \right\} \quad j \in \mathcal{N}^{(k)} \quad (2.4)$$

où :

- $\mathbf{f}^{(k)}$ désigne le $k^{\text{ème}}$ mode du système et $\mathbf{x}^{(k)}$, l'état du $k^{\text{ème}}$ mode ;
- $\mathcal{N}^{(k)}$ est l'ensemble des modes du système vers lesquels une transition est possible à partir du $k^{\text{ème}}$ mode ;
- la condition $\mathcal{L}_j^{(k)}$ détermine l'instant $t_f^{(k)}$ de commutation du $k^{\text{ème}}$ vers le $j^{\text{ème}}$ mode du système ;
- $\mathcal{T}_j^{(k)}$ donne les conditions de transition entre les modes k et j , *i.e.* les conditions initiales $\mathbf{x}^{(j)}(t_0^{(j)})$ du $j^{\text{ème}}$ mode du système en fonction des conditions terminales $\mathbf{x}^{(k)}(t_f^{(k)})$ du $k^{\text{ème}}$ mode¹.

Dans la plupart des cas cependant, les commutations entre les modes de fonctionnement du système ne concernent que certaines équations et/ou variables, et la formulation du système est en fin de compte assez concise (Barton, 1992).

Les discontinuités du système différentiel semblent *a priori* incompatibles avec l'utilisation des méthodes variationnelles, du Principe du Maximum ou du Principe de Bellman, basées sur le gradient des fonctions du système par rapport aux variables d'état et aux paramètres de commande ; ce n'est toutefois pas systématiquement le cas. Au moins trois classes de problèmes d'optimisation hybrides peuvent être distinguées :

1. Dans le cas de figure le plus simple, la séquence des modes est fixe et les trajectoires d'état sont continûment différentiables (C^1) aux instants de commutation. Il est alors possible d'appliquer les méthodes précédemment mentionnées, sans se soucier de la nature hybride du système.
2. Le second type de problème correspond au cas où la séquence des événements est invariable, mais où les variables d'état et/ou les différents modèles du système sont discontinus aux instants de commutation. Sous certaines conditions, il est possible

¹Les conditions initiales du mode de fonctionnement $\mathcal{S}^{(1)}$ sont supposées données par la relation :

$$\mathcal{T}_0^{(1)}(\dot{\mathbf{x}}^{(1)}, \mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{u}^{(1)}, \mathbf{p}, t) = \mathbf{0}$$

d'établir la régularité du critère d'optimisation vis-à-vis des variables de commande du procédé (Galán et Barton, 1998).

3. La classe la plus complexe de problèmes hybrides est relative au cas où le séquençage des modes varie en fonction des variables d'optimisation. Le problème d'optimisation résultant est clairement non régulier, et seules les méthodes d'optimisation stochastiques sont susceptibles, en l'état actuel des connaissances, d'être appliquées. Remarquons qu'il est également possible de formuler les problèmes d'optimisation hybrides de ce type comme des problèmes du second type, en introduisant des variables d'optimisation *binaires* afin de représenter les différentes séquences d'événement possible ; on peut ainsi se ramener à des problèmes d'optimisation réguliers, mais pour lesquels aucune méthode de résolution générale n'existe à ce jour (voir ci-dessous).

Optimisation dynamique mixte

On assiste également, depuis quelques années, à un intérêt croissant envers les problèmes d'optimisation dynamiques *mixtes* (*Mixed Integer Dynamic Optimization*, MIDO). Il s'agit de problèmes d'optimisation dynamique classiques couplés avec des variables de décision *binaires*, *entières* ou encore *discrètes*. Les applications en Génie des Procédés sont nombreuses, *e.g.* les procédés discontinus (Sharif et al., 1998; Allgor et Barton, 1999b), la réduction des schémas réactionnels (Petzold et Zhu, 1999) ou encore la résolution des problèmes d'optimisation dynamique hybrides comme mentionné précédemment ; les problèmes d'optimisation considérés dans cette étude comportent également des variables de décision entières (*cf.* Chapitre 1).

Les algorithmes standards de résolution des problèmes d'optimisation mixtes dans les espaces euclidiens supposent que les fonctions impliquées sont convexes (Geoffrion, 1972; Duran et Grossmann, 1986; Floudas, 1995). Il est bien connu que si ces algorithmes sont appliquées pour résoudre des problèmes contenant des fonctions non convexes, la convergence vers la solution globale du problème n'est nullement garantie, ni même d'ailleurs la convergence vers un optimum local ; ces observations s'étendent naturellement au cas des problèmes MIDO (Allgor et Barton, 1997, 1999a).

Récemment, des algorithmes d'optimisation globale ont été développés pour résoudre les problèmes non convexes d'optimisation mixte non-linéaire (*Mixed-Integer Non-Linear Programming*, MINLP) (Adjiman et al., 2000; Kesavan et Barton, 2000a,b). Bien que ces algorithmes soient rigoureux, ils reposent tous sur la connaissance explicite des fonctions du problème, et ne sont donc pas directement applicables au cas où les variables d'état sont implicitement définies (systèmes différentiels). Comme pour l'optimisation globale des problèmes d'optimisation dynamiques, une des principales difficultés consiste à construire des sous-estimateurs convexes du problème en présence de contraintes différentielles (Singer et Barton, 2001).

Optimisation dynamique des petites stations d'épuration

Dans le cadre de l'optimisation dynamique des petites stations d'épuration, les modes de fonctionnement successifs sont préalablement connus (succession de périodes d'aération et d'arrêt), mais le système différentiel présente des discontinuités aux instants de

commutation (*cf.* § 1.2.2 et 1.2.3). En reprenant la classification des problèmes d'optimisation dynamique hybrides établie précédemment, les problèmes (1.29) et (1.36) sont du second type. D'autre part, le nombre des modes de fonctionnement du système n'est pas fixé ; cette variable de décision entière doit être optimisée, au même titre que la durée des séquences d'aération et d'arrêt. On est ainsi confronté à la résolution d'un problème d'optimisation dynamique *mixte*.

D'une manière générale, les problèmes d'optimisation dynamique mixtes sont particulièrement complexes et il n'existe pas, à l'heure actuelle, d'algorithme de résolution généraux. Afin de s'affranchir de l'optimisation des variables entières impliquées, les problèmes (1.29) et (1.36) sont ici résolus en fixant le nombre de cycles d'aération N_c . La détermination du nombre optimal de cycle est alors réalisée en énumérant simplement les différentes possibilités ; cette approche est envisageable dans la mesure où le nombre de possibilités pour N_c reste limité.

Pour un nombre donné de cycles d'aération, le nombre et la configuration des modes de fonctionnement du système sont fixés. Étant donné que les instants de commutation dépendent explicitement des variables d'optimisation continues a^k et ℓ^k , les problèmes d'optimisation dynamique résultants sont donc réguliers, et peuvent être résolus au moyen des méthodes d'optimisation classiques, *e.g.* les méthodes variationnelles ou le Principe du Maximum. Les conditions nécessaires d'optimalité de ce type de système sont développées dans la partie suivante.

2.2 Conditions nécessaires d'optimalité

Les conditions nécessaires d'optimalité (du premier ordre) sont ici développées par l'approche variationnelle (Bryson et Ho, 1975). L'intérêt de procéder ainsi est de pouvoir expliquer l'origine des variables introduites et la manière dont sont traitées les différentes formes que peuvent prendre les problèmes d'optimisation.

Les conditions d'optimalité sont d'abord présentées pour les systèmes continus paramétrés (§ 2.2.1), puis pour une classe particulière de systèmes hybrides discrets/continus (§ 2.2.2). Le cas des problèmes d'optimisation dynamique sous contraintes est traité dans le paragraphe 2.2.3.

2.2.1 Système différentiel paramétré continu sans contrainte

Dans un premier temps, les conditions d'optimalité sont développées pour des problèmes d'optimisation dynamique paramétrés sans contrainte, *i.e.* des problèmes de la forme :

$$\min_{\mathbf{u}(t), \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_f), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.5a)$$

$$\text{soumis à : } \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (2.5b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.5c)$$

où le champ de vecteurs $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}^n$ et les fonctionnelles $\mathcal{G}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}$

2.2. Conditions nécessaires d'optimalité

et $\mathcal{L}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}$ sont de classe C^1 par rapport à l'ensemble des variables du problème et ne pas dépendent pas explicitement du temps¹.

Le système (2.5) correspond au problème d'optimisation dynamique le plus élémentaire. Il s'agit néanmoins d'un problème d'optimisation sous contraintes (différentielles) puisque l'équation d'état (2.5b) est indissociable du critère (2.5a). L'objectif du développement qui suit est d'établir les conditions auxquelles doivent satisfaire les variables de commande $\mathbf{u}(t)$ et les paramètres \mathbf{p} du système à l'optimum. On considère pour cela le hamiltonien \mathcal{H} du système défini par :

$$\mathcal{H}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (2.6)$$

où $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^n$ désignent les variables adjointes du problème. En utilisant cette fonctionnelle, il est possible de réécrire le critère (2.5a) sous la forme :

$$\mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_f), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_f} [\mathcal{H}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) - \boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}}] dt \quad (2.7)$$

Des variations $\delta\mathbf{u}(t)$ du vecteur de commande et $\delta\mathbf{p}$ du vecteur des paramètres induisent des variations $\delta\mathcal{J}$ du critère données par² :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{J} &= \left[\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \delta\mathbf{x} \right]_{t_f} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}^T} \delta\mathbf{x} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \delta\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta\mathbf{u} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \right) dt \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} (-\delta\boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}} - \boldsymbol{\lambda}^T \delta\dot{\mathbf{x}}) dt \end{aligned} \quad (2.8)$$

En remarquant que $\delta\dot{\mathbf{x}} = \delta\mathbf{f}$ et en réarrangeant les termes, (2.8) peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{J} &= \left[\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \delta\mathbf{x} \right]_{t_f} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}^T} \delta\mathbf{x} - \boldsymbol{\lambda}^T \delta\dot{\mathbf{x}} \right) dt + \int_{t_0}^{t_f} \delta\boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} - \mathbf{f} \right) dt \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta\mathbf{u} dt + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} dt \end{aligned} \quad (2.9)$$

En intégrant alors par parties le terme $\int_{t_0}^{t_f} \boldsymbol{\lambda}^T \delta\dot{\mathbf{x}} dt = [\boldsymbol{\lambda}^T \delta\mathbf{x}]_{t_0}^{t_f} - \int_{t_0}^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}}^T \delta\mathbf{x} dt$ et en posant $\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}^T}$, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{J} &= \left[\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} - \boldsymbol{\lambda}^T \right) \delta\mathbf{x} \right]_{t_f} + [\boldsymbol{\lambda}^T \delta\mathbf{x}]_{t_0} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta\mathbf{u} dt + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} dt \end{aligned} \quad (2.10)$$

¹Cette condition ne nuit pas à la généralité du problème. Tout système non-autonome de la forme $\dot{\mathbf{x}} = f(\mathbf{x}, t)$ peut être vu comme une partie d'un système autonome de plus grande dimension $\dot{\tilde{\mathbf{x}}} = \tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}})$, avec $\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}, t)$ et $\tilde{f}(\tilde{\mathbf{x}}) = (f(\mathbf{x}, t), 1)$.

²L'instant final t_f de l'optimisation est ici supposé fixé.

Si l'on considère, de plus, que les conditions initiales sont fixées ($\delta \mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$), les variations du critère s'écrivent finalement :

$$\begin{aligned}\delta \mathcal{J} &= \left[\left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} - \boldsymbol{\lambda}^T \right) \delta \mathbf{x} \right]_{t_f} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} \\ &\quad + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta \mathbf{u} dt + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} dt\end{aligned}\tag{2.11}$$

Les conditions nécessaires du premier ordre pour que la commande $\mathbf{u}(t)$ et les paramètres \mathbf{p} soient optimaux sont déterminées de sorte que les variations $\delta \mathcal{J}$ du critère soient nulles, quelles que soient les variations $\delta \mathbf{u}(t)$ et $\delta \mathbf{p}$. Ces conditions sont explicitement données par le développement précédent :

- la condition d'optimalité de la commande :

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{u}^T}, \quad \forall t \in [t_0, t_f]\tag{2.12a}$$

- la condition d'optimalité des paramètres :

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}^T} dt\tag{2.12b}$$

- la définition des variables adjointes :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{x}^T}, \quad \forall t \in [t_0, t_f]\tag{2.12c}$$

- les conditions terminales adjointes :

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_f) = \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_f}\tag{2.12d}$$

Les conditions nécessaires d'optimalité (2.12) constituent un problème aux conditions limites partagées (*Two Point Boundary Value Problem*, TPBVP) de dimension $2n+m+\ell$. Ce système est composé de n équations d'état (2.5b) et conditions initiales (2.5c), de n équations différentielles adjointes (2.12c) et conditions terminales (2.12d), de m équations algébriques (2.12a) qui caractérisent la commande optimale \mathbf{u} et de ℓ équations algébriques (2.12b) relatives aux paramètres optimaux \mathbf{p} .

2.2.2 Système différentiel paramétré discontinu sans contrainte

Les conditions d'optimalité d'une classe particulière de systèmes hybrides discrets/continus sont ici développées. Les phénomènes hybrides peuvent être classés en deux catégories.

Les commutations (*switch*) font référence à un changement discret de la forme du système dynamique (mode), suite à un événement qui se produit lorsqu'une condition donnée est vérifiée. Les différentes formes que peut prendre le système dynamique sont appelées les *modes* du système. Les instants de commutation peuvent être

2.2. Conditions nécessaires d'optimalité

connus *a priori* (*time events*) ou bien définis implicitement (*state events*) par la donnée d'une relation faisant intervenir l'état du système, par exemple :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) \quad \text{si } s(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) < 0 \quad (2.13a)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) \quad \text{si } s(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) \geq 0 \quad (2.13b)$$

où $\mathbf{f}^{(1)}$ (resp. $\mathbf{f}^{(2)}$) décrit l'évolution dynamique du système lorsque $s(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) < 0$ (resp. $s(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) \geq 0$). Les instants de commutation t_i sont alors définis par :

$$t_i = \{t \in [t_0, t_f] \mid s(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) = 0\} \quad (2.14)$$

Il est important de noter que lorsque les événements sont définis par des relations (d'état) implicites, ni l'ordre d'occurrence des instants de commutation ni leurs nombres ne sont, en général, connus d'avance. Aussi, ce type de système donne généralement lieu à des problèmes d'optimisation non réguliers, difficiles à résoudre par les méthodes déterministes classiques (Barton et al., 2000). Dans ce cas, l'utilisation de méthodes d'optimisation stochastiques constitue l'unique alternative à l'heure actuelle.

Les sauts (*jumps*) font référence à la discontinuité de l'état du système dynamique lors d'événements se produisant à un instant donné. Comme précédemment ces sauts peuvent être définis explicitement ou implicitement, par exemple :

$$\begin{aligned} \forall t_i \in [t_0, t_f], \quad & s(\mathbf{x}(t_i^-), \mathbf{u}(t_i^-), \mathbf{p}, t_i) = 0, \\ & j(\mathbf{x}(t_i^-), \dot{\mathbf{x}}(t_i^-), \mathbf{u}(t_i^-), \mathbf{x}(t_i^+), \dot{\mathbf{x}}(t_i^+), \mathbf{u}(t_i^+), \mathbf{p}, t_i) = 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

où s et j désignent respectivement la condition de commutation (événement) et la condition de transition (discontinuité).

Dans ce paragraphe, le développement des conditions d'optimalité est limité à une classe particulière de systèmes hybrides fonctionnant en commutation¹ :

- le problème d'optimisation consiste à minimiser la fonctionnelle \mathcal{J} définie par :

$$\min_{\mathbf{u}(t), \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_1^-), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}^-), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.16a)$$

- le système dynamique continu est donné par :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}), \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-] \quad (2.16b)$$

$$\mathbf{x}(t_0^+) = \mathbf{x}_0 \quad (2.16c)$$

$$\mathbf{x}(t_i^+) = \mathbf{x}(t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.16d)$$

- les n_s instants de commutation $t_1, t_2, \dots, t_{n_s} = t_f$ sont ordonnés et définis explicitement par les relations suivantes :

$$s_i(\mathbf{p}, t_i^-) = 0, \quad t_i \in [t_0, t_f], \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.16e)$$

¹Un développement similaire est donné dans Ruban (1997) lorsque l'état présente des discontinuités.

où les champs de vecteurs $\mathbf{f}^{(i)}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}^n$ et les fonctionnelles $\mathcal{G}: \overbrace{\mathbb{R}^n \times \cdots \times \mathbb{R}^n}^{n_s \text{ fois}} \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}$, $\mathcal{L}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^\ell \rightarrow \mathbb{R}$ et $s_i: \mathbb{R}^\ell \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ sont de classe \mathcal{C}^1 par rapport à l'ensemble des variables du problème.

Comme dans le cas des systèmes continus, l'utilisation des hamiltoniens $\mathcal{H}^{(i)}$ (2.17) permet de réécrire le critère \mathcal{J} sous la forme (2.18) :

$$\mathcal{H}^{(i)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_1^-), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}^-), \mathbf{p}) \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} [\mathcal{H}^{(i)}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p})] dt \end{aligned} \quad (2.18)$$

Les variations $\delta\mathcal{J}$ engendrées par des variations $\delta\mathbf{u}(t)$ et $\delta\mathbf{p}$ des vecteurs de commande et des paramètres s'écrivent :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{J} &= \sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} \delta\mathbf{x}_{t_i^-} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} (\mathcal{H}^{(i)} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(i)})_{t_i^-} \delta t_i - \sum_{i=1}^{n_s} (\mathcal{H}^{(i)} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(i)})_{t_{i-1}^+} \delta t_{i-1} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left(\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \delta\mathbf{x} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \delta\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta\mathbf{u} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \right) dt \\ &\quad - \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} (\delta\boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(i)} + \boldsymbol{\lambda}^T \delta\mathbf{f}^{(i)}) dt \end{aligned} \quad (2.19)$$

En utilisant le fait que $\delta\dot{\mathbf{x}} = \delta\mathbf{f}^{(i)}$, $\forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-]$ et que $\delta t_i = -\boldsymbol{\sigma}_i^T \delta\mathbf{p}$ avec $\boldsymbol{\sigma}_i = \left[\left(\frac{\partial s_i}{\partial t} \Big|_{t_i^-} \right)^{-1} \frac{\partial s_i}{\partial \mathbf{p}^T} \right]^T$, (2.19) devient :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{J} &= \sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} \delta\mathbf{x}_{t_i^-} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s-1} \left[-(\mathcal{H}^{(i)} - \boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}})_{t_i^-} + (\mathcal{H}^{(i+1)} - \boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}})_{t_i^+} \right] \boldsymbol{\sigma}_i^T \delta\mathbf{p} - (\mathcal{H}^{(n_s)} - \boldsymbol{\lambda}^T \dot{\mathbf{x}})_{t_{n_s}^-} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T \delta\mathbf{p} \\ &\quad + \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_0^+} \delta\mathbf{x}(t_0^+) + \sum_{i=1}^{n_s} \left[-\boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_i^-} \delta\mathbf{x}(t_i^-) + \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_i^+} \delta\mathbf{x}(t_i^+) \right] - \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_{n_s}^-} \delta\mathbf{x}(t_{n_s}^-) \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left(\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} - \mathbf{f}^{(i)T} \right) \delta\boldsymbol{\lambda} dt + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left(\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} + \dot{\boldsymbol{\lambda}}^T \right) \delta\mathbf{x} dt \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta\mathbf{u} dt + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta\mathbf{p} dt \end{aligned} \quad (2.20)$$

Comme de plus,

$$\delta \mathbf{x}_{t_0} = \mathbf{0} \quad (2.21a)$$

$$\delta \mathbf{x}_{t_i^+} = \delta \mathbf{x}_{t_i^-} \quad (2.21b)$$

$$\delta \mathbf{x}_{t_i^\pm} = \delta \mathbf{x}(t_i^\pm) + \dot{\mathbf{x}}(t_i^\pm) \delta t_i = \delta \mathbf{x}(t_i^\pm) - \dot{\mathbf{x}}(t_i^\pm) \boldsymbol{\sigma}_i^T \delta \mathbf{p} \quad (2.21c)$$

et si l'on pose $\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T}$, $\forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-]$, les variations $\delta \mathcal{J}$ s'écrivent :

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{J} &= \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} + \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_i^+} - \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_i^-} \right) \delta \mathbf{x}_{t_i^-} + \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}^-} - \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_{n_s}^-} \right) \delta \mathbf{x}_{t_{n_s}} \\ &\quad + \left[\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\mathcal{H}_{t_i^-}^{(i)} - \mathcal{H}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \boldsymbol{\sigma}_i^T - \mathcal{H}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T \right] \delta \mathbf{p} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta \mathbf{u} dt + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} dt \end{aligned} \quad (2.22)$$

Comme précédemment, les conditions nécessaires d'optimalité du premier ordre sont explicitement données par le développement (2.22) :

- la condition d'optimalité de la commande :

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T}, \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.23a)$$

- la condition d'optimalité des paramètres :

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\mathcal{H}_{t_i^-}^{(i)} - \mathcal{H}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \boldsymbol{\sigma}_i^T - \mathcal{H}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} dt \quad (2.23b)$$

- la définition des variables adjointes :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T}, \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.23c)$$

- les conditions terminales adjointes :

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_{n_s}) = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}^-} \quad (2.23d)$$

- les conditions de continuité adjointes :

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-}, \quad i = 1 \dots n_s - 1 \quad (2.23e)$$

Ces conditions définissent un TPBVP composé de n équations d'état, conditions initiales et conditions de continuité, de n équations adjointes, conditions terminales et conditions de continuité, de m équations algébriques qui caractérisent la commande optimale $\mathbf{u}(t)$ et de ℓ relations algébriques relatives aux paramètres optimaux \mathbf{p} .

Il est important de noter que si le terme \mathcal{G} du critère d'optimisation dépend de l'état du système aux instants de commutation t_1, \dots, t_{n_s} , alors les variables adjointes présentent des discontinuités (2.23e). On peut vérifier d'autre part, qu'en supprimant la possibilité de commutation entre les différents modes de fonctionnement $f^{(i)}$, on retrouve les conditions d'optimalité (2.12), qui ont été établies pour les systèmes dynamiques paramétrés continus.

2.2.3 Problèmes d'optimisation sous contraintes

Les conditions d'optimalité obtenues dans le paragraphe précédent sont relatives à des problèmes d'optimisation sans contrainte. Néanmoins, ce type de problèmes est généralement associé à des contraintes de différents types sur l'état et/ou sur la commande qu'il est donc nécessaire de pouvoir prendre en compte. On peut distinguer six types de contraintes (Goh et Teo, 1988; Chen et Hwang, 1990) :

(i) Contrainte d'égalité de dimension infinie :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) = 0, \quad t \in [\tau_1, \tau_2], \quad t_0 \leq \tau_1 < \tau_2 \leq t_f \quad (2.24a)$$

(ii) Contrainte d'inégalité de dimension infinie :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) \geq 0, \quad t \in [\tau_1, \tau_2], \quad t_0 \leq \tau_1 < \tau_2 \leq t_f \quad (2.24b)$$

(iii) Contrainte d'égalité intérieure :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \tau) = 0, \quad \tau \in [t_0, t_f] \quad (2.24c)$$

(iv) Contrainte d'inégalité intérieure :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \tau) \geq 0, \quad \tau \in [t_0, t_f] \quad (2.24d)$$

(v) Contrainte d'égalité terminale :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t_f) = 0 \quad (2.24e)$$

(vi) Contrainte d'inégalité terminale :

$$\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t_f) \geq 0 \quad (2.24f)$$

Toutes ces contraintes peuvent être représentées sous une forme canonique, qui est identique à la forme générale du critère d'optimisation (2.16a) pour lequel on réservera l'indice $j = 0$:

$$\mathcal{J}_j = \mathcal{G}_j(\mathbf{x}(t_1), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_{n_s}} \mathcal{L}_j(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.25)$$

Les différents types de contraintes, leurs formes canoniques et la conditions à satisfaire sont présentées dans le récapitulatif suivant :

(i) Contrainte d'égalité de dimension infinie :

$$\mathcal{G}_j = 0 \quad \mathcal{L}_j = \omega [\phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t)]^2 \quad \mathcal{J}_j = 0 \quad (2.26a)$$

où ω est un facteur de pondération positif et ajustable.

(ii) Contrainte d'inégalité de dimension infinie :

$$\mathcal{G}_j = 0 \quad \mathcal{L}_j = \omega \min[0, \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t)] \quad \mathcal{J}_j = 0 \quad (2.26b)$$

2.2. Conditions nécessaires d'optimalité

La fonction \min introduite n'est pas dérivable. Pour éviter ces problèmes, il est préférable d'utiliser une fonction \min avec un exposant supérieur à 1, par exemple (Vassiliadis et al., 1994) :

$$\mathcal{L}_j = \omega \min [0, \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t)]^{2\xi} , \quad \xi \geq 1$$

(iii) Contrainte d'égalité intérieure :

$$\mathcal{G}_j = \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \tau) \quad \mathcal{L}_j = 0 \quad \mathcal{J}_j = 0 \quad (2.26c)$$

(iv) Contrainte d'inégalité intérieure :

$$\mathcal{G}_j = \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \tau) \quad \mathcal{L}_j = 0 \quad \mathcal{J}_j \geq 0 \quad (2.26d)$$

(v) Contrainte d'égalité terminale :

$$\mathcal{G}_j = \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t_f) \quad \mathcal{L}_j = 0 \quad \mathcal{J}_j = 0 \quad (2.26e)$$

(vi) Contrainte d'inégalité terminale :

$$\mathcal{G}_j = \phi(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t_f) \quad \mathcal{L}_j = 0 \quad \mathcal{J}_j \geq 0 \quad (2.26f)$$

En utilisant ces formes canoniques, on peut associer à chaque contrainte un hamiltonien \mathcal{H}_j et un vecteur adjoint $\boldsymbol{\lambda}_j$:

- Pour les types de contraintes (i) et (ii) :

$$\mathcal{H}_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \mathcal{L}_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) + \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (2.27a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (2.27b)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j(t_f) = \mathbf{0} \quad (2.27c)$$

$$(2.27d)$$

- Pour les types de contraintes (iii) et (iv) :

$$\mathcal{H}_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (2.28a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (2.28b)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j^T(t_f) = \mathbf{0}^T \quad (2.28c)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j^T(\tau^-) = \boldsymbol{\lambda}_j^T(\tau^+) + \left. \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{\tau} \quad (2.28d)$$

- Pour les types de contraintes (v) et (vi) :

$$\mathcal{H}_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) = \boldsymbol{\lambda}_j^T \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}) \quad (2.29a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}_j^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (2.29b)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_j^T(t_f) = \left. \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_f} \quad (2.29c)$$

Chapitre 2. Méthodes d'optimisation dynamique

L'inclusion des contraintes dans le problème d'optimisation dynamique est réalisée en augmentant le critère initial des contraintes pondérées :

$$\bar{\mathcal{J}} = \mathcal{J}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \mathcal{J}_j \quad (2.30)$$

où r désigne le nombre de contraintes et $\boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^r$ le vecteur des multiplicateurs de Lagrange. En définissant le vecteur adjoint augmenté $\bar{\boldsymbol{\lambda}}$ et les fonctionnelles augmentées $\bar{\mathcal{H}}$ et $\bar{\mathcal{G}}$ par :

$$\bar{\boldsymbol{\lambda}} = \boldsymbol{\lambda}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \boldsymbol{\lambda}_j , \quad (2.31a)$$

$$\bar{\mathcal{H}} = \mathcal{H}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \mathcal{H}_j , \quad (2.31b)$$

$$\bar{\mathcal{G}} = \mathcal{G}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \mathcal{G}_j , \quad (2.31c)$$

le développement au premier ordre des variations de $\bar{\mathcal{J}}$ est alors similaire, en tous points, à celui des variations de \mathcal{J} (2.22) dans le cas non constraint :

$$\begin{aligned} \delta \bar{\mathcal{J}} &= \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\frac{\partial \bar{\mathcal{G}}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i} + \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \Big|_{t_i^+} - \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \Big|_{t_i^-} \right) \delta \mathbf{x}_{t_i} + \left(\frac{\partial \bar{\mathcal{G}}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}} - \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T \Big|_{t_{n_s}^-} \right) \delta \mathbf{x}_{t_{n_s}} \\ &\quad + \left[\frac{\partial \bar{\mathcal{G}}}{\partial \mathbf{p}^T} - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\bar{\mathcal{H}}_{t_i^-}^{(i)} - \bar{\mathcal{H}}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \boldsymbol{\sigma}_i^T - \bar{\mathcal{H}}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T \right] \delta \mathbf{p} \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \delta \mathbf{u} dt + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} \delta \mathbf{p} dt \end{aligned} \quad (2.32)$$

$$\text{avec : } \dot{\bar{\boldsymbol{\lambda}}}^T = - \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T}, \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], i = 1 \dots n_s \quad (2.33)$$

Ainsi, les conditions d'optimalité du problème d'optimisation sous contraintes sont définies par le TPBVP suivant :

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T}, \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], i = 1 \dots n_s \quad (2.34a)$$

$$\mathbf{0} = \frac{\partial \bar{\mathcal{G}}}{\partial \mathbf{p}^T} - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\bar{\mathcal{H}}_{t_i^-}^{(i)} - \bar{\mathcal{H}}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \boldsymbol{\sigma}_i^T - \bar{\mathcal{H}}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \bar{\mathcal{H}}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} dt \quad (2.34b)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \left(\frac{\partial \mathcal{H}_j^{(i)}}{\partial \bar{\boldsymbol{\lambda}}^T} \right)^T, \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], i = 1 \dots n_s \quad (2.34c)$$

$$\mathbf{x}(t_0^+) = \mathbf{x}_0 \quad (2.34d)$$

$$\mathbf{x}(t_i^+) = \mathbf{x}(t_i^-), i = 1 \dots n_s - 1 \quad (2.34e)$$

$$\dot{\lambda}_j^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_j^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T}, \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], i = 1 \dots n_s, j = 0 \dots r \quad (2.34f)$$

$$\lambda_j^T(t_{n_s}) = \left. \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_{n_s}^-}, j = 0 \dots r \quad (2.34g)$$

$$\lambda_j^T(t_i^-) = \lambda_j^T(t_i^+) + \left. \frac{\partial \mathcal{G}_j}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_i^-}, i = 1 \dots n_s - 1, j = 0 \dots r \quad (2.34h)$$

$$0 = \nu_j \delta_j, j = 0 \dots r \quad (2.34i)$$

$$0 \leq \nu_j \text{ si } j \in \mathcal{I}_{ineg} \quad (2.34j)$$

où $\mathcal{I}_{ineg} \subset \{1, \dots, r\}$ désigne l'ensemble des contraintes d'inégalités du problème.

Comme dans le cas sans contrainte, le TPBVP résultant est constitué de n équations différentielles d'état, conditions initiales et conditions de continuité, de n équations différentielles adjointes, conditions terminales et conditions de continuité, de m équations algébriques qui caractérisent l'optimalité de la commande $\mathbf{u}(t)$, et de ℓ équations algébriques relatives aux paramètres \mathbf{p} . À cela s'ajoute n équations différentielles adjointes, conditions terminales et conditions de continuité pour chaque contrainte, ainsi qu'une relation algébrique (2.34i) lorsqu'il s'agit de contraintes d'égalité et deux relations (2.34i),(2.34j) pour les contraintes d'inégalité. Ces relations algébriques complémentaires permettent de déterminer respectivement les valeurs optimales des multiplicateurs de Lagrange et de Karush-Khun-Tucker (KKT) associés aux contraintes.

Une manière indirecte de résoudre les problèmes d'optimisation dynamique consiste à trouver une solution au TPBVP sous-jacent, *e.g.* (2.34). Cette recherche peut être abordée soit de manière globale en considérant les grandeurs augmentées $\bar{\mathbf{X}}, \bar{\mathcal{H}}$, etc., soit de manière individuelle en calculant les composantes du vecteur $\boldsymbol{\nu}$ des multiplicateurs de Lagrange et de KKT. L'application de telles méthodes peut cependant s'avérer problématique en pratique, et la mise en œuvre de méthodes de résolution directes est souvent préférée. La description de ces méthodes fait l'objet de la partie suivante.

2.3 Méthodes de résolution numériques

Les conditions d'optimalité pour des systèmes différentiels paramétrés continus et discontinus, sous contraintes ou non, ont été présentées dans le paragraphe précédent. Pour ce type de systèmes, l'application des méthodes variationnelles conduit à des problèmes aux limites partagées algébro-différentiels.

La non-linéarité des systèmes différentiels considérés est un aspect important des problèmes d'optimisation étudiés. L'intérêt de la communauté scientifique envers les systèmes non-linéaires est en effet assez récent. On trouve dans la littérature un grand nombre d'études relatives à des systèmes de la forme (2.35) :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) + \mathbf{u}^T \cdot \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) \quad (2.35)$$

Chapitre 2. Méthodes d'optimisation dynamique

Dans le cadre de l'étude des petites stations d'épuration, il est toutefois nécessaire de s'intéresser à une forme plus générale de systèmes différentiels (2.36) :

$$\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{u}, \boldsymbol{p}) \quad (2.36)$$

Les études consacrées aux systèmes de cette forme ne sont pas rares, mais restent néanmoins trop peu nombreuses, et ce malgré la variété des systèmes qui correspondent à cette description.

Le fait que les conditions d'optimalité s'expriment sous la forme d'un TPBVP pose également de nombreux problèmes. Intégrer les équations d'état et les équations adjointes dans le sens contraire à leurs conditions aux limites naturelles peut être à l'origine d'instabilités (Ray et Szekely, 1973). Les équations d'état ne sont, en effet, stables que dans le sens d'intégration direct et les équations adjointes, dans le sens d'intégration inverse. Même si elles ne sont pas systématiques, ces instabilités sont fréquentes et dépendent de la nature du système état/adjoint considéré.

Les problèmes aux conditions limites partagées sont ainsi beaucoup plus difficiles à résoudre, théoriquement et numériquement, que les problèmes aux seules conditions initiales (*Initial Value Problem*, IVP) : théoriquement, en raison de l'absence de démonstration générale concernant l'existence et l'unicité de la solution des TPBVP ; numériquement, puisqu'il n'existe pas d'approche permettant d'obtenir systématiquement la solution lorsqu'elle existe. Plusieurs méthodes permettent cependant de résoudre les TPBVP linéaires, mais ces techniques ne sont plus adaptées dès lors que le problème est non-linéaire. Il est alors nécessaire de recourir à des techniques itératives, dont la convergence n'est pas garantie et est souvent lente (Cash et Wright, 1990, 1991). Pour s'affranchir de la résolution des TPBVP, il est courant de rechercher des solutions approximatives du problème original.

Ces méthodes de résolution sont précisées ci-après. Un bref aperçu des méthodes permettant de résoudre les TPBVP résultant du Principe du Maximum (méthodes indirectes) est d'abord donné. Les différentes techniques mettant en jeu des solutions optimales approximatives (méthodes directes) sont ensuite détaillées. Ni les méthodes basées sur le Principe d'optimalité de Bellman (*e.g.* programmation dynamique, IDP (*Iterative Dynamic Programming*), *etc.*), ni les méthodes d'optimisation stochastiques (*e.g.* algorithmes génétiques, recuit simulé, ICRS, *etc.*), ne sont en revanche présentées. Pour terminer, il convient de rappeler que les méthodes d'optimisation envisagées sont des méthodes locales, et qu'en raison de la non convexité des systèmes différentiels impliqués, leur application ne garantit en aucune manière d'atteindre l'optimum global des problèmes étudiés.

2.3.1 Méthodes de résolution indirectes

Les méthodes indirectes consistent à trouver des solutions aux TPBVPs issus des conditions d'optimalité. En d'autres termes, il s'agit d'identifier une solution qui vérifie ces conditions, ce qui revient à résoudre indirectement le problème d'optimisation. De nombreuses variantes existent et sont le plus souvent des méthodes itératives. Ces techniques de résolution n'ont pas été utilisées dans cette étude. Aussi, seul un rapide aperçu des principales méthodes indirectes est ici donné (*e.g.* Bryson et Ho, 1975; Lee, 1968).

La méthode de l'immersion invariante (*Invariant Imbedding*) consiste à transformer le TPBVP en un système d'équations aux dérivées partielles aux conditions initiales. Cette démarche, dont les développements sont très étendus dès lors que le système étudié est linéaire, s'applique également aux TPBVPs non-linéaires. La différence réside alors dans la complexité du système d'équation aux dérivées partielles à résoudre.

La méthode de la BCI (*Boundary Conditions Iteration*, itération sur les conditions limites) consiste à rechercher les conditions initiales manquantes du système adjoint. Ces conditions initiales sont calculées de sorte que les variables adjointes soient égales, à l'instant final, aux conditions terminales adjointes optimales. À chaque itération, les équations d'état et adjointes sont ainsi intégrées dans le sens direct ; le profil de commande $\mathbf{u}(t)$ et les paramètres \mathbf{p} sont calculés en résolvant, à chaque instant, les conditions d'optimalité du hamiltonien par rapport à $\mathbf{u}(t)$ et \mathbf{p} , *e.g.* (2.23a), (2.23b). Une des difficultés de cette méthode est que, compte tenu de la non-linéarité du TPBVP, il est difficile de prévoir le comportement d'une extrémité en fonction de l'autre. Cette méthode engage donc des temps de calcul souvent très importants.

La méthode CVI (*Control Vector Iteration*, itération sur le vecteur de commande) consiste à imposer un profil de commande, ce qui permet, à l'inverse de la procédure BCI, d'intégrer les équations d'état et adjointes dans leurs sens naturels à partir des conditions aux limites optimales. Le profil de commande $\mathbf{u}(t)$ et les valeurs des paramètres \mathbf{p} sont corrigés au fil des itérations de telle sorte qu'ils vérifient les conditions d'optimalité du hamiltonien \mathcal{H} par rapport à $\mathbf{u}(t)$ et \mathbf{p} .

2.3.2 Méthodes de résolution directes

L'objectif des méthodes directes est de transformer le problème d'optimisation dynamique de dimension infinie en un problème d'optimisation de dimension finie, afin de le résoudre par les méthodes bien connues de programmation non-linéaire. Deux types de méthodes directes se distinguent, l'approche séquentielle et l'approche simultanée.

Approche séquentielle

L'approche séquentielle (*e.g.* Goh et Teo, 1988; Chen et Hwang, 1990), aussi appelée CVP (*Control Vector Parametrization*) ou forme continue-paramétrée, consiste à discréteriser la commande continue en un nombre fini d'éléments, le plus souvent au moyen de polynômes (*e.g.* des polynômes de Lagrange) ou de fonctions de type *spline*. Les coefficients des polynômes et la taille des différents éléments deviennent alors les variables de décision d'un problème de programmation non-linéaire (*NonLinear Programming*, NLP). L'état du système, contrairement à la commande, n'est pas paramétrisé. Il est donc toujours nécessaire d'intégrer le système d'état pour évaluer le critère et les contraintes du problème non-linéaire résultant.

La transformation du problème d'optimisation dynamique de dimension infinie en un problème de dimension finie (problème paramétrique) est obtenue en approximant les

Chapitre 2. Méthodes d'optimisation dynamique

variables de commande $\mathbf{u}(t)$ par des fonctions de la forme :

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(\tilde{\mathbf{u}}, t), \quad k = 1 \dots m \quad (2.37)$$

où $\tilde{\mathbf{u}}$ est un vecteur de paramètres. En raison de ces simplifications, les solutions calculées par la méthode CVP sont inévitablement sous-optimales, par rapport à celles que l'on obtiendrait en résolvant analytiquement les conditions d'optimalité (TPBVP). La pratique montre cependant que même les formes approximatives les plus simples conduisent, en général, à des valeurs optimales du critère qui sont proches de celles obtenues par les méthodes de résolution exactes. Par exemple, l'approximation \mathbf{u}_N du vecteur de commande par un polynôme de Lagrange d'ordre N , sur un intervalle de la forme $[t_{i-1}^+, t_i^-]$ est donnée par :

$$\mathbf{u}(t) = \sum_{j=0}^N \tilde{\mathbf{u}}_{ij} \cdot \phi_j^{(N)}(\tau^{(i)}) , \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-] , \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.38a)$$

$$\text{avec : } \phi_j^{(N)}(\tau^{(i)}) = \begin{cases} 1 & \text{si } N = 0 \\ \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^N \frac{\tau^{(i)} - \tau_k}{\tau_j - \tau_k} & \text{si } N > 0 \end{cases} \quad (2.38b)$$

$$\tau^{(i)} = \frac{t - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \quad (2.38c)$$

$$0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_N < 1 \quad (2.38d)$$

Un des principaux avantages que procure l'utilisation de polynômes de Lagrange est que :

$$\mathbf{u}(t) = \tilde{\mathbf{u}}_{ij} \quad \text{si } \tau^{(i)} = \tau_j , \quad j = 0 \dots N \quad (2.39)$$

Le fait de borner les paramètres $\tilde{\mathbf{u}}_{ij}$ permet donc de borner les profils de commande aux instants τ_j , et même entre ces instants si $N = 0$ ou $N = 1$. Il est également possible de borner ces profils pour des polynômes de Lagrange d'ordre supérieur ($N > 1$), mais cela nécessite d'imposer des contraintes plus compliquées sur les paramètres $\tilde{\mathbf{u}}_{ij}$.

Les points τ_k , $k = 1 \dots N$, peuvent être choisis simplement en prenant des intervalles équidistants ou mieux, en considérant des points de collocation. Dans ce dernier cas, le choix des N points de collocation est connu pour correspondre aux zéros d'un polynôme orthogonal $\mathcal{P}_N^{(\alpha, \beta)}$ (polynôme de Jacobi de degré N) qui vérifie :

$$\int_0^1 \tau^\beta (1 - \tau)^\alpha \tau_j \mathcal{P}_N^{(\alpha, \beta)} d\tau = 0 , \quad j = 0 \dots N - 1 \quad (2.40)$$

On parle alors de collocation orthogonale. Pour améliorer les performances de la méthode CVP, il est possible d'*affiner* le profil de commande en subdivisant les intervalles $[t_{i-1}^+, t_i^-]$ initiaux, ce qui en contrepartie augmente le nombre de paramètres d'optimisation.

Pour un système paramétré discontinu sans contrainte (2.16) par exemple, la forme continue-paramétrée du problème s'écrit sous la forme :

$$\min_{\tilde{\mathbf{a}}, \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_1), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}), \mathbf{p}) + \int_{t_0}^{t_{n_s}} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}_N(t), \mathbf{p}) dt \quad (2.41a)$$

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}_N(t), \mathbf{p}) , \quad \forall t \in [t_{i-1}, t_i] , \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.41b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (2.41c)$$

$$\mathbf{x}(t_i^+) = \mathbf{x}(t_i^-) , \quad i = 1 \dots n_s - 1 \quad (2.41d)$$

La paramétrisation des problèmes sous contraintes est en tous points similaire. On peut en effet se ramener à des expressions paramétrées équivalentes à (2.41a), en exprimant les contraintes sous la forme canonique (*cf.* § 2.2.3, p. 50).

L'algorithme de résolution se décompose en deux sous-problèmes :

- le sous-problème relatif au calcul des valeurs du critère et des contraintes du problème paramétré (intégration du système d'état), et éventuellement de leurs gradients ;
- le sous-problème (maître) relatif la résolution du problème non-linéaire résultant.

La résolution du problème non-linéaire (2.41) peut être envisagée soit par des méthodes de gradient classiques, *e.g.* programmation quadratique successive (*Successive Quadratic Programming, SQP*), soit par des méthodes de recherche directes ou stochastiques, ne nécessitant pas le calcul des gradients du critère et des contraintes. Dans cette étude, une méthode de type *SQP* est utilisée. Cette méthode est performante et robuste : pour un choix adéquat de la fonction de mérite, la séquence de points générées par l'algorithme converge vers un point de KKT (Bazaraa et al., 1993).

La méthode *SQP* a été mise au point dans les années 1970 par Han (1976) et Powell (1978) sur la base des travaux de Wilson (1963). Son principe est détaillé en Annexe C. Elle consiste à approximer le problème d'optimisation non-linéaire sous contrainte par un problème d'optimisation quadratique sous contraintes linéaires. La résolution est basée sur l'estimation du hessien de la fonction lagrangienne du problème non-linéaire. Cette estimation est elle-même construite à partir des gradients du critère et des contraintes par rapport aux paramètres d'optimisation. La précision avec laquelle les gradients du problème sont calculés conditionne ainsi, dans une large mesure, la précision de la méthode.

Trois méthodes peuvent être utilisées pour le calcul des gradients du critère et des contraintes :

La méthode des différences finies est la plus simple à mettre en œuvre mais donne des résultats souvent peu précis. Avec des différences centrées par exemple, une estimation du gradient de la fonctionnelle \mathcal{J} par rapport au vecteur de paramètres \mathbf{p} est donnée par :

$$\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{J} \approx \frac{\mathcal{J}(\mathbf{p} + \delta\mathbf{p}) - \mathcal{J}(\mathbf{p} - \delta\mathbf{p})}{2\delta\mathbf{p}} \quad (2.42)$$

La méthode des sensibilités consiste à intégrer les équations de sensibilité de l'état. Ces équations sont obtenues en différentiant les équations d'état par rapport aux paramètres d'optimisation :

$$\dot{\$}_{\tilde{\mathbf{u}}_{ij}}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \tilde{\mathbf{u}}_{ij}^T} \right) = \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \phi_j^{(N)}(\tau^{(i)}) + \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \$_{\tilde{\mathbf{u}}_{ij}} \quad (2.43a)$$

$$\dot{\$}_{\mathbf{p}}(t) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{p}^T} \right) = \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} + \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \$_{\mathbf{p}} \quad (2.43b)$$

Aux instants de commutation t_i , les sensibilités peuvent admettre des discontinuités qui résultent de la différence de pente entre les modèles $\mathbf{f}^{(i)}$ et $\mathbf{f}^{(i+1)}$. Ces conditions sont obtenues par la différentiation directe des conditions de continuité de l'état à

ces instants.

Lorsque les sensibilités $\mathbf{s}(t)$ sont déterminées, le calcul des gradients est immédiat, e.g. pour le critère d'optimisation (2.41a) :

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{u}}_{ij}} \mathcal{J} = \int_{t_0}^{t_{ns}} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \phi_j^{(N)}(\tau^{(i)}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\tilde{\mathbf{u}}_{ij}} \right) dt \quad (2.44)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{J} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} + \sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{p}} \Big|_{t_i^-} + \int_{t_0}^{t_{ns}} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}^T} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{p}} \right) dt \quad (2.45)$$

La méthode de l'adjoint exploite les conditions d'optimalité données par le Principe du Maximum. Les variations calculées peuvent en effet être reliées aux gradients correspondant par la relation :

$$\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{J} = \frac{\delta \mathcal{J}}{\delta \mathbf{p}^T} \quad (2.46)$$

Pour les systèmes dynamiques paramétrés discontinus, le gradient du critère et des contraintes (sous leurs formes canoniques) se déduit directement de la relation (2.22) :

$$\nabla_{\tilde{\mathbf{u}}_{ij}} \mathcal{J} = \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \phi_j^{(N)}(\tau^{(i)}) dt \quad (2.47a)$$

$$\nabla_{\mathbf{p}} \mathcal{J} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}} + \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\mathcal{H}_{t_i^-}^{(i)} - \mathcal{H}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T + \mathcal{H}_{t_{ns}^-}^{(n_s)} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} dt \quad (2.47b)$$

$$\text{avec : } \boldsymbol{\sigma}_i^T = \left(\frac{\partial s_i}{\partial t} \Big|_{t_i^-} \right)^{-1} \frac{\partial s_i}{\partial \mathbf{p}^T}$$

où les variables adjointes $\boldsymbol{\lambda}$ sont déterminées par l'intégration du système différentiel (2.23c) à partir des conditions terminales (2.23d) et en respectant les conditions de discontinuité (2.23e) aux instants de commutation. On peut également remarquer que dans le cas de la commande paramétrée, l'influence d'un des éléments \tilde{u}_{ij}^k du vecteur $\tilde{\mathbf{u}}^k$ sur le critère \mathcal{J} est limité à l'intervalle $[t_{i-1}^+, t_i^-]$. En d'autres termes, le hamiltonien $\mathcal{H}^{(i)}$ ne dépend de ce paramètre qu'à l'intérieur de cet intervalle.

La précision de la méthode de l'adjoint est équivalente à celle de la méthode des sensibilités. En revanche, la méthode de l'adjoint est plus avantageuse pour les systèmes différentiels de grandes dimensions puisqu'il suffit d'intégrer le système adjoint une seule fois, indépendamment du nombre de paramètres d'optimisation.

L'algorithme de résolution par programmation quadratique successive s'organise de la manière suivante :

- (i) choisir une initialisation des vecteurs de paramètres $\tilde{\mathbf{u}}$ et \mathbf{p}
- (ii) a - intégrer les équations d'état entre t_0 et t_{ns} ,
- b - calculer les valeurs du critère et des contraintes ;

- (iii) a - intégrer les équations adjointes, à rebours, entre t_{n_s} et t_0 ;
b - calculer les gradients du critère et des contraintes ;
- (iv) a - construire le sous-problème quadratique sous contraintes linéaires ;
b - déterminer la direction de recherche pour réduire la fonction de mérite ;
c - minimiser cette fonction de mérite ;
- (v) retourner à l'étape (ii) si nécessaire et utiliser la solution comme nouveau point de départ.

Il est à noter que l'étape (iv) est automatisée dans le code de calcul NLPQL (Schittkowski, 1985). Aussi, la procédure d'implémentation consiste à mettre en œuvre les étapes (ii) et (iii) d'intégration des systèmes d'état et adjoint et de calcul des gradients.

Approche simultanée

L'approche simultanée (*e.g.* Biegler, 1984; Cuthrell et Biegler, 1987; Lodgson et Biegler, 1992), aussi appelée forme paramétrée-paramétrée consiste à discréteriser à la fois l'état et la commande du problème d'optimisation. On se ramène, comme dans le cas de l'approche séquentielle, à la résolution d'un NLP dont les variables de décision sont les coefficients des polynômes qui approximent l'état et la commande. L'avantage de cette approche est qu'il n'est plus nécessaire d'intégrer de systèmes différentiels lors de la résolution du problème non-linéaire. Ceci peut représenter une forte diminution du temps de calcul puisque l'intégration des système différentiel occasionne jusqu'à 95% du temps de calcul de l'approche séquentielle. En contrepartie, la taille du NLP résultant est notablement plus importante, même lorsque le nombre de points de discréétisation est réduit. D'autre part, l'approche simultanée est de type *non-faisable* (contrairement à l'approche séquentielle). Ainsi, les approximations successives de la solution peuvent être assez éloignées de l'état réel du système dynamique tant que l'algorithme n'a pas convergé.

À la manière de la paramétrisation de la commande, on cherche une forme approximative qui permet de représenter les solutions du système différentiel. Contrairement à la commande, l'état est soumis à des contraintes différentielles d'égalité strictes, et la précision de l'approximation doit donc être choisie en conséquence. En particulier, l'approximation de l'état par des polynômes de Lagrange est bien adaptée à la résolution des problèmes différentiels sous contraintes et est très courante (Cuthrell et Biegler, 1987, 1989; Lodgson et Biegler, 1992; Tieu et al., 1995).

Pour un système différentiel discontinu par exemple, l'approximation \mathbf{x}_{N+1} du vecteur d'état sur l'intervalle $[t_{i-1}^+, t_i^-]$ par un polynôme de Lagrange d'ordre $N + 1$ s'écrit :

$$\mathbf{x}_{N+1}(t) = \sum_{j=0}^{N+1} \tilde{\mathbf{x}}_{ij} \psi_j^{(N+1)}(\tau^{(i)}) , \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-] , \quad i = 1 \dots n_s , \quad k = 1 \dots n \quad (2.48a)$$

$$\text{avec : } \psi_j^{(N+1)}(\tau^{(i)}) = \prod_{\substack{l=0 \\ l \neq j}}^{N+1} \frac{\tau^{(i)} - \tau_l}{\tau_j - \tau_l} \quad (2.48b)$$

$$\tau^{(i)} = \frac{t - t_{i-1}}{t_i - t_{i-1}} \quad (2.48c)$$

$$0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_N < \tau_{N+1} = 1 \quad (2.48d)$$

L'approximation de la commande (2.38) par des polynômes de Lagrange a déjà été précisée dans le paragraphe précédent pour l'approche séquentielle.

L'erreur d'approximation entre la solution exacte du système différentiel et l'état approximé est donnée, à chaque instant, par l'équation des résidus :

$$\mathbf{r}(t) = \sum_{j=1}^{N+1} \tilde{\mathbf{x}}_{ij} \dot{\psi}_j(\tau^{(i)}) - \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}_{N+1}(t), \mathbf{u}_N(t), \mathbf{p}), \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], \quad i = 1 \dots n_s \quad (2.49)$$

Pour discréteriser cette équation, une méthode de collocation orthogonale est utilisée :

$$\int_{t_{i-1}^-}^{t_i^+} \mathbf{r}(t) \delta(\tau^{(i)} - \tau_l) dt = \mathbf{0}, \quad i = 1 \dots n_s, \quad l = 1 \dots N + 1 \quad (2.50)$$

où δ est la fonction de Dirac et les points de collocation τ_l correspondent aux racines d'un polynôme de Jacobi $\mathcal{P}_{N+1}^{(\alpha, \beta)}$.

En utilisant ces approximations, on peut alors réécrire le problème d'optimisation (2.16) sous la forme paramétrée-paramétrée suivante :

$$\min_{\tilde{\mathbf{x}}, \tilde{\mathbf{u}}, \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\tilde{\mathbf{x}}_{1,0}, \dots, \tilde{\mathbf{x}}_{n_s,0}, \mathbf{p}) + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \mathcal{L}(\mathbf{x}_{N+1}, \mathbf{u}_N, \mathbf{p}) dt \quad (2.51a)$$

$$\mathbf{0} = \sum_{j=1}^{N+1} \tilde{\mathbf{x}}_{ij} \dot{\psi}_j(\tau_l) - \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}_{N+1}, \mathbf{u}_N, \mathbf{p}), \quad \forall t \in [t_{i-1}^+, t_i^-], \quad i = 1 \dots n_s, \quad l = 0 \dots N + 1 \quad (2.51b)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_{1,0} = \mathbf{x}_0 \quad (2.51c)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_{i+1,0} = \tilde{\mathbf{x}}_{i,n_s}, \quad i = 1 \dots n_s - 1 \quad (2.51d)$$

La forme paramétrée-paramétrée des problèmes sous contraintes est obtenue de façon similaire en considérant les contraintes sous la forme canonique (2.51a). La résolution du problème (2.51) résultant s'effectue alors au moyen des méthodes classiques de programmation non-linéaire, *e.g.* la méthode *SQP*.

2.4 Conclusions

Les méthodes d'optimisation dynamique adaptées à la résolution des problèmes d'optimisation dynamiques formulés dans le premier chapitre ont été présentées. Ces méthodes

déterministes sont limitées à la détermination des variables de commandes continues (profils ou paramètres de commande), *i.e.* ne permettent pas de prendre en compte les variables entières ou binaires. Il s'agit d'autre part de méthodes d'optimisation locales qui ne garantissent pas d'obtenir l'optimum global des problèmes considérés.

L'application des méthodes directes séquentielle et simultanée est envisagée. Ces méthodes sont basées sur l'approximation de l'état et/ou de la commande du système dynamique afin de se ramener à la résolution de problèmes d'optimisation non-linéaire. Leurs aptitudes à gérer les contraintes les rendent particulièrement intéressantes. Elles constituent un très bon compromis entre deux exigences fondamentales : (*i*) la nécessité d'améliorer le fonctionnement du système (optimalité des résultats) et (*ii*) la nécessaire simplicité d'utilisation pour une application sur site industriel (bornes, contraintes, rapidité).

L'approche séquentielle consiste à approximer le profil de commande par des fonctions paramétrées. Elle présente l'avantage d'être de type *faisable*, mais nécessite d'intégrer, à chaque itération, des systèmes différentiels. Le calcul des gradient du critère et des contraintes des problèmes considérés représente donc une part importante du temps de résolution, jusqu'à 95%. L'approche simultanée permet d'éviter ces problème en paramétrant conjointement la commande et l'état du système. En contrepartie, elle peut nécessiter de résoudre des problèmes non-linéaires de très grandes dimensions et est de type *non-faisable*.

Le choix de l'une ou l'autre de ces approches dépend des spécificités de chaque problème. Leurs applications pour le calcul des politiques optimales d'aération des petites stations d'épuration à boues activées fait l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 3

Fonctionnement optimal du procédé

Il ne faut pas dire que la science est utile parce qu'elle nous permet de construire des machines. Il faut dire : les machines sont utiles parce qu'elles nous permettent de faire de la science

RAYMOND POINCARÉ

La formulation des problèmes d'optimisation du fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées et la description des méthodes d'optimisation dynamique ont fait l'objet des deux premiers chapitres de ce manuscrit. Ce chapitre est consacré à l'application des méthodes d'optimisation dynamique pour l'amélioration des performances de ces petites unités de traitement. L'objectif est d'évaluer le gain potentiel qui peut être réalisé, par rapport aux modes de gestion actuels du procédé, en optimisant le fonctionnement du système d'aération. Deux types d'optimisation sont envisagés, (*i*) la minimisation des rejets d'azote total, et (*ii*) la minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur.

Afin de démontrer les potentialités des méthodes d'optimisation dynamique, la détermination des conditions optimales de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées a été envisagée en s'intéressant, dans un premier temps, à des cas d'étude théoriques, tirés de la littérature. Ces résultats ont fait l'objet de différentes publications et communications (*e.g.* Chachuat et al., 2001a,b,c, soumis pour publication) et ne sont pas présentés ici pour ne pas alourdir le contenu de ce document.

Les résultats présentés dans ce chapitre sont relatifs à une unité de traitement existante¹. La configuration du procédé, ainsi que la procédure d'identification paramétrique, ont été reportées en Annexe D ; seuls les principaux résultats sont rappelés dans la première partie (§ 3.1). Les aspects relatifs à la résolution numérique des problèmes d'optimisation sont ensuite détaillés dans la deuxième partie (§ 3.2). Les conditions optimales de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées, obtenues en considérant le modèle mathématique complet du procédé, font l'objet de la partie 3.3. En raison des

¹Les résultats présentés dans ce chapitre ont été soumis en partie pour publication dans *Industrial & Engineering Chemistry Research* (Chachuat et al., en préparation).

temps de calcul nécessaires pour déterminer les profils optimaux d'aération, des simplifications sont apportées aux problèmes d'optimisation afin de faciliter leurs résolutions ; ces simplifications, qui concernent à la fois le modèle mathématique du procédé et la dimension des problèmes d'optimisation, sont détaillées dans la quatrième partie (§ 3.4). En dernier lieu, l'optimisation à long terme du procédé est abordée dans la partie 3.5 de manière à vérifier que les politiques optimales calculées garantissent un fonctionnement fiable du système et que les performances annoncées sont durables.

3.1 Étude d'une unité de traitement existante

L'étude d'une unité de traitement existante est envisagée afin de pouvoir évaluer les gains potentiels qui peuvent être réalisés en pratique. Cette unité de traitement est une filière de configuration classique comprenant un étage de pré-traitement (dégrillage, dessablage, déshuileage et décantation primaire), suivi d'un étage de traitement biologique (bassin d'aération et clarificateur).

Les caractéristiques de la partie biologique du traitement sont résumées sur la Fig. D.2 (p. 251). Les réactions de dégradation s'effectuent au sein d'un réacteur unique dont l'aération et le brassage sont assurés par 3 turbines de 30 kW chacune ; la gestion des cycles d'aération est réalisée au moyen d'horloges et la durée journalière d'aération est de 12h45 (Fig. D.3, p. 251). Le clarificateur est de type cyclindro-conique et les débits de recyclage et d'extraction des boues sont constants, respectivement de l'ordre de $Q^{rec} = 7\,600 \text{ m}^3/\text{j}$ et $Q^{purge} = 75 \text{ m}^3/\text{j}$.

Les modèles mathématiques présentés dans le premier chapitre ont fait l'objet d'une procédure d'identification paramétrique. La description de cette procédure est détaillée en Annexe D. Seuls les principaux résultats sont ici rappelés.

Données expérimentales

Les mesures expérimentales disponibles sur cette unité sont issues d'une campagne de mesure de 24 heures¹. Ces données sont de trois types :

- *des prélèvements moyens* de 2 heures d'effluent pré-traité (sortie du décanteur primaire) sur lesquels les concentrations en DCO , DCO_s , NTK et NH_4 et le débit sont mesurés ;
- *des prélèvements moyens* de 2 heures d'effluent traité (sortie du clarificateur) sur lesquels les mesures des concentrations en DCO , DCO_s , NTK , NH_4 , NO_3 et MES sont disponibles ;
- *des prélèvements instantanés* de liqueur mixte et de boues de recirculation, réalisés à 14h et 16h, et sur lesquels les concentrations en DCO , MES et NTK , et en MES , sont respectivement mesurées.

Le nombre et la diversité de ces mesures permet d'envisager, dans de bonnes conditions, l'identification paramétrique des modèles mathématiques définis dans le Chapitre 1. D'une

¹Mesures mises à disposition par la Direction Technique des Opérations du groupe Vivendi Environnement et de la société Anjou Recherche.

3.1. Étude d'une unité de traitement existante

part, les prélèvements moyens d'effluent pré-traité permettent de connaître précisément les perturbations incidentes durant la journée de mesure (*cf.* Fig. 3.1 et Tab. D.5, p. 264) ; d'autre part, les mesures effectuées sur les échantillons d'effluent traité (*cf.* Fig. D.7, p. 258) et les prélèvements de boues (*cf.* Fig. D.6, p. 256) servent directement de base à la procédure d'identification décrite dans le paragraphe suivant.

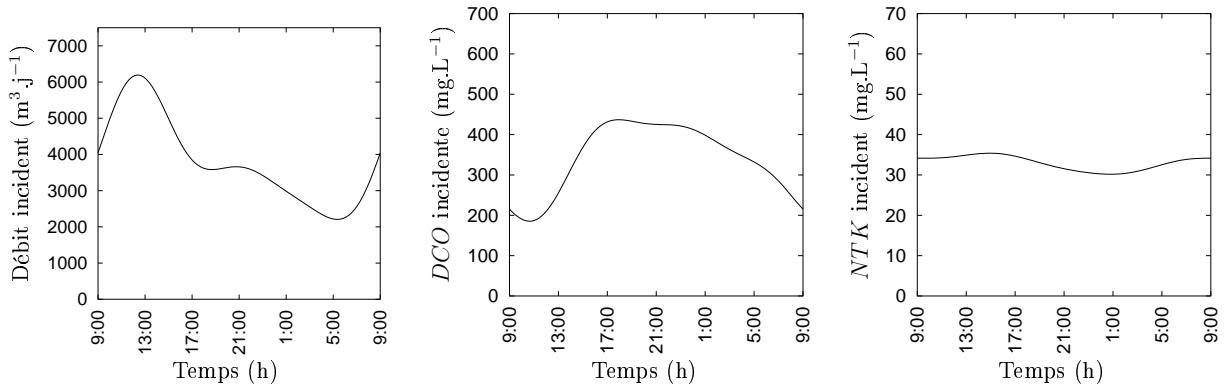


FIG. 3.1 – Perturbations incidentes du procédé : débit et concentrations en *DCO* et *NTK*.

Identification paramétrique des modèles mathématiques

L'identification paramétrique consiste à déterminer le jeu de paramètres qui minimise l'écart entre des valeurs mesurées expérimentalement et prédites théoriquement. Rigoureusement parlant, un problème d'identification est donc un problème d'optimisation dynamique.

Dans le cadre du procédé à boues activées, les modèles sont de grandes dimensions et il n'est donc pas envisageable d'identifier l'ensemble des paramètres de façon systématique. Afin de n'avoir à estimer qu'un nombre réduit de paramètres, la procédure d'identification suivante est appliquée :

1. Sélectionner un jeu de paramètres initial ; les valeurs initiales retenues sont celles définies dans le cadre du *benchmark* (Alex et al., 1999) (Tab. D.4, p. 264) ;
2. Éliminer de la procédure les paramètres dont les valeurs sont connues ou peuvent être estimées directement à partir des mesures effectuées ;
3. Sélectionner parmi les paramètres restants, ceux ayant la plus forte sensibilité – une procédure d'échantillonnage (*latin hypercube sampling*) est mise en œuvre afin d'estimer la sensibilité *moyenne* des paramètres dans leur gamme de variation– ;
4. Identifier les paramètres retenus –méthode de type *SQP*– ;
5. Calculer les intervalles et régions de confiance des paramètres identifiés de manière à déceler les combinaisons redondantes de paramètres et les paramètres peu sensibles ; le cas échéant, les éliminer de la procédure d'identification en leur fixant les valeurs par défaut (étape 1.) et retourner à l'étape 4.

Les résultats de l'identification des modèles complet et simplifié sont rappelés ci-dessous.

Identification paramétrique du modèle complet – Afin d'estimer les conditions initiales du système, le régime stationnaire du procédé est calculé en utilisant les perturbations incidentes mesurées, la politique d'aération actuelle du réacteur et les paramètres par défaut du modèle ; les conditions initiales résultantes sont données dans le Tab. D.6 (p. 266). L'application de la procédure d'identification précédente permet de sélectionner 4 paramètres, Y_H , i_{NBM} , b_H et f_{ns} ; les valeurs estimées sont reportées dans le Tab. 3.1.

Identification paramétrique du modèle simplifié – L'identification paramétrique du modèle simplifié est basée sur des considérations similaires. L'ensemble des paramètres sélectionnés est le même que précédemment. Les estimations de ces paramètres sont données dans le Tab. 3.2.

TAB. 3.1 – Paramètres estimés du modèle complet.

paramètre	valeur
Y_H	$6.18 \cdot 10^{-1}$
i_{NBM}	$7.10 \cdot 10^{-2}$
b_H	$5.49 \cdot 10^{-1} \text{ j}^{-1}$
f_{ns}	$2.89 \cdot 10^{-3}$

TAB. 3.2 – Paramètres estimés du modèle simplifié.

paramètre	valeur
Y_H	$7.58 \cdot 10^{-1}$
i_{NBM}	$6.78 \cdot 10^{-2}$
b_H	$9.41 \cdot 10^{-1} \text{ j}^{-1}$
f_{ns}	$2.45 \cdot 10^{-3}$

Les conditions optimales de fonctionnement de cette unité de traitement sont déterminées sur la base de ces deux modèles mathématiques, en utilisant les paramètres identifiés. Ces résultats sont présentés dans la suite du chapitre.

3.2 Résolution numérique des problèmes d'optimisation

L'expérience acquise lors de la mise en œuvre des méthodes de résolution des problèmes d'optimisation dynamique est rassemblée dans cette partie. Les difficultés rencontrées d'un point de vue pratique ainsi que les précautions prises pour garantir l'optimalité des résultats y sont présentées. Un rapide rappel des problèmes d'optimisation dynamique est proposé ; le choix et les aspects relatifs à l'implémentation numérique de la méthode de résolution sont ensuite détaillés.

3.2.1 Position du problème

Les problèmes d'optimisation relatifs à la minimisation des rejets d'azote total (1.29) et à la minimisation de la consommation énergétique du système d'aération (1.36) ont été explicités dans le premier chapitre de ce manuscrit. Ces deux problèmes sont rappelés ci-dessous.

3.2. Résolution numérique des problèmes d'optimisation

– Minimisation des rejets d'azote total (MR) :

$$\begin{aligned} \min_{N_c, a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}} \mathcal{J} &= \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) \, dt \\ \text{soumis à : } \quad \dot{\mathbf{x}} &= \begin{cases} \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \end{cases} \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \ell^k - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad k = 1 \dots N_c$$

$$t_f = t_0 + \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k$$

– Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur (MCE) :

$$\begin{aligned} \min_{N_c, a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}} \mathcal{J} &= \sum_{k=1}^{N_c} a^k / \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k \\ \text{soumis à : } \quad \dot{\mathbf{x}} &= \begin{cases} \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \end{cases} \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \ell^k - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad k = 1 \dots N_c$$

$$\begin{aligned} 0 &\leq NGL_{\max} - \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq DCO_{\max} - \mathcal{F}_{DCO}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq DBO_{5\max} - \mathcal{F}_{DBO_5}(\mathbf{x}) \\ 0 &\leq MES_{\max} - \mathcal{F}_{MES}(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad \left. \right\} \quad t \in [t_0, t_f]$$

$$t_f = t_0 + \sum_{k=1}^{N_c} \ell^k$$

où les fonctionnelles \mathcal{F}_{NGL} , \mathcal{F}_{DCO} , \mathcal{F}_{DBO_5} et \mathcal{F}_{MES} sont définies par les relations (1.34) ou (1.35) selon le type de modèle utilisé.

Pour les deux problèmes d'optimisation, le comportement du procédé est représenté au moyen d'un système différentiel de type hybride discret/continu dont les deux modes $\mathbf{f}^{(1)}$ et $\mathbf{f}^{(2)}$ font respectivement référence aux séquences durant lesquelles le réacteur est aéré ou non. Mathématiquement, ces modifications se traduisent par la prise en compte ou non du terme \mathcal{A}_O d'apport d'oxygène dans l'équation (1.3) (p. 19) relative à la concentration en oxygène dissous S_O . Le champ de vecteurs du système présente ainsi des discontinuités aux instants de commutation, contrairement aux variables d'état qui restent continues.

Pour un nombre N_c donné de cycles de fonctionnement, le nombre de séquences d'aération et d'arrêt est $2N_c$. Les instants de commutation t_k , $k = 1 \dots 2N_c - 1$, entre les deux modes du système sont définis par des conditions de commutation explicites de la forme $s^{(k)}(\mathbf{p}, t) = 0$. Selon le type de commutation ($\mathbf{f}^{(1)} \curvearrowright \mathbf{f}^{(2)}$ ou $\mathbf{f}^{(2)} \curvearrowright \mathbf{f}^{(1)}$), ces relations

s'écrivent :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} s^{(1)}(\mathbf{p}, t) & = & a^1 - t = 0 \\ s^{(2k-1)}(\mathbf{p}, t) & = & \sum_{i=1}^{k-1} \ell^i + a^k - t = 0, \quad k = 2 \dots N_c \\ s^{(2k)}(\mathbf{p}, t) & = & \sum_{i=1}^k \ell^i - t = 0, \quad k = 1 \dots N_c - 1 \end{array} \right. \quad (3.1)$$

Les instants de commutation t_b^k et t_c^k , respectivement relatifs aux conditions $s^{(2k-1)}$ et $s^{(2k)}$, sont donnés par :

$$t_0 < t_b^1 < t_c^1 < \dots < t_b^{N_c} < t_c^{N_c} \quad (3.2a)$$

$$\text{avec : } t_b^k = \sum_{i=1}^{k-1} \ell^i + a^k, \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.2b)$$

$$t_c^k = \sum_{i=1}^k \ell^i, \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.2c)$$

On rappelle que les paramètres d'optimisation N_c , a^k et ℓ^k , ainsi que les instants de commutation t_b^k et t_c^k , sont illustrés sur la Fig. 1.5 (p. 30).

3.2.2 Méthodes de résolution

En toute rigueur, les problèmes (1.29) et (1.36) sont des problèmes d'optimisation dynamique mixtes, pour lesquels il n'existe pas, à l'heure actuelle, de méthodes de résolution générales. Afin d'éviter ces difficultés, la résolution de ces problèmes est ici envisagée pour un nombre fixé de cycles d'aération, les valeurs optimales de N_c étant alors déterminées par de simples énumérations.

Pour un nombre donné de cycles, le nombre et l'ordre d'occurrence des commutations sont fixés. Dans ces conditions, les problèmes d'optimisation hybride résultants sont *réguliers* (*cf.* § 2.1) et peuvent être résolus par les méthodes d'optimisation dynamique traditionnelles décrites dans le Chapitre 2. En particulier, les méthodes directes, basées sur la paramétrisation du profil de commande et/ou d'état du système, réalisent actuellement le meilleur compromis entre la précision des solutions et le temps de calcul nécessaire pour effectuer la résolution, et permettent de gérer efficacement les contraintes des problèmes.

Dans le cadre de l'optimisation des petites stations d'épuration, l'utilisation de l'approche directe simultanée se révèle toutefois inadaptée. Comme le système fonctionne en commutation, il est en effet nécessaire d'approximer l'état par (au moins) autant de polynômes qu'il y a de phases de fonctionnement, *i.e.* $2N_c$ polynômes pour N_c cycles de fonctionnement, et pour chaque polynôme, un nombre suffisant de points de collocation doit être considéré pour obtenir une approximation satisfaisante de l'état. Le plus souvent, la taille du NLP résultant est dissuasive. D'autre part, certaines variables d'état du système présentent de fortes variations au moment de la mise en marche ou de l'arrêt du système d'aération (*e.g.* la concentration en oxygène dissous dans le réacteur). Pour ces variables, les performances de la collocation orthogonale sont médiocres lorsque des polynômes d'interpolation sont utilisés, même pour un grand nombre de points de collocation

(présence d'oscillations). Pour illustrer ce propos, l'approximation des concentrations en *NGL* et en oxygène dissous (au cours d'une période d'arrêt de l'aérateur) par des polynômes de Lagrange est présentée sur la Fig. 3.2. S'il apparaît possible d'approximer la concentration en *NGL* de façon satisfaisante, la concentration en oxygène dissous est en revanche moins bien représentée, et ceci quel que soit le nombre de points de collocation considéré ; l'utilisation d'autres fonctions d'interpolation que des polynômes seraient ici nécessaires. Cette méthode présente de plus l'inconvénient d'être de type *non faisable* (*cf.* § 2.3.2).

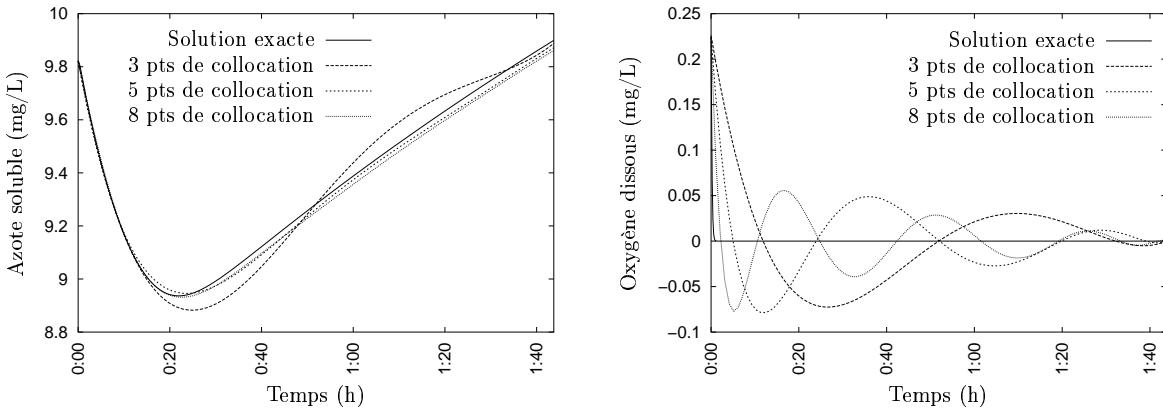


FIG. 3.2 – Approximations polynomiales des concentrations en *NGL* et en oxygène dissous dans le réacteur au cours d'une période d'arrêt de l'aérateur.

Pour ces raisons, c'est l'approche directe séquentielle qui est utilisée, par la suite, pour la résolution des problèmes (1.29) et (1.36).

3.2.3 Application de l'approche séquentielle

Les problèmes d'optimisation non-linéaire issus de l'application de l'approche directe séquentielle sont résolus par le code de calcul **NLPQL** (Schittkowski, 1985), en langage de programmation **FORTRAN**. Ce code dispose d'un algorithme d'estimation des gradients par différences finies. Toutefois, ce type de différentiation peut augmenter de façon importante le temps de calcul et n'est généralement pas suffisamment précis pour assurer la convergence de la séquence des sous-problèmes quadratiques vers un point stationnaire du problème non-linéaire (conditions de KKT). Les méthodes de l'adjoint et des sensibilités résultent de développements analytiques et permettent d'estimer les gradients de façon beaucoup plus précise. L'expression générale du gradient d'une fonctionnelle de type \mathcal{J}_i par rapport aux paramètres \mathbf{p} d'optimisation a été précisée pour les systèmes paramétrés discontinus dans le Chapitre 2 (§ 2.3.2, p. 55).

Pour le système étudié, les paramètres d'optimisation sont $\mathbf{p}^T = [a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}]$ et aucune variable de commande continue $\mathbf{u}(t)$ n'est prise en compte. Lorsque le nombre de cycles d'aération est élevé, la dimension du problème est importante, avec typiquement plusieurs dizaines de paramètres d'optimisation. Aussi, les gradients des fonctionnelles \mathcal{J}_i sont calculés par la méthode de l'adjoint qui est particulièrement bien adaptée aux problèmes de grandes dimensions (Latifi et al., 1998) ; le gain de temps est conséquent vis-à-vis de la méthode des sensibilités qui nécessite d'intégrer les équations de sensibilité

de l'état par rapport à chaque paramètre d'optimisation. Ces expressions sont précisées ci-dessous.

Cas de la minimisation des rejets d'azote total

Les contraintes de fonctionnement et la contrainte de temps final du problème de minimisation des rejets d'azote dépendent uniquement des paramètres d'optimisation ; le calcul des gradients de ces contraintes ne pose donc pas de problèmes particuliers. En revanche, le critère d'optimisation dépend de l'état du système. En appliquant la méthode de l'adjoint, le gradient de cette fonctionnelle est donné par :

$$\nabla_{a^k} \mathcal{J} = \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)} \left(t_b^{k^-} \right) - \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)} \left(t_b^{k^+} \right), \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.3a)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\ell^k} \mathcal{J} &= \sum_{j=k+1}^{N_c} \left[\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)} \left(t_b^{j^-} \right) - \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)} \left(t_b^{j^+} \right) \right] \\ &\quad - \sum_{j=k}^{N_c-1} \left[\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)} \left(t_c^{j^+} \right) - \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)} \left(t_c^{j^-} \right) \right] + \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)} \left(t_c^{N_c^-} \right), \quad k = 1 \dots N_c \end{aligned} \quad (3.3b)$$

où les hamiltoniens $\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)}$ et $\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)}$ sont définies par :

$$\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)} (\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{F}_{NGL} (\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(1)} (\mathbf{x}) \quad (3.4a)$$

$$\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)} (\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{F}_{NGL} (\mathbf{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(2)} (\mathbf{x}) \quad (3.4b)$$

et où les variables adjointes sont solutions du système différentiel suivant :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = - \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad \text{si } t \in \left[t_c^{k-1^+}, t_b^{k^-} \right], \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.5a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = - \frac{\partial \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad \text{si } t \in \left[t_b^{k^+}, t_c^{k^-} \right], \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.5b)$$

$$\text{avec la condition terminale : } \boldsymbol{\lambda} \left(t_c^{N_c^-} \right) = \mathbf{0} \quad (3.5c)$$

$$\text{et les conditions de continuité : } \boldsymbol{\lambda} \left(t_c^{k^+} \right) = \boldsymbol{\lambda} \left(t_c^{k^-} \right), \quad k = 1 \dots N_c - 1 \quad (3.5d)$$

$$\boldsymbol{\lambda} \left(t_b^{k^+} \right) = \boldsymbol{\lambda} \left(t_b^{k^-} \right), \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.5e)$$

Cas de la minimisation de la consommation énergétique

Comme précédemment, les contraintes de fonctionnement et la contrainte de temps final ne dépendent que des paramètres d'optimisation. D'autre part, le critère de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur est également indépendant de l'état du système. Les gradients de ces fonctions par rapport aux paramètres sont donc obtenus

3.2. Résolution numérique des problèmes d'optimisation

par différentiation directe, *e.g.* dans le cas du critère d'optimisation :

$$\nabla_{a^k} \mathcal{J} = \frac{1}{\sum_{j=1}^{N_c} \ell^k} \quad \nabla_{\ell^k} \mathcal{J} = \frac{-\sum_{j=1}^{N_c} a^k}{\left(\sum_{j=1}^{N_c} \ell^k \right)^2} \quad (3.6)$$

Le calcul des gradients des contraintes d'état est plus problématique. Ces contraintes sont exprimées sous une forme canonique (*cf.* § 2.2.3, p. 50), *e.g.* pour la contrainte sur l'azote global :

$$g_{NGL} = \sum_{k=1}^{N_c} \left[\int_{t_c^{k-1+}}^{t_b^k} \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) dt + \int_{t_b^k}^{t_c^k} \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) dt \right] = 0 \quad (3.7a)$$

$$\text{avec : } \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) = \max(0, \mathcal{F}_{NGL}(\boldsymbol{x}) - NGL_{\max})^2 \quad (3.7b)$$

Les autres contraintes d'état (g_{DCO} , g_{DBO_5} et g_{MES}) sont traitées de façon similaire.

Il est intéressant de remarquer que ces contraintes d'égalité intégrales peuvent être dissociées en contraintes d'inégalité indépendantes, *e.g.* $g_{NGL} \geq 0$ et $g_{NGL} \leq 0$. Du fait de la positivité de l'intégrant $\mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x})$, la contrainte $g_{NGL} \geq 0$ est systématiquement vérifiée. La seule contrainte à satisfaire est donc $g_{NGL} \leq 0$.

Les quatre contraintes d'inégalité résultantes sont relaxées, de manière à rendre possible un très faible dépassement de la limitation imposée. Pour la contrainte g_{NGL} par exemple :

$$g_{NGL} = \sum_{k=1}^{N_c} \left[\int_{t_c^{k-1+}}^{t_b^k} \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) dt + \int_{t_b^k}^{t_c^k} \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) dt \right] - \varepsilon_{NGL} \leq 0 \quad (3.8)$$

L'utilisation d'une telle relaxation permet de faciliter la résolution du problème d'optimisation et réduit sensiblement le temps de calcul nécessaire. Les perturbations considérées ici sont $\varepsilon_{NGL} = \varepsilon_{DCO} = \varepsilon_{BDO_5} = \varepsilon_{MES} = 10^{-4}$, ce qui revient à autoriser un dépassement de 0,01 mg.L⁻¹ de la norme pendant 1s au cours d'une journée, et ne modifie donc en rien le résultat de l'optimisation.

Pour la contrainte de rejet g_{NGL} à nouveau, le gradient par rapport aux paramètres d'optimisation s'écrit :

$$\nabla_{a^k} g_{NGL} = \mathcal{H}_{NGL}^{(1)}(t_b^k) - \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(t_b^k), \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.9a)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\ell^k} g_{NGL} &= \sum_{j=k+1}^{N_c} \left[\mathcal{H}_{NGL}^{(1)}(t_b^j) - \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(t_b^j) \right] \\ &\quad - \sum_{j=k}^{N_c-1} \left[\mathcal{H}_{NGL}^{(1)}(t_c^j) - \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(t_c^j) \right] + \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(t_c^{N_c}) , \quad k = 1 \dots N_c \end{aligned} \quad (3.9b)$$

où les fonctionnelles $\mathcal{H}_{NGL}^{(1)}$ et $\mathcal{H}_{NGL}^{(2)}$ sont définies par :

$$\mathcal{H}_{NGL}^{(1)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(1)}(\boldsymbol{x}) \quad (3.10a)$$

$$\mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = \mathcal{L}_{NGL}(\boldsymbol{x}) + \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{f}^{(2)}(\boldsymbol{x}) \quad (3.10b)$$

et où les variables adjointes sont solutions du système différentiel suivant :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_{NGL}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \quad \text{si } t \in [t_c^{k-1+}, t_b^{k-}] , \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.11a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \quad \text{si } t \in [t_b^{k+}, t_c^{k-}] , \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.11b)$$

avec la condition terminale : $\boldsymbol{\lambda}(t_c^{N_c-}) = \mathbf{0}$ (3.11c)

et les conditions de continuité : $\boldsymbol{\lambda}(t_c^{k+}) = \boldsymbol{\lambda}(t_c^{k-}) , \quad k = 1 \dots N_c - 1$ (3.11d)

$\boldsymbol{\lambda}(t_b^{k+}) = \boldsymbol{\lambda}(t_b^{k-}) , \quad k = 1 \dots N_c$ (3.11e)

Les gradients des autres contraintes d'état sont donnés par des expressions équivalentes.

Propriétés numériques

Pour assurer la convergence de la méthode *SQP*, la précision avec laquelle les gradients des problèmes d'optimisation sont estimés est déterminante. En particulier, l'estimation, par la méthode de l'adjoint, des gradients des fonctions (critères et contraintes) qui dépendent de l'état doit être effectuée avec soin. Le schéma numérique utilisé consiste à intégrer les équations d'état, tout en conservant les valeurs de l'état en certains points de l'intervalle $[t_0, t_f]$, afin de les réutiliser lors de l'intégration à rebours des systèmes adjoints¹. De cette manière, les équations du TPBVP état/adjoint sont intégrées à partir de leurs conditions aux limites respectives et la stabilité de l'ensemble est assurée.

Le choix du maillage de l'état du système conditionne en grande partie la précision des gradients :

Maillage irrégulier – L'utilisation de maillages irréguliers de l'état du système permet d'obtenir les estimations les plus précises. Avec cette approche, il est possible d'affiner le pas Δt de discrétisation durant les périodes où l'état et l'adjoint connaissent de fortes variations, notamment au voisinage des instants t_b^k et t_c^k de commutation (Fig. 3.3). Toutefois, la taille du maillage résultant peut poser des problèmes de stockage d'une part, et donne lieu à des temps de calcul particulièrement importants d'autre part.

Maillage régulier – La mise en œuvre de maillages réguliers permet de réduire sensiblement l'espace de stockage nécessaire ainsi que le temps de calcul des gradients. En contrepartie, les estimations sont moins précises, même lorsque la discrétisation est fine (*e.g.* $\Delta t = 1$ s). Aussi, le choix du pas de grille Δt et l'ordre d'interpolation de l'état entre deux instants successifs t et $t + \Delta t$ doivent faire l'objet d'une attention particulière :

¹Le code de calcul **DASSL** (Brenan et al., 1989) est utilisé pour l'intégration numérique des systèmes différentiels d'état et adjointe. Une extension de ce code proposée par P. Rouchon a également été utilisée afin d'exploiter la structure creuse de la matrice jacobienne du modèle complet (routines **MA28** d'Harwell). Les résultats obtenus n'ont toutefois pas permis de réduire les temps d'intégration ; la matrice jacobienne ne semble pas comporter suffisamment d'éléments nuls.

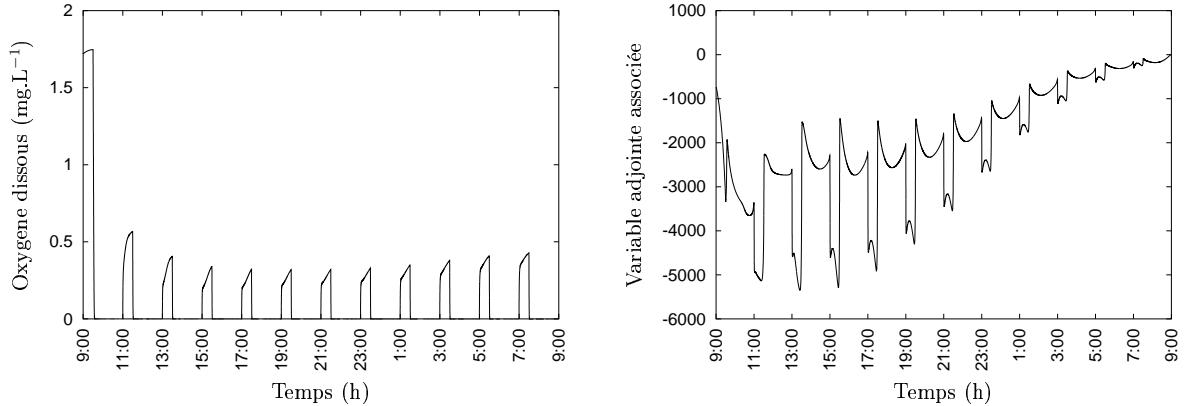


FIG. 3.3 – Illustration de la raideur (*stiffness*) des systèmes d'état et adjoint ; cas de la concentration en oxygène dissous et de la variable adjointe associée (pour la contrainte g_{NGL} du problème MCE).

- Pas de temps :

Pour garantir la convergence de l'algorithme *SQP*, il a été établi que le pas de temps d'intégration des systèmes d'état et adjoints doit être de l'ordre de la seconde avec un maillage régulier. Ceci est illustré sur la Fig. 3.4 dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique pour 12 cycles d'aération par jour¹ : les erreurs relatives d'estimation de chaque composante du gradient de g_{NGL} sont calculées par rapport aux gradients obtenus avec un maillage irrégulier pour différents pas de temps Δt . L'ordre de grandeur de ces pas de temps est ici particulièrement faible comparé à la période d'optimisation considérée (une journée). Ceci est essentiellement dû aux fortes variations des variables d'état et adjointes au voisinage des instants de commutations t_b^k et t_c^k (Fig. 3.3). Outre le problème lié à l'espace requis pour le stockage de l'état, l'aspect le plus problématique concerne le temps de calcul occasionné par l'intégration du TPBVP (typiquement, 90% à 95% du temps nécessaire pour effectuer 1 itération *SQP*).

- Mode d'interpolation :

Entre deux instants de stockage successifs t et $t + \Delta t$, l'état du système peut être interpolé au moyen de polynômes. Pour une interpolation d'ordre 3 par exemple, le polynôme \mathcal{P} est construit de telle sorte que :

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(t) &= \mathbf{x}(t) & \mathcal{P}(t + \Delta t) &= \mathbf{x}(t + \Delta t) \\ \dot{\mathcal{P}}(t) &= \dot{\mathbf{x}}(t) & \dot{\mathcal{P}}(t + \Delta t) &= \dot{\mathbf{x}}(t + \Delta t) \end{aligned}$$

¹Les erreurs d'estimation relatives au paramètre ℓ^{12} ne sont pas représentées étant donné que les gradients par rapport à ce paramètre ne dépendent pas du maillage adopté (écart nul) :

$$\nabla_{\ell^{12}} g_{NGL} = \mathcal{H}_{NGL}^{(2)}(t_c^{12-}) = \mathcal{L}_{NGL}(t_c^{12-})$$

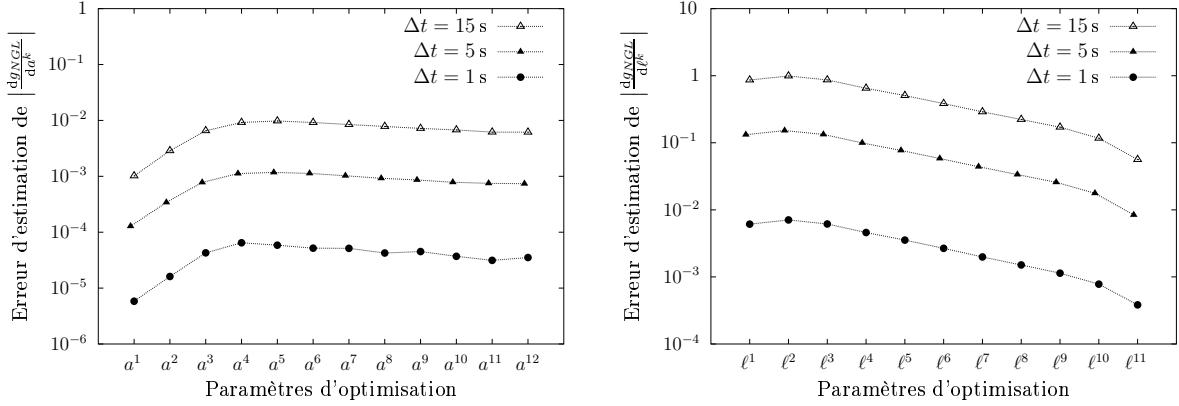


FIG. 3.4 – Illustration de l'influence du pas de temps Δt sur la précision du gradient de la contrainte de rejet g_{NGL} du problème (MCE) par rapport aux paramètres a^k (Fig. gauche) et ℓ^k (Fig. droite).

Il résulte :

$$\mathcal{P}(\tau) = a\tau^3 + b\tau^2 + c\tau + d, \quad \tau \in [t, t + \Delta t]$$

$$\text{avec : } a = \frac{\dot{\mathbf{x}}(t+\Delta t) - \dot{\mathbf{x}}(t)}{(\Delta t)^2} - 2 \frac{\mathbf{x}(t+\Delta t) - \mathbf{x}(t)}{(\Delta t)^3}$$

$$b = \frac{(\dot{\mathbf{x}}(t+\Delta t) - \dot{\mathbf{x}}(t))}{2\Delta t} - 3a\Delta t$$

$$c = \dot{\mathbf{x}}(t + \Delta t) - 3at^2 - 2bt$$

$$d = \mathbf{x}(t) - at^3 - bt^2 - ct$$

Plus l'ordre d'interpolation est élevé, plus l'estimation des gradients est bien entendu précise. Ceci est illustré sur la Fig. 3.5 dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique, pour $N_c = 12$ cycles de fonctionnement. Le principe de cette représentation est analogue à celui adopté pour la Fig. 3.4. Des résultats similaires sont obtenus pour les gradients du critère d'optimisation du problème (MR). Il apparaît que l'utilisation de polynômes d'interpolation d'ordre 3 donne des estimations très précises et permet ainsi de compenser, en partie, les erreurs liées à l'utilisation d'un maillage régulier.

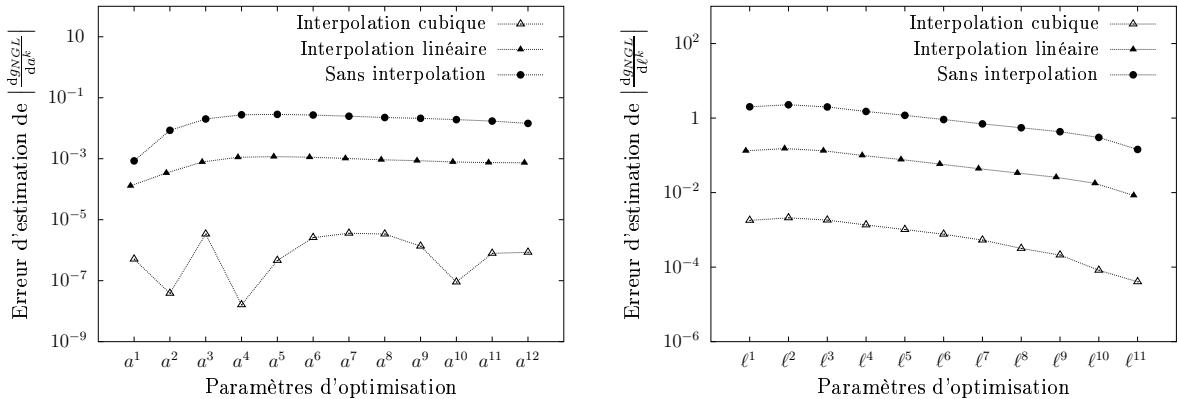


FIG. 3.5 – Illustration de l'influence du mode d'interpolation sur la précision du gradient de la contrainte de rejet g_{NGL} du problème (MCE) par rapport aux paramètres a^k (Fig. gauche) et ℓ^k (Fig. droite), avec $\Delta t = 5 \text{ s}$.

Par ailleurs, pour un pas de discréétisation et un ordre d'interpolation donnés, l'estimation des gradients par rapport aux paramètres a^k est sensiblement plus précise que pour les paramètres ℓ^k (Fig. 3.5 et 3.4). Ceci trouve une justification dans l'expression mathématique des gradients : les composantes relatives à a^k (*e.g.* (3.9b)) correspondent à la différence entre deux termes (hamiltoniens) seulement, alors que les composantes relatives à ℓ^k (*e.g.* (3.9b)) résultent de la somme (ou la différence) de nombreux termes, ce qui a pour effet de cumuler les erreurs. De manière générale, ceci explique également pourquoi les composantes par rapport aux paramètres ℓ^k gagnent en précision lorsque k augmente, *i.e.* lorsque le nombre de termes diminue.

Lors de la résolution du problème non-linéaire, il apparaît que plus le nombre de paramètres d'optimisation est important, plus le nombre d'itérations de l'algorithme *SQP* est élevé. Le nombre d'itérations généralement nécessaire pour calculer le profil optimal d'aération est de l'ordre de 10 fois le nombre de paramètres d'optimisation, aussi bien pour la minimisation des rejets que pour la minimisation de la consommation énergétique. Ce nombre d'itérations est élevé pour une méthode de type *SQP*, qui converge typiquement en quelques dizaines d'itérations seulement. Les raisons de ce phénomène n'ont cependant pas pu être identifiée précisément : il ne semble pas que le traitement des contraintes d'état en soit à l'origine, dans la mesure où le même comportement est obtenu pour les deux problèmes (MR) et (MCE) ; d'autre part, la précision avec laquelle les gradients sont calculés n'apparaît pas non plus en être la cause puisque, (*i*) l'utilisation d'un maillage irrégulier ne permet pas de réduire le nombre d'itérations et, (*ii*) l'utilisation de la méthode des sensibilités donne des résultats similaires.

Le critère d'arrêt¹ (critère de KKT) de la méthode *SQP* est fixé à 10^{-7} pour le problème (MR) et 10^{-11} pour le problème (MCE). Pour des valeurs plus faibles du critère d'arrêt, la précision des gradients apparaît en effet insuffisante pour assurer systématiquement la terminaison de la méthode *SQP* dans de bonnes conditions, même en utilisant un maillage irrégulier de l'état. De manière générale, le critère d'optimisation décroît rapidement au cours des 50 à 100 premières itérations, et l'écart par rapport à la valeur optimale est de l'ordre de 1% ; au cours des itérations suivantes, les profils d'aération continuent à évoluer de façon importante, bien que la valeur du critère varie peu. Ce type de comportement est caractéristique des systèmes dégénérés, *i.e.* pour lesquels une modification du profil de commande n'entraîne que de faibles variations du critère d'optimisation.

La convergence de la méthode pour le problème (MCE) est illustrée sur la Fig. 3.6. Le critère d'optimisation (Fig. 3.6 gauche) ne diminue pas régulièrement avec les itérations, mais connaît au contraire des paliers successifs. Ce type de comportement est classique pour les problèmes sous contraintes ; le critère diminue lentement lorsque les poids des multiplicateurs relatifs aux contraintes sont grands et inversement. Les fortes fluctuations du critère de KKT (Fig. 3.6 droite) en fonction des itérations sont également caractéristiques des problèmes d'optimisation sous contraintes ; au final, on peut vérifier que l'algorithme se termine pour une valeur du critère de KKT inférieure 10^{-7} , conformément à la précision définie dans le code de calcul.

En dernier lieu, il est important de rappeler que l'application de la méthode *SQP* ne permet de déterminer que des optimums **locaux**, étant donné que les problèmes considérés sont non-convexes. La détermination du profil d'optimisation donnant le minimum

¹Le critère d'arrêt est défini par la variable `acc` dans le code de calcul `NLPQL`.

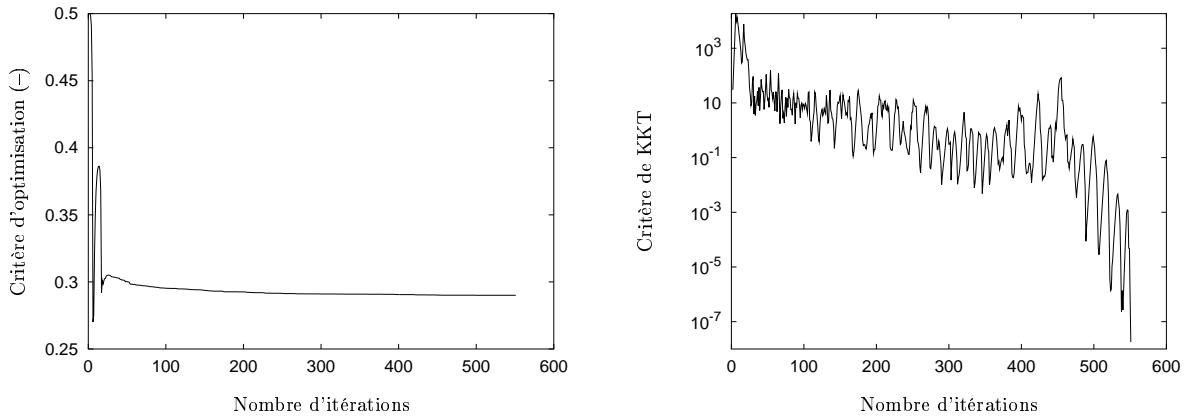


FIG. 3.6 – Illustration de la convergence de la méthode SQP pour le problème (MCE) : évolution du critère d’optimisation (Fig. gauche) et du critère d’optimalité de KKT (Fig. droite) en fonction des itérations.

global de rejet d’azote ou de consommation énergétique n’est donc ici nullement garanti, et ceci bien que l’algorithme d’optimisation, initialisé avec des profils d’aération choisis aléatoirement, semble converger de façon systématique vers le même profil. La mise en œuvre des méthodes d’optimisation globale pour le calcul des profils optimaux d’aération est discutée dans le paragraphe 3.6.

3.3 Fonctionnement optimal du procédé

L’objectif de cette partie est de présenter les conditions opératoires optimales de fonctionnement de l’unité de traitement décrite dans le paragraphe § 3.1, au cours d’une journée de fonctionnement. Ces conditions optimales sont déterminées pour le modèle mathématique global (*cf.* § 1.1.3), en utilisant les paramètres et les conditions initiales estimés lors de l’identification paramétrique, et en considérant les perturbations incidentes réelles du procédé (*cf.* Annexe D).

Les résultats relatifs à la minimisation des rejets d’azote total sont présentés dans le paragraphe 3.3.1 ; la minimisation de la consommation énergétique de l’aérateur fait l’objet du paragraphe 3.3.2. Afin d’évaluer dans quelle mesure les performances actuelles du procédé peuvent être améliorées, une comparaison est proposée dans le paragraphe 3.3.3.

3.3.1 Minimisation des rejets d’azote total

L’alternance des phases de fonctionnement et d’arrêt des turbines est nécessaire pour obtenir, tour à tour, la dégradation de l’ammoniaque et des nitrates apportés par l’influent ou formés dans le réacteur biologique. C’est cet équilibre subtil entre les phases d’aérobiose et d’anoxie du réacteur qui est ici recherché, de manière à minimiser la concentration des rejets d’azote total.

De manière générale, le calcul des profils optimaux d’aération est complexe puisqu’il s’agit de déterminer conjointement le nombre et la durée des séquences de marche et d’arrêt de l’aérateur. Ces aspects ont été discutés dans le paragraphe 3.2.2 ; l’optimisation

3.3. Fonctionnement optimal du procédé

n'est ici envisagée que pour un nombre fixé de cycles d'aération, dont la valeur optimale est déterminé par simple énumération (Fig. 3.7).

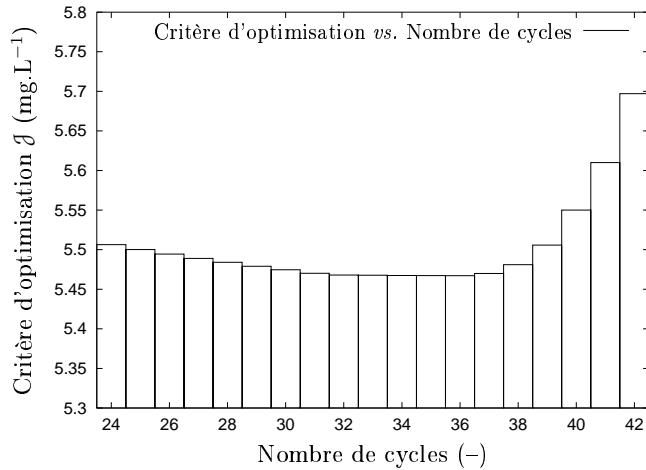


FIG. 3.7 – Influence du nombre de cycles sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.

Le taux optimal d'aération diminue lentement, dans un premier temps, avec l'augmentation du nombre de cycles. Qualitativement, ce comportement était prévisible étant donné que l'ajout de cycles supplémentaires améliore la flexibilité de la politique d'aération. En l'absence de bornes sur les paramètres ($t_{\min}^{\text{on}} = t_{\min}^{\text{off}} = 0$), on peut d'ailleurs démontrer simplement, par récurrence, que cette diminution se poursuivrait indéfiniment :

$$\begin{aligned} \forall N_c \geq 1, \min_{\{(a^k, \ell^k)\}_{1 \leq k \leq N_c}} J &= \min_{\{(a^k, \ell^k)\}_{1 \leq k \leq N_c}, a^{N_c+1}=0, \ell^{N_c+1}=0} J \\ &\leq \min_{\{(a^k, \ell^k)\}_{1 \leq k \leq N_c+1}} J \end{aligned}$$

Ce raisonnement n'est bien entendu plus valable lorsque des bornes sont définies sur les paramètres d'optimisation. Dans ce cas, les séquences d'aération et d'arrêt diminuent à mesure que N_c augmente, et les paramètres a^k et ℓ^k se rapprochent progressivement des bornes inférieures définies par les contraintes $t_{\min}^{\text{on}} = 15 \text{ min.}$ et $t_{\min}^{\text{off}} = 15 \text{ min.}$ Ainsi, au delà d'un certain nombre de cycles, ces contraintes saturent et l'ajout de cycles d'aération supplémentaires induit une augmentation rapide de la concentration moyenne d'azote rejetée. On peut malgré tout remarquer que l'influence de N_c reste ici limitée dans la gamme de variation considérée.

Dans le cas de figure étudié, le nombre optimal de cycles de fonctionnement est $N_c^* = 36$; il correspond à une concentration moyenne d'azote de $J^* = 5.47 \text{ mg.L}^{-1}$ sur 24 heures. La Fig. 3.8 présente (i) le profil optimal d'aération résultant (Fig. gauche), ainsi que (ii) l'évolution des taux d'aération au cours des différents cycles (Fig. droite).

Les taux d'aération les plus élevés (jusqu'à 70%) sont observés aux cours des 12 premières heures, corrélativement aux charges incidentes d'azote les plus importantes¹ (Fig. 3.1); ils diminuent ensuite, à mesure que le débit baisse. En raison du temps de

¹Les fluctuations de la concentration incidente d'azote sont faibles au cours des 24 heures, si bien que la charge incidente d'azote varie essentiellement en fonction du débit (Fig. 3.1).

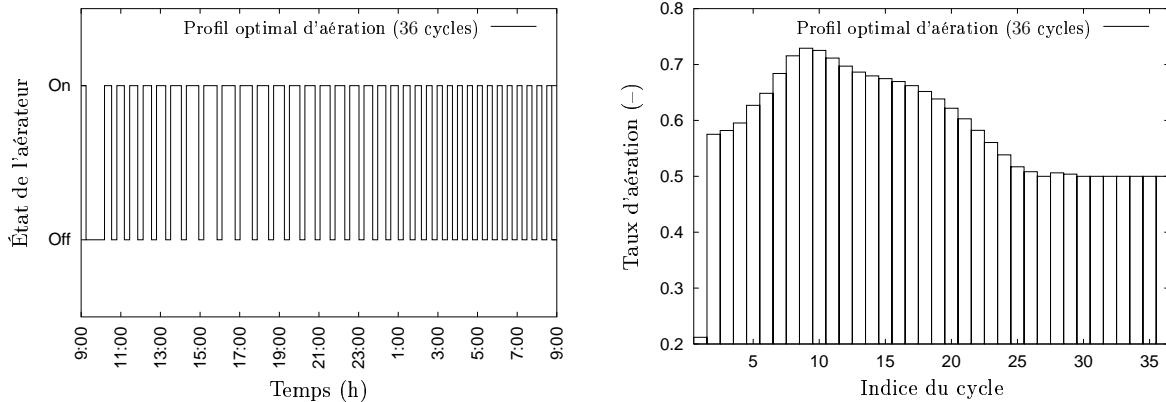


FIG. 3.8 – Profil optimal d'aération pour 36 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération au cours des différents cycles (Fig. droite).

séjour de l'effluent dans le clarificateur, les effets de la politique d'aération sur les concentrations des rejets ne sont perçus qu'avec un décalage de plusieurs heures. Ainsi, les derniers cycles d'aération n'ont qu'une influence très limitée sur la concentration en NGL de l'effluent, ce qui explique pourquoi le profil d'aération est plat au voisinage du temps final.

Le profil et la composition des rejets d'azote sont donnés sur la Fig. 3.9. Deux phases successives se distinguent : dans un premier temps, les rejets correspondent à l'effluent déjà présent dans le clarificateur à l'instant initial ; les effets de la politique optimale d'aération ne sont donc perceptibles qu'après plusieurs heures. Hormis la concentration d'azote organique qui reste constante (de l'ordre de 2 mg.L^{-1}), la concentration et la composition des rejets varient sensiblement au cours des 24 heures.

- La concentration en nitrate diminue régulièrement, et ne constitue plus qu'une faible partie des rejets azotés à l'intant final ; la réduction des rejets d'azote total est d'ailleurs liée, en grande partie, à cette diminution.
- L'évolution de la concentration en ammoniac est fortement liée aux variations de la charge azotée incidente, et accuse une forte augmentation suite à la pointe de débit, malgré les forts taux d'aération appliqués durant cette période.

Par ailleurs, on peut vérifier que la limite réglementaire relative aux rejets d'azote total est satisfaite.

Les contraintes réglementaires relatives aux rejets de DCO , DBO_5 et MES sont également vérifiées (Fig. 3.10). Le fait que les concentrations en DCO et DBO_5 de l'effluent soient ici particulièrement faibles résulte de la faible concentration incidente en DCO , en partie liée à l'étage de pré-traitement.

3.3.2 Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur

L'application de la politique optimale d'aération précédente se traduit par des rejet sensiblement inférieurs aux niveaux autorisés par la réglementation. Comme il n'est tenu compte à aucun moment, des durées d'aération résultantes, ce type de gestion peut donner lieu à une consommation d'énergie très élevée et entraîner une hausse sensible du coût de fonctionnement de l'unité. Pour améliorer les performances du procédé, une alternative

3.3. Fonctionnement optimal du procédé

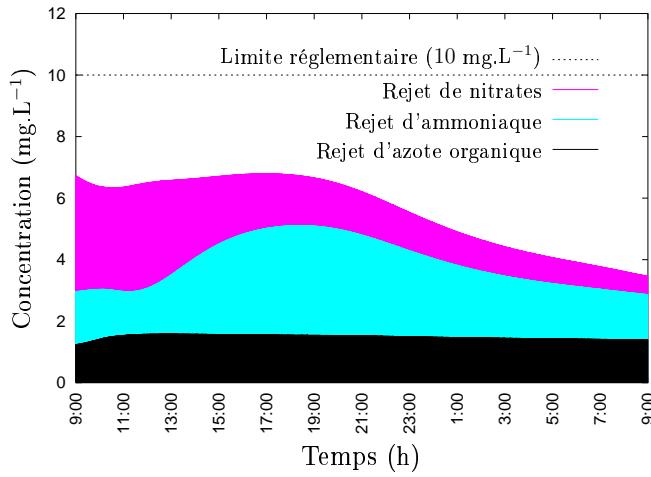


FIG. 3.9 – Composition des rejets d'azote.

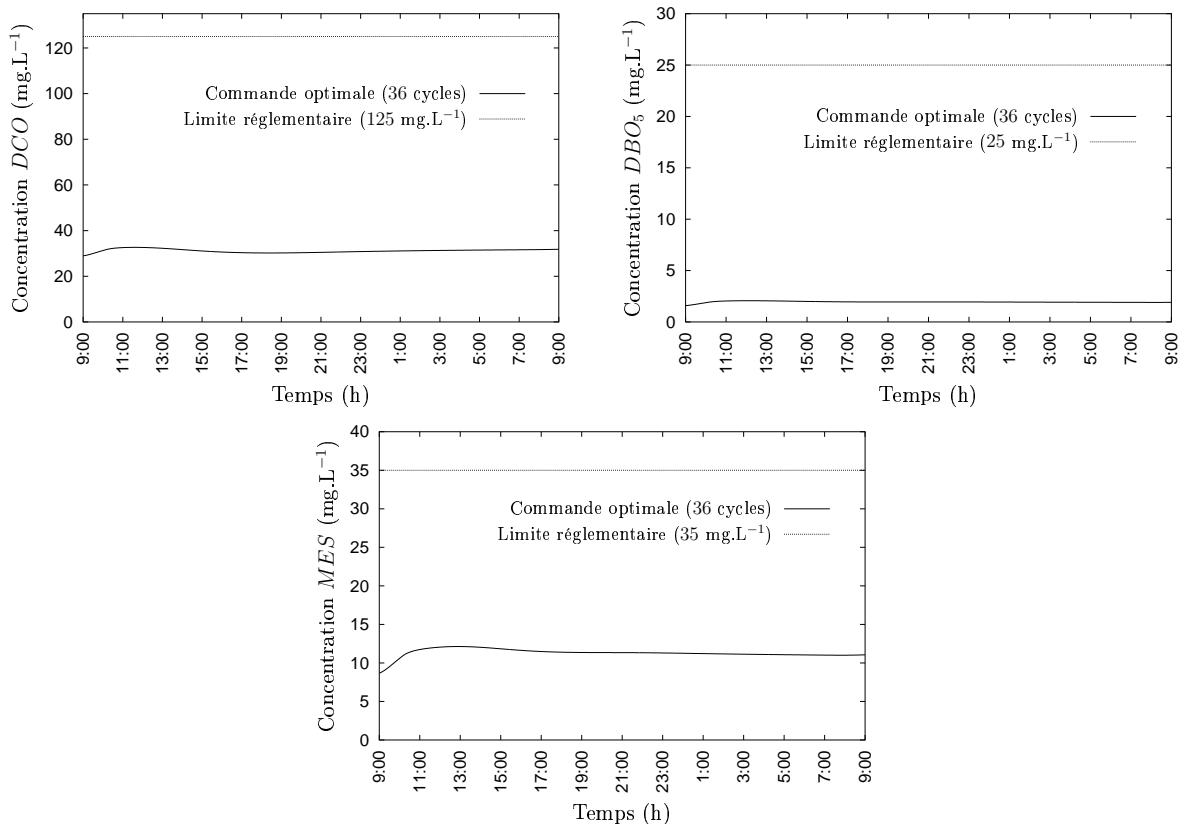


FIG. 3.10 – Profils des concentrations rejetées en DCO , DBO_5 et MES pour 36 cycles de fonctionnement et limites réglementaires.

Chapitre 3. Fonctionnement optimal du procédé

à la minimisation des rejets d'azote consiste à rechercher la politique d'aération qui minimise, de façon spécifique, la consommation énergétique de l'unité, tout en respectant les normes de rejets réglementaires. Les résultats obtenus sont présentés dans ce paragraphe.

Comme précédemment, il s'agit de déterminer le nombre optimal de cycles d'aération par l'énumération des différentes possibilités (Fig. 3.11). Bien que l'influence de N_c soit limitée, surestimer le nombre optimal de cycles se traduit par une augmentation rapide du taux minimal d'aération (de l'ordre de 10%), et dégrade ainsi le bénéfice de l'optimisation.

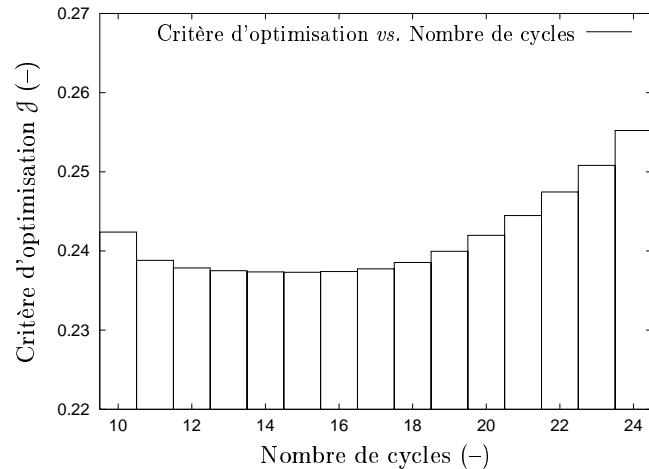


FIG. 3.11 – Influence du nombre de cycles sur le taux d'aération minimal du réacteur.

Le nombre optimal de cycles d'aération dépend des bornes inférieures définies sur les séquences d'aération par le biais de la contrainte $t_{\min}^{\text{on}} = 15 \text{ min.}$; en l'absence de bornes sur les paramètres a^k et ℓ^k d'optimisation, cette valeur serait, ici aussi, infinie. Le problème admet un unique minimum pour $N_c^* = 15$, et le taux d'aération optimal correspondant est $J^* = 23.7\%$, *i.e.* une durée totale d'aération de l'ordre de 5h40 sur la journée. Le profil optimal correspondant des séquences d'aération et l'évolution des taux d'aération par cycle sont donnés sur la Fig. 3.12.

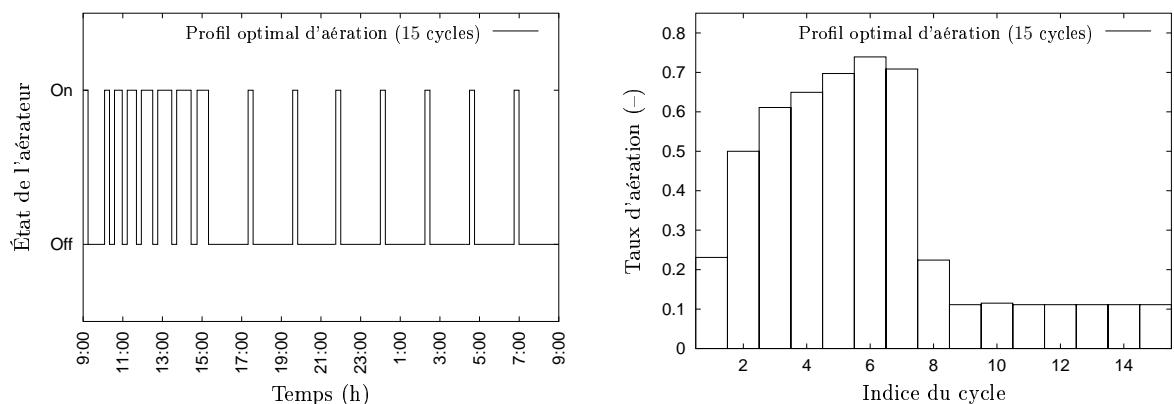


FIG. 3.12 – Profil optimal d'aération pour 15 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération au cours des différents cycles (Fig. droite).

Deux phases successives peuvent être distinguées sur le profil optimal d'aération. Durant les 7 premiers cycles (entre 9h00 et 15h00), les taux d'aération sont élevés, de manière

3.3. Fonctionnement optimal du procédé

à faire face à la pointe de débit et aux fortes charges incidentes qui en résultent (Fig. 3.1). Au cours des cycles suivants, en revanche, l'aération est quasi-minimale.

L'étude du profil d'azote correspondant (Fig. 3.13) montre que la concentration en *NGL* reste stable durant les 10 premières heures, en raison des forts taux d'aération. À ce stade, le profil de concentration est proche de celui obtenu dans le cas de la minimisation des rejets (Fig. 3.9). L'aération minimale du réacteur donne ensuite lieu à une rapide augmentation de la concentration d'azote rejetée, qui atteint la limite réglementaire à l'instant final¹. Durant cette période, la composition des rejets d'azote varie sensiblement. En raison des longues phases d'anoxie, la fraction de nitrate devient négligeable et la fraction d'ammoniaque augmente régulièrement pour constituer, au final, environ 90% de la concentration en *NGL*.

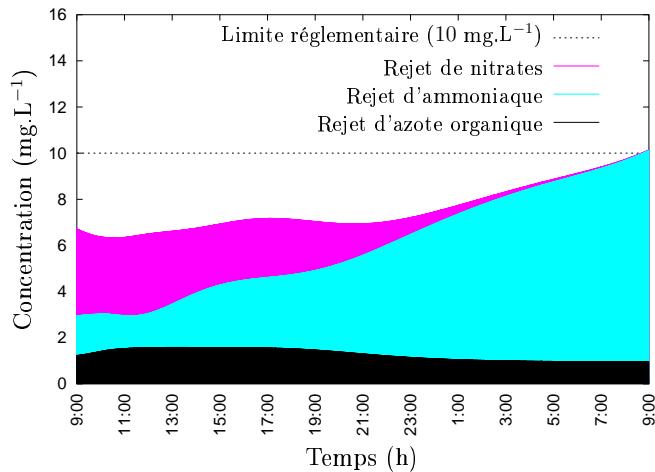


FIG. 3.13 – Composition des rejets d'azote.

Les autres contraintes réglementaires imposées sont également respectées (Fig. 3.14) ; les concentrations maximales autorisées en *DCO*, *DBO*₅ et *MES* ne sont pas limitantes. Toutefois, la réduction des périodes d'aération occasionne une diminution du taux de dégradation des composés organiques, ainsi qu'une diminution des quantités de biomasse (*cf.* paragraphe suivant) ; ceci explique pourquoi l'application de la politique optimale d'aération donne lieu à une augmentation des concentrations en *DCO* et *DBO*₅. Il s'agira de vérifier qu'à terme, l'application de la politique optimale d'aération n'entraîne pas un dépassement des normes de rejet correspondantes.

3.3.3 Comparaisons avec le mode de gestion actuel de l'unité

Des comparaisons entre les stratégies optimales d'aération calculées précédemment et le mode actuel de gestion du procédé sont proposées dans ce paragraphe. L'objectif de ces comparaisons est d'évaluer les améliorations potentielles qui peuvent être apportées aux performances de l'unité de traitement.

¹Le léger dépassement de la contrainte qui peut être observé à l'instant final sur la Fig. 3.13 résulte de la relaxation des contraintes de rejet (*cf.* § 3.2.3).

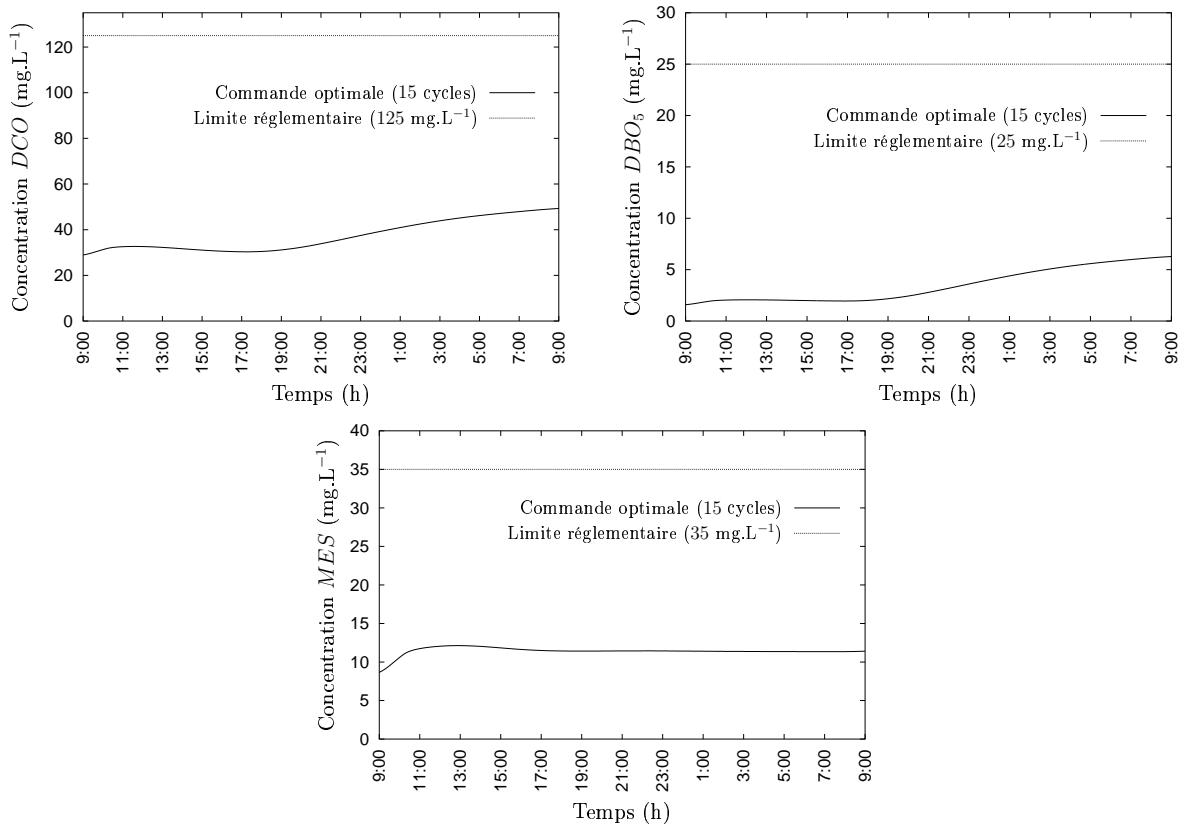


FIG. 3.14 – Profils des concentrations rejetées en DCO , DBO_5 et MES pour 15 cycles d'aération et limites réglementaires.

Cas de la minimisation des rejets azotés

Dans le mode actuel de fonctionnement de l'unité de traitement, les rejets moyens d'azote total sont de l'ordre de 6.3 mg.L^{-1} sur la période de 24 heures considérée. L'application des méthodes d'optimisation dynamique montre qu'une gestion plus adaptée du système d'aération pourrait permettre de réduire la concentration moyenne en *NGL* de l'effluent à environ 5.5 mg.L^{-1} , soit une diminution de plus de 16%.

La différence entre la politique actuelle d'aération du réacteur et cette politique optimale est illustrée sur la Fig. 3.15 (gauche). Les profils des rejets d'azote total correspondants sont donnés sur la Fig. 3.15 (droite). Dans les deux cas de figure, l'ensemble des contraintes de rejet, et notamment la contrainte sur l'azote total, sont satisfaites.

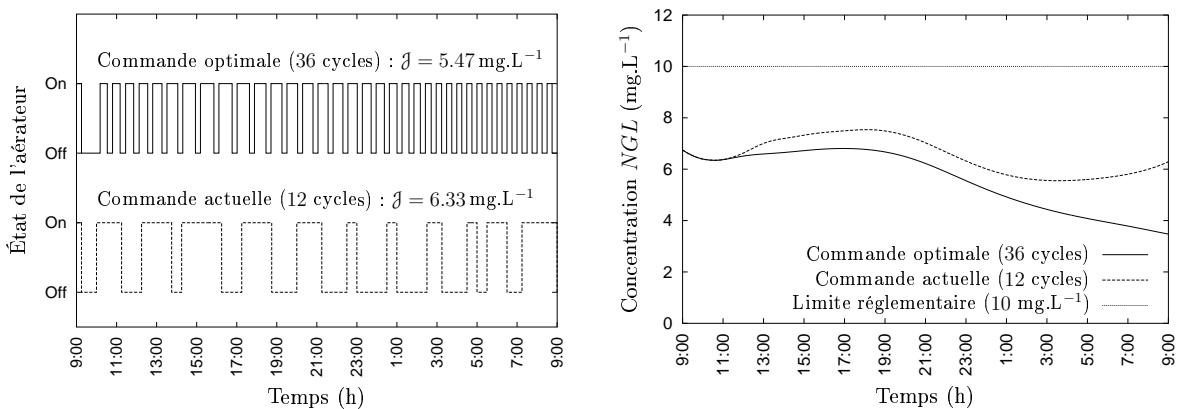


FIG. 3.15 – Comparaison entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total : stratégies d'aération (Fig. gauche) et concentration de l'effluent en azote global (Fig. droite).

La réduction des rejets d'azote à cependant une contrepartie. Avec la politique optimale d'aération, la durée journalière est de l'ordre de 14h15, soit une augmentation d'environ 1h30 (13%) de cette durée par rapport à l'actuelle politique d'aération. Pour cette unité de traitement, la réduction de 16% des rejets d'azote total s'accompagne d'une augmentation sensible des périodes d'aération nécessaires, et donc de la consommation énergétique de l'aérateur.

D'autre part, il est capital de vérifier que l'application de la politique optimale de rejet ne constitue pas un risque pour le procédé. En particulier, l'effet de l'optimisation sur les quantités de biomasses hétérotrophe et autotrophe présentes dans le système doit être analysé avec soin. La durée de l'optimisation (24 heures) est en effet courte devant les dynamiques d'évolution de ces micro-organismes et il ne s'agit pas, en modifiant la politique d'aération, d'empêcher le maintien d'une quantité suffisante de biomasse dans le système, ce qui serait désastreux pour le procédé. L'évolution comparée des concentrations en biomasses hétérotrophe et autotrophe dans le réacteur, entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé, est illustrée sur la Fig. 3.16.

Les concentrations en biomasses hétérotrophe et autotrophe présentent une évolution comparable sur la période considérée, ce qui semble indiquer que l'application de la politique optimale d'aération ne présente pas de risques pour le procédé. Ces évolutions sont d'ailleurs plutôt en faveur de la politique optimale dont les périodes d'aération plus importantes entraînent une augmentation des quantités de biomasse par rapport au mode

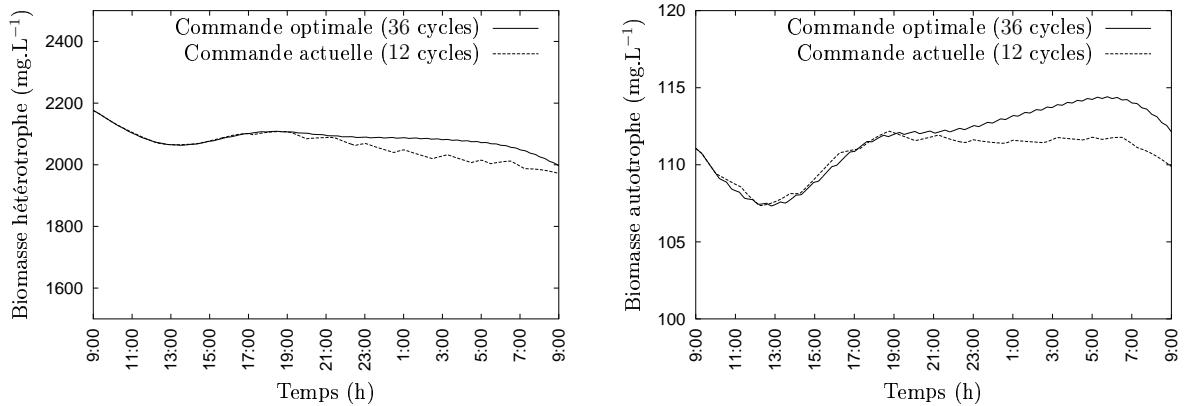


FIG. 3.16 – Évolutions comparées des concentrations en biomasses hétérotrophe (Fig. gauche) et autotrophe (Fig. droite) entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé dans le cadre de la minimisation des rejets d’azote total.

de fonctionnement actuel.

Cas de la minimisation de la consommation énergétique

L’application des politiques optimales de rejet permet d’améliorer sensiblement la qualité du traitement de l’unité étudiée mais s’accompagne, en contrepartie, d’une large augmentation de la durée, déjà importante, des périodes d’aération du réacteur. La résolution du problème d’optimisation relatif à la minimisation de la consommation énergétique permet de montrer, sur la base des normes de rejet définies par l’Union Européenne, qu’il n’est pas nécessaire de mettre en œuvre des taux d’aération aussi élevés.

La réduction de la durée journalière d’aération (*i.e.* de la consommation énergétique) est ici particulièrement conséquente. Alors que le mode actuel de gestion comprend 12h45 d’aération, les résultats obtenus montrent que 5h40 d’aération seulement suffisent à assurer le respect des normes réglementaires sur la période de 24 heures. Ces deux stratégies d’aération et les profils d’azote total correspondants sont représentés sur la Fig. 3.17.

À nouveau, il est impératif de s’assurer que de telles réductions de la durée d’aération ne sont pas préjudiciables, à terme, pour le procédé. L’évolution comparée des concentrations en biomasses hétérotrophe et autotrophe dans le réacteur, entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé, est présentée sur la Fig. 3.18.

Une diminution des concentrations en biomasse hétérotrophe est constatée avec les deux politiques d’aération. Cette diminution semble toutefois accélérée par l’application de la politique optimale (20% sur 24 heures). La croissance des micro-organismes hétérotrophes est possible dans des conditions aussi bien aérobies qu’anoxyes, mais est malgré tout plus rapide en présence d’oxygène dissous; en réduisant les périodes d’aération du réacteur, la prolifération de ces micro-organismes est donc limitée, ce qui justifie les différences observées entre les deux modes de fonctionnement. À long terme, l’effet de la politique optimale ne semble malgré tout pas devoir entraîner la disparition des micro-organismes hétérotrophes; leur taux de croissance est en effet rapide et de la biomasse est apportée par le biais de l’influent. Il s’agira bien entendu de le vérifier.

L’effet de la politique optimale sur les micro-organismes autotrophes apparaît plus pro-

3.3. Fonctionnement optimal du procédé

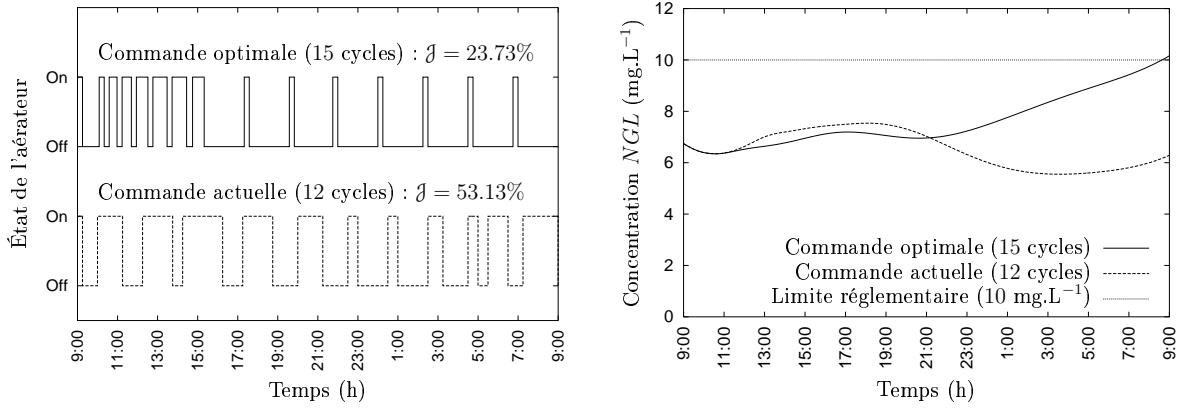


FIG. 3.17 – Comparaison entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique : stratégies d'aération (Fig. gauche) et concentration de l'effluent en azote global (Fig. droite).

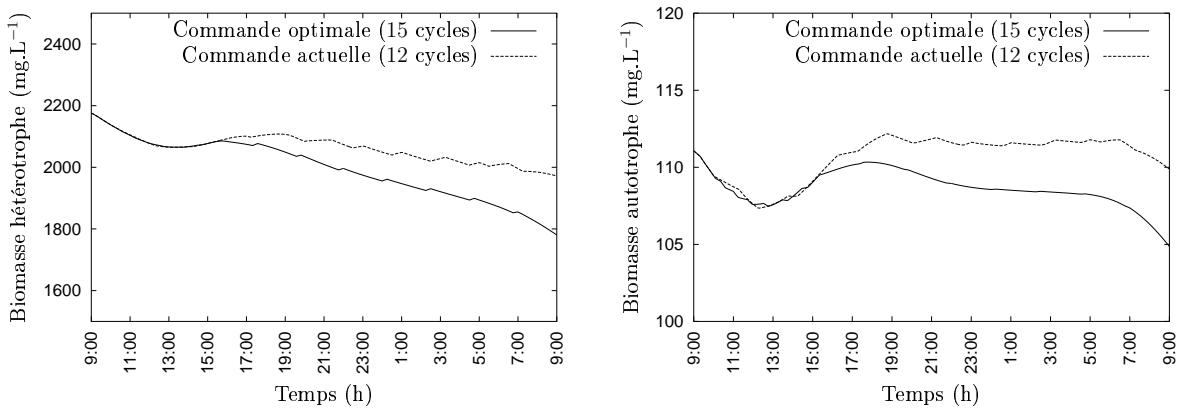


FIG. 3.18 – Évolutions comparées des concentrations en biomasses hétérotrophe (Fig. gauche) et autotrophe (Fig. droite) entre les modes de fonctionnement optimal et actuel du procédé dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique.

blématique. La croissance de ces micro-organismes est en effet beaucoup plus lente que celle des bactéries hétérotrophes, et n'est possible que lorsque le réacteur est aéré. Dans les conditions actuelles de fonctionnement de l'unité, la quantité de biomasse autotrophe semble en mesure de se maintenir d'un jour à l'autre, à une concentration de l'ordre de 110 mg.L^{-1} ; l'application de la politique optimale d'aération, en revanche, induit une rapide diminution de ces micro-organismes au cours de la journée. Réduire de 55% la durée journalière d'aération, revient en effet à diminuer d'autant les périodes durant lesquelles ces micro-organismes sont susceptibles de proliférer. Il convient donc d'être particulièrement attentif à l'évolution de la quantité de biomasse autotrophe dans le réacteur. Si les conditions d'aération sont telles que le renouvellement de ces micro-organismes ne peut plus être assuré, c'est le fonctionnement de la station d'épuration qui, à terme, est menacé.

3.3.4 Conclusions

Les résultats présentés dans cette partie montrent que les performances actuelles de l'unité de traitement étudiée peuvent être largement améliorées. En terme de qualité de traitement d'une part, une diminution de l'ordre de 16% de la concentrations des rejets azotés apparaît potentiellement réalisable. En terme de coût de fonctionnement d'autre part, une réduction de plus de 50% de la consommation énergétique du système d'aération peut également être obtenue.

Il convient toutefois de nuancer ces résultats, sans pour autant minimiser les potentialités des méthodes d'optimisation. Les conditions initiales du système sont celles estimées lors de l'identification paramétrique du modèle, et les politiques optimales sont calculées sur de courtes périodes : le procédé ne fonctionne donc pas en régime stationnaire. Dans de telles conditions, il est vraisemblable que les rejets d'azote et les taux d'aération optimaux seraient différents, notamment pour le problème relatif à la minimisation de la consommation énergétique. Optimiser le fonctionnement du procédé à long terme devrait également permettre de statuer sur les problèmes liés à l'évolution des quantités de biomasses autotrophe et hétérotrophe. Ces aspects seront développés ultérieurement, dans la partie 3.5.

Avant de s'intéresser aux problèmes d'optimisation à long terme du procédé, il convient cependant de simplifier les problèmes d'optimisation, afin de réduire les temps de calcul des politiques optimales d'aération. La convergence de l'algorithme de résolution utilisé nécessite en effet plusieurs centaines d'itérations (*cf.* § 3.2.3) et parallèlement, l'intégration du système état/adjoint pour calculer les gradients des critères et contraintes des problèmes peut prendre jusqu'à 15 minutes-CPU¹. La détermination d'un simple profil optimal d'aération sur 24 heures peut donc impliquer des temps de calcul de plusieurs jours. Ce constat est naturellement en contradiction avec l'implémentation en-ligne des méthodes d'optimisation dynamique qui est envisagée à terme, et incite à apporter des simplifications aux problèmes d'optimisation, de manière à les rendre compatibles avec les objectifs fixés. C'est là l'objet de la partie suivante.

¹Temps de calcul pour des PC équipés de processeurs AMD-Athlon® cadencés à 1.2 GHz

3.4 Simplification du problème d'optimisation

Afin de limiter le temps de calcul des politiques optimales d'aération, il est nécessaire d'apporter des simplifications aux problèmes d'optimisation. Deux types de simplifications sont ici considérés. Dans un premier temps, un modèle mathématique simplifié du procédé est utilisé afin d'améliorer la rapidité du calcul des gradients des problèmes (intégration des systèmes état/adjoint). La réduction de la taille des problèmes d'optimisation (paramétrisation) est ensuite étudiée dans le but de limiter le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution. Ces deux aspects sont développés dans les paragraphes 3.4.1 et 3.4.2 respectivement.

3.4.1 Simplification du modèle de fonctionnement

Les résultats relatifs à l'utilisation d'un modèle de fonctionnement simplifié du procédé sont présentés dans ce paragraphe. Ce modèle simplifié a été présenté dans le premier chapitre (*cf.* § 1.1.4, p. 27) et a fait l'objet, comme le modèle complet, d'une procédure d'identification paramétrique (*cf.* § 3.1). La différence entre ces deux modèles réside essentiellement dans la description des processus de sédimentation/clarification qui se produisent dans le décanteur.

L'objectif est de ce paragraphe et de comparer les politiques optimales d'aération résultantes à celles obtenues avec le modèle mathématique complet afin de vérifier leurs compatibilités. Les problèmes de minimisation des rejets d'azote et de la consommation énergétique sont envisagés successivement.

Cas de la minimisation des rejets d'azote total

L'influence du nombre de cycles de fonctionnement sur le taux optimal d'aération est illustrée sur la Fig. 3.19. Le critère d'optimisation présente un unique minimum pour 39 cycles d'aération sur 24 heures ; il correspond à une concentration moyenne d'azote de l'ordre de 5.0 mg.L^{-1} .

Le profil optimal d'aération pour 39 cycles de fonctionnement, ainsi que la répartition des taux d'aération par cycle, sont donnés sur la Fig. 3.20. La configuration du profil d'aération est globalement comparable à celle obtenue avec le modèle complet (Fig. 3.8, p. 78), et les durées totales d'aération sont similaires, avec 13h40 pour le modèle simplifié contre 14h15 avec le modèle complet. D'autre part, l'effet de bord au voisinage de l'instant final (profil plat, *cf.* § 3.3.1), n'est plus observé dans ce cas, étant donné que les rejets sont basés sur les concentrations de sortie du réacteur, et non plus du clarificateur (temps de séjour nul).

L'ensemble des contraintes de rejet sont satisfaites, et notamment la contrainte relative aux rejets d'azote total (Fig. 3.21). De manière générale, le fait que le temps de transit de l'effluent dans le clarificateur ne soit pas pris en compte, explique pourquoi les rejets moyens d'azote (5.0 mg.L^{-1}) sont inférieurs à ce qu'ils étaient avec le modèle complet (5.5 mg.L^{-1}). Il est vraisemblable que l'écart entre ces deux valeurs serait inférieur en considérant, par exemple, un horizon d'optimisation plus long (*e.g.* 48 heures) ; ceci per-

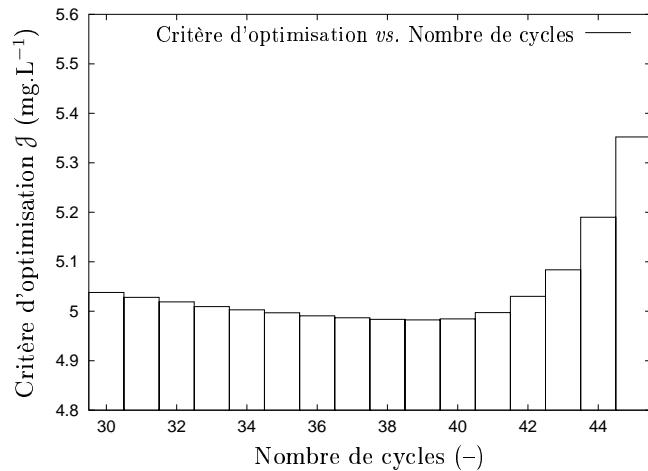


FIG. 3.19 – Influence du nombre de cycle sur la concentration moyenne minimale d'azote total – Utilisation du modèle simplifié.

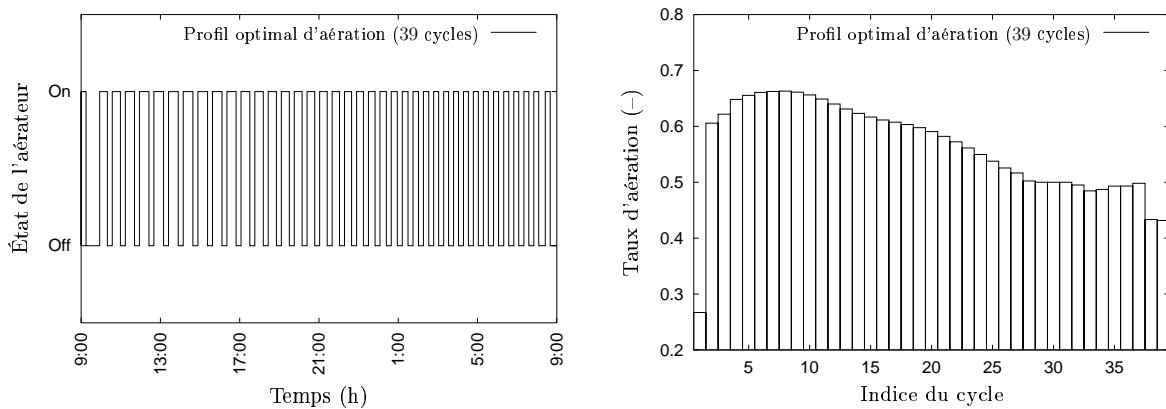


FIG. 3.20 – Profil optimal d'aération pour 39 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération au cours des différents cycles (Fig. droite) – Utilisation du modèle simplifié.

3.4. Simplification du problème d'optimisation

mettrait de s'affranchir des effets de bord induits par l'utilisation du modèle mathématique complet.

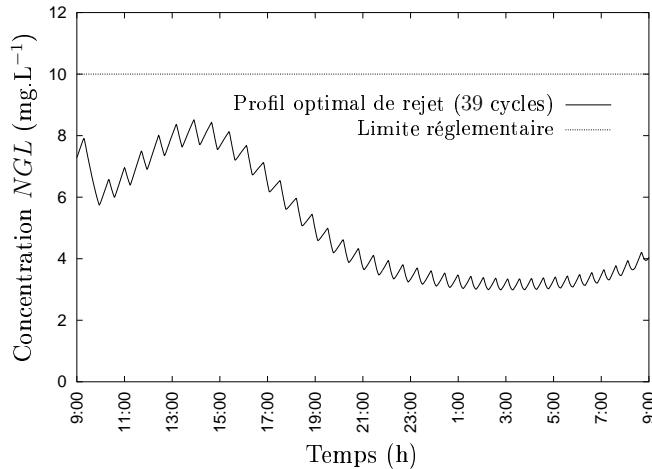


FIG. 3.21 – Rejets d'azote pour 39 cycles d'aération – Utilisation du modèle simplifié.

Si l'on utilise le modèle mathématique complet pour simuler le comportement de l'unité de traitement avec la politique optimale de rejet du problème simplifié (Fig. 3.20), on peut par ailleurs vérifier que le profil d'azote total résultant est proche de celui obtenu en utilisant directement ce modèle. Cette comparaison, présentée sur la Fig. 3.22, valide ainsi la simplification du modèle mathématique.

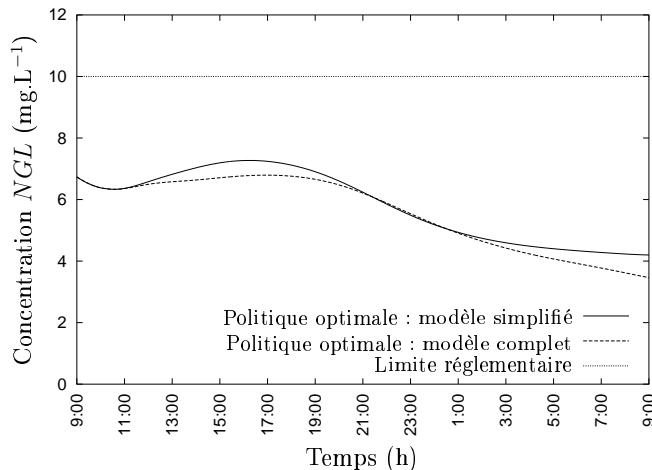


FIG. 3.22 – Comparaison des politiques optimales de rejet calculées avec le modèle complet et le modèle simplifié.

Des résultats relatifs à la sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des contraintes du problème et des incertitudes sur les paramètres du modèle sont détaillés ci-dessous.

Sensibilité des contraintes sur les durées minimales d'aération et d'arrêt –
Parmi les contraintes du problème (1.29) de minimisation des rejets azotés, seules les durées minimales de fonctionnement t_{\min}^{on} et d'arrêt t_{\min}^{off} des turbines sont actives.

Afin d'évaluer la sensibilité de la politique optimale de rejet vis-à-vis de ces durées minimales, la résolution du problème a été effectuée pour différentes valeurs de t_{\min}^{on} et t_{\min}^{off} (5 min., 10 min., 15 min. et 20 min.). Ces résultats sont reportés dans le Tab. 3.3 ; ils indiquent clairement que ces contraintes n'ont qu'une influence limitée sur le résultat de l'optimisation.

TAB. 3.3 – Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les durées minimales d'aération et d'arrêt.

$t_{\min}^{\text{on}}, t_{\min}^{\text{off}}$	N_c^*	\mathcal{J}^*
5 min.	76	4.90 mg.L^{-1}
10 min.	54	4.92 mg.L^{-1}
15 min.	39	4.98 mg.L^{-1}
20 min.	30	5.08 mg.L^{-1}

Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des paramètres estimés – Les modèles mathématiques en traitement des eaux sont réputés difficiles à identifier, et l'incertitude sur les paramètres estimés est généralement importante. Il est donc important d'évaluer la sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des incertitudes sur les valeurs des paramètres du modèle. La Fig. 3.23 représente la sensibilité relative du critère \mathcal{J} en fonction des perturbations sur les paramètres Y_H , i_{NBM} , b_H et f_{ns} .

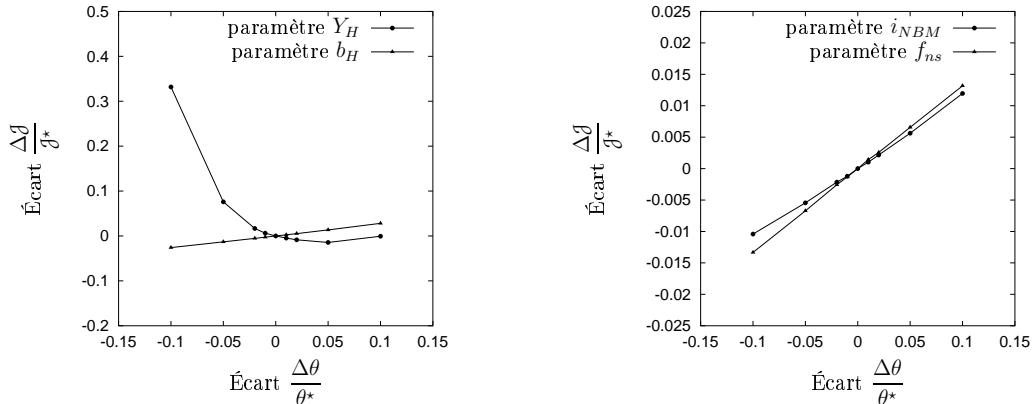


FIG. 3.23 – Sensibilité de la politique optimale de rejet vis-à-vis des paramètres estimés du modèle simplifié.

L'influence des paramètres i_{NBM} , b_H et f_{ns} sur la valeur minimale des rejets d'azote apparaît limitée. En revanche, l'influence du paramètre Y_H est déterminante ; des perturbations, même faibles, de la valeur de Y_H sont en effet susceptibles de modifier le résultat de l'optimisation de façon importante. À nouveau, il s'agit donc d'être prudent quant aux performances annoncées.

Minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur

Les résultats relatifs à la simplification du problème de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur sont présentés dans ce paragraphe. L'influence du nombre de

3.4. Simplification du problème d'optimisation

Cycles de fonctionnement sur le taux optimal d'aération est illustrée sur la Fig. 3.24. Le taux optimal d'aération présente un unique minimum en fonction du nombre de cycles d'aération, pour $N_c^* = 22$; le taux journalier d'aération correspondant est de l'ordre de 29.0%, soit une durée d'aération de l'ordre de 6h55.

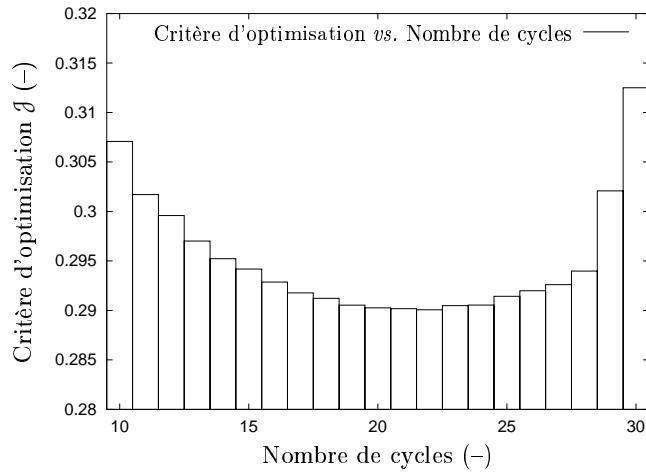


FIG. 3.24 – Influence du nombre de cycle sur le taux minimal d'aération – Utilisation du modèle simplifié.

Le profil optimal d'aération pour 22 cycles et la répartition des taux d'aération par cycle sont représentés sur la Fig. 3.25. Comme dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote, ces résultats sont globalement comparables à ceux obtenus en considérant le modèle complet de l'unité (Fig. 3.12, p. 80).

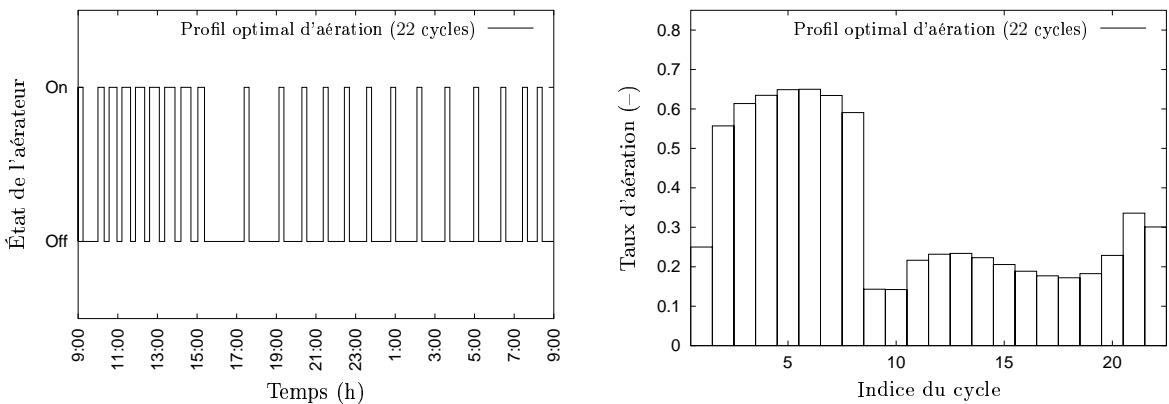


FIG. 3.25 – Profil optimal d'aération pour 22 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération au cours des différents cycles (Fig. droite) – Utilisation du modèle simplifié.

Durant les premiers cycles notamment, ces deux profils d'aération sont similaires. Des différences apparaissent cependant au cours des cycles suivants. Comme le modèle du clarificateur est simplifié, aucun phénomène de mélange n'est ici pris en compte et l'évolution de la concentration en NGL est rapide. Ainsi, la limite réglementaire de rejet devient contraignante après seulement 10 heures de fonctionnement, alors qu'elle n'est atteinte

qu'à l'instant final lorsque le modèle complet est utilisé (Fig. 3.13, p. 81). Ceci explique également que les taux d'aération ne sont pas minimaux au cours des derniers cycles, et que la durée totale d'aération (6h55) est nettement supérieure à celle obtenue en utilisant le modèle complet (5h40). Cette différence serait vraisemblablement moins importante en optimisant le procédé sur des horizons de temps plus longs.

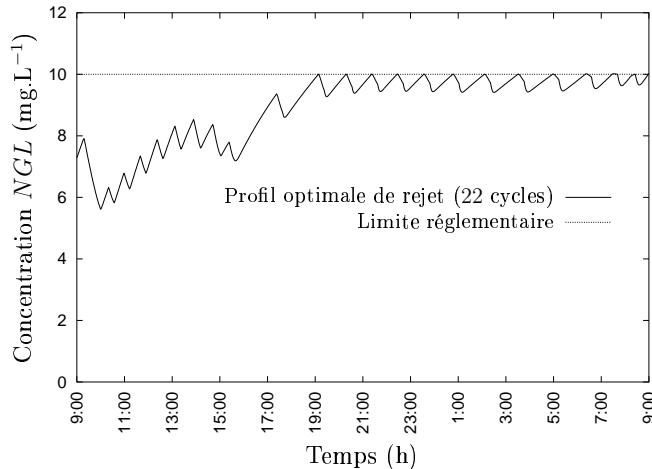


FIG. 3.26 – Rejets d'azote pour 22 cycles d'aération – Utilisation du modèle simplifié.

Pour vérifier que ces politiques d'aération sont cohérentes, les rejets d'azote correspondants sont comparés sur la Fig. 3.27. Les différences constatées sont minimes et valident, comme précédemment, l'utilisation du modèle simplifié pour le calcul des politiques optimales d'aération.

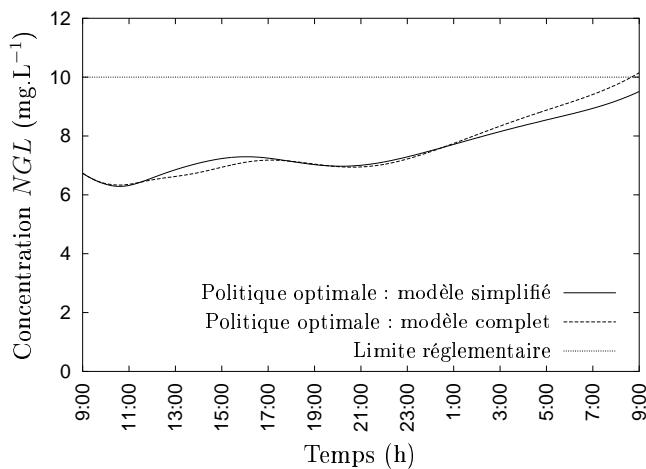


FIG. 3.27 – Comparaison des politiques optimales calculées avec le modèle complet et le modèle simplifié.

La sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des contraintes actives du problème (contrainte de rejet NGL et durées minimales d'aération et d'arrêt) et des paramètres estimés du modèle simplifié est précisée ci-dessous.

Sensibilité vis-à-vis des durées minimales d'aération et d'arrêt – Les durées minimales de fonctionnement et d'arrêt des turbines présentent une forte influence

3.4. Simplification du problème d'optimisation

sur le nombre optimal de cycles de la politique d'aération, mais n'ont au contraire qu'un effet très limité sur la consommation énergétique de l'aérateur (Tab. 3.4).

Sensibilité vis-à-vis de la contrainte sur l'azote total – Contrairement aux durées minimales d'aération et d'arrêt, la limite réglementaire de rejet d'azote total conditionne, dans une large mesure, le taux optimal d'aération du réacteur (Tab. 3.5).

Compte tenu du profil de concentration en *NGL* (Fig. 3.26), ce résultat est tout à fait justifié. Aérer le moins possible revient en effet à dégrader le moins possible de polluants (l'azote en particulier) et, en ce sens, les séquences optimales d'aération sont celles qui conduisent au profil d'azote total le plus proche possible de la limite réglementaire, sans jamais la dépasser. Modifier cette limite entraîne donc de fortes modifications de la politiques optimale d'aération.

TAB. 3.4 – Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les durées minimales d'aération et d'arrêt.

$t_{\min}^{\text{on}}, t_{\min}^{\text{off}}$	N_c^*	\mathcal{J}^*
5 min.	60	28.39%
10 min.	31	28.61%
15 min.	22	29.01%
20 min.	17	29.45%

TAB. 3.5 – Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis de la contrainte sur les rejets d'azote total.

NGL_{\max}	N_c^*	\mathcal{J}^*
9 mg.L ⁻¹	24	32.60%
10 mg.L ⁻¹	22	29.01%
11 mg.L ⁻¹	20	25.18%
12 mg.L ⁻¹	19	20.71%

Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des paramètres estimés – Alors que la politique optimale d'aération est peu sensible aux incertitudes sur les paramètres i_{NBM} , b_H et f_{ns} , de faibles perturbations sur le paramètre Y_H peuvent entraîner des variations substantielles du taux minimal d'aération du réacteur (Fig. 3.28).

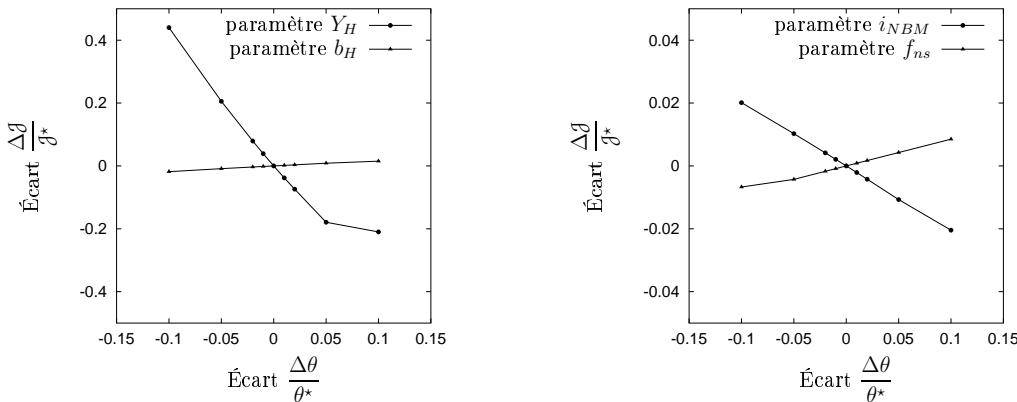


FIG. 3.28 – Sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des paramètres estimés du modèle simplifié.

Comme pour la minimisation des rejets d'azote total, la sensibilité de la politique optimale d'aération vis-à-vis des paramètres du modèle incite à relativiser les réductions de consommation énergétique qui sont ici potentiellement réalisables.

Conclusions

Un modèle simplifié du procédé a été utilisé de manière à réduire le temps de calcul des profils optimaux d'aération. Les politiques optimales d'aération résultantes sont globalement cohérentes avec celles obtenues en utilisant le modèle mathématique complet de l'unité. D'autre part, une diminution significative du temps de calcul est réalisée. La réduction de la dimension des systèmes différentiels est, en effet, conséquente (131 variables d'état pour le modèle complet avec 10 couches de décantation, contre 11 variables d'état dans ce cas) et, de fait, l'intégration des systèmes différentiels d'état et adjoints est sensiblement plus rapide. Selon le nombre de cycles de fonctionnement considéré, le calcul d'une itération prend entre 10 s et 30 s–CPU (PC Athlon®-1.2GHz) avec un maillage irrégulier. Comme le nombre d'itérations de l'algorithme *SQP* reste par ailleurs équivalent, le temps de calcul des profils optimaux d'aération est globalement 20 à 30 fois plus court. Quelques heures suffisent ainsi à résoudre le problème d'optimisation. Il est toutefois possible de limiter davantage les temps de calcul, en réduisant notamment la dimension du problème d'optimisation (nombre de paramètres). Ces aspects font l'objet du paragraphe suivant.

3.4.2 Réduction de la dimension du problème

La simplification du modèle mathématique a permis de réduire de façon substantielle les temps de calcul des politiques optimales d'aération du réacteur. Afin de diminuer davantage ces temps de calcul, il est possible de réduire la dimension des problèmes d'optimisation, *i.e.* le nombre de paramètres d'optimisation. Deux niveaux de simplifications sont ici considérés :

Simplification $[a^k, \bar{\ell}]$ – Les durées des cycles sont supposées identiques. La politique d'aération est ainsi déterminée par la donnée du nombre N_c de cycles et des durées a^k des N_c périodes d'aération ; la durée $\bar{\ell} = \frac{t_f - t_0}{N_c}$ des cycles est fixée par l'horizon d'optimisation et le nombre de cycles. Le problème comporte ainsi 1 variable entière et N_c variables continues, *e.g.* pour la minimisation des rejets d'azote total :

$$\min_{N_c, a^1, \dots, a^{N_c}} \mathcal{J} = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) \, dt$$

soumis à :
$$\left. \begin{array}{lcl} \dot{\mathbf{x}} & = & \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si} & t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \dot{\mathbf{x}} & = & \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si} & t_b^k \leq t < t_c^k \\ t_{\min}^{\text{on}} & \leq & a^k & \leq & t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} & \leq & \frac{t_f - t_0}{N_c} - a^k & \leq & t_{\max}^{\text{off}} \end{array} \right\} \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.12a)$$

où les instants de commutation t_b^k et t_c^k sont définis par :

$$\left. \begin{array}{lcl} t_b^k & = & (k-1) \frac{t_f - t_0}{N_c} + a^k \\ t_c^k & = & k \frac{t_f - t_0}{N_c} \end{array} \right\} \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.12b)$$

Il est à noter que l'application de ces simplifications ne modifie pas l'expression des gradients des problèmes d'optimisation par rapport aux paramètre a^k (*cf.* § 3.2.3).

Simplification $[\bar{a}, \bar{\ell}]$ – Les durées d'aération par cycle sont également supposées identiques. Résoudre le problème revient alors à déterminer le nombre N_c de cycles et la durée moyenne d'aération \bar{a} , *i.e.* 1 variable entière et 1 variable continue. Pour le problème de minimisation des rejets d'azote total, par exemple, ces simplifications donnent :

$$\begin{aligned} \min_{N_c, \bar{a}} \mathcal{J} &= \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) dt \\ \text{soumis à : } \dot{\mathbf{x}} &= \begin{cases} \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \end{cases} \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.13a) \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq \bar{a} \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \frac{t_f - t_0}{N_c} - \bar{a} \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned}$$

où les instants de commutation t_b^k et t_c^k sont définis par :

$$\left. \begin{array}{l} t_b^k = (k-1) \frac{t_f - t_0}{N_c} + \bar{a} \\ t_c^k = k \frac{t_f - t_0}{N_c} \end{array} \right\} \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.13b)$$

Ces simplifications, plus poussées, modifient l'expression des gradients des problèmes d'optimisation. Dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total à nouveau, le gradient du critère \mathcal{J} d'optimisation est donné par :

$$\nabla_{\bar{a}} \mathcal{J} = \sum_{k=1}^{N_c} \left[\mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(1)}(t_b^k^-) - \mathcal{H}_{\mathcal{J}}^{(2)}(t_b^k^+) \right] \quad (3.14)$$

où les variables adjointes $\boldsymbol{\lambda}$ sont solutions du système différentiel (3.5). La simplification du problème de minimisation de la consommation énergétique est obtenue de façon identique.

Réduire le nombre de paramètres d'optimisation a pour effet de diminuer la flexibilité du profil d'aération, ce qui donne inévitablement lieu à une augmentation des rejets ou de la consommation énergétique selon le cas. L'objectif de ce paragraphe est d'étudier l'effet des deux simplifications sur les politiques optimales d'aération. L'application est effectuée successivement pour les problèmes de minimisation des rejets d'azote et de la consommation énergétique, et est basée sur l'utilisation du modèle simplifié de fonctionnement.

Cas de la minimisation des rejets d'azote

Les résultats relatifs à la réduction du problème de minimisation des rejets d'azote total sont présentés dans ce paragraphe. Les valeurs optimales N_c^* du nombre de cycles d'aération et les concentrations moyennes en NGL correspondantes (\mathcal{J}^*) sont données dans le Tab. 3.6. Pour les différents niveaux de simplification, un unique minimum aux problèmes est obtenu en fonction du nombre de cycles.

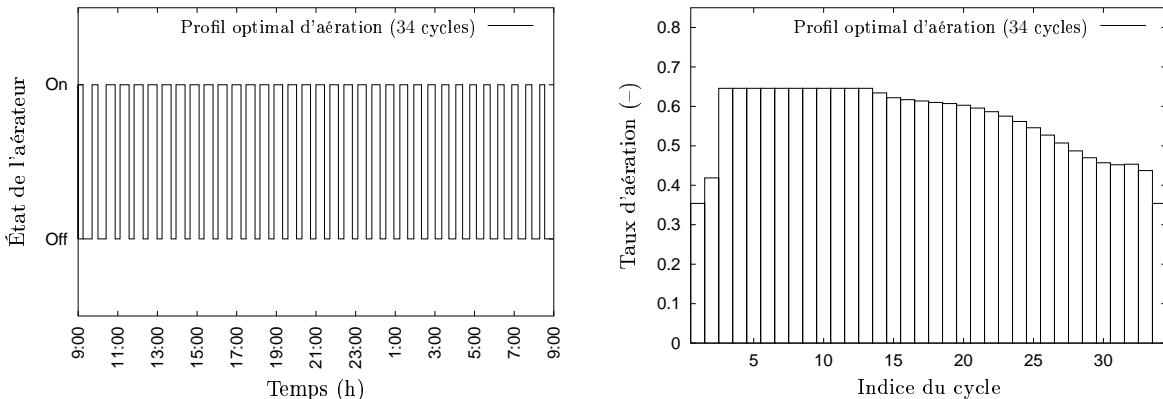
- Lorsque les durées de cycles sont identiques (simplification $[a^k, \bar{\ell}]$), la concentration moyenne minimale des rejets en azote total est de l'ordre de 5.0 mg.L^{-1} et est obtenue

TAB. 3.6 – Influence de la réduction du nombre de paramètres d'optimisation sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.

	Problème général	Simplification $[a^k, \bar{\ell}]$	Simplification $[\bar{a}, \bar{\ell}]$
N_c^*	39	34	38
\mathcal{J}^*	4.98 mg.L^{-1}	5.04 mg.L^{-1}	5.29 mg.L^{-1}
taux d'aération	57.0%	56.8%	60.0%

pour 34 cycles d'aération. L'application du premier niveau de simplification se solde donc par une perte minime du bénéfice de l'optimisation (inférieur à 1%).

Le profil optimal d'aération et la répartition des taux d'aération par cycle sont représentés sur la Fig. 3.29. La politique optimale d'aération résultante est comparable à celle calculée pour le problème général (Fig. 3.20, p. 88) ; les taux moyens d'aération notamment, sont similaires. Les principales différences sont observées aux cours des premiers cycles, lorsque le débit incident est important : durant ces cycles, la durée minimale d'arrêt des turbines ($t_{\min}^{\text{off}} = 15 \text{ min.}$) est atteinte et les durées d'aération correspondantes sont alors imposées ($a^k = \frac{t_f - t_0}{N_c} - t_{\min}^{\text{off}} = 15$) ; ceci illustre la perte de flexibilité de la politique d'aération, qui résulte directement des simplifications apportées.


 FIG. 3.29 – Profil optimal d'aération pour 34 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération par cycle (Fig. droite) – Réduction de type $[a^k, \bar{\ell}]$.

Une comparaison des profils optimaux de concentration en NGL est présentée sur la Fig. 3.30. Il est intéressant de remarquer que malgré les différences relevées entre les politiques d'aération, ces profils de concentrations sont très similaires. Ceci justifie d'ailleurs que les concentrations moyennes des rejets en NGL soient équivalentes. La prise en compte de cycles de même durée apparaît donc tout à fait justifiée, d'autant plus que le nombre d'itérations de l'algorithme de résolution, et donc le temps de calcul, est ainsi réduit de plus de moitié.

- Lorsqu'à la fois les durées d'aération et les durées de cycles sont identiques (simplification $[\bar{a}, \bar{\ell}]$), le minimum de rejet est obtenu pour 38 cycles d'aération et la concentration moyenne optimale en NGL est d'environ 5.3 mg.L^{-1} ; parallèlement,

3.4. Simplification du problème d'optimisation

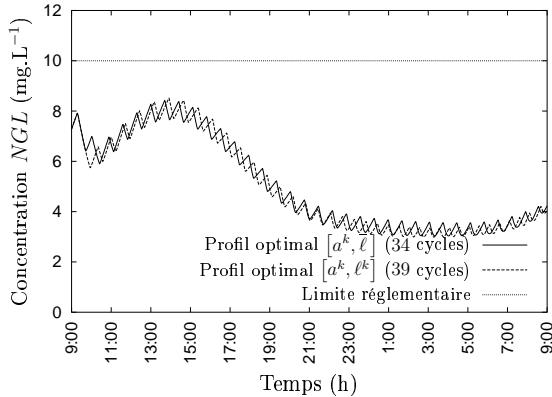


FIG. 3.30 – Influence des simplifications de type $[a^k, \bar{l}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation des rejets d'azote total.

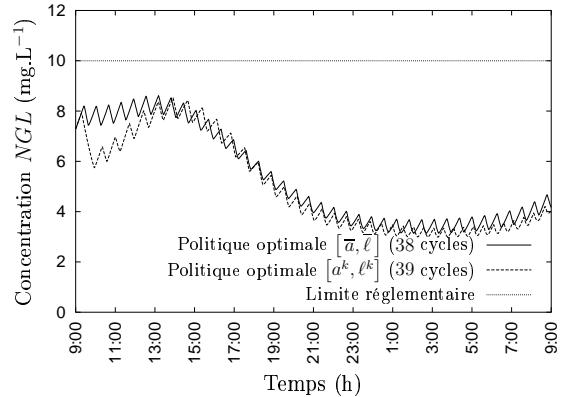


FIG. 3.31 – Influence des simplifications de type $[\bar{a}, \bar{l}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation des rejets d'azote total.

le taux d'aération moyen accuse une augmentation de plus de 5%. Ce type de simplification se solde donc par une perte d'optimalité sensiblement plus importante que précédemment.

La différence entre les profils de concentration en NGL est illustrée sur la Fig. 3.31. Les écarts les plus importants sont principalement observés durant les premiers cycles d'optimisation, alors que les profils apparaissent ensuite assez semblables. Bien que la résolution du problème soit très rapide dans ce cas, en une dizaine d'itérations seulement, la mise en œuvre d'une politique d'aération identique d'un cycle à l'autre n'est donc clairement pas bien adaptée. Il n'est en effet plus possible, dans ce cas, d'agir localement sur le taux d'aération d'un cycle (ou d'un ensemble de cycles) donné, si bien que la politique d'aération résultante est peu flexible. Ce défaut de flexibilité se solde ainsi par une large dégradation du gain de l'optimisation lorsque les perturbations incidentes du procédés varient fortement.

Cas de la minimisation de la consommation énergétique

Ce paragraphe présente les résultats de la réduction du problème de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur. Les conditions optimales d'aération du réacteur sont données, avec et sans simplifications, dans le Tab. 3.7.

TAB. 3.7 – Influence de la réduction du nombre de paramètres sur la consommation énergétique de l'aérateur.

Problème général	Simplification $[a^k, \bar{l}]$	Simplification $[\bar{a}, \bar{l}]$
N_c^*	22	18
\mathcal{J}^*	29.01%	29.55%

Une nette différence est obtenue entre les deux niveaux de simplification.

- Avec un taux d'aération minimal de l'ordre de 29.5% (7h05) pour 18 cycles de fonctionnement, la perte d'optimalité est très faible (moins de 2%) lorsque les durées de tous les cycles sont identiques (simplification $[a^k, \bar{\ell}]$). Le profil optimal d'aération est représenté sur la Fig. 3.32. On peut vérifier que ce profil est semblable à celui obtenu en résolvant le problème général (Fig. 3.25, p. 91). Cette similitude se retrouve d'ailleurs pour les profils de concentration en *NGL* correspondants (Fig. 3.33) et justifie que les taux d'aération soient du même ordre.

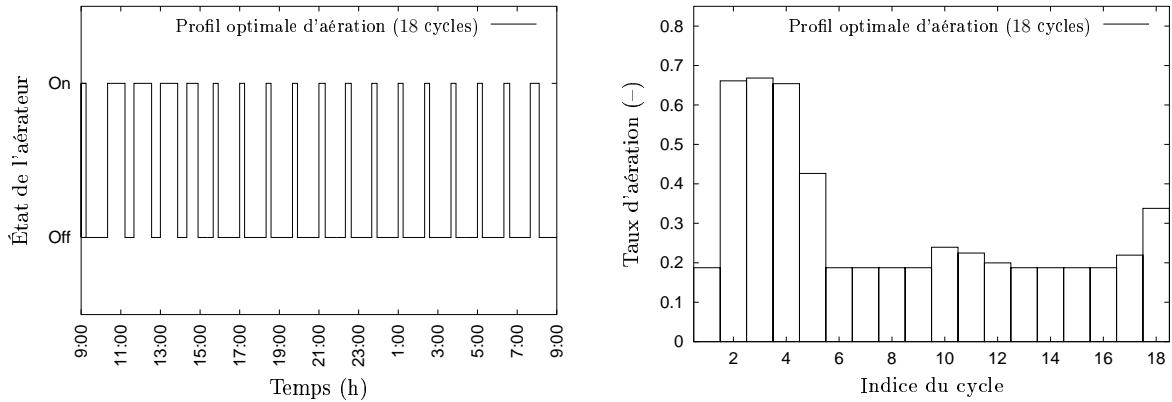


FIG. 3.32 – Profil optimal d'aération pour 18 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération par cycle (Fig. droite) – Réduction de type $[a^k, \bar{\ell}]$.

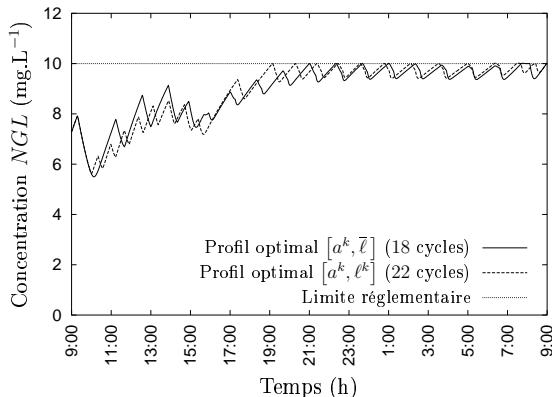


FIG. 3.33 – Influence des simplifications de type $[a^k, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation de la consommation énergétique.

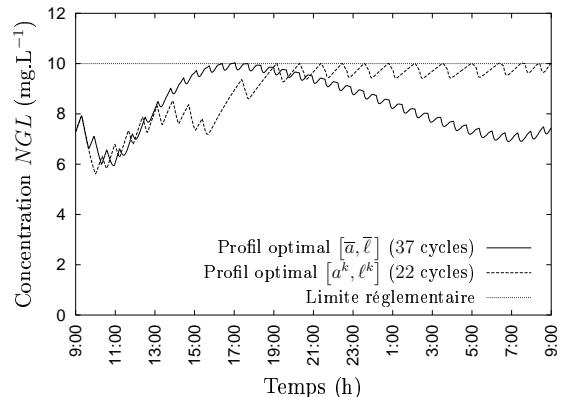


FIG. 3.34 – Influence des simplifications de type $[\bar{a}, \bar{\ell}]$ sur le profil de concentration d'azote total – Minimisation de la consommation énergétique.

- La mise en œuvre de cycles d'aération tous identiques (simplification $[\bar{a}, \bar{\ell}]$) occasionne, en revanche, une nette dégradation des performances de l'optimisation (augmentation de 30% du taux d'aération). Cette perte d'optimalité est d'ailleurs particulièrement bien illustrée sur la Fig. 3.34 ; supposer les durées d'aération et de cycles identiques à la fois ne permet en effet plus d'ajuster le profil de concentration en *NGL* à la limite réglementaire, faute de flexibilité suffisante.

Les conclusions sont semblables à celles énoncées pour le problème de minimisation des rejets d'azote total. La politique d'aération conserve une flexibilité suffisante en considér-

rant des cycles de mêmes durées ; lorsqu'à la fois, les durées d'aération et des cycles sont identiques, les performances réalisées se dégradent sensiblement.

3.4.3 Conclusions

Afin de réduire la dimension des problèmes d'optimisation, deux niveaux de simplification sont proposés. Dans un premier temps, le nombre des paramètres d'optimisation est réduit de moitié en considérant des cycles d'aération de mêmes durées. La comparaison des conditions optimales de fonctionnement correspondantes avec celles obtenues sans simplification montre que des performances similaires sont obtenues pour les deux problèmes d'optimisation, alors que parallèlement, les temps de calcul sont 2 à 3 fois plus courts. En revanche, la prise en compte de cycles et de périodes d'aération identiques pour tous les cycles occasionne une baisse sensible des gains de l'optimisation, indiquant par là même que ces simplifications plus poussées ne sont pas adéquates.

La réduction du nombre de paramètres d'optimisation s'accompagne d'une diminution du nombre d'itérations de l'algorithme de résolution. En égalant les durées des cycles d'aération notamment, la convergence de l'algorithme requiert 2 à 3 fois moins d'itérations, typiquement entre 100 et 200. En cumulant ces simplifications avec celles relatives au modèle du procédé, le temps nécessaire pour déterminer un profil optimal d'aération sur 1 journée varie entre 60 et 180 min.–CPU (PC Athlon®–1.2GHz). Suite à cette large diminution des temps de calcul, il devient ainsi possible d'envisager l'optimisation à long terme des profils d'aération. Ces aspects sont développés dans la partie suivante.

3.5 Optimisation à long terme du procédé

Les conditions optimales de fonctionnement du procédé permettent d'améliorer de façon substantielle les performances de l'unité de traitement, tant en terme de qualité de rejet, que de consommation énergétique. Toutefois, les résultats obtenus jusqu'à présent ne concernent que de courtes périodes de temps (24 heures), et rien ne garantit que ces performances soient durables et non préjudiciables, à long terme, pour le procédé.

La Fig. 3.35 illustre l'évolution du système lorsque la politique d'aération qui minimise la consommation énergétique de l'aérateur sur 24 heures (*cf.* § 3.4.1) est appliquée durant 60 jours. L'application de taux d'aération insuffisants entraîne une rapide diminution de la concentration en biomasse autotrophe dans le réacteur. Corrélativement, la concentration d'azote total de l'effluent augmente et finit par dépasser largement la limite réglementaire. Ce comportement indique clairement que la période d'optimisation considérée n'est pas suffisante pour permettre de tenir compte des dynamiques lentes du système, *e.g.* le processus d'évolution de la biomasse autotrophe (plusieurs jours à plusieurs semaines). Il est donc impératif d'intégrer ces aspects dans le problème d'optimisation, afin de s'assurer que l'application des politiques optimales d'aération ne donne pas lieu à une rapide dégradation de la qualité du traitement.

La prise en compte de l'évolution à long terme du procédé est discutée dans cette partie.

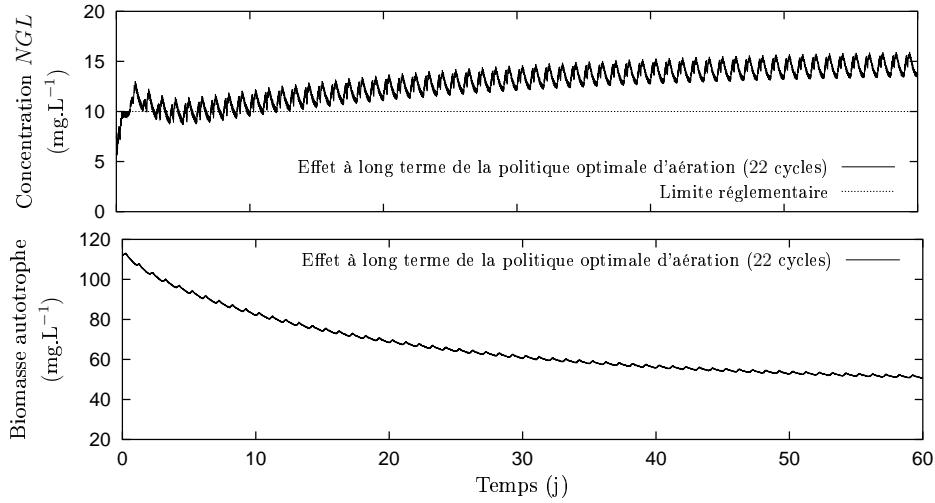


FIG. 3.35 – Effets à long terme de la politique optimale d'aération du réacteur sur les rejets d'azote total (Fig. haut) et la concentration de biomasse autotrophe (Fig. bas).

3.5.1 Position du problème

Plusieurs approches sont envisageables pour déterminer le fonctionnement optimal à long terme du procédé :

- L'alternative la plus naturelle consiste à rajouter des contraintes sur les conditions d'état terminales, de manière à ce qu'elles soient égales aux conditions initiales (régime stationnaire). Pour le problème simplifié (3.12a) de minimisation des rejets d'azote total, par exemple, il vient :

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}_0, N_c, a^1, \dots, a^{N_c}} \mathcal{J} &= \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\mathbf{x}) dt \\ \text{soumis à : } \quad \dot{\mathbf{x}} &= \begin{cases} \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_c^{k-1} \leq t < t_b^k \\ \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}) & \text{si } t_b^k \leq t < t_c^k \end{cases} \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \frac{t_f - t_0}{N_c} - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \end{aligned} \quad k = 1 \dots N_c \quad (3.15)$$

$$\mathbf{x}(t_f) = \mathbf{x}_0$$

Bien que cette approche soit attractive, la pratique montre que les problèmes d'optimisation résultants admettent de nombreux optima locaux qui rendent leurs résolutions très délicates.

- Faute de pouvoir utiliser l'approche précédente, il est possible de calculer les politiques optimales sur de longues périodes de temps, *e.g.* plusieurs jours ou dizaines de jours. Toutefois, si l'on considère des horizons de N_j jours et des politiques d'aération de N_c cycles par jour, la dimension des problèmes d'optimisation devient rapidement problématique. Afin de limiter le nombre de paramètres, l'approche qui est ici adoptée consiste à calculer la politique quotidienne d'aération qui, réappliquée d'un jour à l'autre durant N_j jours, optimise le fonctionnement de l'unité. De cette

3.5. Optimisation à long terme du procédé

manière, la dimension du problème n'est pas modifiée (N_c variables continues d'optimisation) ; seuls les horizons d'intégration le sont. Dans le cadre de la minimisation des rejets, par exemple, le problème d'optimisation à long terme s'écrit :

$$\begin{aligned} \min_{N_c, a^1, \dots, a^{N_c}} \mathcal{J} &= \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{F}_{NGL}(\boldsymbol{x}) \, dt \\ \text{soumis à : } \dot{\boldsymbol{x}} &= \begin{cases} \boldsymbol{f}^{(1)}(\boldsymbol{x}) & \text{si } t_c^{(j-1)N_c+k-1} \leq t < t_b^{(j-1)N_c+k} \\ \boldsymbol{f}^{(2)}(\boldsymbol{x}) & \text{si } t_b^{(j-1)N_c+k} \leq t < t_c^{(j-1)N_c+k} \end{cases} \quad \left. \begin{array}{l} k = 1 \dots N_c, \\ j = 1 \dots N_j \end{array} \right\} \\ t_{\min}^{\text{on}} &\leq a^k \leq t_{\max}^{\text{on}} \\ t_{\min}^{\text{off}} &\leq \frac{t_f - t_0}{N_c} - a^k \leq t_{\max}^{\text{off}} \quad \left. \begin{array}{l} k = 1 \dots N_c \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (3.16)$$

où les instants de commutation sont définis par :

$$\begin{aligned} t_b^{(j-1)N_c+k} &= t_0 + [(j-1)N_c + (k-1)] \frac{t_f - t_0}{N_c} + a^k \\ t_c^{(j-1)N_c+k} &= t_0 + [(j-1)N_c + k] \frac{t_f - t_0}{N_c} \quad \left. \begin{array}{l} k = 1 \dots N_c, \\ j = 1 \dots N_j \end{array} \right\} \end{aligned} \quad (3.17)$$

Les politiques optimales d'aération à long terme de l'unité sont détaillées dans les deux paragraphes suivants ; les problèmes de minimisation des rejets d'azote total et de minimisation de la consommation énergétique sont successivement envisagés. Les simplifications proposées dans la partie précédente sont ici appliquées : le modèle mathématique simplifié est utilisé et les durées des cycles sont identiques.

3.5.2 Minimisation à long terme des rejets d'azote total

Les résultats relatifs à la minimisation à long terme des rejets d'azote total sont présentés dans ce paragraphe : les conditions optimales de fonctionnement sont tout d'abord détaillées. Une comparaison est ensuite proposée entre ces résultats et le mode de fonctionnement actuel du procédé.

Conditions optimales de fonctionnement à long terme

De manière générale, le calcul des politiques optimales d'aération à long terme nécessite d'intégrer les systèmes différentiels d'état et adjoints sur de longues périodes, ce qui rallonge d'autant le temps nécessaire à la résolution du problème. Dans ces conditions, déterminer l'optimum du problème par l'énumération du nombre de cycles d'aération est fastidieux. Aussi, la résolution du problème n'est ici effectué que pour certaines valeurs de N_c (Tab. 3.8). Ceci n'a cependant pas de réelle incidence sur le résultat de l'optimisation, dans la mesure où le critère d'optimisation varie peu en fonction du nombre de cycles. La concentration moyenne minimale des rejets sur 60 jours est de l'ordre de $5,0 \text{ mg.L}^{-1}$ et correspond ici à 36 cycles d'aération.

La période d'optimisation doit permettre d'intégrer les dynamiques lentes du procédé. Les résultats de l'optimisation pour différentes durées d'optimisation (5, 15, 30, 45, 60 et 90 jours) sont donnés dans le Tab. 3.9. Si la concentration moyenne des rejets décroît légèrement à mesure que N_j augmente, la politique optimale d'aération, en revanche,

Chapitre 3. Fonctionnement optimal du procédé

TAB. 3.8 – Influence du nombre de cycles d'aération par jour sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote, pour 60 jours d'optimisation.

Nombre de cycles N_c	Critère d'optimisation \mathcal{J}
27 cycles	5.028 mg.L ⁻¹
30 cycles	5.006 mg.L ⁻¹
33 cycles	4.995 mg.L ⁻¹
36 cycles	4.991 mg.L ⁻¹
39 cycles	4.996 mg.L ⁻¹
42 cycles	5.033 mg.L ⁻¹

TAB. 3.9 – Influence du nombre de jours sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote, pour 36 cycles d'aération par jour.

Nombre de jours N_j	Critère d'optimisation \mathcal{J}
5 jours	5.108 mg.L ⁻¹
15 jours	5.325 mg.L ⁻¹
30 jours	5.158 mg.L ⁻¹
45 jours	5.052 mg.L ⁻¹
60 jours	4.991 mg.L ⁻¹
90 jours	4.923 mg.L ⁻¹

n'évolue pratiquement plus au delà de 45 jours d'optimisation (soit environ 4 fois le temps caractéristique de la dynamique de la biomasse autotrophe).

La politique optimale d'aération calculée pour 36 cycles par jour, sur un horizon de 60 jours, est présentée sur la Fig. 3.36. Il est intéressant de constater que la configuration générale des taux d'aération reproduit les variations de la charge incidente d'azote de façon très fidèle (Fig. 3.36 droite); aux charges les plus fortes correspondent les taux d'aération les plus élevés, et réciproquement.

La concentration moyenne à long terme des rejets d'azote total est similaire à celle obtenue sur 24 heures. Les différences entre les profils d'aération correspondants sont malgré tout marquées (Fig. 3.29, p. 96). Le taux moyen d'aération notamment, est ici largement inférieur à celui de la politique d'aération calculée à court terme. On a pu vérifier d'ailleurs, que l'application de ces deux politiques d'aération ne donne pas, à long terme, les mêmes résultats.

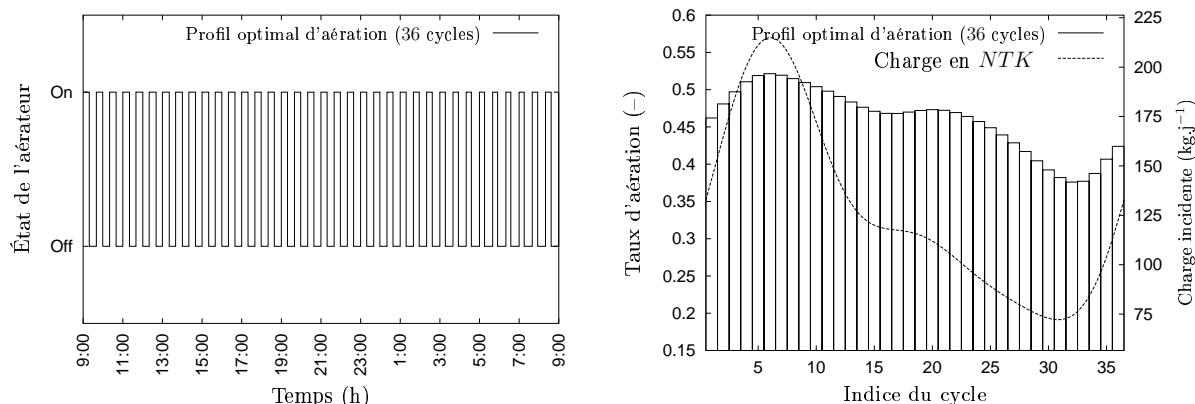


FIG. 3.36 – Profil optimal d'aération pour 36 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération par cycles (Fig. droite) – Minimisation à long terme des rejets d'azote total.

L'évolution des concentrations en azote total, ainsi que des concentrations en biomasses autotrophe et hétérotrophe, est donnée sur la Fig. 3.37. Ces résultats permettent de vérifier que le procédé atteint un régime de fonctionnement quasi-stationnaire (d'un jour à

3.5. Optimisation à long terme du procédé

l'autre) après 60 jours de fonctionnement ; les concentrations en biomasses autotrophe et hétérotrophe se stabilisent respectivement autour de 100 mg.L^{-1} et 1150 mg.L^{-1} . D'autre part, le profil de concentration en *NGL* dépasse légèrement la limite réglementaire de rejet au cours des premiers jours. Ce comportement est toutefois temporaire et ne se reproduit plus par la suite.

Le fait que les concentrations évoluent rapidement au cours des premiers jours permet d'expliquer, en grande partie, les différences obtenues entre les profils d'aération calculés à court et à long termes.

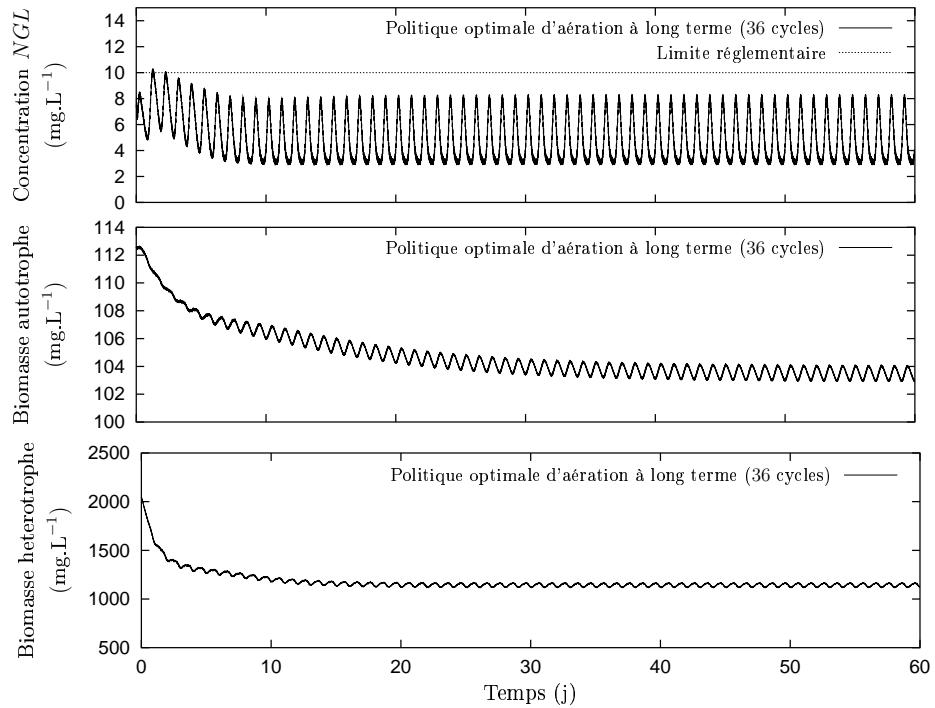


FIG. 3.37 – Fonctionnement optimal de l'unité de traitement à long terme : profil optimal des rejets d'azote total (Fig. haut) et évolutions des concentrations en biomasses autotrophe (Fig. milieu) et hétérotrophe (Fig. bas).

Comparaison avec le mode de gestion actuel du procédé

Le calcul des politiques optimales d'aération à long terme permet d'obtenir un fonctionnement stable du procédé. Dans ces conditions, il est intéressant d'évaluer le gain potentiel qui peut être réalisé par rapport au mode de gestion actuel.

Afin d'établir une comparaison rigoureuse de ces deux modes de gestion, il est nécessaire de considérer les conditions de fonctionnement stationnaires de l'unité pour la politique actuelle d'aération. Ces conditions sont obtenues simplement, en simulant le système sur de longues périodes de temps.

La comparaison des modes de fonctionnement actuel et optimal en régime stationnaire est présentée sur la Fig. 3.38. L'application de la politique actuelle d'aération donne des rejets moyens d'azote total de l'ordre de 7.3 mg.L^{-1} et occasionne un dépassement de la limite

réglementaire durant près de 6 heures. D'autre part, les résultats de l'optimisation à long terme du procédé indiquent que la concentration moyenne minimale qui peut être atteinte est d'environ 4.8 mg.L^{-1} , soit une réduction potentielle de près de 34%, et permettent d'éviter le dépassement des contraintes réglementaires. Il est également intéressant de préciser que l'application de la politique optimale d'aération se solde par une réduction de plus de 13% ($\approx 1\text{h}40$) de la durée quotidienne d'aération, ce qui la rend d'autant plus intéressante.

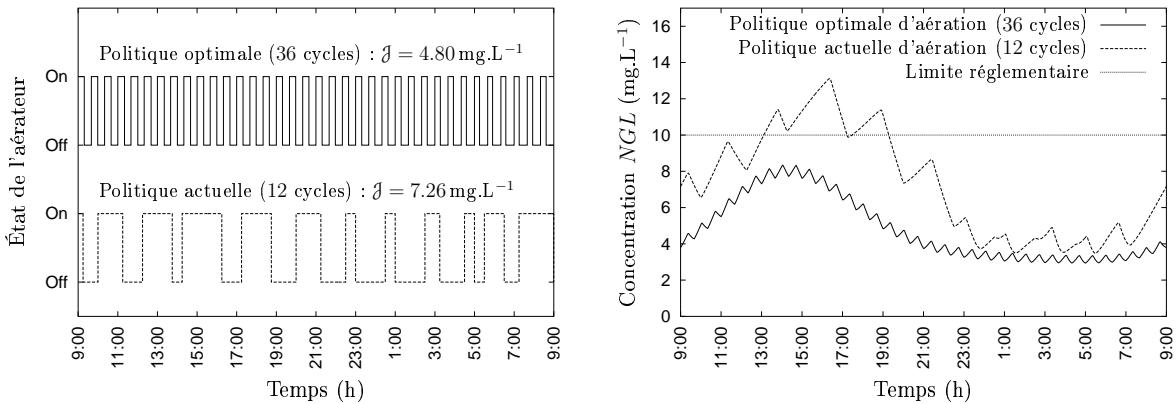


FIG. 3.38 – Comparaison entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total à long terme : stratégies d'aération (Fig. gauche) et concentration de l'effluent en azote global (Fig. droite).

Les résultats de cette comparaison indiquent clairement que les performances de l'unité de traitement étudiée peuvent être très nettement améliorées en mettant en œuvre une gestion plus adaptée de l'aération du réacteur.

3.5.3 Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur

La minimisation des rejets conduit à une large amélioration des performances de l'unité de traitement. Dans le même temps, une importante réduction de la durée journalière d'aération, *i.e.* de la consommation énergétique, est obtenue, sans pour autant avoir été recherchée. Ces résultats laissent à penser que minimiser la consommation énergétique de l'aérateur de façon spécifique devrait permettre d'améliorer encore d'avantage les performances du procédé. Les conditions optimales relatives à ce type de gestion sont détaillées dans le paragraphe suivant ; une comparaison avec le mode actuel de fonctionnement du procédé est ensuite proposée.

Conditions optimales de fonctionnement à long terme

Pour des raisons de temps de calcul, l'énumération complète du nombre de cycles d'optimisation n'est pas effectuée et seules quelques valeurs de N_c sont considérées (Tab. 3.10). Les résultats obtenus permettent toutefois de vérifier que le taux minimal d'aération varie peu en fonction du nombre de cycles. D'autre part, le calcul du taux optimal d'aération

3.5. Optimisation à long terme du procédé

sur des horizons de différentes durées indique qu'un régime de fonctionnement stationnaire est obtenu à partir de 45 jours (Tab. 3.11).

TAB. 3.10 – Influence du nombre de cycles d'aération par jour sur le taux minimal d'aération du réacteur, pour 60 jours d'optimisation.

Nombre de cycles N_c	Critère d'optimisation \mathcal{J}
18 cycles	41.71%
21 cycles	40.69%
24 cycles	40.25%
27 cycles	40.27%
30 cycles	40.73%

TAB. 3.11 – Influence du nombre de jours sur le taux minimal d'aération du réacteur, pour 24 cycles d'aération par jour.

Nombre de jours N_j	Critère d'optimisation	
	N_j	\mathcal{J}
5 jours		39.99%
15 jours		40.07%
30 jours		40.20%
45 jours		40.23%
60 jours		40.25%
90 jours		40.25%

Les conditions optimales de fonctionnement de l'unité de traitement sont ici présentées pour des horizons d'optimisation de 60 jours. Le taux minimal d'aération $\mathcal{J}^* = 40.25\%$ est obtenu avec 24 cycles de fonctionnement ; il correspond à une durée journalière d'aération de 9h40. La configuration du profil optimal d'aération est donnée sur la Fig. 3.39. L'intensité d'aération est maximale, jusqu'à 70%, lorsque les charges incidentes sont les plus élevées (entre 11h et 15h). Les taux d'aération diminuent ensuite, à mesure que les charges incidentes baissent ; ils deviennent rapidement minimaux (25%) et le restent durant plus de 12 heures.

Dans le cadre de l'optimisation à long terme du procédé, le taux moyen d'aération est sensiblement plus important que celui calculé sur 24 heures (29.5%, cf. § 3.4.2). Il apparaît donc nécessaire de maintenir une intensité d'aération soutenue si l'on souhaite garantir la fiabilité du traitement.

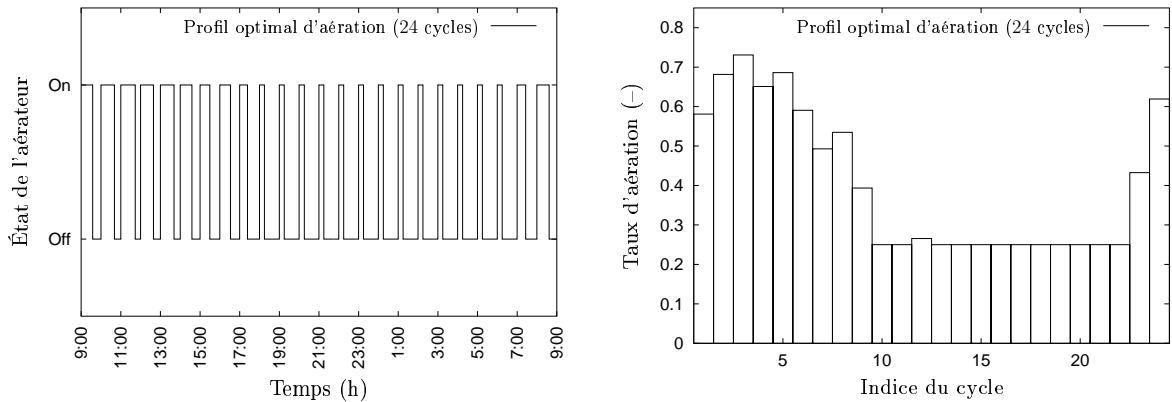


FIG. 3.39 – Profil optimal d'aération pour 24 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et représentation des taux d'aération par cycles (Fig. droite) – Minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur.

L'évolution des concentrations en *NGL* et en biomasses autotrophe et hétérotrophe est représentée sur la Fig. 3.40. Le profil de rejet d'azote total permet à nouveau d'illustrer le

Chapitre 3. Fonctionnement optimal du procédé

caractère déterminant de la limite réglementaire. Lorsque la charge incidente est importante, le profil atteint 10 mg.L^{-1} , malgré les longues durées d'aération. En revanche, la limite n'est plus atteinte pour les faibles charges bien que l'intensité d'aération soit alors minimale.

La concentration en biomasse hétérotrophe atteint rapidement un niveau stable, compris entre 1 et 1.2 g.L^{-1} . L'évolution de la concentration en biomasse autotrophe est plus lente. Les périodes durant lesquelles les taux d'aération sont élevés permettent de maintenir une quantité suffisante de biomasse autotrophe dans le réacteur, et contrebalancent ainsi les diminutions qui se produisent lors des périodes d'aération minimale ; à terme, la concentration en biomasse autotrophe varie autour de 90 mg.L^{-1} .

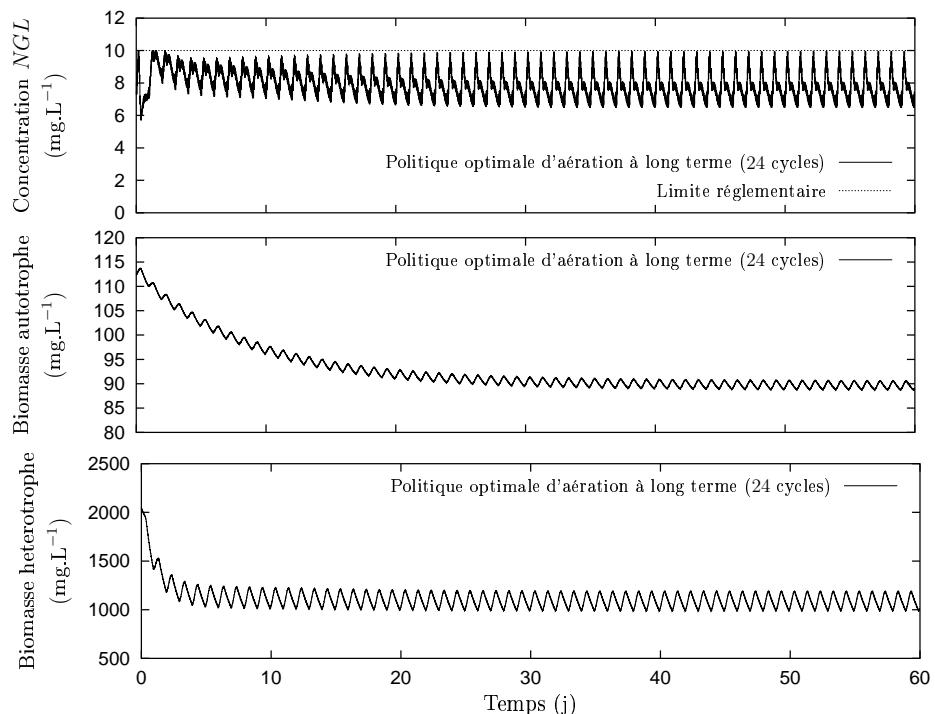


FIG. 3.40 – Fonctionnement optimal de l'unité de traitement à long terme : profil optimal de rejet d'azote total (Fig. haut) et évolutions des concentrations en biomasses autotrophe (Fig. milieu) et hétérotrophe (Fig. bas).

Pour finir, il est important de préciser que les autres contraintes de rejet (DCO , DBO_5 et MES) sont respectées et ne posent pas de problèmes particuliers.

Comparaison avec le mode de gestion actuel du procédé

Afin d'évaluer les bénéfices qui peuvent être réalisés par rapport au mode de fonctionnement actuel de l'unité, une comparaison entre la politique d'aération optimale précédente et la politique actuelle est établie dans des conditions de fonctionnement stationnaires. Ces profils d'aération et les rejets d'azote total correspondants sont présentés sur la Fig. 3.41. Dans les deux cas, les taux d'aération les plus élevés sont appliqués le matin et l'après-midi afin de faire face aux charges incidentes les plus fortes, alors que l'intensité d'aération est faible durant la nuit. Les taux moyens d'aération correspondants sont cependant très

différents. Actuellement, les taux appliqués sont de l'ordre de 53,1%, soit 12h45 par jour, mais la répartition des périodes d'aération ne permet pas de respecter la limite réglementaire de rejet en *NGL* durant plus de 6 heures. L'application des méthodes d'optimisation dynamique montre qu'il est possible de satisfaire cette contrainte tout en appliquant des taux d'aération nettement inférieurs, mais en répartissant de façon beaucoup plus adéquate les périodes d'aération au cours de la journée. Le gain de l'optimisation est ici particulièrement important : le taux moyen d'aération est réduit de près 25%, et dans le même temps, la qualité de l'effluent est améliorée.

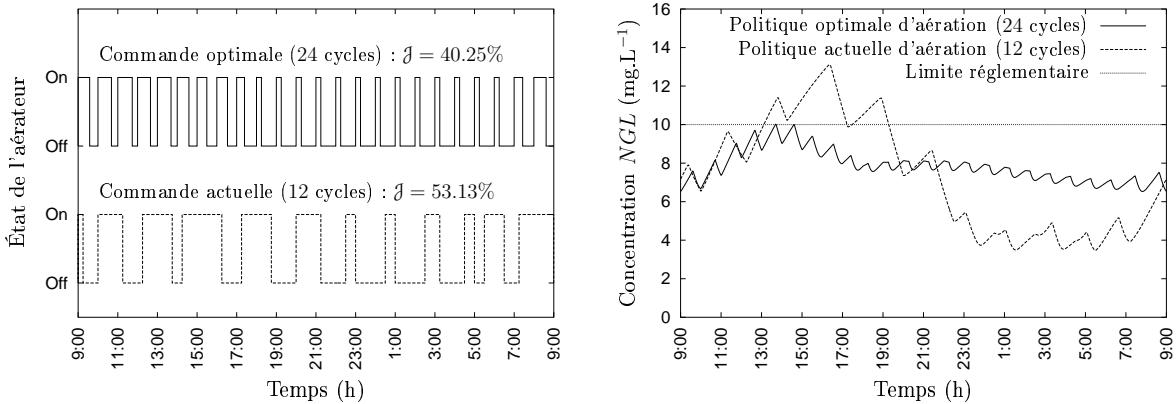


FIG. 3.41 – Comparaison entre le mode de fonctionnement optimal et le mode de gestion actuel du procédé dans le cadre de la minimisation à long terme de la consommation énergétique de l'aérateur : stratégies d'aération (Fig. gauche) et concentration de l'effluent en azote global (Fig. droite).

Une estimation, en terme de coût, du gain apporté par l'optimisation est donnée ci-dessous :

- la consommation énergétique totale des turbines d'aération est de 90 kWh ;
- les valeurs du coût énergétique mentionnées dans la littérature sont de l'ordre de 0.070 €.kWh⁻¹ (Abousam, 2001; Vanrolleghem et Gillot, 2001) ;
- l'application de la politique optimale d'aération permet de réduire la durée journalière d'aération de plus de 3 heures.

Un rapide calcul montre que l'économie annuelle qui est potentiellement réalisable sur cette unité est de l'ordre de **7 000 €**, et ceci en jouant exclusivement sur l'aération du réacteur.

3.5.4 Conclusions

Le calcul des politiques optimales à court terme ne permet pas de tenir compte de certaines dynamiques lentes du système, comme l'évolution bactérienne. L'application de ces politiques d'aération sur de longues périodes peut donc se révéler dangereux pour le procédé. Afin d'intégrer ces aspects dans le problème, il est nécessaire d'envisager l'optimisation à long terme du procédé.

Concernant la minimisation des rejets d'azote total, les résultats obtenus montrent qu'il est possible de réduire de près de 35% la concentration moyenne en *NGL* et d'obtenir simultanément un diminution d'environ 1h40 de la durée d'aération quotidienne.

Les bénéfices réalisés dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique sont également conséquents, avec une réduction de plus de 3 heures du temps d'aération quotidien et une nette amélioration de la qualité de l'effluent. Un rapide chiffrage de ces bénéfices a permis de montrer que l'économie potentielle correspondante est de l'ordre de 7 000 € par an ; d'autre part, l'augmentation du rendement d'épuration peut donner lieu à une réduction des taxes d'assainissement. Ceci peut représenter une économie intéressante pour les petites collectivités et permettre par ailleurs de compenser une partie du coût d'équipement et d'instrumentation de ces unités de traitement.

3.6 Conclusions et Perspectives

Les conditions optimales de fonctionnement d'une petite station de traitement existante à boues activées ont été présentées dans ce chapitre. La méthode de résolution adoptée est l'approche directe séquentielle ; un algorithme de résolution de type SQP (code NLPQL) est appliqué et les gradients sont calculés par la méthode de l'adjoint. On rappelle également que les modèles mathématiques utilisés ont fait l'objet d'une procédure d'identification, à partir de mesures expérimentales réalisées sur l'unité étudiée.

Deux types de problèmes sont envisagés pour améliorer les performances du procédé : (i) la minimisation des rejets d'azote total et, (ii) la minimisation de la consommation énergétique des turbines d'aération. Dans les deux cas, le calcul des conditions optimales a d'abord été réalisé à court terme (24 heures), en considérant le modèle complet de l'unité. Les améliorations ainsi obtenues sont particulièrement élevées. En revanche, les temps de calcul impliqués sont rédhibitoires et ont incité l'application de simplifications : (i) la simplification du modèle dynamique du procédé et, (ii) la réduction du problème d'optimisation par l'intermédiaire des paramètres d'optimisation. Il a pu être établi que les conditions optimales de fonctionnement correspondantes sont analogues à celles obtenues en résolvant le problème général. L'application sur le long terme de ces politiques optimales d'aération conduit cependant à une rapide dégradation des performances du procédé. Il apparaît en effet que la résolution du problème sur de courtes périodes opératoires ne permet pas de prendre en compte certaines dynamiques lentes du système, *e.g.* les dynamiques d'évolution des biomasses hétérotrophe et autotrophe. Ces aspects ont été intégrés au problème en considérant l'optimisation à long terme du procédé (60 jours). En procédant ainsi, les politiques optimales d'aération garantissent des performances durables et ne présentent pas de risques pour le procédé. Ces performances, qui sont inférieures à celles annoncées à court terme, offrent malgré tout de nettes améliorations par rapport au mode de fonctionnement actuel de la station :

- La résolution du problème de minimisation des rejets d'azote permet d'obtenir une réduction de près de 35% de la concentration moyenne en *NGL*. Parallèlement, un diminution d'environ 1h40 de la durée quotidienne d'aération est observée et apporte un intérêt supplémentaire à l'application de ce mode de gestion.
- D'autre part, la politique optimale calculée dans le cas de la minimisation de la consommation énergétique des turbines d'aération réalise une diminution de l'ordre de 25% (soit 3 h) de la durée journalière d'aération par rapport au mode de fonctionnement actuel, tout en respectant les normes de rejet définies par l'Union Européenne. Cette réduction correspond à une économie annuelle de l'ordre de 7 000 €.

Perspectives

L'objectif de la première partie de ce travail était d'évaluer le gain **potentiel** qui peut être réalisé par rapport au mode de fonctionnement actuel du procédé, en appliquant les méthodes d'optimisation dynamique. Pour les deux problèmes étudiés, les résultats obtenus sont très convaincants et motivent la mise en œuvre pratique de ces méthodes. Il est bien entendu possible d'utiliser les profils optimaux d'aération résultants dans des stratégies de commande en *boucle ouverte*, en tenant compte d'éventuelles marges de sécurité. Ceci n'est cependant pas souhaitable en raison de la variabilité des flux de pollution incidents et des incertitudes qui caractérisent les modèles mathématiques utilisés. L'intégration du calcul des politiques optimales dans des schémas de commande en *boucle fermée* est préférable. Ces aspects sont abordés dans la seconde partie du manuscrit.

D'un point de vue plus académique, il serait intéressant d'envisager l'amélioration des algorithmes d'optimisation utilisés. En particulier, l'application de méthodes d'optimisation globales pourrait permettre d'améliorer davantage les performances du procédé. Des travaux sont actuellement menés sur la construction de sous-estimateurs pour les problèmes d'optimisation comportant des contraintes différentielles (Esposito et Floudas, 2000a; Papamichail et Adjiman, 2001a,b; Singer et Barton, 2001). Dans certains cas, il est d'ores et déjà possible de borner les trajectoires d'un système différentiel par l'utilisation des résultats de l'algèbre des intervalles (Moore, 1966; Hansen, 1992). Il est nécessaire de disposer de tels sous-estimateurs pour appliquer les méthodes de décomposition rigoureuses initialement développées dans le cadre des problèmes NLP (méthodes *branch and bound*). Ces sous-estimateurs pourraient également permettre d'envisager la résolution du problème mixte général (MIDO) en s'inspirant des méthodes de résolution des problèmes MINLP. Enfin, une perspective intéressante de l'application des méthodes d'optimisation dynamique concerne la résolution des problèmes d'optimisation dynamique en environnement incertain, *i.e.* en tenant compte des incertitudes sur les paramètres et les perturbations du système. Des méthodes ont été développées dans le cadre des problèmes algébriques (*e.g.* Grossmann et Sargent, 1978; Grossmann et Floudas, 1987; Pistikopoulos et Ierapetritou, 1995). Elles sont basées sur la reformulation du problème original comme un problème d'optimisation mixte. La résolution de ces problèmes dans le cas de contraintes différentielles est actuellement limité par l'absence de méthodes de résolution générales des problèmes MIDO.

Deuxième partie

Mise en œuvre de la commande
optimale en boucle fermée

Introduction

La première partie de ce manuscrit a permis de démontrer la faisabilité des méthodes d'optimisation dynamique pour l'amélioration de la qualité du traitement et du coût de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées. Les politiques optimales d'aération ainsi calculées peuvent être appliquées directement dans un schéma de commande en *boucle ouverte*. Cependant, les inconvénients des méthodes d'optimisation dynamique sont importants pour les bioprocédés, en raison des larges incertitudes qui caractérisent les modèles utilisés et de la forte variabilité des perturbations qui affectent le système. L'intégration des politiques optimales d'aération dans un schéma de commande en *boucle fermée (feedback)* apparaît donc indispensable. Sa mise en œuvre s'effectue en deux parties : (i) le calcul des politiques optimales d'aération et (ii) l'observation et l'estimation en ligne de l'état et des paramètres du système.

Les nombreux paramètres et variables d'état que comporte le modèle ASM 1 le rendent inadéquat pour la commande en boucle fermée du procédé. Il s'agit donc d'utiliser un modèle simplifié, de faible dimension, dont la formulation fait l'objet du chapitre 4. Le calcul des politiques optimales d'aération est basé sur un modèle du procédé supposé parfait. Or des écarts importants existent entre ce modèle et le procédé qu'il représente. Afin de déterminer dans quelle mesure l'imperfection du modèle peut dégrader les bénéfices de l'optimisation, l'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement est présentée dans le chapitre 5. Ce type d'analyse est indispensable pour replacer les résultats dans un contexte plus réaliste et permet de déterminer quels paramètres et/ou variables d'état du système doivent faire l'objet d'une attention particulière. En pratique, certains états du système ne sont pas mesurés et des paramètres varient temporellement. La mise en œuvre d'observateurs d'état et d'estimateurs paramétriques, chargés d'estimer *en ligne* ces états et paramètres à partir des mesures des sorties du système, est envisagée dans le chapitre 6. Pour terminer, l'utilisation de l'observateur/estimateur conjoint résultant dans un schéma de commande optimale en *boucle fermée* est discutée.

CHAPITRE 4

Elaboration d'un modèle réduit de fonctionnement

Celui qui ne progresse pas chaque jour, recule chaque jour

CONFUCIUS

L'utilisation de la simulation dynamique, basée sur des phénomènes physiques rigoureux, est devenue courante en Génie des Procédés. Ces modèles rigoureux permettent de mieux appréhender le comportement dynamique de nombreux systèmes, notamment dans des conditions inhabituelles (voire extrêmes) de fonctionnement, et sont particulièrement utiles pour la conduite des procédés. Étant donné que ces modèles intègrent de nombreuses connaissances relatives à leur domaine d'intérêt, leur précision et leur gamme de validité sont importantes. En contrepartie cependant, le nombre de variables d'état et de paramètres qu'ils comportent est important. Cette complexité est problématique dans certains domaines d'application, comme l'optimisation et la commande des procédés, et l'utilisation de modèles plus simples, de faibles dimensions, est le plus souvent nécessaire :

Optimisation des procédés – L'application des méthodes d'optimisation pour la conception et la gestion optimale des procédés est en constante progression. En raison de l'importance des temps de calcul que peut induire l'utilisation de modèles de grandes tailles, il est généralement nécessaire d'utiliser des modèles simplifiés ne contenant que les dynamiques dominantes du procédé.

Commande de procédé – De nombreux concepts en commande des procédés sont adaptés à des modèles de faibles dimensions. L'utilisation de modèles comportant de nombreux paramètres et variables peut donner lieu à des temps de calculs très élevés et entraîner des problèmes de conditionnement. D'autre part, des problèmes numériques raides (*stiff*) peuvent également survenir lorsque le système est caractérisé par des échelles de temps d'ordres différents (*e.g.* pour les systèmes de type lent/rapide). Il est donc préférable d'utiliser des modèles de faibles dimensions pour

la conception des systèmes de commande, *e.g.* en commande prédictive, commande optimale, *etc.*

Identification paramétrique – Le calage des modèles de grandes dimensions peut également s'avérer problématique. Un grand nombre de données, souvent coûteuses et longues à obtenir, sont en effet nécessaires pour cela, sans compter les problèmes d'identifiabilité rencontrés. Certaines variables d'état sont de plus difficilement mesurables, ce qui rend leur validation délicate. Il est donc préférable de mettre en œuvre des modèles simples, notamment pour l'identification en ligne, *e.g.* en commande adaptative des procédés.

Si la nécessité de disposer de modèles simples, de faibles dimensions, est clairement établie, leur construction peut s'avérer délicate. Il ne s'agit pas, sous prétexte de réduire le nombre de variables d'état et de paramètres, de nuire à la prédictibilité des modèles résultants, auquel cas ceux-ci deviendraient inutilisables pour la commande des procédés sous-jacents. Ces simplifications doivent être effectuées, autant que possible, dans un cadre mathématique rigoureux, *e.g.* en appliquant la méthode des *perturbations singulières* (Kokotovic et al., 1986), la méthode d'*homotopie* (Robertson et Cameron, 1997a,b), *etc.* L'utilisation de ce type de méthodes n'est toutefois pas systématiquement envisageable, et on est alors amené à effectuer des simplifications de nature heuristique, en intégrant notamment l'expérience acquise sur le procédé.

En traitement des eaux, l'adoption par l'Union Européenne de normes de rejet de plus en plus sévères vis-à-vis des rejets des stations d'épuration implique une fiabilisation et un meilleur contrôle de celles-ci. L'utilisation de modèles mathématiques prend alors tout son intérêt pour aider à l'élaboration de stratégies de commande performantes, et éventuellement à la commande en temps réel des unités de traitement. De nombreuses études portant sur la modélisation du procédé à *boues activées* ont été effectués au cours des deux dernières décennies. Elles culminent dans la publication par l'IAWQ des modèles ASM 1, ASM 2, et plus récemment ASM 3 (Henze et al., 1987; Gujer et al., 1995, 1999). L'utilisation largement répandue de ces modèles dans de multiples domaines d'application a permis d'éprouver leurs capacités de prédiction, mais les nombreux paramètres et variables d'état qu'ils contiennent les rendent cependant inadéquats pour la commande *en ligne* du procédé.

L'objectif de ce chapitre est de formuler un modèle de fonctionnement simplifié des unités de traitement à boues activées de petites tailles qui soit compatible avec la mise en œuvre de la commande optimale du procédé¹. En particulier, il sera nécessaire de veiller à ce que le modèle réduit résultant :

- ait un horizon de prédiction de plusieurs heures ;
- soit robuste vis-à-vis des perturbations du procédé (débit, charge) et des changements de politique d'aération ;
- possède les propriétés d'observabilité et d'identifiabilité qui conviennent à l'utilisation dans un schéma de *commande adaptative*.

La formulation du modèle réduit fait l'objet de la première partie de ce chapitre (§ 4.1). Les propriétés d'observabilité et d'identifiabilité structurelle et pratique de ce modèle sont ensuite étudiées dans les parties 4.2 et 4.3 respectivement.

¹Les résultats présentés dans ce chapitre ont été en partie communiqués au 8^{ème} Congrès International GRUTTEE, 22-23 novembre 2001, Limoges (Chachuat et al., 2001d).

4.1 Formulation du modèle réduit

L'utilisation de modèles simplifiés de fonctionnement est fréquente en traitement des eaux par boues activées pour l'observation de l'état, l'estimation en ligne des paramètres ou encore la commande des procédés (*e.g.* Zhao et Kümmel, 1995; Jeppsson, 1996; Julien, 1997; Lindberg, 1997; Marsili-Libelli et Vaggi, 1997; Ryckaert, 1998; Steffens et Lants, 1999; Weijers, 2000). Beaucoup sont basés sur les modèles ASM 1 et ASM 2. Les simplifications qui sont généralement considérées peuvent être réparties en trois classes :

Simplification des dynamiques – L'application de l'hypothèse de l'état *quasi stationnaire* aux dynamiques rapides permet de réduire les modèles de traitement des eaux (Bastin et Dochain, 1990). Cependant, le choix des variables d'état rapides (composés solubles en général) est le plus souvent de nature heuristique et il n'est pas rare qu'un choix arbitraire de ces variables dégrade sensiblement la prédictibilité du modèle résultant. En contrepartie, la théorie des perturbations singulières fournit un cadre mathématique rigoureux pour la simplification des systèmes dynamiques comportant plusieurs échelles de temps, *e.g.* les systèmes de type lent/rapide, mais a été peu appliquée jusqu'à présent aux procédés de traitement des eaux (Weijers, 2000). Par une approche similaire, les dynamiques lentes de ces modèles peuvent également être simplifiées, *e.g.* en les considérant constantes. Pour le choix des variables lentes et rapides du modèle ASM 1, Steffens et al. (1997) proposent d'associer les valeurs propres et les variables d'état du système dynamique au moyen d'une méthode d'homotopie (Robertson et Cameron, 1997a,b). L'application de ce type d'approche à un procédé à boues activées de type *conventionnel* (*i.e.* avec séparation des bassins d'aération et d'anoxie) montre que l'horizon de validité des simplifications relatives aux dynamiques lentes du système (évolution de la biomasse notamment) est de l'ordre d'une journée.

Simplification des cinétiques de dégradation – Les termes cinétiques de Monod (fonctions de commutation de type $\frac{S}{K+S}$) peuvent être simplifiés en les remplaçant par des réactions d'ordre 0 ou 1 par rapport au substrat (supposer un ordre de réaction nul revient à considérer que le substrat n'est pas limitant pour le processus). Pour les unités de traitement à faible charge par exemple, certains auteurs considèrent que les réactions sont du premier ordre par rapport au substrat facilement biodégradable S_S^{ba} , en raison de sa faible concentration dans le réacteur (par rapport à la constante K_S d'affinité) (*e.g.* Julien, 1997). Réciproquement, il n'est pas rare de supposer que les processus d'hydrolyse des substrats particulaires X_S^{ba} et X_{ND}^{ba} s'effectuent à taux constant, indépendamment de la concentration en biomasse hétérotrophe $X_{B,H}^{ba}$ (très supérieure aux concentrations X_S^{ba} et X_{ND}^{ba}). Ce type de simplifications sur les cinétiques de dégradation permet dans quelques cas de découpler les dynamiques de certains composés du modèle ASM 1.

Simplification des composés – Les variables d'état dont les dynamiques sont découpées de celles des autres composés (initialement dans le modèle ASM 1 ou suite à des simplifications préalables), *e.g.* les composés inertes soluble S_I^{ba} et particulaires X_I^{ba} et X_P^{ba} et l'alcalinité S_{ALK}^{ba} , et qui présentent peu d'intérêt peuvent être éliminées du système dynamique. Pour réduire plus encore le nombre de composés, certains auteurs proposent d'associer des variables d'état du modèle initial. Par exemple, Jeppsson (1996) ne distingue pas les composés biodégradables soluble S_S^{ba} et parti-

culaires X_S^{ba} . Il n'est alors plus nécessaire de décrire le mécanisme d'hydrolyse ρ_7 du substrat organique particulaire en substrat soluble (*cf.* Tab. 1.2, p. 18). De la même façon, les formes soluble S_{ND}^{ba} et particulaire X_{ND}^{ba} d'azote organique peuvent être associées.

Au vu de la diversité des simplifications applicables au modèle ASM 1, le nombre de combinaisons possibles est très élevé. Toutefois, la plupart des travaux publiés à l'heure actuelle concernent les procédés de traitement par boues activées de type conventionnels (*e.g.* Vanrolleghem, 1994; Jeppsson, 1996; Lindberg, 1997) ou Biodenipho® (*e.g.* Isaccs et Henze, 1995; Zhao et al., 1995; Potter et al., 1996; Isaacs, 1995). Dans ce cas, la concentration en oxygène dissous S_O^{ba} est soit régulée autour d'une valeur de référence (de l'ordre de 2 ou 3 mg.L⁻¹ dans les bassins d'aération), soit négligeable (dans les zones d'anoxie), ce qui permet d'apporter des simplifications complémentaires au modèle ASM 1. Il est clair que les modèles résultants sont inutilisables dans le cadre de cette étude, étant donné que c'est la commande optimale des séquences d'aération dans le réacteur qui est ici recherchée.

À notre connaissance, peu d'auteurs se sont intéressés, de façon spécifique, à la simplification du modèle ASM 1 dans le cadre d'un procédé de traitement à boues activées en bassin unique avec aération séquentielle. Les travaux de Julien (1997) sont basés sur la commande du procédé par l'ajout d'une source de carbone externe. Toutefois, il a pu être vérifié que le modèle simplifié élaboré par cet auteur n'est pas adapté au cas de la commande des séquences d'aération du réacteur (horizon de prédiction insuffisant). Plus récemment, Anderson et al. (2000) et Kim et al. (2000) ont proposé d'utiliser un modèle linéaire (basé sur le modèle ASM 1) dans un schéma de commande en boucle fermée du système d'aération. Ce type de modèles, bien qu'attractif pour sa simplicité, ne bénéficie cependant que d'un horizon de prédiction très limité (1 à 2 heures), en raison notamment de la forte non-linéarité du procédé.

Dans cette partie, la construction d'un modèle simplifié spécifique est envisagée. Une analyse des dynamiques du système est tout d'abord effectuée, de manière à caractériser les dynamiques rapides du modèle ASM 1 et en extraire un sous-système rapide. Afin de réduire plus encore le modèle résultant, des simplifications supplémentaires, de nature heuristique, sont ensuite apportées (aux cinétiques réactionnelles notamment) en tenant compte des spécificités du procédé. Ces simplifications sont justifiées par l'étude de plusieurs cas de figure.

4.1.1 Simplification des dynamiques lentes du modèle ASM 1

Les procédés de traitement des eaux par boues activées sont caractérisés par des échelles de temps qui diffèrent de plusieurs ordres de grandeur. Séparer le modèle général ASM 1 en modèles plus simples, adaptés à des échelles de temps données, apparaît comme une approche logique au processus de réduction. On trouve dans la littérature de nombreux exemples de modèles réduits, issus du modèle ASM 1 et obtenus à partir de considérations heuristiques. Il se pose alors le problème de trouver une justification mathématiques aux simplifications effectuées.

La théorie des perturbations singulières fournit des méthodes permettant de réduire, de façon systématique et dans un cadre mathématique rigoureux, les systèmes dyna-

4.1. Formulation du modèle réduit

miques de type *lent/rapide*, *i.e.* les systèmes caractérisés par des échelles de temps qui diffèrent de plusieurs ordres de grandeurs. Une des principales difficultés d'application de ces techniques provient cependant de la nécessité d'identifier le paramètre de perturbation ε (Duchêne et Rouchon, 1996), de manière à exprimer le système différentiel perturbé $\dot{x} = v(x, \varepsilon)$ (où $0 < \varepsilon \ll 1$) sous la forme suivante, dite *forme normale de Tikhonov* :

$$\dot{x}_s = \varepsilon v_s(x_s, x_f, \varepsilon) \quad (4.1a)$$

$$\dot{x}_f = v_f(x_s, x_f, \varepsilon) \quad (4.1b)$$

où x_s et x_f désignent respectivement les variables d'état lentes et rapides du système. Plusieurs études relatives à la réduction de modèles pour les bioprocédés ont été publiées. On peut notamment citer les travaux de van Breusegem et Bastin (1991, 1992, 1993), qui traitent de l'application de la méthode des perturbations singulières à des (bio)procédés (*e.g.* fermentation avec levures, réaction enzymatique, *etc.*) décrits par des mécanismes réactionnels de la forme :

$$\sum_{i=1}^n \gamma_{i,j} X_i \longrightarrow \sum_{i=1}^n \delta_{i,j} X_i , \quad j = 1, \dots, m \quad (4.2)$$

où X_1, \dots, X_n désignent les n produits et/ou réactifs, et les réels positifs ou nuls $\gamma_{i,j}$ et $\delta_{i,j}$ les coefficients stœchiométriques des m réactions. Sous l'hypothèse que des réactions se produisent beaucoup plus rapidement que d'autres, un changement de variables linéaire permettant d'exprimer le système original sous la forme normale (4.1) est proposé par ces auteurs.

Le plus souvent, l'application de la méthode des perturbations singulières consiste à simplifier les dynamiques rapides d'un système, de manière à ne conserver que les processus **lents**. Or les dynamiques lentes des procédés de traitement à boues activées ont des constantes de temps de l'ordre de plusieurs jours, voire plusieurs semaines. Aussi, c'est l'approche inverse qu'il est ici intéressant de mettre en œuvre, c'est-à-dire approximer les dynamiques lentes du système afin d'en extraire un sous-modèle adapté à la description du procédé sur un horizon de quelques heures. En ce sens, il s'agit donc considérer l'approximation suivante :

$$\dot{x}_s = 0 \quad (4.3a)$$

$$\dot{x}_f = v_f(x_s, x_f, 0) \quad (4.3b)$$

Il est nécessaire, pour cela, de caractériser dans un premier temps les dynamiques du système, en les classant sur une base de temps, de manière à en extraire la partie rapide. Afin d'établir une classification des dynamiques du modèle ASM 1, l'étude des valeurs propres de la matrice du système linéarisé tangent est ici envisagée. Ces valeurs propres donnent notamment des indications sur les échelles de temps caractéristiques du système. Une des principales difficultés de cette approche consiste cependant à associer les valeurs propres ainsi calculées aux variables d'état du modèle (Duchêne et Rouchon, 1996). Steffens et al. (1997) ont proposé l'utilisation d'une méthode d'homotopie (*e.g.* Robertson et Cameron, 1997a,b). Le principe de cette méthode réside dans le choix d'un système dynamique plus simple dont les états peuvent être reliés, sans équivoque, aux valeurs propres du système linéarisé tangent correspondant (*e.g.* un système découplé) ; ce système est ensuite transformé progressivement de manière à retrouver le système dynamique étudié,

tout en suivant les valeurs propres des systèmes intermédiaires. En pratique, une façon de faire consiste à appliquer la transformation suivante :

$$\mathcal{H}(r) = (1-r) \left[\text{diag} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^T} \right) \right] + r \left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^T} \right], \quad 0 \leq r \leq 1 \quad (4.4)$$

où \mathcal{H} désigne la matrice d'homotopie, $\left[\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^T} \right]$ la matrice jacobienne du champs de vecteur \mathbf{f} , $\left[\text{diag} \left(\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{x}^T} \right) \right]$ la matrice contenant uniquement les termes diagonaux de la matrice jacobienne précédente, et $r \in [0, 1]$ le paramètre d'homotopie. Tracer les valeurs propres du système linéarisé tangent de \mathcal{H} en fonction de r , permet ainsi d'établir des correspondances avec les variables d'état du modèle. L'application de cette méthode au modèle ASM 1 est décrite dans le paragraphe suivant.

Application de la méthode d'homotopie

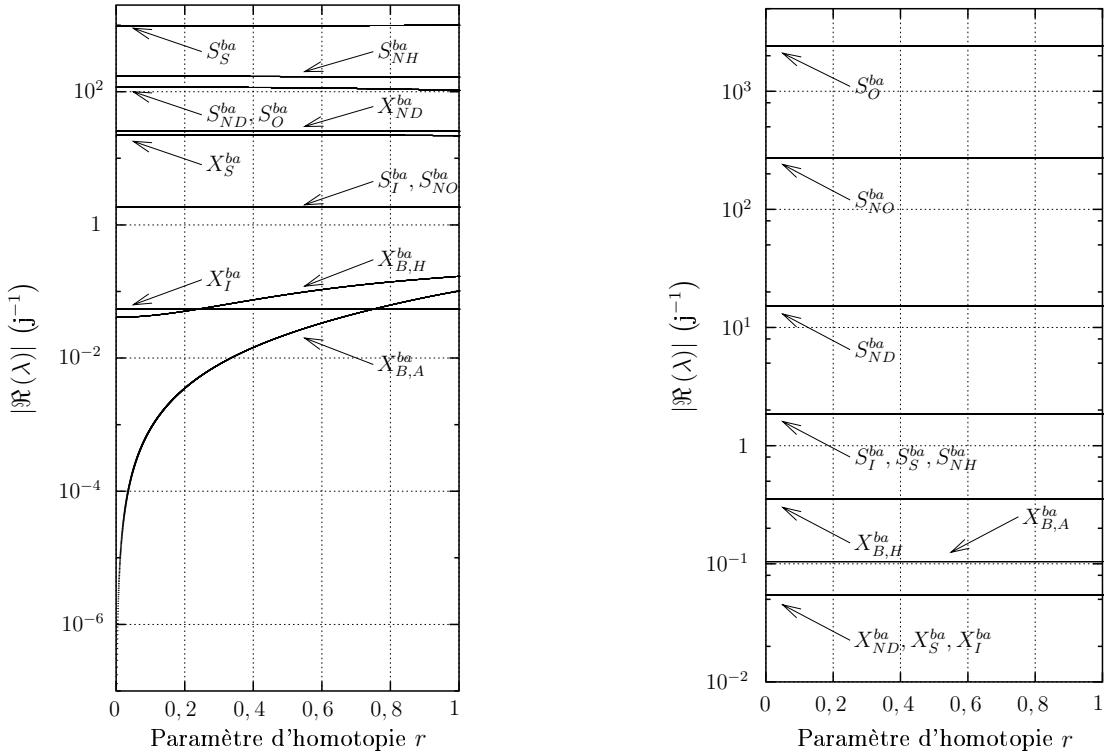


FIG. 4.1 – Résultats de la méthode d'homotopie pour le modèle ASM 1, aux points d'équilibre hyperboliques, en régime permanent avec aération continue (Fig. gauche) et sans aération (Fig. droite).

La méthode d'homotopie est appliquée, dans un premier temps, aux points d'équilibre asymptotiquement stable du système différentiel (1.23). En conditions d'aérobiose comme en conditions d'anoxie, le modèle ASM 1 n'admet qu'un unique point d'équilibre asymptotiquement stable ; les autres points hyperboliques sont tous instables (au moins une valeur propre à partie réelle strictement positive). Les résultats de la méthode d'homotopie sont illustrés sur la Fig. 4.1. Dans les deux cas, les dynamiques des variables d'état relatives aux concentrations en composés organiques particulaires inertes (X_I^{ba}) et en biomasses

4.1. Formulation du modèle réduit

autotrophe ($X_{B,A}^{ba}$) et hétérotrophe ($X_{B,H}^{ba}$) sont caractérisées par des valeurs propres λ_i faibles, *i.e.* ont des constantes de temps $\tau_i = \lambda_i^{-1}$ élevées (de l'ordre de plusieurs jours). Ce comportement confirme l'idée reçue, à juste titre, que les concentrations en biomasses et en composés inertes sont des variables d'état lentes du modèle ASM 1.

Afin de confirmer ce constat, l'évolution des valeurs propres du modèle ASM 1 est étudiée au cours d'une séquence de fonctionnement de 2 heures (1 heure d'aération / 1 heure d'arrêt). Les résultats obtenus sont donnés sur la Fig. 4.2. Au voisinage des instants de commutation, les valeurs propres varient fortement et des bifurcations se produisent, rendant difficile l'association avec les variables d'état du système. Ce comportement est toutefois temporaire (environ 10 min.), et l'association devient ensuite possible.

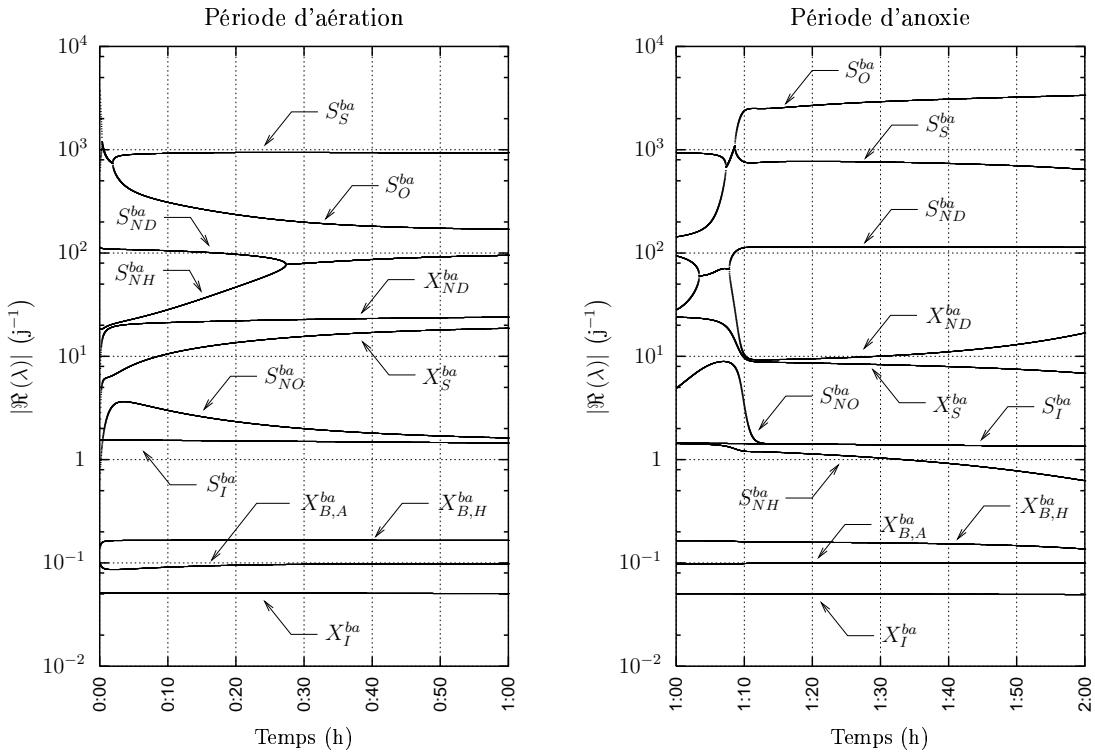


FIG. 4.2 – Évolution des valeurs propres du modèle ASM 1 lors d'un cycle de fonctionnement, comprenant 1 heure d'aération (Fig. gauche) et 1 heure d'arrêt (Fig. droite).

Conformément aux résultats obtenus aux points d'équilibre hyperboliques du système, les valeurs propres associées aux variables d'état X_I^{ba} , $X_{B,H}^{ba}$ et $X_{B,A}^{ba}$ sont inférieures aux autres valeurs propres d'environ un ordre de grandeur, et ceci durant l'ensemble du cycle. On peut noter d'autre part que les constantes de temps relatives à ces dynamiques sont de l'ordre de 10 jours (comprises entre 5 et 20 jours). Il semble par conséquent possible, au vu de ces résultats, de considérer que les concentrations X_I^{ba} , $X_{B,H}^{ba}$ et $X_{B,A}^{ba}$ sont constantes sur des horizons de quelques heures.

Simplification des dynamiques lentes

En appliquant les simplifications précédentes et en omettant la description des composés solubles inertes S_I^{ba} dont la dynamique est découpée de celles des autres composés, le

système différentiel rapide résultant s'écrit :

$$\dot{S}_S^{ba} = D^{in} (S_S^{in} - S_S^{ba}) - \frac{1}{Y_H} (\rho_1 + \rho_2) + \rho_7 \quad (4.5a)$$

$$\begin{aligned} \dot{X}_S^{ba} &= D^{in} X_S^{in} - (D^{in} + D^{rec}) \frac{D^{purg}}{D^{rec} + D^{purg}} X_S^{ba} \\ &\quad + (1 - fr_{XI}) (\rho_4 + \rho_5) - \rho_7 \end{aligned} \quad (4.5b)$$

$$\dot{S}_{NO}^{ba} = D^{in} (S_{NO}^{in} - S_{NO}^{ba}) - \frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \rho_2 + \frac{1}{Y_A} \rho_3 \quad (4.5c)$$

$$\dot{S}_{NH}^{ba} = D^{in} (S_{NH}^{in} - S_{NH}^{ba}) - i_{NBM} (\rho_1 + \rho_2) - \left(i_{NBM} + \frac{1}{Y_A} \right) \rho_3 + \rho_6 \quad (4.5d)$$

$$\dot{S}_{ND}^{ba} = D^{in} (S_{ND}^{in} - S_{ND}^{ba}) - \rho_6 + \rho_8 \quad (4.5e)$$

$$\begin{aligned} \dot{X}_{ND}^{ba} &= D^{in} X_{ND}^{in} - (D^{in} + D^{rec}) \frac{D^{purg}}{D^{rec} + D^{purg}} X_{ND}^{ba} \\ &\quad + (i_{NBM} - fr_{XI} i_{NXI}) (\rho_4 + \rho_5) - \rho_8 \end{aligned} \quad (4.5f)$$

$$\dot{S}_O = D^{in} (S_O^{in} - S_O^{ba}) - \frac{1 - Y_H}{Y_H} \rho_1 - \frac{4.57 - Y_A}{Y_A} \rho_3 + k_{La} (S_O^{sat} - S_O^{ba}) \quad (4.5g)$$

où les cinétiques réactionnelles ρ_i ($i = 1, \dots, 8$) sont définies dans le Tab. 1.2 (p. 18) et $D^{in} = \frac{Q^{in}}{V^{ba}}$, $D^{rec} = \frac{Q^{rec}}{V^{ba}}$ et $D^{purg} = \frac{Q^{purg}}{V^{ba}}$ désignent respectivement les taux de dilution relatifs aux débits incident, de recyclage et d'extraction des boues. Précisons également que le système (4.5) considère que le clarificateur se comporte comme un séparateur idéal, *i.e.* $f_{ns} = 0$ et $\vartheta = \frac{Q^{in} + Q^{rec}}{Q^{rec} + Q^{purg}}$.

Afin de valider ces simplifications, une comparaison entre le modèle ASM 1 et le modèle réduit (4.5) est nécessaire. Cette comparaison est ici établie pour la station d'épuration existante sur une période de 4 jours, en considérant une importante surcharge le second jour (Fig. 4.3). Les paramètres du modèle ASM 1 sont ceux identifiés préalablement (*cf.* Annexe D) et les conditions initiales correspondent à un fonctionnement stationnaire du procédé.

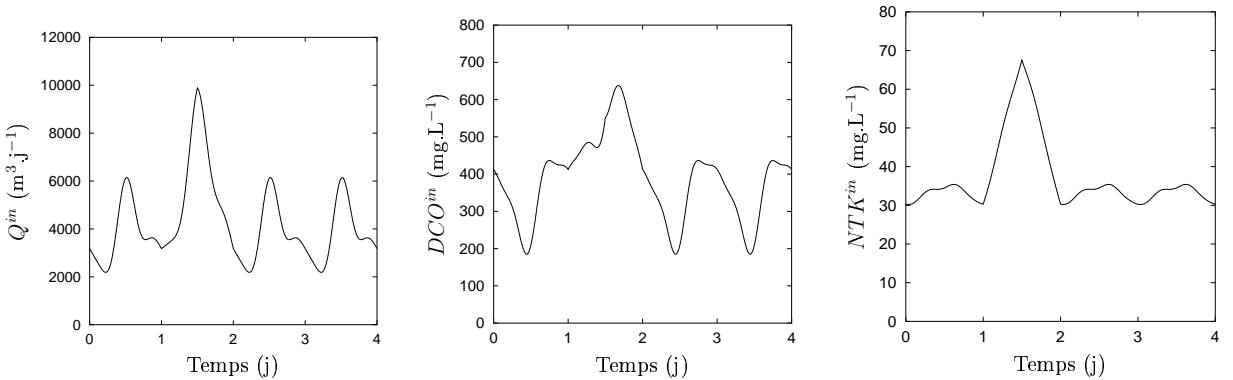


FIG. 4.3 – Variations du débit et des concentrations incidents au cours de la surcharge.

L'évolution des concentrations X_I^{ba} , $X_{B,H}^{ba}$ et $X_{B,A}^{ba}$ est donnée sur la Fig. 4.4. L'effet de la perturbation sur les concentrations en composés particulaires inertes X_I^{ba} et en biomasse autotrophe $X_{B,A}^{ba}$ apparaît limité, avec des écarts inférieurs à $\pm 2\%$ sur 24 heures. La concentration en biomasse hétérotrophe $X_{B,H}^{ba}$ est, en revanche, beaucoup plus sensible

4.1. Formulation du modèle réduit

aux perturbations incidentes, et peut varier de plus de $\pm 25\%$ au cours d'une seule journée. Cette différence de comportement entre les biomasses hétérotrophe et autotrophe n'est pas surprenante puisque le taux de croissance des bactéries hétérotropes (cinétique $\rho_1 + \rho_2$) est nettement plus rapide que celui des bactéries autotrophes (cinétique ρ_3), d'autant plus que ces dernières sont aérobies strictes (Fig. 4.5).

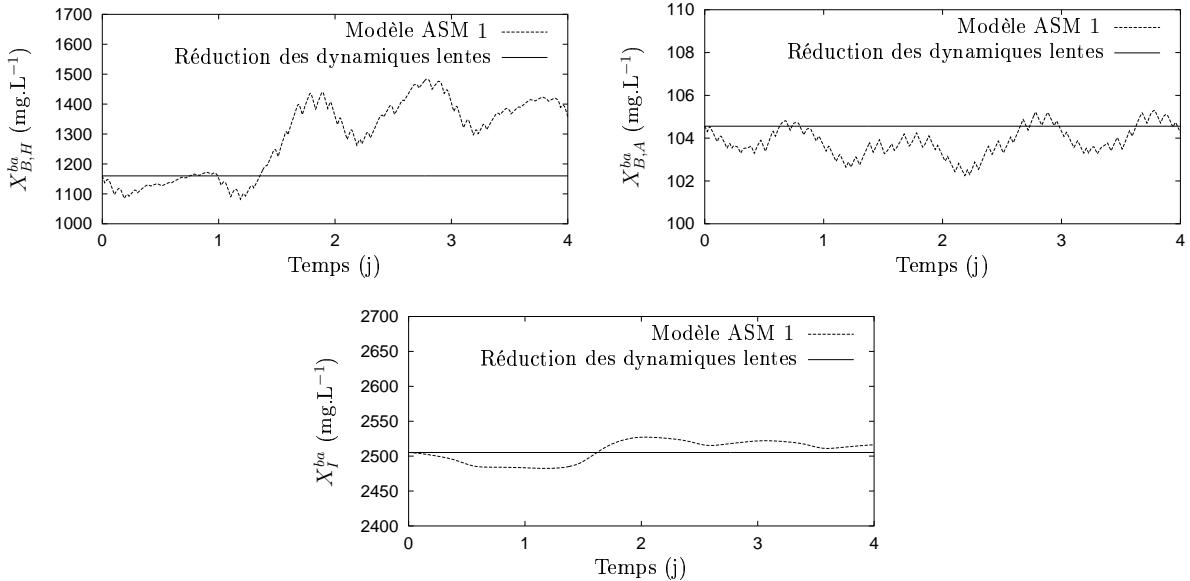


FIG. 4.4 – Effets de la simplification des variables d'état lentes du modèle ASM 1 lors de la surcharge.

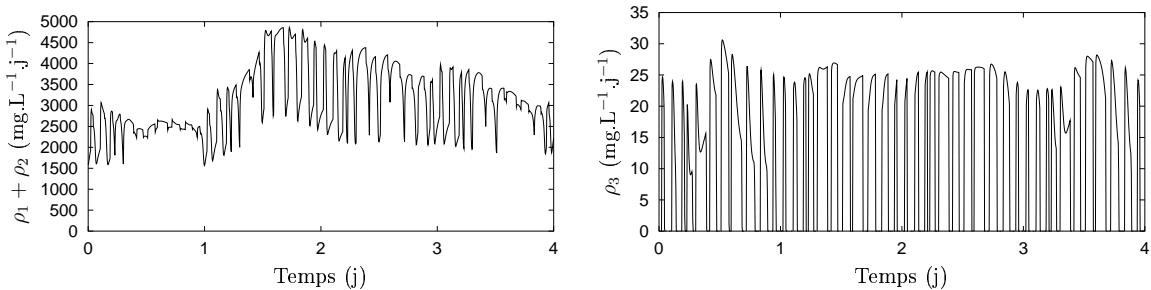


FIG. 4.5 – Comparaison des cinétiques de croissance bactérienne relatives aux biomasses hétérotrophe (Fig. gauche) et autotrophe (Fig. droite).

Malgré les variations de la concentration en biomasse hétérotrophe, les prédictions des deux modèles restent cohérentes (Fig. 4.6). Ce sont les variables d'état soluble du système qui s'écartent le plus rapidement des trajectoires de référence du modèle ASM 1 (e.g. S_S^{ba} , S_{NO}^{ba} et S_{ND}^{ba}). Ces écarts apparaissent ultérieurement pour les composés particulaires (X_S^{ba} et X_{ND}^{ba}), mais sont en revanche plus persistants. Globalement, les prédictions des deux modèles s'écartent essentiellement au cours du 3^{ème} jour, soit 24 heures après le début de la perturbation. Ces résultats valident clairement la simplification des dynamiques lentes du modèle ASM 1.

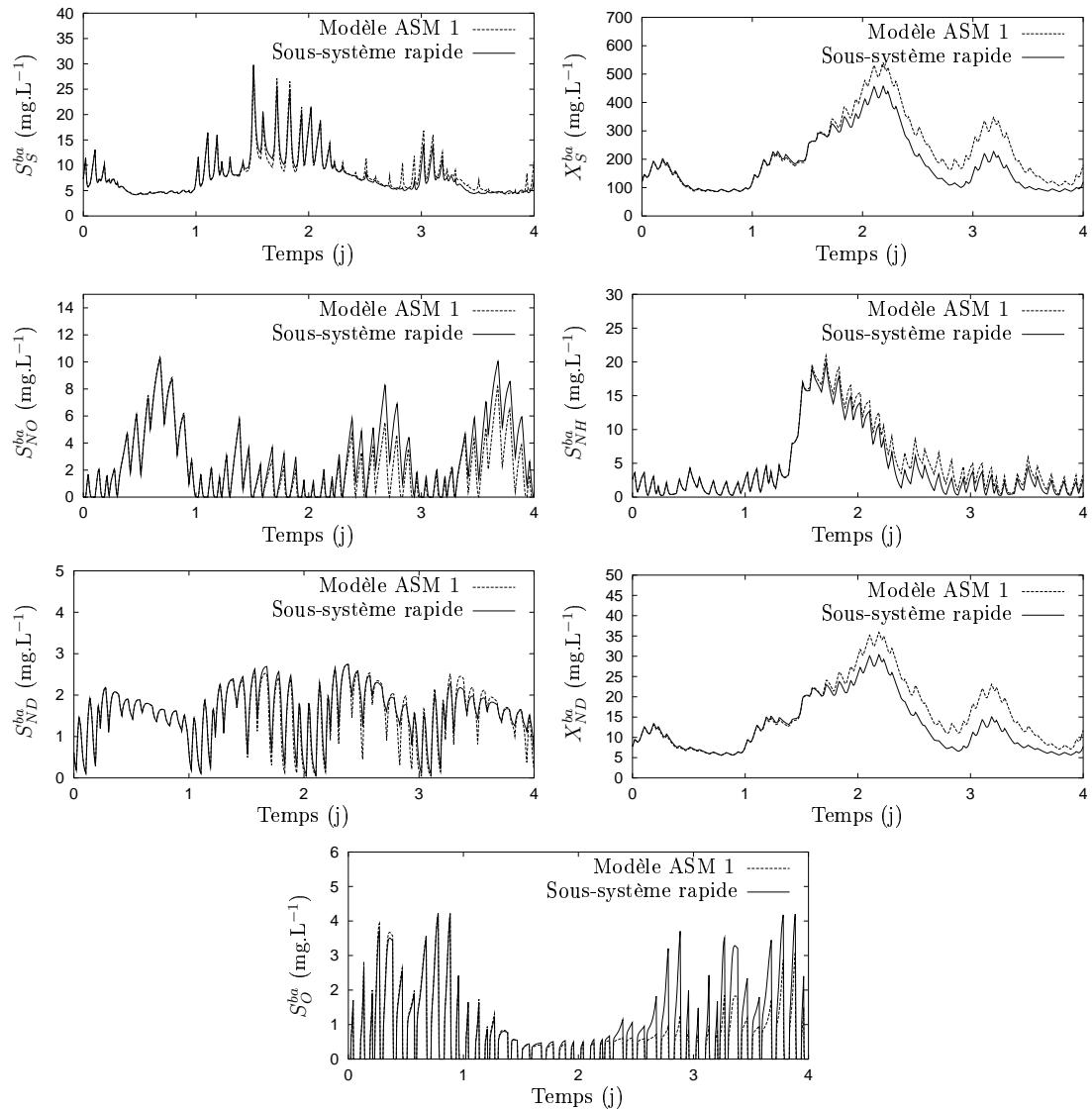


FIG. 4.6 – Influence de la simplification des dynamiques lentes sur les variables d'état du système.

4.1.2 Simplifications complémentaires

La simplification des dynamiques lentes du modèle ASM 1 permet de réduire le nombre de variables d'état de 11 à 7 sans grande incidence sur les propriétés de prédiction à court terme du modèle. Il est néanmoins nécessaire de recourir à des simplifications complémentaires, afin de diminuer plus encore la dimension du système, et ceci de manière à le rendre compatible avec une utilisation en ligne dans un schéma de commande optimale en boucle fermée. L'objectif est de simplifier le modèle de sorte qu'il ne comporte que 4 ou 5 variables d'état. Ces simplifications tiennent compte des spécificités du procédé étudié et sont par conséquent de nature essentiellement heuristique. La simplification de la description des composés organiques et des composés azotés est étudiée successivement.

Cas des composés organiques

Le modèle ASM 1 établit une distinction entre les composés biodégradables solubles (S_S^{ba}), supposés directement assimilables par les micro-organismes, et particulaires (X_S^{ba}), qui doivent être préalablement hydrolysés en composés solubles pour pouvoir être assimilés. Ces composés jouent un rôle important dans le processus de dégradation de l'azote (dé-nitrification), et doivent par conséquent faire l'objet d'une attention particulière. Trois approches sont envisageables pour simplifier la description donnée par le modèle ASM 1 :

- découpler les dynamiques (4.5a) et (4.5b) des composés S_S^{ba} et X_S^{ba} des autres dynamiques du système (4.5), en apportant des simplifications aux expressions des cinétiques ρ_1 , ρ_2 et ρ_8 , *e.g.* :

$$\alpha = \mu_H \frac{S_S^{ba}}{K_S + S_S^{ba}} X_{B,H}^{ba} \quad \text{et} \quad \beta = \kappa_h \frac{X_{ND}^{ba}/X_{B,H}^{ba}}{K_X + X_S^{ba}/X_{B,H}^{ba}} X_{B,H}^{ba} ;$$

- découpler la dynamique (4.5b) relative au composé X_S^{ba} de celles des autres composés du système (4.5), en simplifiant la cinétique d'hydrolyse ρ_7 , *e.g.* :

$$\gamma = \kappa_h \frac{X_S^{ba}/X_{B,H}^{ba}}{K_X + X_S^{ba}/X_{B,H}^{ba}} X_{B,H}^{ba} ;$$

- considérer un composé organique unique, *e.g.* $X_{DCO}^{ba} = S_S^{ba} + X_S^{ba}$, en associant les dynamiques (4.5a) et (4.5b) des composés S_S^{ba} et X_S^{ba} .

L'implémentation numérique de ces simplifications montre que les modèles simplifiés qui résultent des deux premières approches ont des horizons de prédiction de quelques heures, tout au plus. Dans ces deux cas, les nouveaux paramètres qui sont introduits par les simplifications sont en effet fortement sensibles aux perturbations incidentes et aux modifications de la politique d'aération du procédé. Comme le mécanisme de dénitritification est largement influencé par la concentration en composés organiques solubles dans le réacteur, une description inadaptée de l'évolution de ces composés induit rapidement de larges erreurs sur la concentration en nitrate.

La troisième approche se solde, en revanche, par une bien meilleure prédictibilité du modèle réduit. Elle consiste à définir une variable d'état unique $X_{DCO}^{ba} = S_S^{ba} + X_S^{ba}$ pour

décrire l'ensemble des composés organiques biodégradables. La dynamique de ce nouveau composé s'obtient en sommant les dynamiques (4.5a) et (4.5b) :

$$\begin{aligned}\dot{X}_{DCO}^{ba} &= D^{in} X_{DCO}^{in} - D^{in} S_S^{ba} - (D^{in} + D^{rec}) \frac{D^{purg}}{D^{rec} + D^{purg}} X_S^{ba} \\ &\quad - \frac{1}{Y_H} (\rho_1 + \rho_2) + (1 - fr_{XI}) (\rho_4 + \rho_5)\end{aligned}\quad (4.6)$$

Il n'est en effet plus nécessaire, dans ce cas, de décrire le mécanisme d'hydrolyse du substrat organique particulaire ; aussi, le terme cinétique ρ_7 n'apparaît pas dans l'expression (4.6). En remarquant que le taux de purge $\tau^{purg} = \frac{D^{purg}}{D^{rec} + D^{purg}}$ est faible ($\tau^{purg} \ll 1$) et en définissant la fraction soluble des composés organiques par $f_{SS}^{ba} = \frac{S_S^{ba}}{X_{DCO}^{ba}}$, (4.6) devient :

$$\dot{X}_{DCO}^{ba} = D^{in} (X_{DCO}^{in} - f_{SS}^{ba} X_{DCO}^{ba}) - \frac{1}{Y_H} (\rho_1 + \rho_2) + (1 - fr_{XI}) (\rho_4 + \rho_5) \quad (4.7)$$

Les cinétiques de croissances aérobie (ρ_1) et anoxie (ρ_2) de la biomasse hétérotrophe s'écrivent, en fonction des seules variables d'état rapides du système (dont X_{DCO}^{ba}), sous la forme :

$$\rho_1 = \theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \quad (4.8)$$

$$\rho_2 = \theta_1 \eta_{NO,g} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \quad (4.9)$$

où les paramètres θ_1 et K_{DCO} sont définis par :

$$\theta_1 = \mu_H X_{B,H}^{ba} \quad (4.10)$$

$$K_{DCO} = K_S \frac{X_{DCO}^{ba}}{S_S^{ba}} = \frac{K_S}{f_{SS}^{ba}} \quad (4.11)$$

D'autre part, les cinétiques de mortalité des biomasses hétérotrophe (ρ_4) et autotrophe (ρ_5) sont ici prises en compte par le biais d'un paramètre supplémentaire :

$$\theta_2 = (1 - fr_{XI}) (b_H X_{B,H}^{ba} + b_A X_{B,A}^{ba}) \quad (4.12)$$

Afin de valider ces simplifications, il s'agit de vérifier que les paramètres θ_1 , θ_2 et K_{DCO} présentent de faibles variations temporelles.

- Les paramètres θ_1 (4.10) et θ_2 (4.12) ne dépendent que des variables lentes du modèle ASM 1. Aussi, de façon tout à fait prévisible, ces paramètres varient lentement, même suite à de fortes perturbations incidentes (Fig. 4.7 gauche). On peut également vérifier que l'application de différentes politiques d'aération donne des valeurs similaires (Fig. 4.7 droite).
- Les variations du paramètre K_{DCO} (4.11) sont en revanche plus conséquentes, du fait de l'évolution rapide de la variable d'état S_S^{ba} dans le réacteur (procédé faible charge). Bien que les variations de K_{DCO} présentent de fortes amplitudes (entre phases d'aérobie et d'anoxie notamment), ce dernier conserve, hormis durant les périodes de fortes perturbations, une valeur moyenne relativement stable (Fig. 4.8).

²On rappelle que (MR) et (MCE) désignent respectivement les politiques optimales d'aération qui minimisent les rejets d'azote total et la consommation énergétique de l'aérateur.

4.1. Formulation du modèle réduit

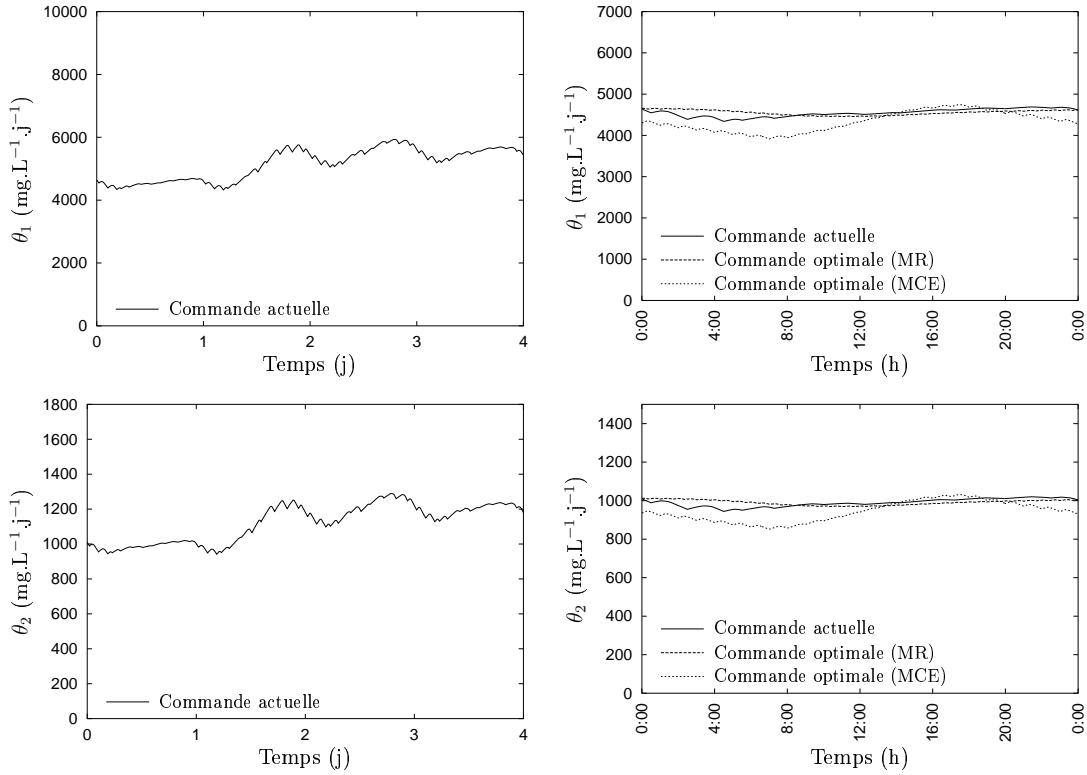


FIG. 4.7 – Variations des paramètres θ_1 et θ_2 lors d'une forte perturbation incidente (fig. gauche) et pour différentes politiques d'aération²(fig. droite).

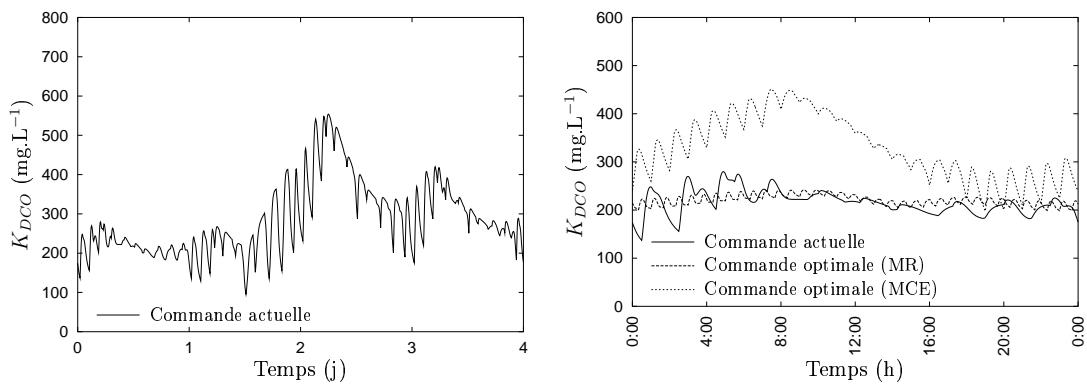


FIG. 4.8 – Variations du paramètre K_{DCO} lors d'une forte perturbation incidente (fig. gauche) et pour différentes politiques d'aération (fig. droite).

Cas des composés azotés

Le modèle ASM 1 distingue 4 fractions azotées S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} , S_{ND}^{ba} et X_{ND}^{ba} . Dans la mesure où les concentrations en azote ammoniacal S_{NH}^{ba} et en nitrate/nitrites S_{NO}^{ba} constituent l'essentiel des rejets d'azote total et sont mesurables en ligne (*cf.* § 4.2.2 page 134), il n'apparaît pas concevable de supprimer ces composés du modèle réduit. En revanche, les deux fractions d'azote organique soluble S_{ND}^{ba} et particulaire X_{ND}^{ba} , dont le rôle est de décrire la formation interne de S_{NH}^{ba} par les processus d'hydrolyse et d'ammonification, ne constituent qu'une faible partie des rejets d'azote et peuvent être simplifiées par différentes approches :

- découpler les dynamiques (4.5d) et (4.5e) des composés S_{NH}^{ba} et S_{ND}^{ba} en simplifiant la cinétique d'ammonification ρ_6 , de sorte qu'il ne soit plus nécessaire de décrire les mécanismes de formation interne d'ammoniaque, *e.g.* :

$$\delta = \kappa_a S_{ND}^{ba} X_{B,H}^{ba} ;$$

- associer les dynamiques des composés azotés organiques S_{ND}^{ba} et X_{ND}^{ba} par des considérations similaires à celles utilisées pour simplifier la description des composés organiques X_{DCO}^{ba} ;
- découpler les dynamiques (4.5e) et (4.5f) en adoptant une description simplifiée du processus d'hydrolyse de l'azote organique particulaire (cinétique ρ_8).

La première approche est attractive puisqu'elle permet d'éliminer les deux fractions azotées organiques simultanément. Compte tenu des simplifications préalables, le modèle réduit résultant ne comporterait alors que 4 variables d'état X_{DCO}^{ba} , S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_O^{ba} . Une telle approche suppose cependant que le processus ρ_6 d'ammonification est constant, et induit ainsi de larges erreurs sur la concentration en ammoniaque S_{NH}^{ba} , notamment lorsque les périodes d'anoxie sont longues. Durant ces périodes, la concentration en azote organique soluble S_{ND}^{ba} vient à s'annuler, et le processus d'ammonification est alors interrompu. Supposer ce processus constant entraîne ainsi une surestimation du taux de formation interne d'ammoniaque, et limite fortement l'horizon de prédiction du modèle réduit (une à deux heures). Il apparaît donc nécessaire de décrire plus finement les mécanismes de formation interne d'ammoniaque dans le modèle réduit.

La prise en compte d'une variable d'état supplémentaire $X_{N_{org}}^{ba} = S_{ND}^{ba} + X_{ND}^{ba}$, résultant de l'association des formes azotées organiques soluble et particulaire, permet d'obtenir une description plus pertinente du processus d'ammonification. En contrepartie, cette simplification introduit de nouveaux paramètres qui sont fortement sensibles aux perturbations incidentes et aux changements de politique d'aération du réacteur. L'horizon de prédiction du modèle ainsi obtenu, bien que plus étendu que précédemment (quelques heures), reste malgré tout insuffisant.

La troisième approche permet de tenir compte de la concentration en azote organique soluble S_{ND}^{ba} et apporte une amélioration sensible de l'horizon de prédiction du modèle réduit par rapport aux deux approches précédentes. En remarquant que $i_{NBM} \ll \frac{1}{Y_A}$ et

4.1. Formulation du modèle réduit

$Y_A \ll 4.57$, les dynamiques des composés S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} , S_{ND}^{ba} et S_O^{ba} s'écrivent :

$$\dot{S}_{NO}^{ba} = D^{in} (S_{NO}^{in} - S_{NO}^{ba}) - \frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \rho_2 + \frac{1}{Y_A} \rho_3 \quad (4.13a)$$

$$\dot{S}_{NH}^{ba} = D^{in} (S_{NH}^{in} - S_{NH}^{ba}) - i_{NBM} (\rho_1 + \rho_2) - \frac{1}{Y_A} \rho_3 + \rho_6 \quad (4.13b)$$

$$\dot{S}_{ND}^{ba} = D^{in} (S_{ND}^{in} - S_{ND}^{ba}) - \rho_6 + \rho_8 \quad (4.13c)$$

$$\dot{S}_O^{ba} = D^{in} (S_O^{in} - S_O^{ba}) - \frac{1 - Y_H}{Y_H} \rho_1 - \frac{4.57}{Y_A} \rho_3 + k_{La} (S_O^{sat} - S_O^{ba}) \quad (4.13d)$$

où les cinétiques de dégradation ρ_1 (4.8) et ρ_2 (4.9) ont déjà été précisées, les cinétiques d'ammonification ρ_6 et de nitrification $\frac{1}{Y_A} \rho_3$ s'écrivent sous la forme simplifiée suivante :

$$\frac{1}{Y_A} \rho_3 = \theta_3 \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,A} + S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,A} + S_O^{ba}} \quad (4.14)$$

$$\rho_6 = \theta_4 S_{ND}^{ba} \quad (4.15)$$

$$\text{avec : } \theta_3 = \frac{\mu_A}{Y_A} X_{B,A}^{ba} \quad (4.16)$$

$$\theta_4 = \kappa_a X_{B,H}^{ba} \quad (4.17)$$

et les dynamiques (4.5e) et (4.5f) des composés S_{ND}^{ba} et X_{ND}^{ba} sont découplées en simplifiant le processus ρ_8 d'hydrolyse de l'azote organique particulaire :

$$\rho_8 = \theta_5 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{ND} + X_{DCO}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} + \eta_{NO,h} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \right) \quad (4.18)$$

$$\text{avec : } \theta_5 = \kappa_h \frac{X_{ND}^{ba}}{X_S^{ba}} X_{B,H}^{ba} \quad (4.19)$$

$$K_{ND} = K_X \frac{X_{DCO}^{ba}}{X_S^{ba}} X_{B,H}^{ba} \quad (4.20)$$

À nouveau, il s'agit de valider ces simplifications en vérifiant que les variations temporelles des nouveaux paramètres θ_3 , θ_4 , θ_5 et K_{ND} sont lentes.

- Les paramètres θ_3 (4.16) et θ_4 (4.17) ne dépendent, comme θ_1 et θ_2 , que des variables d'état lentes et des paramètres du modèle ASM 1. Les variations temporelles de ces paramètres sont donc faibles (Fig. 4.9 gauche). Ils sont également peu sensibles aux changements de la politique d'aération (Fig. 4.9 droite).
- Les paramètres θ_5 (4.19) et K_{ND} (4.20) dépendent au contraire des variables d'état rapides du modèle ASM 1, respectivement par le biais des termes $\frac{X_{ND}^{ba}}{X_S^{ba}}$ et $\frac{X_{DCO}^{ba}}{X_S^{ba}}$. Ces deux rapports sont cependant peu variables dans le temps (*cf.* Fig. 4.6) : d'une part, la fraction azotée des composées organiques particulières reste stable, étant donné que X_S^{ba} et X_{ND}^{ba} font l'objet du même processus de dégradation (hydrolyse) ; d'autre part, les composés organiques sont en grande partie particulières, ce qui fait que la fraction organique particulaire est comprise entre 0.9 et 1. Les variations temporelles des deux paramètres sont par conséquent limitées (Fig. 4.10 gauche) et leurs sensibilités vis-à-vis de la politique d'aération sont restreintes (Fig. 4.10 droite).

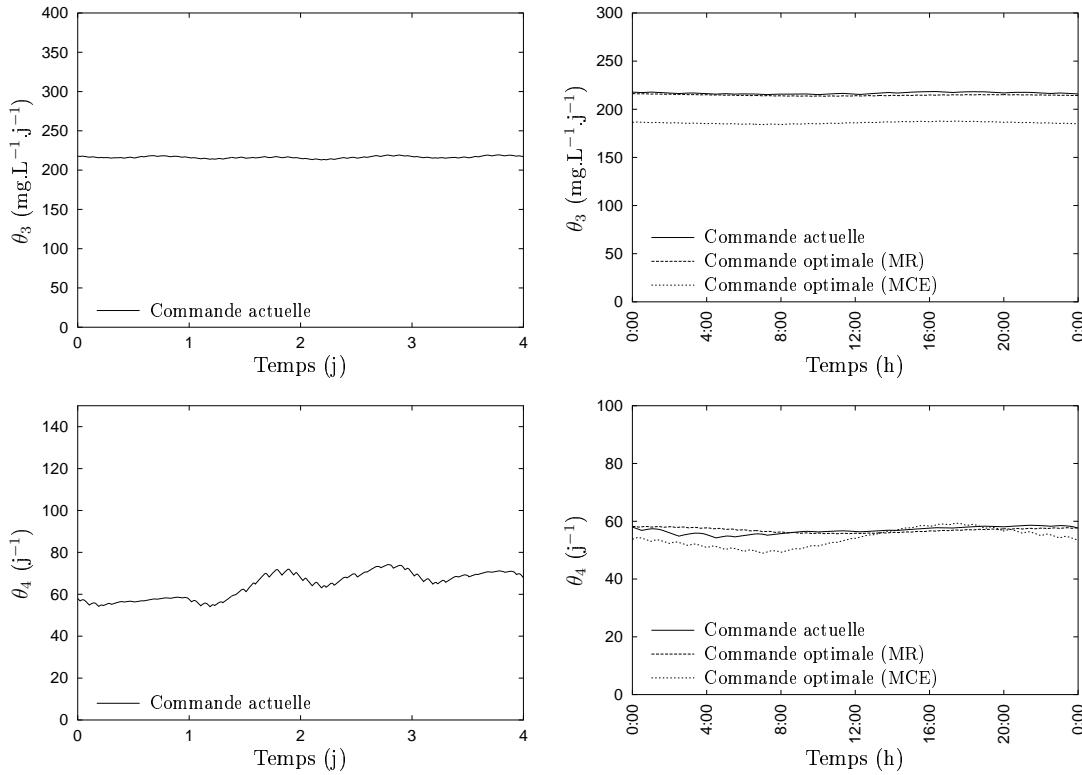


FIG. 4.9 – Variations des paramètres θ_3 et θ_4 lors d'une forte perturbation incidente (fig. gauche) et pour différentes politiques d'aération (fig. droite).

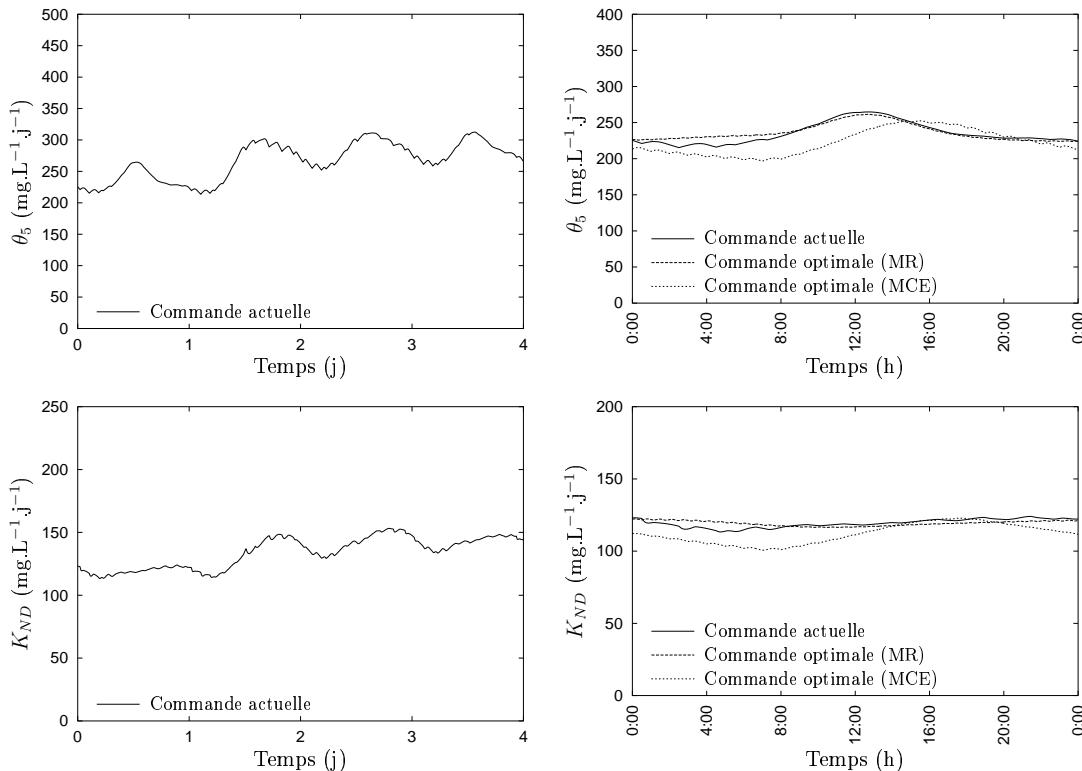


FIG. 4.10 – Variations des paramètres θ_5 et K_{ND} lors d'une forte perturbation incidente (fig. gauche) et pour différentes politiques d'aération (fig. droite).

4.1.3 Expression du modèle réduit

L'application de l'ensemble des simplifications précédentes vis-à-vis des composés organiques biodégradables et azotés permet d'exprimer le sous-système rapide (4.5) sous la forme suivante :

$$\begin{aligned}\dot{X}_{DCO}^{ba} &= D^{in} \left(X_{DCO}^{in} - \frac{K_S}{K_{DCO}} X_{DCO}^{ba} \right) - \frac{1}{Y_H} \theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \right. \\ &\quad \left. + \eta_{NO,g} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \right) + \theta_2\end{aligned}\quad (4.21a)$$

$$\begin{aligned}\dot{S}_{NO}^{ba} &= -D^{in} S_{NO}^{ba} - \frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \theta_1 \eta_{NO,g} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \\ &\quad + \theta_3 \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,A} + S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,A} + S_O^{ba}}\end{aligned}\quad (4.21b)$$

$$\begin{aligned}\dot{S}_{NH}^{ba} &= D^{in} (S_{NH}^{in} - S_{NH}^{ba}) - i_{NBM} \theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \right. \\ &\quad \left. + \eta_{NO,g} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \right) - \theta_3 \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,A} + S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,A} + S_O^{ba}} + \theta_4 S_{ND}^{ba}\end{aligned}\quad (4.21c)$$

$$\begin{aligned}\dot{S}_{ND}^{ba} &= D^{in} (S_{ND}^{in} - S_{ND}^{ba}) - \theta_4 S_{ND}^{ba} + \theta_5 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{ND} + X_{DCO}^{ba}} \left(\frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \right. \\ &\quad \left. + \eta_{NO,h} \frac{K_{O,H}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \right)\end{aligned}\quad (4.21d)$$

$$\begin{aligned}\dot{S}_O^{ba} &= -D^{in} S_O^{ba} - \frac{1 - Y_H}{Y_H} \theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,H} + S_O^{ba}} \\ &\quad - 4.57 \theta_3 \frac{S_{NH}^{ba}}{K_{NH,A} + S_{NH}^{ba}} \frac{S_O^{ba}}{K_{O,A} + S_O^{ba}} + k_{La} (S_O^{sat} - S_O^{ba})\end{aligned}\quad (4.21e)$$

Le modèle réduit définit 16 paramètres, ainsi que le débit Q^{in} et les concentrations X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in} incidents. Les paramètres stœchiométriques et cinétiques Y_H , i_{NBM} , K_S , $K_{O,H}$, $K_{O,A}$, $K_{NH,A}$, K_{NO} , $\eta_{NO,h}$ et $\eta_{NO,g}$ sont identiques à ceux définis dans le modèle ASM 1 (*cf.* Tab. 1.4, p. 20). En revanche, les paramètres supplémentaires θ_i ($i = 1, \dots, 5$), K_{DCO} et K_{ND} sont issus des simplifications. Certains ont malgré tout une interprétation physique. Les paramètres K_{DCO} et K_{ND} en particulier correspondent aux constantes d'affinité vis-à-vis du composé X_{DCO}^{ba} pour les processus de dégradation des composés organiques et d'hydrolyse de l'azote organique respectivement. D'autre part, les paramètres θ_1 et θ_2 peuvent être interprétés comme les taux maximaux de dégradation des composés organiques et de l'azote ammoniacal.

Le modèle réduit étant formulé, il s'agit d'en étudier les propriétés d'observabilité et d'identifiabilité, dans la perspective de l'estimation en ligne de l'état et des paramètres. Ces aspects font l'objet de la suite du chapitre.

4.2 Observabilité du modèle réduit

Dans un schéma de commande en *boucle fermée*, l'actualisation du profil optimal de commande nécessite la connaissance de l'état du système. Il n'est cependant pas rare que certaines variables d'états ne soient pas mesurables *en ligne*, et on est alors amené à utiliser un *observateur d'état* chargé d'estimer ces états à partir des mesures des sorties du système.

L'étude de l'observabilité constitue l'étape préalable indispensable à l'estimation en ligne de l'état d'un modèle. À la base du problème de l'observabilité se trouve la question de savoir s'il est possible ou non, pour un modèle de structure donnée et un ensemble de mesures expérimentales supposées parfaites et non bruitées, de reconstruire les variables d'état du système. Les conditions nécessaires d'observabilité d'un système non-linéaire affine en la commande sont rappelées dans le paragraphe 4.2.1 (*e.g.* Nijmeijer et van der Schaft, 1991; Isidori, 1995). L'étude de l'observabilité du modèle simplifié fait l'objet du paragraphe 4.2.2.

4.2.1 Quelques notions d'observabilité

Les notions d'observabilité sont ici présentées dans le cadre d'un système dynamique commandé, affine en la commande (Nijmeijer et van der Schaft, 1991; Isidori, 1995). On peut remarquer que le système dynamique (4.21) constitue un cas particulier de cette forme, dans la mesure où il ne comporte pas d'entrées commandables $u(t)$.

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \mathbf{g}_j(\mathbf{x}) u_j, \quad \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^m \quad (4.22a)$$

$$y_i = h_i(\mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, p \quad (4.22b)$$

où $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n)$ sont les coordonnées locales relatives à une variété différentielle \mathcal{V} (*e.g.* \mathbb{R}^n), $\mathbf{f}, \mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_m$ sont des champs de vecteurs réguliers (C^∞) sur \mathcal{V} , et $\mathbf{h} = (h_1, \dots, h_p)^T : \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}^p$ est une application régulière. Pour ce type de systèmes, la notion d'observabilité peut être définie de la façon suivante.

DÉFINITION 1 (OBSERVABILITÉ)

Deux états $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathcal{V}$ sont dits indiscernables (noté $\mathbf{x}_1 I \mathbf{x}_2$) pour le système (4.22), si pour chaque fonction d'entrée u , la fonction de sortie $t \rightarrow \mathbf{y}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_1, u}$, $t \geq 0$, du système pour l'état initial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_1$, et la fonction de sortie $t \rightarrow \mathbf{y}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_2, u}$, $t \geq 0$, du système pour l'état initial $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_2$, sont identiques sur leur domaine (commun) de définition. Le système est dit observable si $\mathbf{x}_1 I \mathbf{x}_2$ implique $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$.

L'objectif est de définir une condition de rang pour l'observabilité des systèmes non-linéaires affines en la commande qui soit équivalente à la condition d'observabilité de Kalman pour les systèmes linéaires; conditions qui sera inévitablement une condition **locale**. Ceci motive l'introduction de la notion de la \mathcal{V} -indiscernabilité. Soit \mathcal{V} un ouvert de \mathcal{V} contenant \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 . On dit que \mathbf{x}_1 et \mathbf{x}_2 sont \mathcal{V} -indiscernables, et l'on note $\mathbf{x}_1 I^{\mathcal{V}} \mathbf{x}_2$, si pour chaque commande admissible constante $\mathbf{u} : [0, T] \rightarrow \mathcal{U}$, $T > 0$ arbitraire, qui garde les solutions $\mathbf{x}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_1, u}$ et $\mathbf{x}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_2, u}$ dans \mathcal{V} pour $t \leq T$, les fonctions de sortie

4.2. Observabilité du modèle réduit

$\mathbf{y}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_1,u}$ et $\mathbf{y}(t)|_{\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_2,u}$ sont identiques pour $t \leq T$ sur leur domaine (commun) de définition.

DÉFINITION 2 (OBSERVABILITÉ LOCALE)

Le système (4.22) est dit localement observable au point \mathbf{x}_0 s'il existe un voisinage \mathcal{W} de \mathbf{x}_0 tel que pour chaque voisinage $\mathcal{V} \subset \mathcal{W}$ de \mathbf{x}_0 , la relation $\mathbf{x}_1 I^{\mathcal{V}} \mathbf{x}_2$ implique que $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_0$. Si le système est localement observable en tout point \mathbf{x}_0 de \mathcal{V} , il est dit localement observable.

De manière générale, un système est localement observable si chaque point \mathbf{x}_0 est discernable des points voisins en utilisant des trajectoires du système qui restent proches de \mathbf{x}_0 . Il apparaît donc nécessaire, pour étudier l'observabilité d'un système, de définir un espace d'observation.

DÉFINITION 3 (ESPACE D'OBSERVATION)

Soit le système non-linéaire (4.22). L'espace d'observation, noté \mathcal{O} , de ce système algébro-différentiel est le \mathbb{R} -espace vectoriel des fonctions définies sur \mathcal{V} , qui contient h_1, \dots, h_p , ainsi que toutes les dérivées de Lie successives :

$$L_{\mathbf{X}_1} L_{\mathbf{X}_2} \cdots L_{\mathbf{X}_k} h_j, \quad j = 1, \dots, p, \quad k \geq 1 \quad (4.23)$$

où \mathbf{X}_i , $i = 1, \dots, k$, est un élément de l'ensemble $\{\mathbf{f}, \mathbf{g}_1, \dots, \mathbf{g}_m\}$

En utilisant les propriétés élémentaires relatives à la dérivation dans l'algèbre de Lie, on montre de façon simple que l'espace d'observation \mathcal{O} peut aussi se définir comme l'espace linéaire des fonctions sur \mathcal{V} contenant h_1, \dots, h_p , ainsi que toutes les dérivées de Lie successives :

$$L_{\mathbf{Z}_1} L_{\mathbf{Z}_2} \cdots L_{\mathbf{Z}_k} h_j, \quad j = 1, \dots, p, \quad k \geq 1 \quad (4.24)$$

où \mathbf{Z}_i , $i = 1, \dots, k$, est de la forme :

$$\mathbf{Z}_i(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \sum_{j=1}^m \mathbf{g}_j(\mathbf{x}) u_j^i, \quad (4.25)$$

avec $\mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \in \mathcal{U}$.

L'espace d'observation \mathcal{O} s'interprète ainsi comme l'espace contenant les fonctions de sorties, ainsi que toutes les dérivées des fonctions de sorties suivant les trajectoires du système. En particulier, si le système ne comporte pas d'entrées $u(t)$, \mathcal{O} est construit en prenant $y_j = h_j(\mathbf{x})$, $j = 1, \dots, p$ avec les dérivées temporelles successives $\dot{y}_j = L_{\mathbf{f}} h_j(\mathbf{x})$, $\ddot{y}_j = L_{\mathbf{f}} L_{\mathbf{f}} h_j(\mathbf{x}), \dots$, $j = 1, \dots, p$. À partir de l'espace d'observation \mathcal{O} , la codistribution d'observabilité, notée $d\mathcal{O}$, est définie de la façon suivante :

$$d\mathcal{O}(\mathbf{x}) = \text{vect}\{\mathbf{dH}(\mathbf{x}) \mid \mathbf{H} \in \mathcal{O}\}, \quad \mathbf{x} \in \mathcal{V} \quad (4.26)$$

où la notation $\text{vect}\{\}$ fait référence à l'espace vectoriel engendré par les éléments de la codistribution.

On peut alors démontrer le résultat général suivant, relatif à l'observabilité locale des systèmes non-linéaires.

THÉORÈME 1 (RANG D'OBSERVABILITÉ)

Soit le système non-linéaire (4.22), avec $\dim \mathcal{V} = n$. Si,

$$\dim d\mathcal{O}(\mathbf{x}_0) = n, \quad (4.27)$$

alors le système est localement observable au point \mathbf{x}_0

La condition (4.27) précédente est connue sous le nom de *condition de rang d'observabilité*. Elles permet d'établir l'existence de relations algébriques entre les variables d'état du système et les dérivées successives des entrées et des sorties, relations qui peuvent être vues comme une obstruction à l'existence d'une infinité de trajectoires solutions du système différentiel (4.22) ayant le même comportement entrée/sortie.

Le calcul des termes des dérivées de Lie successives est cependant fastidieux dès lors que le système différentiel est de dimension supérieure à 3. Il est généralement nécessaire d'avoir recours, en pratique, à des logiciels de calcul formel (*e.g. MAPLE®*, *MATCAD®*, etc.) pour étudier les propriétés d'observabilité des systèmes non-linéaires. Ce type de logiciels est en effet particulièrement bien adapté à l'étude des propriétés d'observabilité, notamment pour le calcul des éléments de la codistribution d'observabilité $d\mathcal{O}$. L'algorithme développé par Sedoglavic (2001) dans l'environnement *MAPLE®*¹ est utilisé par la suite.

4.2.2 Application au modèle réduit

Un des problèmes fondamentaux qui se pose pour la commande des stations d'épuration concerne le manque de capteurs en ligne disponibles (*e.g.* Vanrolleghem et Verstraete, 1993). En particulier, le modèle simplifié (4.21) comporte 5 variables d'état, parmi lesquelles les concentrations en composés organiques biodégradables X_{DCO}^{ba} et en azote organique soluble S_{ND}^{ba} ne sont pas mesurables en ligne. D'autre part, bien que des capteurs existent pour la mesure en ligne des concentrations en nitrate S_{NO}^{ba} et en ammoniaque S_{NH}^{ba} , ceux-ci présentent des temps de réponse importants (de l'ordre de 10 minutes), ont un coût élevé et nécessitent d'être régulièrement entretenus². Aussi, seule l'utilisation de sondes à oxygène est en mesure de fournir des informations en temps réel.

L'étude de l'observabilité permet d'indiquer s'il est possible d'estimer la totalité de l'état du modèle réduit à partir de la seule mesure de concentration en oxygène dissous, et le cas échéant les mesures supplémentaires (concentration en nitrate et/ou en ammoniaque) dont il faut disposer pour cela. Ces propriétés varient selon les conditions d'aération du réacteur.

- En conditions de fonctionnement aérobies, l'utilisation de l'algorithme de Sedoglavic (2001) permet d'établir que le modèle réduit (4.21) est localement observable *via* la seule mesure de la concentration en oxygène dissous ;

¹Les librairies sont disponibles à l'adresse <http://medicis.polytechnique.fr/~sedoglav>.

²Les travaux de Ryckaert (1998) permettent d'établir que la mesure du potentiel redox peut constituer une alternative moins coûteuse aux mesures des concentrations d'ammoniaque et de nitrate. L'exploitation de ces mesures reste cependant délicate. Les mesures respirométriques pourraient également s'avérer intéressantes.

4.2. Observabilité du modèle réduit

- Sous des conditions d'anoxie, le modèle (4.21) se simplifie sous la forme :

$$\dot{X}_{DCO}^{ba} = D^{in} \left(X_{DCO}^{in} - \frac{K_S}{K_{DCO}} X_{DCO}^{ba} \right) \quad (4.28a)$$

$$-\frac{1}{Y_H} \theta_1 \eta_{NO,g} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} + \theta_2$$

$$\dot{S}_{NO}^{ba} = -D^{in} S_{NO}^{ba} - \frac{1 - Y_H}{2.86 Y_H} \theta_1 \eta_{NO,g} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \quad (4.28b)$$

$$\begin{aligned} \dot{S}_{NH}^{ba} &= D^{in} \left(S_{NH}^{in} - S_{NH}^{ba} \right) - i_{NBM} \theta_1 \eta_{NO,g} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \\ &\quad + \theta_4 S_{ND}^{ba} \end{aligned} \quad (4.28c)$$

$$\dot{S}_{ND}^{ba} = D^{in} \left(S_{ND}^{in} - S_{ND}^{ba} \right) - \theta_4 S_{ND}^{ba} + \theta_5 \eta_{NO,h} \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{ND} + X_{DCO}^{ba}} \frac{S_{NO}^{ba}}{K_{NO} + S_{NO}^{ba}} \quad (4.28d)$$

En raison de l'absence d'oxygène dissous dans le réacteur, il est impératif d'effectuer au moins une mesure supplémentaire pour observer le système (4.28) : mesurer la concentration en ammoniaque rend le système à nouveau observable. En revanche, la mesure de la concentration en nitrate ne permet pas d'assurer l'observabilité des concentrations en ammoniaque et en azote organique soluble (les dynamiques (4.28a) et (4.28b) étant indépendantes des concentrations S_{NH}^{ba} et S_{ND}^{ba}).

- En conditions de fonctionnement anaérobie enfin, seul le processus d'ammonification subsiste, et le modèle (4.28) devient :

$$\dot{X}_{DCO}^{ba} = D^{in} \left(X_{DCO}^{in} - \frac{K_S}{K_{DCO}} X_{DCO}^{ba} \right) + \theta_2 \quad (4.29a)$$

$$\dot{S}_{NH}^{ba} = D^{in} \left(S_{NH}^{in} - S_{NH}^{ba} \right) + \theta_4 S_{ND}^{ba} \quad (4.29b)$$

$$\dot{S}_{ND}^{ba} = D^{in} \left(S_{ND}^{in} - S_{ND}^{ba} \right) - \theta_4 S_{ND}^{ba} \quad (4.29c)$$

Dans ce cas, il est clair que la concentration X_{DCO}^{ba} n'est pas observable puisque la dynamique (4.29a) est découpée de celles des composés S_{NH}^{ba} et S_{ND}^{ba} ; l'application de la condition de rang d'observabilité (4.27) permet d'ailleurs de le vérifier facilement. La mesure de la concentration en ammoniaque permet uniquement d'assurer l'observabilité de la concentration en azote organique soluble, par l'intermédiaire de la cinétique ρ_4 d'ammonification.

En résumé, le modèle simplifié est ainsi observable *via* la seule mesure en ligne de concentration en oxygène dissous durant les phases de fonctionnement aérobies, alors qu'il devient nécessaire de disposer, au moins, de mesures supplémentaires en ammoniaque durant les périodes d'anoxie. En conditions de fonctionnement anaérobies cependant, la concentration des composés organiques particulaires n'est pas observable (quelles que soient les mesures effectuées). Ce type de fonctionnement reste malgré tout temporaire et est peu fréquent, d'autant que les périodes d'arrêt de l'aérateur sont limitées par une contrainte opératoire ($t_{\max}^{\text{off}} = 120 \text{ min.}$).

4.3 Identification paramétrique du modèle réduit

L'objectif de cette partie est d'étudier la validité du modèle simplifié décrit précédemment. Il s'agit de vérifier qu'il est compatible avec le modèle ASM 1, et de déterminer quelles en sont les limites de validité, en effectuant pour cela une identification paramétrique.

Toutefois, l'étape préalable à cette identification est l'étude de l'identifiabilité structurelle du modèle réduit, afin de déterminer les paramètres et/ou combinaisons de paramètres qui, pour un ensemble de mesures donné, sont identifiables. Quelques notions relatives à l'identifiabilité structurelle sont d'abord rappelées (§ 4.3.1). L'étude de l'identifiabilité du modèle simplifié est ensuite envisagée (§ 4.3.2). Pour terminer, la procédure d'identification paramétrique fait l'objet du paragraphe 4.3.3.

4.3.1 Notions d'identifiabilité structurelle

À la base du problème de l'identifiabilité structurelle se trouve la question de savoir s'il est possible ou non d'obtenir, pour un modèle donné et un ensemble de mesures expérimentales supposées parfaites et non bruitées, un unique jeu de paramètres. L'identifiabilité structurelle des modèles est un concept clé en commande des procédés et a été discuté par de nombreux auteurs (*e.g.* Walter, 1987; Söderström et Stoica, 1989).

Pour un modèle $\mathcal{M}(\cdot)$ de structure donnée, on note $\mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}_i) \equiv \mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}_j)$ lorsque les jeux de paramètres $\boldsymbol{\theta}_i$ et $\boldsymbol{\theta}_j$, appliqués au modèle de structure $\mathcal{M}(\cdot)$, donnent le même comportement entrée/sortie du système.

DÉFINITION 4 (IDENTIFIABILITÉ STRUCTURELLE GLOBALE)

Un modèle de structure $\mathcal{M}(\cdot)$ est globalement structurellement identifiable si pour presque tous les jeux $\boldsymbol{\theta}^$ de paramètres admissibles, l'unique solution de l'équivalence $\mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}) \equiv \mathcal{M}(\boldsymbol{\theta}^*)$ est $\boldsymbol{\theta} = \boldsymbol{\theta}^*$.*

L'énoncé suivant, qui est une variante du théorème des fonctions implicites, donne une caractérisation générale de l'identifiabilité structurelle globale des systèmes algébro-différentiels de la forme :

$$\dot{x}_i = F_i(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t), \quad i = 1, \dots, n \quad (4.30a)$$

$$y_j = G_j(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \boldsymbol{\theta}, t), \quad j = 1, \dots, p \quad (4.30b)$$

THÉORÈME 2 (IDENTIFIABILITÉ STRUCTURELLE GLOBALE)

Un système algébro-différentiel de la forme (4.30) est globalement structurellement identifiable si et seulement si les matrices jacobiniennes :

$$\mathcal{N} = \left(\frac{\partial y_j^{(\ell)}}{\partial x_i} \right) \text{ et } \mathcal{M} = \left(\frac{\partial y_j^{(\ell)}}{\partial x_i} \middle| \frac{\partial y_j^{(\ell)}}{\partial \theta_k} \right) \quad (4.31)$$

avec $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq p$, $1 \leq k \leq q$ et $0 \leq \ell \leq n + q - 1$, sont telles que :

$$\operatorname{rg} \mathcal{M} = \operatorname{rg} \mathcal{N} + q \quad (4.32)$$

où q désigne le nombre de paramètres du système.

4.3. Identification paramétrique du modèle réduit

Le calcul direct des déterminants des matrices formelles \mathcal{N} et \mathcal{M} précédentes est cependant voué à l'échec (Ollivier, 2000), dès lors que la dimension du système est supérieure à $n = 3$. Plusieurs méthodes permettant d'étudier l'identifiabilité structurelle des systèmes non-linéaires ont ainsi été développées, *e.g.* l'observation du vecteur d'état augmenté des paramètres, le développement en série de Taylor, l'approche de la série génératrice, l'approche de l'isomorphisme d'état local ou encore la transformation du système non-linéaire en un système linéaire vis-à-vis des paramètres afin d'appliquer les méthodes développées pour les systèmes linéaires (*e.g.* Söderström et Stoica, 1989; Ljung et Glad, 1994; Walter et Pronzato, 1996; Ollivier, 2000).

La méthode de l'observabilité du vecteur d'état étendu est ici appliquée. Cette approche constitue une approche naturelle au problème d'identifiabilité structurelle. Elle est basée sur le fait que le problème de l'identifiabilité structurelle locale d'un système est un cas particulier du problème d'observabilité. Il s'agit en effet de déterminer si les paramètres inconnus $\boldsymbol{\theta}$ d'un modèle sont observables, en les considérant comme des variables d'état particulières, décrites par des relations du type $\dot{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0}$. En adoptant cette approche, le système non-linéaire affine en la commande (4.22), s'écrit sous la forme étendue suivante :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) + \sum_{j=1}^m \mathbf{g}_j(\mathbf{x}, \boldsymbol{\theta}) u_j, \quad \mathbf{u} = (u_1, \dots, u_m) \in \mathcal{U} \subset \mathbb{R}^m \quad (4.33a)$$

$$\dot{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0} \quad (4.33b)$$

$$y_i = h_i(\mathbf{x}), \quad i = 1, \dots, p \quad (4.33c)$$

Les notions relatives à l'observabilité des systèmes non-linéaires affines en la commande ont déjà été présentées (*cf.* § 4.2.1). L'algorithme utilisé pour tester l'observabilité du système étendu (4.33) est à nouveau celui développé par Sedoglavic (2001) dans l'environnement de calcul formel MAPLE®.

4.3.2 Identifiabilité structurelle du modèle réduit

L'objectif de cette partie est de déterminer les paramètres et/ou combinaisons de paramètres du modèle réduit (4.21) qui sont identifiables pour un ensemble de mesures donné. Comme dans le cadre de l'observabilité, les propriétés d'identifiabilité structurelle du système dépendent des conditions d'aération du réacteur (conditions d'aérobiose, d'anoxie ou d'anaérobiose). Elles dépendent également des perturbations incidentes mesurées : l'utilisation de capteurs débitmétriques est fréquente sur les petites installations de traitement des eaux et ne pose plus de problèmes particuliers ; il est rare, en revanche, que les concentrations incidentes soient mesurées en ligne. Dans cette partie, l'identifiabilité structurelle du modèle réduit est ainsi étudiée en prenant le soin de distinguer le cas où l'ensemble des perturbations incidentes (Q^{in} , S_{NH}^{in} , S_{ND}^{in} et X_{DCO}^{in}) est connu, du cas où seul le débit incident est mesuré en ligne.

Conditions de fonctionnement aérobies – Le modèle simplifié s'exprime sous la forme générale d'un système non-linéaire $\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta})$, où le champ de vecteurs \mathbf{f} est défini par (4.21) et le vecteur d'état \mathbf{x} par :

$$\mathbf{x}(t) = [X_{DCO}^{ba} \ S_{NO}^{ba} \ S_{NH}^{ba} \ S_{ND}^{ba} \ S_O^{ba}]^T \quad (4.34)$$

- Dans le cas de figure où l'ensemble des perturbations incidentes est mesuré en ligne, les vecteurs des entrées \mathbf{u} et des paramètres $\boldsymbol{\theta}$ sont donnés par :

$$\mathbf{u}(t) = [k_{LA} D^{in} X_{DCO}^{in} S_{NH}^{in} S_{ND}^{in}]^T \quad (4.35)$$

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_1 \theta_2 \theta_3 \theta_4 \theta_5 K_{DCO} K_{ND} Y_H i_{NBM} K_S K_{O,H} K_{O,A} K_{NH,A} K_{NO} \eta_{NO,h} \eta_{NO,g} S_O^{sat}]^T \quad (4.36)$$

On montre alors, au moyen de l'algorithme d'observabilité de Sedoglavic (2001), que le système est globalement structurellement identifiable à partir des mesures de concentration en oxygène dissous S_O^{ba} dans le réacteur.

- Si la seule perturbation mesurée en ligne est le débit incident Q^{in} , il est nécessaire d'identifier les concentrations incidentes S_{NH}^{in} , S_{ND}^{in} et X_{DCO}^{in} , qui deviennent de ce fait des paramètres supplémentaires du système :

$$\mathbf{u}(t) = [k_{LA} D^{in}]^T \quad (4.37)$$

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_1 \theta_2 \theta_3 \theta_4 \theta_5 K_{DCO} K_{ND} Y_H i_{NBM} K_S K_{O,H} K_{O,A} K_{NH,A} K_{NO} \eta_{NO,h} \eta_{NO,g} S_O^{sat} X_{DCO}^{in} S_{NH}^{in} S_{ND}^{in}]^T \quad (4.38)$$

Le modèle n'est globalement structurellement identifiable que lorsque la concentration en composés organiques biodégradables X_{DCO}^{ba} est connue (mesurée ou préalablement estimée). Dans le cas contraire, l'identifiabilité structurelle n'est vérifiée que si l'un des paramètres θ_1 , θ_2 , K_{DCO} , K_{ND} , Y_H , i_{NBM} , K_S ou X_{DCO}^{in} est préalablement fixé.

Conditions de fonctionnement anoxies – Le modèle simplifié s'exprime sous la forme (4.28) et le vecteur des paramètres $\boldsymbol{\theta}$ est réduit à :

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_1 \theta_2 \theta_4 \theta_5 K_{DCO} K_{ND} Y_H i_{NBM} K_S K_{NO} \eta_{NO,h} \eta_{NO,g}]^T \quad (4.39)$$

Les couples de paramètres $\theta_1, \eta_{NO,g}$ d'une part, et $\theta_5, \eta_{NO,h}$ d'autre part, apparaissent uniquement sous la forme de produits dans le modèle (4.28), et ne sont clairement pas identifiables. Il s'agit donc de fixer l'un des paramètres de chaque couple, *e.g.* $\eta_{NO,g}$ et $\eta_{NO,h}$.

- Lorsque les perturbations du système sont intégralement connues (débit et concentrations) et que les concentrations en ammoniaque et en nitrate sont mesurées en ligne, le modèle (4.28) est structurellement identifiable. En revanche, lorsque la concentration en nitrate dans le réacteur n'est pas connue, le modèle n'est structurellement identifiable que si l'un des paramètres θ_1 , Y_H , i_{NBM} ou K_{NO} est également fixé (*e.g.* K_{NO}).
- Lorsque ni les concentrations incidentes, ni celles des composés organiques biodégradables ne sont mesurées, l'un des paramètres θ_1 , θ_2 , K_{DCO} , K_{ND} , Y_H , i_{NBM} , K_S ou X_{DCO}^{in} doit être supprimé. Si l'on ne dispose pas non plus de la concentration en nitrate, il devient également nécessaire de fixer, comme précédemment, l'un des paramètres θ_1 , Y_H , i_{NBM} ou K_{NO} .

Conditions de fonctionnement anaérobies – Le modèle réduit se présente sous la forme (4.29), et ne contient plus que les paramètres suivants :

$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_2 \theta_4 K_{DCO} K_S]^T \quad (4.40)$$

4.3. Identification paramétrique du modèle réduit

Il a pu être établi que la concentration des composés organiques biodégradables X_{DCO}^{ba} n'est pas observable en conditions d'anaérobiose (*cf.* § 4.2.2). Si cette concentration n'est pas mesurée *en ligne*, les paramètres θ_2 , K_S , K_{DCO} et X_{DCO}^{in} ne sont pas structurellement identifiables. En revanche, le paramètre θ_4 et, le cas échéant, les concentrations incidentes S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in} sont identifiables à partir de la mesure en ligne de la concentration en ammoniaque.

L'étude de l'identifiabilité structurelle du modèle réduit montre qu'il est théoriquement possible, à partir des seules mesures d'oxygène dissous, de nitrate et d'ammoniaque, et de la connaissance des concentrations incidentes X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in} , d'identifier l'ensemble des paramètres du modèle réduit en conditions de fonctionnement aérobies. En conditions d'anoxie et d'anaérobiose, des termes du modèle réduit se simplifient, et ce dernier n'est plus globalement structurellement identifiable ; seuls des sous-ensembles de paramètres sont alors identifiables.

Il est cependant rare que les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in} soient mesurées en ligne sur les petites stations d'épuration, et il devient nécessaire, dans ce cas, d'estimer ces perturbations. Des problèmes d'identifiabilité supplémentaires apparaissent alors pour plusieurs combinaisons de paramètres, et certains de ces paramètres doivent être fixés.

Bien que les paramètres du modèle réduit soient en grande partie identifiables, l'identification d'un grand nombre de paramètres n'est généralement pas nécessaire, ni d'ailleurs souhaitable (paramètres peu sensibles, problèmes d'identifiabilité pratique, *etc.*). Les aspects relatifs à l'identification paramétrique font l'objet de la partie suivante.

4.3.3 Procédure d'identification paramétrique

L'identification paramétrique consiste à déterminer le jeu de paramètres qui minimise l'écart entre des valeurs mesurées expérimentalement et prédites théoriquement. Malgré les simplifications effectuées, le modèle réduit comporte toujours de nombreux paramètres et il n'est pas envisageable de tous les identifier de façon systématique. Afin de n'avoir à estimer qu'un nombre limité de ces paramètres, une procédure similaire à celle mise en œuvre dans le cadre de l'identification du modèle ASM 1 est appliquée (*cf.* Annexe D). Elle est définie de la façon suivante :

- (i) sélectionner un jeu de paramètres qui soient structurellement identifiables ;
- (ii) sélectionner parmi ces paramètres ceux étant les plus sensibles, au moyen d'une procédure d'échantillonnage, *e.g.* *Latin Hypercube Sampling* (McRay et al., 1979; Iman et Conover, 1980) ;
- (iii) identifier les paramètres retenus au moyen d'un algorithme d'optimisation, *e.g.* la méthode SQP ;
- (iv) déterminer les intervalles et régions de confiance pour les paramètres identifiés afin de déceler les paramètres redondants et/ou peu sensibles ; le cas échéant, les éliminer de la procédure d'identification en les considérant égaux à leurs valeurs par défaut (i) et retourner à l'étape (iii).

Les aspects relatifs à la procédure d'échantillonnage, au calcul des sensibilités ainsi qu'au calcul des intervalles et régions de confiance ont déjà été précisés. Pour des mesures effectuées à une période d'échantillonnage T_e donnée, le problème d'identification paramétrique se présente sous la forme¹ :

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\theta}, \mathbf{x}_0} \mathcal{J} &= \sum_{k=1}^{N_m} [\mathbf{y}(t_k) - \mathbf{y}_k^{mes}]^T \cdot \mathcal{W} \cdot [\mathbf{y}(t_k) - \mathbf{y}_k^{mes}] \\ \text{soumis à : } \quad \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{f}^{(1,2)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{y} &= \mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{x}(t_0) &= \mathbf{x}_0 \\ \boldsymbol{\theta}^L &\leq \boldsymbol{\theta} \leq \boldsymbol{\theta}^U \\ \mathbf{x}_0^L &\leq \mathbf{x}_0 \leq \mathbf{x}_0^U \end{aligned} \quad (4.41)$$

où N_m correspond au nombre de mesures, \mathbf{y}_k^{mes} désigne les mesures effectuées à l'instant $t_k = t_0 + kT_e$ ($1 \leq k \leq N_m$), \mathcal{W} est une matrice de pondération et $\mathbf{f}^{(1)}$, $\mathbf{f}^{(2)}$ désignent respectivement le système (4.21) avec et sans le terme d'apport d'oxygène $k_{La}(S_O^{sat} - S_O^{ba})$.

Le gradient du critère \mathcal{J} d'identification par rapport aux paramètres $\boldsymbol{\theta}$ et aux conditions initiales \mathbf{x}_0 du modèle réduit est donné par :

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{J} = \sum_{k=1}^{N_m} \left[2 (\mathbf{y}(t_k) - \mathbf{y}_k^{mes})^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \Big|_{t_k} + \int_{t_{k-1}^+}^{t_k^-} \boldsymbol{\lambda}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} dt \right] \quad (4.42a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}_0} \mathcal{J} = \boldsymbol{\lambda}|_{t_0} \quad (4.42b)$$

où les variables d'état \mathbf{x} et adjointes $\boldsymbol{\lambda}$ sont solutions du TPBVP suivant :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(1,2)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) \quad (4.42c)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\boldsymbol{\lambda}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (4.42d)$$

$$\text{avec la condition initiale : } \mathbf{x}(t_0^+) = \mathbf{x}_0 \quad (4.42e)$$

$$\text{les conditions de continuité : } \mathbf{x}(t_k^+) = \mathbf{x}(t_k^-) \quad (4.42f)$$

$$\boldsymbol{\lambda}(t_k^-) = \boldsymbol{\lambda}(t_k^+) + 2 (\mathbf{y}(t_k) - \mathbf{y}_k^{mes})^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_k} \quad (4.42g)$$

$$\text{et la condition terminale : } \boldsymbol{\lambda}(t_{N_m}^-) = 2 (\mathbf{y}(t_{N_m}) - \mathbf{y}_{N_m}^{mes})^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{N_m}} \quad (4.42h)$$

Contrairement aux instants d'échantillonnage t_k , la commutation du système d'aération n'engendre pas de discontinuité du système adjoint aux instants t_b^j et t_c^j :

$$\boldsymbol{\lambda}(t_b^{j-}) = \boldsymbol{\lambda}(t_b^{j+}), \quad j = 1 \dots N_c \quad (4.42i)$$

$$\boldsymbol{\lambda}(t_c^{j-}) = \boldsymbol{\lambda}(t_c^{j+}), \quad j = 1 \dots N_c - 1 \quad (4.42j)$$

où N_c désigne le nombre d'aération sur l'horizon d'identification $[t_0, t_0 + N_m T_e]$. Précisons pour terminer, que le problème d'optimisation (4.41) est ici résolu au moyen du code de calcul **NLPQL** (Schittkowski, 1985) et que l'intégration du TPBVP (4.42c–4.42j) est assurée par le code de calcul **DASSL** (Brenan et al., 1989).

¹Afin de simplifier les expressions mathématiques, la notation $\mathbf{f}^{(1,2)}$ est ici utilisée ; cette notation fait référence au modèle $\mathbf{f}^{(1)}$ durant les périodes d'aération et au modèle $\mathbf{f}^{(2)}$ lors des périodes d'arrêt.

4.3.4 Résultats de l'identification

L'objectif de l'identification paramétrique du modèle réduit est de valider les hypothèses simplificatrices adoptées. Pour ce faire, les mesures \mathbf{y}_k^{mes} sont ici simulées par le modèle ASM 1 (avec décanteur simplifié), et l'ensemble des concentrations X_{DCO}^{ba} , S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} , S_{ND}^{ba} et S_O^{ba} est supposé mesuré en ligne avec une période d'échantillonnage $T_e = 10$ minutes.

Le modèle réduit comprend des paramètres cinétiques et stœchiométriques du modèle ASM 1, ainsi que des paramètres supplémentaires issus des simplifications. Pour les paramètres cinétiques et stœchiométriques, les valeurs adoptées par défaut sont celles définies dans le cadre du *benchmark* de l'action européenne COST 624 ; les valeurs des paramètres spécifiques sont celles relatives à des conditions de fonctionnement stationnaires de l'unité de traitement existante, pour la politique d'aération actuelle (*cf.* Fig. 4.7, 4.8, 4.9 et 4.10) et les perturbations incidentes mesurées (*cf.* Fig. 3.1, p. 65). Toutes ces valeurs sont données dans le Tab. 4.1.

Tab. 4.1 – Valeurs par défaut des paramètres du modèle réduit.

paramètres du modèle ASM 1			paramètres spécifiques		
Y_H	0.758	–	θ_1	4 500	$\text{mg L}^{-1} \text{j}^{-1}$
i_{NBM}	0.0678	–	θ_2	1 000	$\text{mg L}^{-1} \text{j}^{-1}$
K_S	10.0	mg L^{-1}	θ_3	210	$\text{mg L}^{-1} \text{j}^{-1}$
$K_{O,H}$	0.2	mg L^{-1}	θ_4	60	j^{-1}
$K_{O,A}$	0.4	mg L^{-1}	θ_5	250	$\text{mg L}^{-1} \text{j}^{-1}$
$K_{NH,A}$	1.0	mg L^{-1}	K_{DCO}	250	mg L^{-1}
K_{NO}	0.5	mg L^{-1}	K_{ND}	120	mg L^{-1}
$\eta_{NO,g}$	0.8	–			
$\eta_{NO,h}$	0.8	–			
S_O^{sat}	10.0	mg L^{-1}			

Conformément à la procédure d'identification envisagée, une sélection des paramètres les plus influents est préalablement réalisée, en évaluant la sensibilité des paramètres du modèle au moyen d'une méthode d'échantillonnage. Les propriétés d'identifiabilité pratique du modèle réduit sont ensuite étudiées par l'analyse des intervalles et des régions de confiance des paramètres, et des résultats d'identification paramétrique sont présentés. Les cas où les concentrations incidentes en carbone soluble et en ammoniac sont connues ou non sont traités successivement.

Analyse de sensibilité

Afin de limiter le nombre de paramètres à identifier, une analyse de sensibilité est effectuée. Il s'agit de sélectionner les paramètres qui ont une forte influence sur les variables d'état du modèle réduit. Le critère retenu est que la sensibilité moyenne $\bar{s}_{[\theta_k^L, \theta_k^U]}$ soit supérieure à la valeur 0.20 (*cf.* § D.3.2, p. 263). Cette valeur, qui peut être vue comme une valeur moyenne de la sensibilité du paramètre θ_k sur l'intervalle $[\theta_k^L, \theta_k^U]$ a été retenue sur la base de considérations pratiques. Elle permet de séparer l'ensemble des paramètres en deux

sous-ensembles équitables. Seuls les paramètres dont la sensibilité moyenne est supérieure à cette limite sont alors retenus par la suite. Les résultats obtenus sont donnés dans le Tab. 4.2. Les paramètres, perturbations incidentes et concentrations initiales reportés dans ce tableau sont ceux qui présentent la plus forte influence vis-à-vis de chaque variable d'état du modèle réduit.

TAB. 4.2 – Résultats de l'analyse de la sensibilité des paramètres du modèle réduit.

	X_{DCO}^{ba}	S_{NO}^{ba}	S_{NH}^{ba}
paramètres spécifiques	$\theta_1, \theta_2, K_{DCO}$	$\theta_1, \theta_5, K_{DCO}, K_{ND}$	$\theta_1, \theta_2, \theta_5, K_{DCO}, K_{ND}$
paramètres cinétiques			
paramètres stœchiométriques	Y_H, i_{NBM}	Y_H, i_{NBM}	Y_H, i_{NBM}
perturbations	Q^{in}, X_{DCO}^{in}		Q^{in}, S_{NH}^{in}
conditions initiales	X_{DCO0}^{ba}		

	S_{ND}^{ba}	S_O^{ba}
paramètres spécifiques	$\theta_1, \theta_2, \theta_4, \theta_5, K_{DCO}, K_{ND}$	$\theta_1, \theta_5, K_{DCO}, K_{ND}$
paramètres cinétiques		
paramètres stœchiométriques	Y_H	Y_H, i_{NBM}
perturbations	X_{DCO}^{in}	Q^{in}
conditions initiales		

Dans l'ensemble, les paramètres spécifiques issus des simplifications du modèle ASM 1 présentent une sensibilité importante. D'autre part, et conformément aux résultats obtenus lors de l'analyse de la sensibilité du modèle ASM 1, les paramètres stœchiométriques Y_H et i_{NBM} sont influents. Les paramètres cinétiques du modèle réduit, et notamment les constantes d'affinité, sont en revanche peu sensibles.

Ces résultats permettent également d'établir que le débit Q^{in} et les concentrations en composés organiques biodégradables X_{DCO}^{in} et en ammoniaque S_{NH}^{in} sont influents.

- Le débit incident est supposé être mesuré en ligne ; il sera donc nécessaire de considérer des algorithmes d'estimation et d'identification robustes vis-à-vis de ses variations.
- Les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} , ne sont généralement pas mesurées en ligne ; il sera donc important de pouvoir les estimer.
- La concentration incidente en azote organique soluble enfin apparaît peu sensible. Comme cette concentration n'est pas mesurée en ligne et est le plus souvent très faible, elle sera négligée dans la suite de l'étude ; l'apport d'azote organique soluble par l'influent sera alors compensé par une très légère surestimation du processus d'hydrolyse de l'azote organique particulaire via le paramètre θ_5 .

On peut remarquer pour terminer, que la seule condition initiale qui présente une sensibilité importante est la concentration en carbone organique biodégradable X_{DCO0}^{ba} . Étant donné que cette concentration n'est pas mesurable en ligne, il s'agira de l'estimer le plus précisément possible au moyen d'un estimateur d'état.

En retirant les paramètres peu influents (en prenant comme valeur celles par défaut définies dans le Tab. 4.1, p. 141), il reste les 9 paramètres $\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4, \theta_5, K_{DCO}, K_{ND}, Y_H, i_{NBM}$, auxquels s'ajoutent les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} . On peut rappeler

4.3. Identification paramétrique du modèle réduit

que si toutes les variables d'état du système sont connues (mesurées ou préalablement estimées en ligne), cette combinaison de paramètres est structurellement identifiable, quelles que soient les conditions de fonctionnement du réacteur (*cf.* § 4.3.2).

Cas où les concentrations incidentes sont mesurées en ligne

Les résultats de l'identification du modèle réduit obtenus en supposant les perturbations incidentes connues sont présentés dans ce paragraphe. L'analyse des intervalles et des régions de confiance des 9 paramètres préalablement sélectionnés indique qu'il existe de fortes corrélations, notamment :

- entre les paramètres θ_1 , θ_2 , K_{DCO} et Y_H ;
- entre les paramètres θ_4 et i_{NBM} ;
- entre les paramètres θ_5 et K_{ND} .

Compte tenu de ces résultats, les paramètres Y_H et i_{NBM} sont retirés de la procédure d'identification. Bien que ces paramètres influencent fortement le comportement dynamique du modèle réduit, il est en effet naturel de conserver prioritairement ceux étant susceptibles de varier temporellement. Les couples de paramètres θ_1 , K_{DCO} et θ_5 , K_{ND} , sont également fortement corrélés. Ces corrélations résultent respectivement des termes cinétiques $\theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}}$ et $\theta_5 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{ND} + X_{DCO}^{ba}}$ du modèle réduit. Les constantes d'affinité K_{DCO} et K_{ND} sont ici retirées de la procédure d'identification, au profit des paramètres θ_1 et θ_4 , plus sensibles. Les valeurs adoptées par la suite pour les quatre paramètres Y_H , i_{NBM} , K_{DCO} et K_{ND} sont celles définies par défaut dans le Tab. 4.1 (p. 141).

Les résultats de l'identification paramétrique des paramètres $\theta_1, \dots, \theta_5$ sur un horizon d'opération de 8 heures (à partir de $t_0 = 9$ h) sont donnés dans le Tab. 4.3 ; les valeurs des intervalles de confiance et des sensibilités relatives $\frac{\Delta\mathcal{J}/\mathcal{J}^*}{\Delta\theta_i/\theta_i^*}$ (calculées pour $\Delta\boldsymbol{\theta} = 0.1\boldsymbol{\theta}^*$) y sont également reportées.

TAB. 4.3 – Résultat de l'identification – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.

paramètre	valeur	intervalle de confiance à 90%	sensibilité $\frac{\Delta\mathcal{J}/\mathcal{J}^*}{\Delta\theta_i/\theta_i^*}$
θ_1	4 888 mg L ⁻¹ j ⁻¹	0.6 %	11 900 %
θ_2	929.0 mg L ⁻¹ j ⁻¹	0.9 %	5 880 %
θ_3	211.1 mg L ⁻¹ j ⁻¹	1.5 %	460 %
θ_4	56.0 j ⁻¹	1.7 %	70 %
θ_5	253.3 mg L ⁻¹ j ⁻¹	0.8 %	4 410 %
critère à l'optimum :		$\mathcal{J}^* = 4.9$	

Les valeurs estimées sont peu différentes de celles définies par défaut (*cf.* Tab. 4.1) et les intervalles de confiance sont particulièrement faibles, de l'ordre de 1 %. Ces bons résultats indiquent que les paramètres $\theta_1, \dots, \theta_5$ ne sont pas (fortement) corrélés, mais sont aussi liés au fait que les valeurs générées par le modèle ASM 1 pour l'identification ne sont pas bruitées. D'autre part, la faible valeur du critère \mathcal{J} d'identification à l'optimum montre

que les écarts de prédiction des modèles réduit et ASM 1 sont peu importants. La très forte sensibilité du modèle réduit vis-à-vis des paramètres θ_1 , θ_2 et θ_5 incite cependant à relativiser ces résultats. Une erreur, même faible, sur les valeurs de ces paramètres peut en effet sensiblement modifier les trajectoires d'état du système. Ces aspects seront plus spécifiquement étudiés dans le chapitre 5.

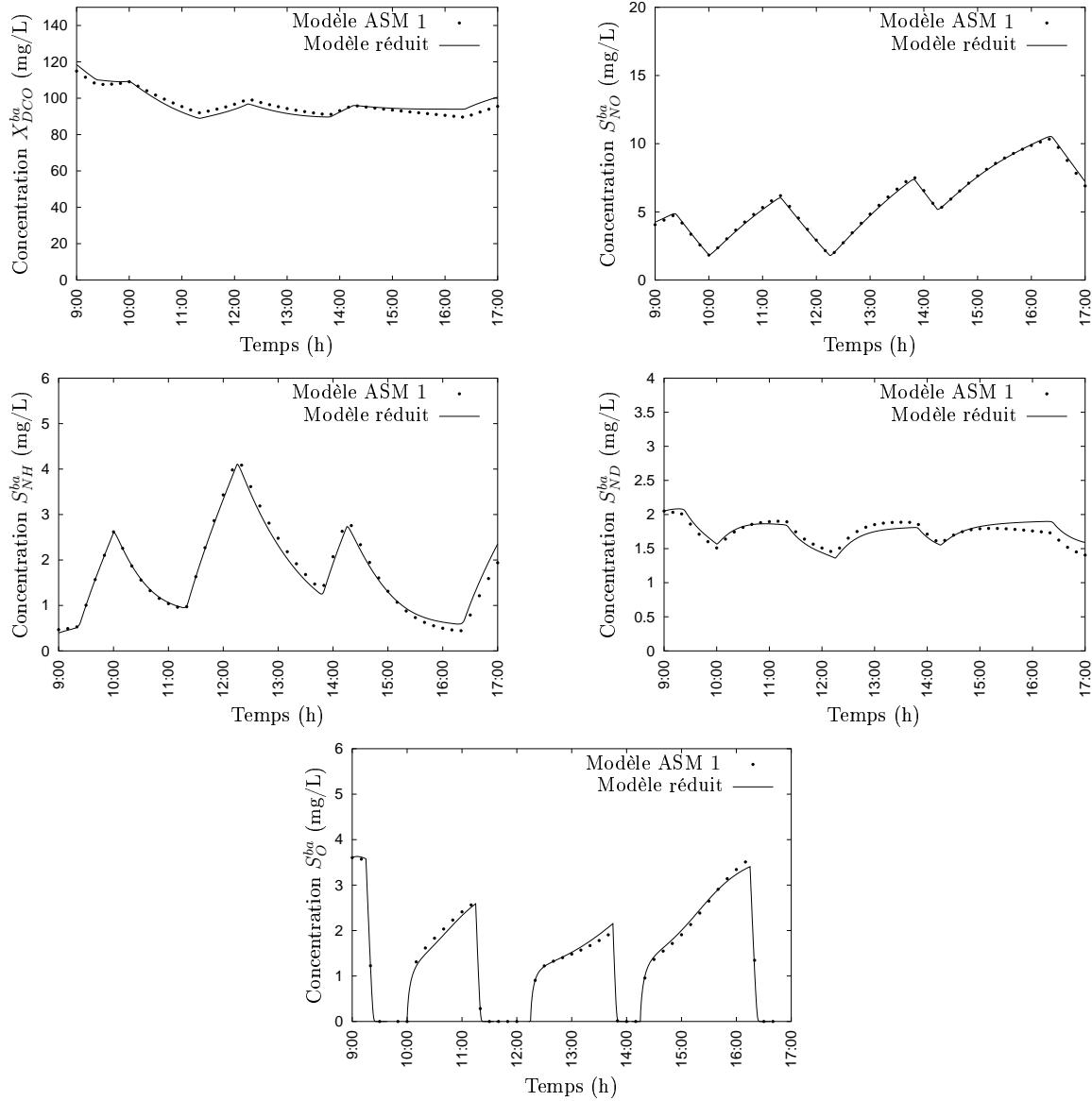


FIG. 4.11 – Résultats de l'identification paramétrique du modèle réduit sur un horizon de 8 heures (application de la politique actuelle d'aération) – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.

Une comparaison entre les deux modèles est présentée sur la Fig. 4.11. Comme l'indique la valeur du critère d'optimisation, les écarts observés sont faibles pour l'ensemble des variables d'état. Étant donné que les paramètres spécifiques varient peu, les supposer constants durant l'opération n'induit donc pas de larges erreurs. Les comparaisons entre les termes cinétiques du modèle simplifié et ceux du modèle ASM 1 permet d'ailleurs de le confirmer (Fig. 4.12). On peut toutefois noter que les termes cinétiques $\theta_4 S_{ND}^{ba}$ (formation

4.3. Identification paramétrique du modèle réduit

interne de S_{ND}^{ba}) et $\theta_5 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{ND} + X_{DCO}^{ba}}$ (dégradation de S_{ND}^{ba}) sont alternativement (légèrement) surestimés et sous-estimés. Ceci n'a cependant qu'une faible incidence sur la concentration en azote soluble dans la mesure où le bilan de matière est globalement respecté.

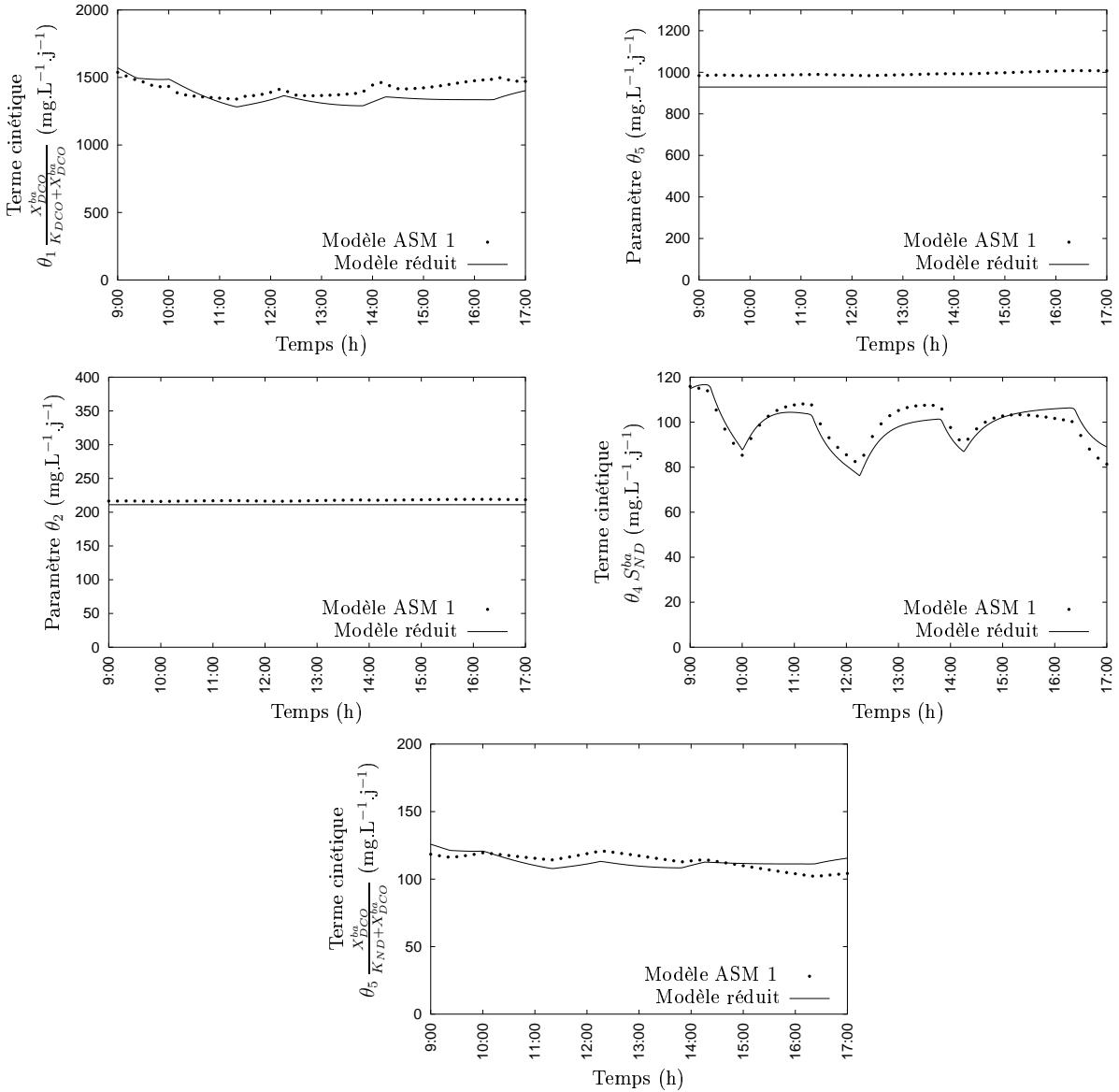


FIG. 4.12 – Comparaison des termes cinétiques simplifiés du modèle réduit avec ceux du modèle ASM 1 – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.

Pour garantir la validité des hypothèses simplificatrices adoptées lors de la réduction du modèle ASM 1, une évaluation de l'horizon de prédiction du modèle réduit est nécessaire. Il s'agit notamment d'étudier le comportement de ce dernier vis-à-vis (i), d'une forte perturbation incidente et (ii), de différentes politiques d'aération.

(i) **Cas d'une forte perturbation incidente** – Disposer d'un modèle réduit qui soit robuste vis-à-vis des perturbations incidentes est indispensable si l'on souhaite calculer en ligne les politiques optimales d'aération du réacteur. Pour le vérifier, le comportement du modèle réduit face à une forte surcharge est ici comparé à celui

du modèle ASM 1, pour le jeu de paramètres préalablement estimé (Tab. 4.3). Les résultats obtenus montrent que les écarts de prédiction restent limités malgré la perturbation. L'évolution comparée des rejets d'azote total est illustrée sur la Fig. 4.13 (gauche).

- (ii) **Cas d'un changement de politique d'aération** – S'assurer de la robustesse du modèle réduit face à la modification de la politique d'aération du réacteur est également nécessaire. L'effet, sur le comportement du modèle réduit, des politiques d'aération qui minimisent soit les rejets d'azote total (MR), soit la consommation énergétique de l'aérateur (MCE) – politiques optimales d'aération à long terme, cf. § 3.5 – est ici étudié. Les écarts entre les prédictions du modèle réduit et les valeurs de référence données par le modèle ASM 1 sont présentées sur la Fig. 4.13 (droite) pour les rejets d'azote total. Dans les deux cas, l'utilisation des paramètres identifiés avec la politique d'aération actuelle (Tab. 4.3) permet de représenter de façon très pertinente le comportement dynamique du procédé sur l'horizon d'opération.

Ces résultats valident les simplifications apportées au modèle ASM 1.

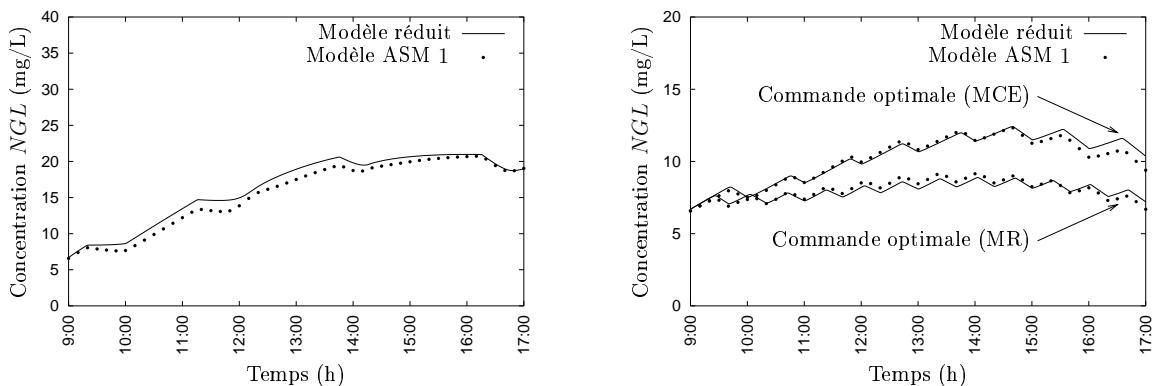


FIG. 4.13 – Évolution comparée des modèles réduit et ASM 1 vis-à-vis d'une forte perturbation incidente (Fig. gauche) et de différentes politiques d'aération (Fig. droite) – Cas où les perturbations incidentes sont mesurées en ligne.

Cas où X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} ne sont pas mesurées en ligne

Les résultats précédents démontrent l'aptitude du modèle réduit à représenter le comportement du procédé sur des périodes d'opération de plusieurs heures, lorsque les perturbations incidentes sont connues. En pratique cependant, certaines perturbations incidentes ne sont pas accessibles, *e.g.* X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} . Il devient alors nécessaire de les estimer conjointement aux paramètres du modèle.

L'analyse des intervalles et des régions de confiance montre que la prise en compte des concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} induit des corrélations supplémentaires, notamment :

- entre la concentration incidente X_{DCO}^{in} et le paramètre θ_2 ,
- entre la concentration incidente S_{NH}^{in} et le paramètre θ_4 .

4.3. Identification paramétrique du modèle réduit

Ces corrélations s'ajoutent ainsi à celles déjà détectées entre les paramètres du modèle (*cf.* paragraphe précédent). Elles résultent de la présence des termes $D^{in} X_{DCO}^{in} + \theta_2$ et $D^{in} S_{NH}^{in} + \theta_4 S_{ND}$ dans l'expression du système (4.21). Différentes approches peuvent être appliquées pour en tenir compte. Une première alternative consiste à définir de nouveaux paramètres, *e.g.* $\theta'_2 = D^{in} X_{DCO}^{in} + \theta_2$. La variabilité temporelle de tels paramètres limite cependant notablement l'horizon de prédiction du modèle réduit. Une autre alternative consiste à fixer les paramètres θ_2 et θ_4 , dont les variations sont peu importantes, à des valeurs vraisemblables (Fig. 4.7 et 4.9), et de n'estimer alors que les perturbations X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} . Contrairement à la première approche, cette façon de faire permet de tenir compte des mesures en ligne du débit incident et limite moins l'horizon de prédiction du modèle réduit.

Les résultats de l'identification, obtenus en adoptant cette dernière approche et en donnant aux paramètres θ_2 et θ_4 les valeurs par défaut préalablement définies (Tab. 4.1 p. 141), sont détaillés dans le Tab. 4.4. Une comparaison entre les prédiction des modèles réduit et ASM 1 est présentée sur la Fig. 4.14.

TAB. 4.4 – Résultat de l'identification – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.

paramètre	valeur	intervalle de confiance à 90%	sensibilité $\frac{\Delta \mathcal{J}}{\Delta \theta_i / \theta_i^*}$
θ_1	4 779 mg L ⁻¹ j ⁻¹	0.9 %	5 380 %
θ_3	214.4 mg L ⁻¹ j ⁻¹	2.3 %	180 %
θ_5	237.6 mg L ⁻¹ j ⁻¹	3.9 %	1 870 %
X_{DCO}^{in}	173.9 mg L ⁻¹	2.6 %	660 %
S_{NH}^{in}	23.5 mg L ⁻¹	5.8 %	970 %
critère à l'optimum :		$\mathcal{J}^* = 11.0$	

Dans l'ensemble, les valeurs des paramètres sont proches de celles estimées en connaissant les concentrations incidentes (Tab. 4.3 p. 143). Les écarts de prédiction entre les deux modèles, bien que légèrement supérieurs à ceux obtenus précédemment, restent faibles. On peut toutefois noter que la valeur du paramètre θ_5 accuse une baisse significative (environ 10%). Comme d'autre part, le taux d'ammonification est surestimé (paramètre par défaut θ_4), le bilan de matière (4.21d) du composé S_{ND}^{ba} est biaisé (sous-estimé). Ceci explique d'ailleurs que les concentrations en azote soluble soient inférieures à celles données par le modèle ASM 1. Malgré ces différences, le taux de formation en ammoniaque est correctement estimé (Fig. 4.15 gauche), si bien que l'écart de concentration en azote soluble ne se répercute pas sur la concentration en ammoniaque.

La concentration incidente des composés organiques X_{DCO}^{in} est également largement sous-estimée, de manière à compenser la surestimation du taux de formation interne de X_{DCO}^{ba} (paramètre par défaut θ_2). Le bilan d'apport des composés organiques (somme entre ces deux composantes) est ainsi globalement respecté, comme l'illustre la Fig. 4.15 (droite).

Ces résultats démontrent l'aptitude du modèle réduit à représenter le comportement dynamique du procédé lorsque les concentrations incidentes ne sont pas mesurées. D'autre

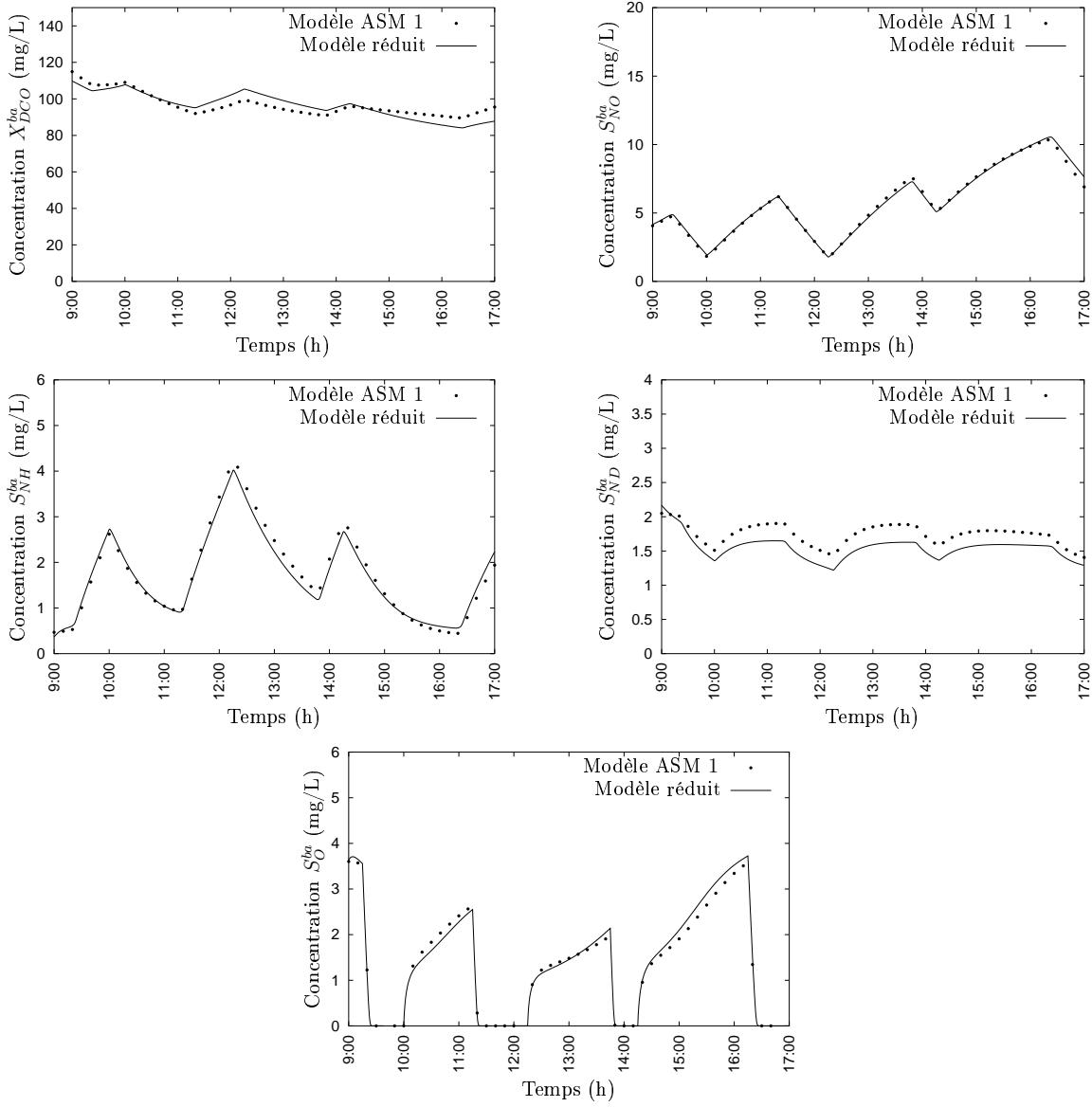


FIG. 4.14 – Résultats de l'identification paramétrique du modèle simplifié sur un horizon de 8 heures (application de la politique actuelle d'aération) – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.

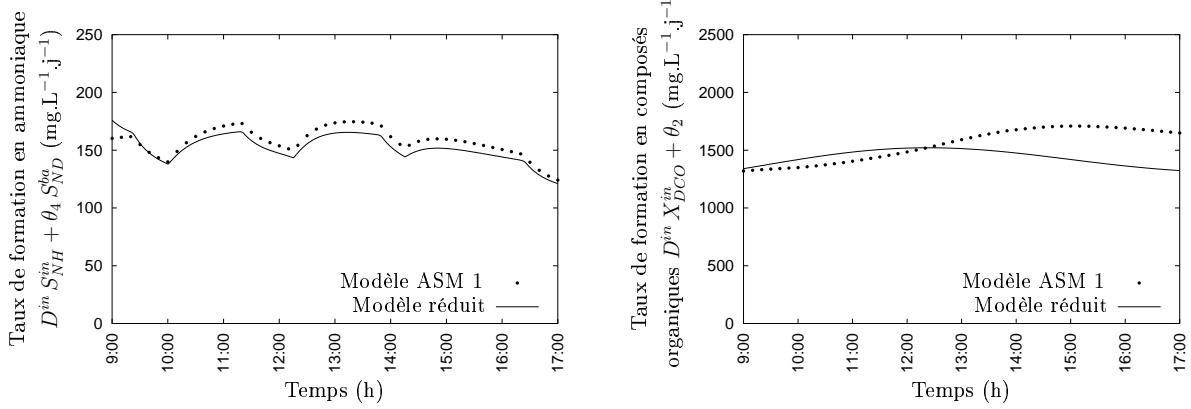


FIG. 4.15 – Comparaison des taux de formation en ammoniacque S_{NH}^{ba} (fig. gauche) et en composés organiques X_{DCO}^{ba} (fig. droite) pour les modèles réduit et ASM 1 – Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées en ligne.

part, l'horizon de prédition de plusieurs heures de ce modèle apparaît suffisant pour envisager d'actualiser *en ligne* les politiques optimales d'aération, *e.g.* dans un schéma de commande prédictive.

4.4 Conclusions

L'élaboration d'un modèle de fonctionnement simplifié est nécessaire en vue de la commande optimale en boucle fermée des petites stations d'épuration à boues activées. Issu du modèle ASM 1 de l'IAWQ, le modèle proposé intègre deux types de simplifications : (i) des simplifications rigoureuses, basées sur l'analyse des valeurs propres du système dynamique, afin d'éliminer les variables d'état dont les dynamiques sont lentes; (ii) des simplifications de nature plus heuristique qui permettent de réduire davantage la dimension du système. Il comporte 5 variables d'état X_{DCO}^{ba} , S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} , S_{ND}^{ba} et S_O^{ba} , et définit 7 paramètres spécifiques susceptibles de varier temporellement.

L'étude des propriétés d'observabilité (locale) de ce modèle nécessite de distinguer différents types de conditions de fonctionnement. En condition d'aérobiose, la seule mesure de la concentration en oxygène dissous permet d'observer le système. Sous des conditions d'anoxie en revanche, la mesure de la concentration en ammoniacque devient nécessaire (et suffisante). En conditions d'anaérobiose enfin, la dynamique d'évolution des composés organiques est découpée des autres dynamiques et la concentration de ces composés n'est donc pas observable par le biais d'autres mesures. Étant donné que les périodes d'anaérobiose sont rares et généralement de courtes durées sur ce type d'unités, il semble néanmoins possible d'envisager l'observation du système dans de bonnes conditions, malgré ce défaut d'observabilité.

L'étude des propriétés d'identifiabilité structurelle du modèle réduit a également fait l'objet de ce chapitre. Ces propriétés dépendent à nouveau des conditions de fonctionnement du réacteur, mais également de la connaissance ou non des concentrations incidentes X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in} . Des combinaisons de paramètres structurellement identifiables ont ainsi pu être obtenues pour chaque cas. Le fait que tous les paramètres ne soient pas sys-

tématiquement identifiables n'apparaît pas problématique. Il n'est en effet pas possible, pour des raisons d'identifiabilité pratique, d'estimer la totalité des paramètres à partir d'un nombre limité de mesures. Une analyse de sensibilité est donc mise en œuvre afin de sélectionner les paramètres les plus influents ; les redondances entre les paramètres sont ensuite éliminées par l'analyse de leurs intervalles et régions de confiance.

Les résultats de l'identification paramétrique, enfin, montrent que le modèle réduit permet de représenter le comportement du procédé de façon très pertinente sur un horizon d'opération de 8 heures au moins, que les concentrations incidentes des composés organiques et d'azote ammoniacal soient mesurées ou non. Ils permettent également de vérifier que ce modèle est robuste vis-à-vis des changements de politique d'aération et présente une certaine tolérance aux perturbations du procédé. Les simplifications adoptées lors de l'élaboration du modèle réduit sont ainsi validées.

Au terme de ce chapitre, le modèle réduit proposé apparaît apte à être utilisé dans un schéma de commande en boucle fermée. Avant cela, il s'agit cependant de vérifier que les politiques optimales calculées à partir de ce modèle sont compatibles avec celles données par le modèle ASM 1 d'une part, et d'analyser la sensibilité de ces conditions optimales de fonctionnement vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle d'autre part. Ces aspects, indispensables pour replacer les résultats de l'optimisation dans un contexte plus réaliste, font l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 5

Analyse de la sensibilité du modèle réduit

Sentir c'est juger

Les grandes formes de la vie mentale
DELACROIX

Jusqu'à présent, le calcul des politiques optimales d'aération est effectué à partir d'un modèle de connaissance du procédé supposé parfait. Tout modèle, aussi détaillé soit-il, présente cependant des écarts avec le procédé qu'il représente. Ces écarts, qui caractérisent l'imperfection du modèle, peuvent dégrader la qualité des résultats obtenus.

Les perturbations externes au système (*e.g.* bruits, erreurs de mesure, *etc...*) sont souvent à l'origine de ces écarts. Les erreurs d'estimation des paramètres du modèle peuvent également induire de larges écarts. Ces derniers surviennent lors de l'étape de modélisation du procédé ou encore lors de l'adaptation *en ligne* des paramètres, *i.e.* en cours de fonctionnement. Les raisons de l'inadéquation entre les paramètres nominaux du modèle et les paramètres réels du procédé sont nombreuses. Parmi les principales, on peut citer les suivantes :

- La mise au point de modèles de connaissance en Génie des Procédés nécessite que des hypothèses simplificatrices soient adoptées. Ces hypothèses conduisent à négliger certains phénomènes et à définir des paramètres dont la signification, bien que physique, n'est malgré tout qu'*approximative*. D'autres phénomènes encore mal connus sont également difficiles à prendre en compte.
- L'estimation des paramètres du modèle consiste à minimiser l'écart entre modèle et procédé mais ne l'annule pas systématiquement. Lorsque l'identification est effectuée *hors ligne*, les conditions d'estimation sont proches des conditions de fonctionnement mais pas identiques. Réaliser les estimations *en ligne* permet de limiter les erreurs, mais n'est cependant pas toujours réalisable pour des raisons techniques ou de coût.

L'objet de l'analyse de sensibilité est d'étudier l'influence des écarts entre un modèle nominal et un modèle perturbé. Ces analyses permettent de déterminer dans quelle mesure

l'imperfection du modèle peut dégrader le bénéfice de l'optimisation. Elles sont indispensables pour pouvoir replacer les résultats obtenus dans un contexte de fonctionnement réel du procédé.

Dans cette partie, l'analyse de la sensibilité du procédé de traitement à boues activées dans son mode de fonctionnement optimal est présentée. Les conditions optimales relatives au modèle réduit sont tout d'abord précisées et comparées à celles obtenues avec le modèle ASM 1 (§ 5.1). Les aspects relatifs au calcul de la sensibilité de ces politiques d'aération vis-à-vis des erreurs d'estimation commises sur les paramètres et les conditions initiales du système sont ensuite détaillés (§ 5.2). L'application est faite pour les problèmes de minimisation des rejets d'azote et de la consommation énergétique de l'aérateur (§ 5.3).

5.1 Détermination des politiques optimales d'aération

Les conditions optimales de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées sont ici déterminées dans le cadre de l'utilisation du modèle réduit présenté dans le chapitre précédent. Les problèmes d'optimisation et l'algorithme de résolution appliqués sont en tous points similaires à ceux considérés précédemment (*cf.* chapitre 3). Les résultats obtenus dans le cadre de la minimisation des rejets et de la consommation énergétique de l'aérateur sont présentés successivement. Dans les deux cas, une comparaison est établie avec les politiques optimales calculées avec le modèle ASM 1.

5.1.1 Minimisation des rejets d'azote total

Le calcul des profils optimaux d'aération qui minimisent les rejets d'azote total de l'unité de traitement fait l'objet de ce paragraphe. Le modèle réduit (4.21) est utilisé avec les paramètres et les conditions initiales identifiés dans le chapitre 4 et en supposant les perturbations incidentes connues (Fig. 3.1, p. 65) : les valeurs des paramètres spécifiques du modèle réduit sont données dans le Tab. 4.3 (p. 143) ; les valeurs des autres paramètres sont celles définies par défaut dans le Tab. 4.1 (p. 141). Pour des raisons de compatibilité avec l'horizon de prédiction du modèle réduit, l'horizon d'optimisation considéré est de 8 heures.

Comme lors du calcul des politiques optimales d'aération avec le modèle ASM 1, le problème admet un unique optimum global en fonction du nombre de cycle. Ce minimum est ici obtenu pour $N_c^* = 8$ cycles de fonctionnement et correspond à une concentration moyenne de l'ordre de $\mathcal{J}^* = 6.9 \text{ mg.L}^{-1}$ (Fig. 5.1).

Le profil optimal d'aération pour 8 cycles de fonctionnement est illustré sur la Fig. 5.2 (gauche). Les taux d'aération les plus élevés sont obtenus à la mi-journée, corrélativement au maximum de charge incidente. Le profil de concentration de l'effluent en azote total correspondant est donné sur la Fig. 5.2 (droite). Sur cette même figure, le profil de rejet simulé au moyen du modèle ASM 1 (pour le même profil d'aération) est également représenté. Les différences observées résultent en partie des erreurs liées aux simplifications du modèle, mais tiennent surtout au fait que le modèle réduit ne permet pas de représenter les rejets d'azote sous forme particulaire (X_{ND}). Le fait que cette fraction particulaire soit peu variable, de l'ordre de 0.5 à 1 mg.L^{-1} , explique que les rejets simulés par le modèle

5.1. Détermination des politiques optimales d'aération

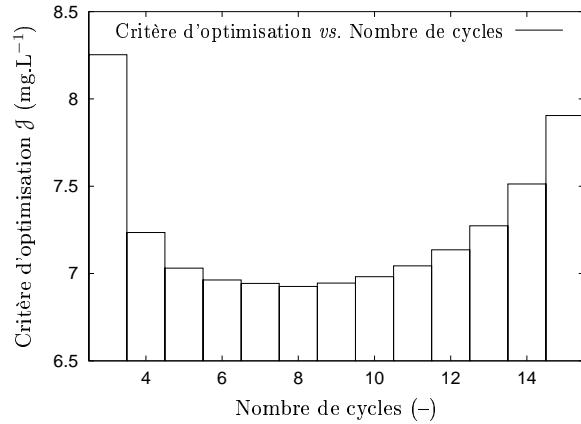


FIG. 5.1 – Influence du nombre de cycles d'aération sur la concentration moyenne minimale des rejets d'azote total.

réduit soient systématiquement inférieurs à ceux obtenus avec le modèle ASM 1. Malgré ces écarts, la limite réglementaire de rejet en *NGL* est toutefois respectée.

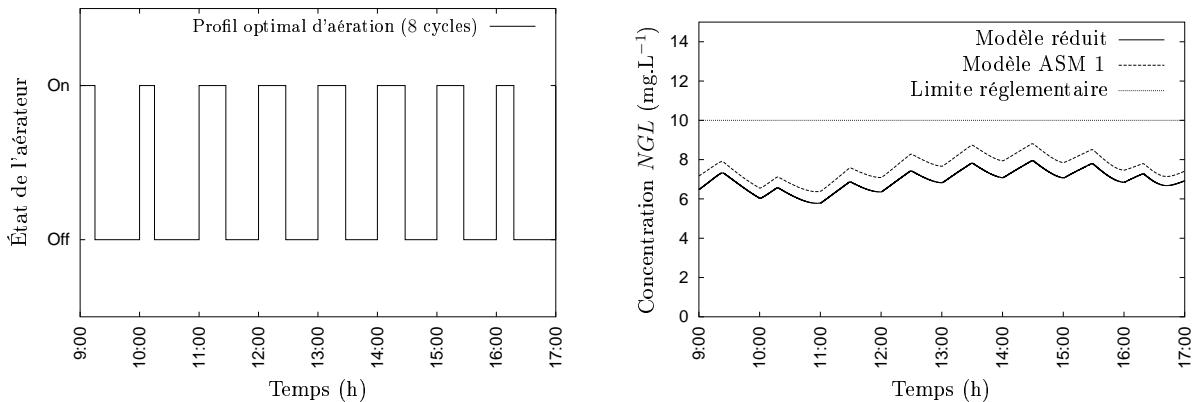


FIG. 5.2 – Profil optimal d'aération pour 8 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et rejets d'azote total correspondants (Fig. droite).

Une comparaison entre les conditions optimales de fonctionnement calculées avec les modèles ASM 1 et réduit est établie sur la base du même horizon d'optimisation. Dans les deux cas, le minimum de rejet est obtenu pour 8 cycles d'aération. Les profils optimaux d'aération sont présentés sur la Fig. 5.3 (gauche). Les différences apparaissent peu importantes et les taux moyens d'aération sont similaires avec 38.6% d'aération pour le modèle réduit contre 39.8% avec le modèle ASM 1. En simulant les profils de concentration en azote total au moyen de ce dernier, on retrouve également de très faibles écarts entre les deux politiques d'aération (Fig. 5.3 droite). On peut ainsi vérifier que les erreurs relatives aux simplifications du modèle ASM 1 restent limitées.

Ces résultats valident clairement l'utilisation du modèle réduit pour le calcul des politiques d'aération qui minimisent les rejets d'azote total sur des horizons de quelques heures. Le problème de minimisation de la consommation énergétique fait l'objet du paragraphe suivant.

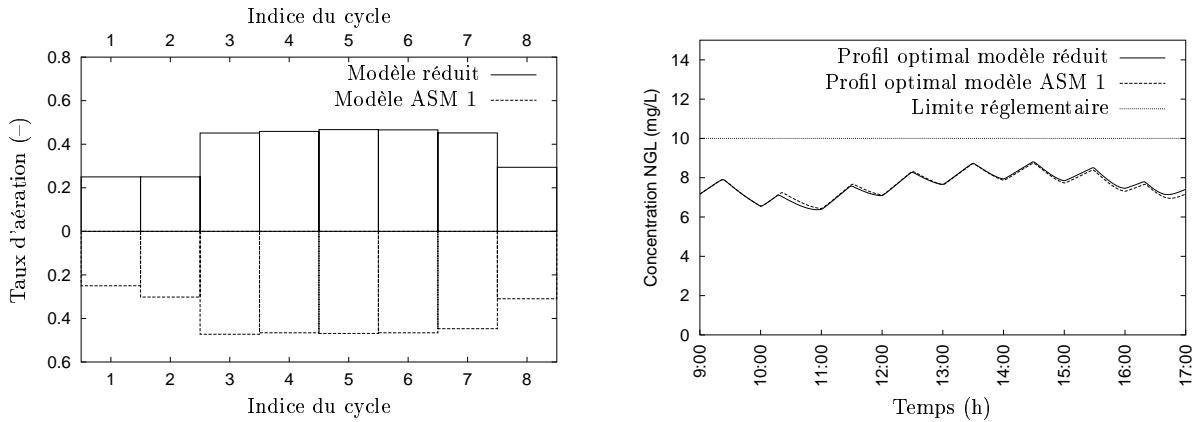


FIG. 5.3 – Comparaison des conditions optimales de fonctionnement relatives aux modèles réduit et ASM 1 : profils optimaux d'aération (Fig. gauche) et rejets d'azote total correspondants (Fig. droite).

5.1.2 Minimisation de la consommation énergétique

La validité des simplifications du modèle ASM 1 est étudiée dans ce paragraphe dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique du système d'aération. Compte tenu des résultats obtenus précédemment, une modification de la contrainte de rejet d'azote total est ici adoptée pour palier l'inaptitude du modèle réduit à représenter la concentration d'azote particulaire de l'effluent. Cette concentration variant entre 0.5 et 1 mg.L⁻¹, la contrainte de rejet est intégrée au problème d'optimisation sous la forme d'une concentration maximale en azote soluble $NGL_{\max} = 9 \text{ mg.L}^{-1}$ (au lieu de 10 mg.L⁻¹) :

$$S_{NO}(t) + S_{NH}(t) + S_{ND}(t) \leq 9 \text{ mg.L}^{-1}, \quad \forall t \in [t_0, t_f] \quad (5.1)$$

Cette modification n'a bien entendu aucune incidence sur la méthode de résolution du problème.

L'influence du nombre de cycles de fonctionnement sur la valeur du taux moyen minimal d'aération du réacteur est illustrée sur la Fig. 5.4. À nouveau, ce profil présente un unique minimum, obtenu dans ce cas pour $N_c^* = 6$ cycles. On peut toutefois noter qu'avec des écarts inférieurs à 4%, l'influence de N_c est faible entre 4 et 8 cycles d'aération. Le taux moyen minimal d'aération sur 8 heures est environ 26.2%.

Le profil optimal d'aération pour 6 cycles d'aération est représenté sur la Fig. 5.5 (gauche). Durant les deux premiers cycles, la concentration maximale des rejets d'azote soluble (5.1) n'est pas contraignante et les taux d'aération sont minimaux. La contrainte n'est atteinte qu'au terme du troisième cycle (Fig. 5.5 droite). À partir de ce point, les taux d'aération augmentent sensiblement pour faire face à la charge incidente d'azote.

La comparaison des rejets d'azote simulés au moyen des modèles réduit et ASM 1 montre que les deux profils s'écartent progressivement. Ces différences sont en partie liées à la fraction d'azote particulaire. Elles résultent également des simplifications adoptées par le modèle réduit (erreurs d'estimation des paramètres spécifiques, approximation des cinétiques de dégradation, *etc.*). Ces écarts restent malgré tout limités ($\leq 1 \text{ mg.L}^{-1}$) et seuls de très faibles dépassemens de la limite réglementaire (10 mg.L^{-1}) en résultent.

Une comparaison des politiques optimales d'aération obtenues en considérant les mo-

5.1. Détermination des politiques optimales d'aération

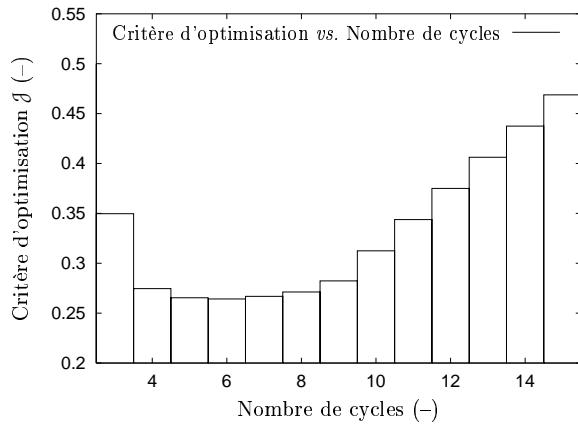


FIG. 5.4 – Influence du nombre de cycles sur le taux moyen minimal d'aération du réacteur.

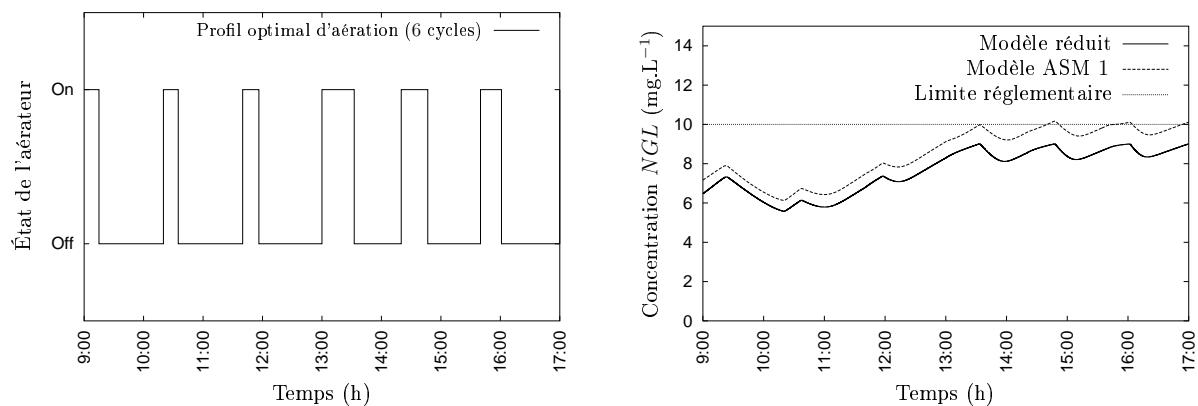


FIG. 5.5 – Profil optimal d'aération pour 6 cycles de fonctionnement (Fig. gauche) et rejets d'azote total correspondants (Fig. droite).

dèles réduit et ASM 1 est présentée sur la Fig. 5.6 (gauche). Contrairement au modèle réduit, l'optimum est atteint avec le modèle ASM 1 pour 8 cycles d'aération. Malgré cette différence, les taux minimaux moyens d'aération sont voisins avec 26.7% pour ce dernier contre 26.4% avec le modèle réduit. Le taux minimal d'aération n'est ainsi que très légèrement sous-estimé par le modèle réduit ; ce résultat est à mettre en parallèle avec le dépassement de la contrainte de rejet (Fig. 5.6 droite).

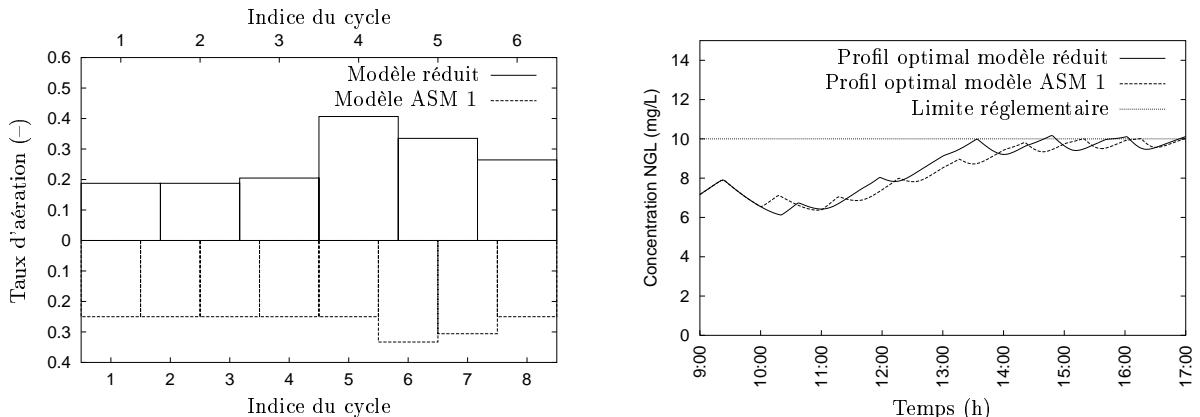


FIG. 5.6 – Comparaison des conditions optimales de fonctionnement relatives aux modèles réduit et ASM 1 : profil optimaux d'aération (Fig. gauche) et rejets d'azote total correspondants (Fig. droite).

Comme précédemment, les résultats obtenus dans ce paragraphe valident clairement l'utilisation du modèle réduit pour le calcul des politiques optimales d'aération, sur des horizons de quelques heures, dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique.

5.1.3 Conclusions

La première partie de ce chapitre concernait le calcul des politiques optimales d'aération au moyen du modèle réduit formulé dans le chapitre 4. Les résultats obtenus indiquent que ce modèle est en mesure de donner des profils optimaux d'aération proches de ceux calculés à partir du modèle ASM 1 sur des horizons de quelques heures. Ils apportent ainsi une validation supplémentaire aux simplifications adoptées.

Dans la perspective de l'implémentation *en ligne* du calcul des politiques optimales d'aération, il est impératif d'étudier la sensibilité de ces conditions optimales de fonctionnement vis-à-vis des erreurs d'estimation commises sur les paramètres, les conditions initiales et les perturbations incidentes du système. Les méthodes permettant de calculer ces sensibilités font l'objet de la partie suivante.

5.2 Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement

L'objectif de cette partie est d'évaluer dans quelle mesure les écarts entre le procédé et le modèle utilisé pour le représenter peuvent affecter les résultats de l'optimisation du

5.2. Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement

système. Pour cela, les sensibilités du critère, des contraintes et des trajectoires du système sont étudiées vis-à-vis des erreurs commises sur les valeurs des paramètres, des conditions initiales et des perturbations incidentes du procédé. Cette analyse est essentielle si l'on souhaite replacer les résultats obtenus dans un contexte de fonctionnement réel, *i.e.* dans le perspective de la commande optimale du procédé en boucle fermée.

5.2.1 Notion de sensibilité

La sensibilité d'une variable par rapport à un paramètre est une grandeur qui caractérise l'influence des variations du paramètre sur la variable. Mathématiquement, cette grandeur correspond à une dérivée partielle. Il est possible de distinguer la sensibilité *absolue* et la sensibilité *relative*.

DÉFINITION 5 (SENSIBILITÉ ABSOLUE - SENSIBILITÉ RELATIVE)

- La sensibilité absolue d'une grandeur z par rapport à une grandeur p est définie comme la dérivée partielle :

$$\frac{\partial z}{\partial p}$$

Cette forme exprime les variations absolues de z consécutives à des variations absolues de p

- La sensibilité relative d'une grandeur z par rapport à une grandeur p est définie comme la dérivée partielle :

$$\frac{\partial \ln z}{\partial \ln p} = \frac{p}{z} \frac{\partial z}{\partial p}$$

Cette forme exprime les variations relatives de z consécutives à des variations relatives de p

- Il est également possible d'exprimer la sensibilité par l'une des deux formes intermédiaires suivantes :

$$p \frac{\partial z}{\partial p} \quad \text{ou} \quad \frac{1}{z} \frac{\partial z}{\partial p}$$

Le calcul des coefficients de sensibilité peut se faire numériquement ou analytiquement. L'approche numérique (*e.g.* Seferlis et Hrymak, 1996; Støren et Hertzberg, 1999) consiste à approximer les dérivées partielles précédentes par des différences finies, le plus souvent des différences centrées. Pour cela, les équations reliant les grandeurs z et p sont résolues pour différentes valeurs des paramètres perturbés autour d'une valeur dite *nominale*. La complexité du calcul dépend de la nature de la variable et du paramètre considérés, ainsi que du type de relations manipulées. Dans le cadre de la commande optimale des procédés, l'approximation de la sensibilité par des différences finies n'est cependant pas bien adaptée. À chaque problème perturbé correspond en effet la résolution d'un TPBVP, ce qui fait qu'une telle méthode de résolution est très coûteuse en temps de calcul.

Une alternative au calcul numérique des sensibilités consiste à développer analytiquement les expressions qui définissent les dérivées partielles précédentes. On distingue deux approches :

- l'approche par différentiation directe (*e.g.* House et al., 1993), qui consiste à exprimer les sensibilités du critère et des contraintes du problème (par rapport aux paramètres) en fonction des sensibilités de l'état et de la commande du système;
- l'approche dérivée du Principe du Maximum (*e.g.* Kriendl, 1972; Evers, 1980; Nikolaou et Manousiouthakis, 1990; House et al., 1993; Fournier et Latifi, 1997), qui permet de calculer les sensibilités en utilisant l'information contenue dans la solution optimale nominale par les variables adjointes et le hamiltonien.

Cette dernière approche est une approche naturelle pour le calcul de la sensibilité de la politique optimale dans la mesure où elle utilise l'information contenue dans les variables du Principe du Maximum. C'est celle qui est appliquée dans le cadre de cette étude.

5.2.2 Position du problème

Soit le problème de commande optimale (5.2) suivant, relatif à l'optimisation dynamique d'un système paramétré discontinu sans contrainte¹ :

$$\min_{\mathbf{u}(t), \mathbf{p}} \mathcal{J} = \mathcal{G}(\mathbf{x}(t_1), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) + \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) dt \quad (5.2a)$$

$$\text{soumis à : } \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}), \forall t \in [t_{i-1}, t_i], i = 1 \dots n_s \quad (5.2b)$$

$$\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0 \quad (5.2c)$$

$$\mathbf{x}(t_i^+) = \mathbf{x}(t_i^-), i = 1 \dots n_s \quad (5.2d)$$

$$s_i(\mathbf{p}, t_i^-) = 0, t_i \in [t_0, t_f], i = 1 \dots n_s \quad (5.2e)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ désigne l'état du système, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$ et $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^\ell$ les vecteurs de commande et des paramètres d'optimisation, et $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^q$ le vecteur des paramètres du modèle. Les fonctions vectorielles $\mathbf{f}^{(i)}$ ($1 \leq i \leq n_s$) et scalaires \mathcal{G} , \mathcal{L} et s_i ($1 \leq i \leq n_s$) sont de classe \mathcal{C}^1 par rapport à l'ensemble des variables du problème. Les n_s instants de commutation t_i sont supposés ordonnés et **explicitement** donnés par les conditions (5.2e), ce qui assure que le problème d'optimisation dynamique est régulier (*cf.* § 2.1, p. 40).

Dans la suite, OCP_n désigne le problème d'optimisation relatif aux conditions nominales de fonctionnement (vecteur de paramètres $\boldsymbol{\theta}_n$ et conditions initiales \mathbf{x}_{0n}) et OCP_p , le problème relatif aux conditions perturbées (vecteur de paramètres $\boldsymbol{\theta}_p = \boldsymbol{\theta}_n + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta}$ et conditions initiales $\mathbf{x}_{0p} = \mathbf{x}_{0n} + \boldsymbol{\delta}\mathbf{x}_0$). De même, les solutions du problème associées aux conditions paramétriques *nominales* sont indiquées n (*e.g.* $\mathbf{u}_n(t)$, \mathbf{p}_n , etc.) et celles relatives aux conditions *perturbées* indiquées p .

Les conditions d'optimalité du problème OCP_n (5.2), *i.e.* lorsque les paramètres du modèle et les conditions initiales sont nominaux, ont déjà été établies dans le chapitre 2 (*cf.* § 2.2.2, p. 46). Le profil $\mathbf{u}_n(t)$ et les paramètres \mathbf{p}_n de commande optimaux sont solutions du système algébro-différentiel aux limites partagées (2.23), dont l'expression

¹Afin de se placer dans un cadre général, le profil de commande $\mathbf{u}(t)$ est ici pris en compte dans l'expression du problème. On rappelle que les problèmes d'optimisation étudiés ne comportent pas de variables de commande de ce type, mais uniquement des paramètres d'optimisation \mathbf{p} (paramètres a^k et ℓ^k).

5.2. Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement

est rappelée ci-dessous :

$$\mathbb{0}_{1 \times m} = \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T}, \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.3a)$$

$$\mathbb{0}_{1 \times \ell} = \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\mathcal{H}_{t_i^-}^{(i)} - \mathcal{H}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \boldsymbol{\sigma}_i^T - \mathcal{H}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^T} dt \quad (5.3b)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T}, \quad \forall t \in (t_{i-1}^+, t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.3c)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_{n_s}^-) = \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_{n_s}^-} \quad (5.3d)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) + \left. \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \right|_{t_i^-}, \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.3e)$$

où les fonctionnelles $\mathcal{H}^{(i)}$ (hamiltoniens) sont définies par :

$$\mathcal{H}^{(i)}(\mathbf{x}_n, \boldsymbol{\lambda}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{p}_n, \boldsymbol{\theta}_n) = \mathcal{L}(\mathbf{x}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{p}_n, \boldsymbol{\theta}_n) + \boldsymbol{\lambda}_n^T \cdot \mathbf{f}^{(i)}(\mathbf{x}_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{p}_n, \boldsymbol{\theta}_n) \quad (5.4)$$

et les vecteurs $\boldsymbol{\sigma}_i$ par :

$$\boldsymbol{\sigma}_i = \left[\left(\frac{\partial s_i}{\partial t} \Big|_{t_i^-} \right)^{-1} \frac{\partial s_i}{\partial \mathbf{p}^T} \Big|_{\mathbf{p}_n} \right]^T \quad (5.5)$$

Lorsque le problème d'optimisation dynamique comporte des contraintes, une façon de procéder consiste à exprimer chaque contrainte $j = 1, \dots, r$ sous une forme canonique, notée \mathcal{J}_j , similaire à celle du critère d'optimisation (5.2a) :

$$\mathcal{J}_j = \mathcal{G}_j(\mathbf{x}(t_1), \dots, \mathbf{x}(t_{n_s}), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) + \int_{t_0}^{t_f} \mathcal{L}_j(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) dt \quad (5.6)$$

Ces transformations ont déjà été précisées pour les différents types de contraintes (*cf.* § 2.2.3, p. 50). Elles permettent d'associer à chaque contrainte $j = 1 \dots r$, un vecteur $\boldsymbol{\lambda}_j$ de variables adjointes, des fonctionnelles \mathcal{G}_j et \mathcal{L}_j , et des hamiltoniens $\mathcal{H}_j^{(i)}$. Si l'on désigne les grandeurs relatives au critère d'optimisation par l'indice $j = 0$, et si l'on définit les variables et fonctionnelles augmentées :

$$\boldsymbol{\lambda} = \boldsymbol{\lambda}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \boldsymbol{\lambda}_j \quad (5.7a)$$

$$\mathcal{G} = \mathcal{G}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \mathcal{G}_j \quad (5.7b)$$

$$\mathcal{H}^{(i)} = \mathcal{H}_0^{(i)} + \sum_{j=1}^r \nu_j \mathcal{H}_j^{(i)}, \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.7c)$$

où les coefficients ν_j ($j = 1, \dots, r$) correspondent aux multiplicateurs de Lagrange et de Kuhn-Tucker optimaux associés à la solution optimale nominale du problème OCP_n , alors les conditions d'optimalité du problème sous contraintes sont données par des relations équivalentes aux conditions (5.3) précédentes, auxquelles se rajoutent les relations :

$$\nu_j \mathcal{J}_j = 0, \quad j = 1 \dots r \quad (5.8)$$

avec $\nu_j \geq 0$ (resp. $\nu_j \leq 0$) lorsqu'il s'agit de contraintes d'inégalité $\mathcal{J}_j \leq 0$ (resp. $\mathcal{J}_j \geq 0$).

Il existe deux manières d'analyser l'influence des perturbations sur le critère, les contraintes et les trajectoires du système. On peut en effet considérer :

- (i) Le cas où la commande et les paramètres optimaux *nominaux* $\mathbf{u}_n(t)$ et \mathbf{p}_n sont utilisés comme solution du problème *perturbé* OCP_p . Il s'agit alors d'intégrer un problème aux conditions initiales (IVP, *initial value problem*) (*e.g.* Nikolaou et Manousiouthakis, 1990; Fournier et Latifi, 1997). D'un point de vue pratique, ce cas illustre la prédiction des résultats optimaux si la solution optimale idéale était appliquée au procédé perturbé.
- (ii) Le cas où la commande et les paramètres optimaux *perturbés* $\mathbf{u}_p(t)$ et \mathbf{p}_p sont utilisés comme solution du problème *perturbé* OCP_p . Il est alors nécessaire de résoudre un TPBVP du type (5.3). Ce cas illustre ainsi le *décalage* des conditions optimales lorsque celles-ci sont relatives au procédé réel et non plus au procédé modélisé.

Ces deux cas de figure sont détaillés dans la suite.

5.2.3 Système perturbé en conditions optimales nominales

L'étude du système perturbé en conditions optimales nominales permet d'évaluer l'influence des erreurs d'estimation commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle mathématique lorsque les politiques optimales nominales sont appliquées. La sensibilité du critère d'optimisation et des contraintes du problème vis-à-vis de ces incertitudes est présentée dans un premier temps ; la sensibilité des trajectoires d'état du système est ensuite étudiée.

Sensibilité du critère d'optimisation et des contraintes du problème

La sensibilité de la politique optimale vis-à-vis des perturbations est étudiée à travers l'influence des erreurs des paramètres et conditions initiales du modèle sur le critère d'optimisation. Cette grandeur est en effet le seul élément qui permette de caractériser la solution optimale du problème. Des indices $S_0^{\theta_k}$ et $S_0^{x_{0l}}$ de déviation sont définis. Ils représentent les variations relatives du critère perturbé \mathcal{J}_{0p} par rapport au critère nominal \mathcal{J}_{0n} :

$$S_0^{\theta_k} = \frac{\mathcal{J}_{0p}(\theta_{kp}) - \mathcal{J}_{0n}(\theta_{kn})}{\mathcal{J}_{0n}(\theta_{kn})}, \quad k = 1 \dots q \quad (5.9a)$$

$$S_0^{x_{0l}} = \frac{\mathcal{J}_{0p}(x_{0lp}) - \mathcal{J}_{0n}(x_{0ln})}{\mathcal{J}_{0n}(x_{0ln})}, \quad l = 1 \dots n \quad (5.9b)$$

D'autre part et de toute évidence, la présence de contraintes a une influence importante sur les résultats optimaux. L'analyse de leur sensibilité est donc indispensable. Les contraintes actives étant nulles dans les conditions optimales nominales ($\mathcal{J}_{jn}(\mathbf{x}_{0n}, \boldsymbol{\theta}_n) = 0$), normer le

5.2. Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement

dépassement des contraintes par \mathcal{J}_{j_n} n'a pas de sens. En revanche, il est possible d'exprimer ces écarts au moyen d'indices \mathcal{S}_j définis par :

$$\mathcal{S}_j^{\theta_k} = \frac{\nu_j \mathcal{J}_{j_p}(\theta_{kp})}{\mathcal{J}_{0n}(\theta_{kn})}, \quad j \in \mathcal{I}_{act}, \quad k = 1 \dots q \quad (5.10)$$

$$\mathcal{S}_j^{x_{0k}} = \frac{\nu_j \mathcal{J}_{j_p}(x_{0lp})}{\mathcal{J}_{0n}(x_{0ln})}, \quad j \in \mathcal{I}_{act}, \quad l = 1 \dots n \quad (5.11)$$

où $\mathcal{I}_{act} \subset [1, r]$ désigne l'ensemble des contraintes actives du problème dans les conditions optimales nominales de fonctionnement. Une autre façon d'exprimer la sensibilité d'une contrainte intégrale consiste à considérer le dépassement maximal au cours de l'opération (violation de la contrainte).

La définition des indices \mathcal{S}_0 et \mathcal{S}_j fournit les écarts normalisés des grandeurs correspondantes, en fonction des incertitudes sur les paramètres et les conditions initiales. Les perturbations $\Delta\boldsymbol{\theta}$ et $\Delta\mathbf{x}_0$ sont également normalisées en les exprimant au moyen de relations du type $\Delta\boldsymbol{\theta} = \varepsilon\boldsymbol{\theta}_n$ et $\Delta\mathbf{x}_0 = \varepsilon\mathbf{x}_{0n}$. La sensibilité relative des indices d'optimalité est ainsi définie par la pente des courbes $\mathcal{S}_0(\varepsilon)$ et $\mathcal{S}_j(\varepsilon)$ lorsque $\varepsilon \rightarrow 0$.

La sensibilité relative du critère du problème en présence de perturbations sur les paramètres et les conditions initiales du modèle peut aussi être estimée de façon plus analytique, en considérant le développement au premier ordre des variations du critère au voisinage des conditions optimales nominales :

$$\delta\mathcal{J}_0 = \mathcal{J}_{0p}(\mathbf{x}_{0n} + \boldsymbol{\delta}\mathbf{x}_0, \boldsymbol{\theta}_n + \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta}) - \mathcal{J}_{0n}(\mathbf{x}_{0n}, \boldsymbol{\theta}_n) \approx \frac{\partial\mathcal{J}_0}{\partial\boldsymbol{\theta}^T} \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta} + \frac{\partial\mathcal{J}_0}{\partial\mathbf{x}_0^T} \boldsymbol{\delta}\mathbf{x}_0 \quad (5.12)$$

Le calcul des variations $\delta\mathcal{J}$ du critère d'optimisation lorsque les paramètres $\boldsymbol{\theta}$ et les conditions initiales \mathbf{x}_0 du modèle sont perturbés est en tous points similaire à celui des variations du critère en conditions nominales. On montre que l'effet de ces perturbations sur le critère d'optimisation s'exprime sous la forme :

$$\delta\mathcal{J}_0 = \boldsymbol{\lambda}^T \Big|_{t_0^+} \cdot \boldsymbol{\delta}\mathbf{x}_0 + \frac{\partial\mathcal{G}_0}{\partial\boldsymbol{\theta}^T} \Big|_{(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})_n} \cdot \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta} + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial\mathcal{H}_0^{(i)}}{\partial\boldsymbol{\theta}^T} \Big|_{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})_n} \cdot \boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta} dt \quad (5.13)$$

L'expression des coefficients de sensibilité $\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{R}^q$ et $\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{\mathbf{x}_0} \in \mathbb{R}^n$ respectivement relatifs aux paramètres et aux conditions initiales du modèle est alors immédiate :

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{\theta_k} = \left[\frac{\partial\mathcal{G}_0}{\partial\theta_k} \Big|_{(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})_n} + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial\mathcal{H}_0^{(i)}}{\partial\theta_k} \Big|_{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})_n} dt \right], \quad k = 1 \dots q \quad (5.14a)$$

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{x_{0l}} = \lambda_l^T \Big|_{t_0^+}, \quad l = 1 \dots n \quad (5.14b)$$

Dans le cadre d'un problème d'optimisation sous contraintes, les variations des contraintes \mathcal{J}_j ($j \in \mathcal{I}_{act}$) vis-à-vis des perturbations $\boldsymbol{\delta}\boldsymbol{\theta}$ et $\boldsymbol{\delta}\mathbf{x}_0$ s'expriment sous une forme équivalente à (5.13) ; les coefficients de sensibilité des contraintes sont donnés par :

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_j}^{\theta_k} = \left[\frac{\partial\mathcal{G}_j}{\partial\theta_k} \Big|_{(\mathbf{x}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}_n)} + \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \frac{\partial\mathcal{H}_j^{(i)}}{\partial\theta_k} \Big|_{(\mathbf{x}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta})_n} dt \right], \quad j \in \mathcal{I}_{act}, \quad k = 1 \dots q \quad (5.15a)$$

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_j}^{x_{0l}} = \lambda_{jl}^T \Big|_{t_0^+}, \quad j \in \mathcal{I}_{act}, \quad l = 1 \dots n \quad (5.15b)$$

Sensibilité des trajectoires d'état du système

L'analyse de la sensibilité du critère et des contraintes du problème permet de caractériser l'influence des erreurs d'estimation de l'état initial et des paramètres sur la valeur de ces fonctions en fin d'opération. Ni le critère d'optimisation, ni les contraintes, ne constituent cependant des grandeurs caractéristiques du système en cours d'opération. D'un point de vue pratique, la sensibilité de la commande et des trajectoires d'état du système apparaît plus intéressante.

Il s'agit de déterminer la sensibilité de ces trajectoires lorsque le système perturbé est soumis à la politique optimale nominale $\mathbf{u}_n(t)$, \mathbf{p}_n . On définit pour le système considéré, les fonctions de sensibilité $s_x^\theta(t) \in \mathbb{R}^{n \times q}$ et $s_x^{\mathbf{x}_0}(t) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ respectivement relatives à l'influence des paramètres θ et des conditions initiales \mathbf{x}_0 sur la trajectoire $\mathbf{x}(t)$:

$$s_x^\theta(t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \theta^T} \quad \text{et} \quad s_x^{\mathbf{x}_0}(t) = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_0^T} \quad (5.16)$$

Les équations donnant les sensibilités $s_x^\theta(t)$ et $s_x^{\mathbf{x}_0}(t)$ en conditions optimales nominales résultent de la différentiation directe du système d'état discontinu (5.2b)–(5.2e) par rapport aux perturbations :

- Sensibilité de l'état par rapport aux paramètres θ :

$$\dot{s}_x^\theta = \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot s_x^\theta + \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \theta^T}, \quad \forall t \in (t_{i-1}^+, t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.17)$$

- Sensibilité de l'état par rapport aux conditions initiales \mathbf{x}_0 :

$$\dot{s}_x^{\mathbf{x}_0} = \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot s_x^{\mathbf{x}_0}, \quad \forall t \in (t_{i-1}^+, t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.18)$$

De façon similaire, les conditions de continuité des sensibilités $s_x^\theta(t)$ et $s_x^{\mathbf{x}_0}(t)$ aux instants de commutation t_i , s'obtiennent par la différentiation directe de celles de l'état en ces mêmes instants :

- Sensibilité de l'état par rapport aux paramètres θ :

$$s_x^\theta(t_0^+) = \mathbb{0}_{n \times q} \quad (5.19a)$$

$$s_x^\theta(t_i^+) = s_x^\theta(t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.19b)$$

- Sensibilité de l'état par rapport aux conditions initiales \mathbf{x}_0 :

$$s_x^{\mathbf{x}_0}(t_0^+) = \mathbb{1}_{n \times n} \quad (5.20a)$$

$$s_x^{\mathbf{x}_0}(t_i^+) = s_x^{\mathbf{x}_0}(t_i^-), \quad i = 1 \dots n_s \quad (5.20b)$$

La résolution de ce système permet de déterminer les périodes durant lesquelles les trajectoires d'état sont les plus sensibles aux perturbations d'un paramètre ou d'une condition initiale donné du système, et peuvent donc entraîner les écarts les plus importants par rapport aux conditions optimales nominales de fonctionnement.

5.2.4 Système perturbé en conditions optimales perturbées

Les développements précédents permettent d'obtenir les sensibilités du critère d'optimisation, des contraintes et des trajectoires d'état du système vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle dans des conditions optimales nominales de fonctionnement. Toutefois, il n'est pas possible en procédant ainsi d'estimer la sensibilité des profils et des paramètres optimaux de commande, ni même l'influence des contraintes sur le critère d'optimisation du problème. Il est nécessaire pour cela de considérer les conditions optimales relatives au fonctionnement **perturbé** du procédé.

Le calcul des conditions optimales perturbées peut être envisagé de façon simple en calculant les sensibilités par différences finies et en définissant des indices $S_0^{\theta_k}$ et $S_0^{x_0}$ analogues à (5.9a) et (5.9b). Cette approche nécessite cependant de résoudre le problème d'optimisation (5.2) pour chaque paramètre perturbé, et induit donc des temps de calcul importants, notamment lorsque le nombre de paramètres est conséquent. D'autre part, les coefficients et fonctions de sensibilité résultants peuvent présenter un défaut de précision. Une alternative au calcul numérique des conditions optimales perturbées de fonctionnement consiste à différentier les conditions d'optimalité au premier ordre données par le TPBVP (5.3). Cette approche est détaillée ci-après.

Les fonctions de sensibilité $s_z^\theta(t)$ et $s_z^{x_0}(t)$ représentent respectivement l'influence des paramètres θ et des conditions initiales x_0 sur la trajectoire $z(t)$:

$$s_z^\theta(t) = \frac{\partial z}{\partial \theta^T} \quad \text{et} \quad s_z^{x_0}(t) = \frac{\partial z}{\partial x_0^T} \quad (5.21a)$$

Dans le cas présent, les trajectoires $z(t)$ considérées sont celles des variables $x(t)$, $\lambda(t)$ et $u(t)$. D'autre part, les coefficients de sensibilité s_p^θ et $s_p^{x_0}$ correspondent respectivement aux sensibilités des paramètres p d'optimisation par rapport aux paramètres θ et aux conditions initiales x_0 du modèle :

$$s_p^\theta = \frac{\partial p}{\partial \theta^T} \quad \text{et} \quad s_p^{x_0} = \frac{\partial p}{\partial x_0^T} \quad (5.21b)$$

Les équations de sensibilité des variables d'état x , des variables adjointes λ et de la commande u s'obtiennent par la différentiation des conditions algébro-différentielles d'optimalité du problème par rapport aux paramètres θ et aux conditions initiales x_0 considérés :

$$\dot{s}_z^\theta = \left(\frac{\partial \dot{z}}{\partial \theta} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial z}{\partial \theta} \right) = \frac{\partial \dot{z}}{\partial \theta} \quad (5.22a)$$

$$\dot{s}_z^{x_0} = \left(\frac{\partial \dot{z}}{\partial x_0} \right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial z}{\partial x_0} \right) = \frac{\partial \dot{z}}{\partial x_0} \quad (5.22b)$$

On s'intéresse dans un premier temps au cas du système différentiel paramétré discontinu sans contrainte (2.16). La différentiation des conditions d'optimalité conduit à :

- Sensibilité de la condition d'optimalité de la commande $\mathbf{u}(t)$:

$$\begin{aligned} \mathbb{0}_{m \times q} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\theta} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \end{aligned} \quad (5.23a)$$

$$\mathbb{0}_{m \times n} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\mathbf{x}_0} \quad (5.23b)$$

- Sensibilité de la condition d'optimalité des paramètres de commande \mathbf{p} :

$$\begin{aligned} \mathbb{0}_{\ell \times q} &= \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T \partial \mathbf{p}} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^2} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} + \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T \partial \mathbf{p}} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} \right]_{t_i^-} \\ &\quad - \sum_{i=1}^{n_s-1} \left(\mathcal{H}_{t_i^-}^{(i)} - \mathcal{H}_{t_i^+}^{(i+1)} \right) \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_i}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} - \mathcal{H}_{t_{n_s}^-}^{(n_s)} \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}_{n_s}}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} - \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\theta} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} \right) + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} - \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} \right) \right]_{t_i^-} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s-1} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\theta} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} - \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} \right) \right]_{t_i^+} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \\ &\quad + \sum_{k=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left[\frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T \partial \mathbf{p}} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p}^2} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\theta} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{x}} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} + \frac{\partial^2 \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{p} \partial \boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} \right] dt \end{aligned} \quad (5.24a)$$

$$\begin{aligned} \mathbb{0}_{\ell \times n} &= \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^2} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} + \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T \partial \mathbf{p}} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} \right]_{t_i^-} - \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\mathbf{x}_0} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} \right) + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathbf{x}_0} - \frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} \right) \right]_{t_i^-} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \\ &\quad + \sum_{i=1}^{n_s-1} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \cdot \left(\mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathbf{x}_0} - \frac{\partial \mathcal{H}^{(i+1)}}{\partial \mathbf{x}} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} \right) \right]_{t_i^+} \cdot \boldsymbol{\sigma}_i \end{aligned} \quad (5.24b)$$

- Sensibilité du système d'état :

$$\dot{\mathbb{s}}_{\mathbf{x}}^{\theta} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\theta} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\theta} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \quad (5.25a)$$

$$\dot{\mathbb{s}}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \boldsymbol{\lambda}} \right] \cdot \mathbb{s}_{\mathbf{u}}^{\mathbf{x}_0} \quad (5.25b)$$

5.2. Analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement

- Sensibilité du système adjoint :

$$\dot{\$}_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\mathbf{x}}^{\theta} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\mathbf{u}}^{\theta} \quad (5.26a)$$

$$-\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right]$$

$$\dot{\$}_{\boldsymbol{\lambda}}^{x_0} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\mathbf{x}}^{x_0} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\lambda}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\boldsymbol{\lambda}}^{x_0} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}^T} \left[\frac{\partial \mathcal{H}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}} \right] \cdot \$_{\mathbf{u}}^{x_0} \quad (5.26b)$$

- Conditions initiales et de continuité des sensibilités de l'état :

$$\$_{\mathbf{x}}^{\theta}(t_0^+) = \mathbb{0}_{n \times q} \quad (5.27a)$$

$$\$_{\mathbf{x}}^{\theta}(t_i^+) = \$_{\mathbf{x}}^{\theta}(t_i^-) + \left(\mathbf{f}^{(i)} \Big|_{t_i^-} - \mathbf{f}^{(i+1)} \Big|_{t_i^+} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \$_{\mathbf{p}}^{\theta} \quad (5.27b)$$

$$\$_{\mathbf{x}}^{x_0}(t_0^+) = \mathbb{1}_{n \times n} \quad (5.27c)$$

$$\$_{\mathbf{x}}^{x_0}(t_i^+) = \$_{\mathbf{x}}^{x_0}(t_i^-) + \left(\mathbf{f}^{(i)} \Big|_{t_i^-} - \mathbf{f}^{(i+1)} \Big|_{t_i^+} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \$_{\mathbf{p}}^{x_0} \quad (5.27d)$$

- Conditions initiales et de continuité des sensibilités de l'adjoint :

$$\$_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta}(t_{n_s}^-) = \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^2} \cdot \$_{\mathbf{x}}^{\theta} \Big|_{t_{n_s}^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}^-} \cdot \$_{\mathbf{p}}^{\theta} \quad (5.28a)$$

$$\$_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta}(t_i^-) = \$_{\boldsymbol{\lambda}}^{\theta}(t_i^+) + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \boldsymbol{\theta} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^2} \cdot \$_{\mathbf{x}}^{\theta} \Big|_{t_i^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} \cdot \$_{\mathbf{p}}^{\theta} \quad (5.28b)$$

$$\left(\boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^+} \right)^T \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \$_{\mathbf{p}}^{\theta}$$

$$\$_{\boldsymbol{\lambda}}^{x_0}(t_{n_s}^-) = \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^2} \cdot \$_{\mathbf{x}}^{x_0} \Big|_{t_{n_s}^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_{n_s}^-} \cdot \$_{\mathbf{p}}^{x_0} \quad (5.28c)$$

$$\$_{\boldsymbol{\lambda}}^{x_0}(t_i^-) = \$_{\boldsymbol{\lambda}}^{x_0}(t_i^+) + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^2} \cdot \$_{\mathbf{x}}^{x_0} \Big|_{t_i^-} + \frac{\partial^2 \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} \cdot \$_{\mathbf{p}}^{x_0} \quad (5.28d)$$

$$\left(\boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^-} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(i)}}{\partial \mathbf{x}^T} \Big|_{t_i^+} \right)^T \cdot \boldsymbol{\sigma}_i^T \cdot \$_{\mathbf{p}}^{x_0}$$

Dans le cas où le système est soumis à des contraintes, les équations de sensibilité sont identiques à celles établies précédemment, avec les contraintes exprimées sous la forme canonique (5.6) et les variables adjointes $\boldsymbol{\lambda}$, la fonctionnelle \mathcal{G} et les hamiltoniens $\mathcal{H}^{(i)}$ étendus respectivement définis par les relations (5.7a), (5.7b) et (5.7c). Remarquons que ces vecteurs et fonctionnelles étendus dépendent des multiplicateurs de Lagrange ν_j , qui eux-mêmes varient en fonction des paramètres et conditions initiales du modèle. De nouveaux coefficients de sensibilité $\$_{\boldsymbol{\nu}}^{\theta}$ et $\$_{\boldsymbol{\nu}}^{x_0}$ apparaissent donc dans les relations du système algébro-différentiel (5.23)–(5.28) :

$$\$_{\boldsymbol{\nu}}^{\theta} = \frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad \text{et} \quad \$_{\boldsymbol{\nu}}^{x_0} = \frac{\partial \boldsymbol{\nu}}{\partial \mathbf{x}_0^T} \quad (5.29)$$

Chapitre 5. Analyse de la sensibilité du modèle réduit

Il s'agit donc d'ajouter au système (5.23)–(5.28), des relations complémentaires pour les déterminer :

$$\sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{x}}^{\boldsymbol{\theta}} \Big|_{t_i} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{p}}^{\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} = \mathbf{0}_{1 \times q} \quad \text{si } j \in \mathcal{I}_{\text{act}} \quad (5.30\text{a})$$

$$\mathbf{s}_{\nu_j}^{\boldsymbol{\theta}} = \mathbf{0}_{1 \times q} \quad \text{si } j \in [1, r] \setminus \mathcal{I}_{\text{act}} \quad (5.30\text{b})$$

$$\sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{x}}^{\mathbf{x}_0} \Big|_{t_i} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbf{s}_{\mathbf{p}}^{\mathbf{x}_0} + \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} = \mathbf{0}_{1 \times n} \quad \text{si } j \in \mathcal{I}_{\text{act}} \quad (5.31\text{a})$$

$$\mathbf{s}_{\nu_j}^{\mathbf{x}_0} = \mathbf{0}_{1 \times n} \quad \text{si } j \in [1, r] \setminus \mathcal{I}_{\text{act}} \quad (5.31\text{b})$$

Précisons que l'analyse de la sensibilité des trajectoires adjointes ne présente qu'un intérêt très limité dans la mesure où elle n'est pas aussi facilement exploitable que la sensibilité des trajectoires d'état et de la commande.

L'analyse de la sensibilité des trajectoires optimales consiste à résoudre un système algébro-différentiel **discontinu linéaire** aux conditions aux limites partagées. Contrairement à Eaton et Rawlings (1990) qui présentent une analyse similaire dans le cas d'une commande paramétrée, le résolution du TPBVP est ici envisagée dans sa forme continue. Les coefficients de sensibilité $\mathbf{s}_{\mathbf{p}}$ apparaissent cependant dans les conditions de continuité des équations de sensibilité de l'état (5.27) et adjointes (5.28). Il n'est donc pas possible de résoudre directement le TPBVP en intégrant les équations de sensibilité de l'état et en stockant les résultats afin de les réutiliser lors de l'intégration à rebours des équations de sensibilité adjointes (méthode utilisée pour le calcul des gradients du critère et des contraintes des problème d'optimisation, cf. § 3.2.3, p. 69). Le recours à des méthodes de résolution itératives est nécessaire.

La méthode adoptée consiste à résoudre le TPBVP au moyen d'un algorithme itératif basé sur la méthode hybride de Powell¹. Les estimations successives des coefficients de sensibilité $\mathbf{s}_{\mathbf{p}}$ et \mathbf{s}_{ν} permettent d'intégrer les équations de sensibilité de l'état (5.25) et adjointes (5.26) dans leurs sens *propres*, à partir de leurs conditions initiales (5.27) et terminales (5.28) respectives : la stabilité de l'intégration numérique est ainsi garantie. La sensibilité $\mathbf{s}_{\mathbf{u}}(t)$ du profil de commande est explicitement donnée par les relations (5.23) en fonction des sensibilités $\mathbf{s}_{\mathbf{x}}(t)$ et $\mathbf{s}_{\lambda}(t)$ des trajectoires d'état et adjointes. Typiquement, la convergence de cette méthode est rapide, en quelques itérations seulement.

À partir des coefficients et des fonctions de sensibilité, le calcul des coefficients de sensibilité du critère d'optimisation \mathcal{J}_0 en conditions optimales perturbées résulte de la

¹Le code de calcul DNSQ de la librairie SLATEC, disponible sur le site web <http://gams.nist.gov/> est ici utilisé.

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

différentiation directe de la relation (5.2a) :

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{\theta_k} = \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{x}}^{\theta_k} \right]_{t_i^-} + \frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{p}}^{\theta_k} + \frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \theta_k} \quad (5.32a)$$

$$+ \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{x}}^{\theta_k} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{u}}^{\theta_k} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{p}}^{\theta_k} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta_k} \right] dt + \mathcal{L}|_{t_{n_s}^-} \cdot \boldsymbol{\sigma}_{n_s}^T \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{p}}^{\theta_k}$$

$$\mathbb{S}_{\mathcal{J}_0}^{x_{0l}} = \sum_{i=1}^{n_s} \left[\frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{x}}^{x_{0l}} \right]_{t_i^-} + \frac{\partial \mathcal{G}_0}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{p}}^{x_{0l}} \quad (5.32b)$$

$$+ \sum_{i=1}^{n_s} \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{x}}^{x_{0l}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{u}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{u}}^{x_{0l}} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{p}^T} \cdot \mathbb{S}_{\mathbf{p}}^{x_{0l}} \right] dt$$

Les coefficients de sensibilité du critère tiennent compte de deux contributions. La première correspond directement à la variation de la valeur du critère en raison des incertitudes ; la seconde traduit l'effet de la modification des conditions optimales de fonctionnement sur la valeur du critère d'optimisation.

5.2.5 Conclusions

L'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement est une étude préalable indispensable à la mise en œuvre de la commande optimale en boucle fermée du procédé. Elle permet de déterminer l'influence des écarts entre le procédé réel et le modèle nominal utilisé pour calculer les conditions optimales. Deux approches ont été présentées dans cette partie. La première permet d'évaluer la sensibilité du système perturbé en conditions optimales nominales, *i.e.* d'estimer l'influence des incertitudes sur les paramètres et les conditions initiales du modèle dynamique sur le critère, les contraintes et les trajectoires d'état du système lorsque la commande optimale nominale est appliquée. La seconde s'intéresse au système perturbé en conditions optimales perturbées. Il s'agit dans ce cas d'évaluer dans quelle mesure ces mêmes incertitudes affectent les conditions optimales de fonctionnement du système (commande optimale et critère d'optimisation notamment).

L'application de ces approches au cas des petites stations d'épuration à boues activées fait l'objet de la partie suivante.

5.3 Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

L'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement des petites stations d'épuration à boues activées est présentée dans cette partie. L'application est ici effectuée pour les deux politiques optimales calculées avec le modèle réduit dans la première partie de ce chapitre (§ 5.1). Le cas de la minimisation des rejets d'azote total et de la consommation énergétique de l'aérateur sont traités successivement.

5.3.1 Cas de la minimisation des rejets d'azote total

Les conditions optimales de fonctionnement relatives au problème de minimisation des rejets d'azote total ont été détaillées dans le paragraphe 5.1.1, pour un horizon d'optimisation de 8 heures et en utilisant les paramètres identifiés dans le chapitre 4. Les résultats de l'analyse de la sensibilité de ces conditions optimales sont présentés ci-dessous.

Sensibilité du critère et des contraintes.

La sensibilité du critère et des contraintes du problème (1.36) de minimisation des rejets d'azote total est étudiée, dans un premier temps, en fonction des incertitudes sur les paramètres et les conditions initiales du modèle lorsque la commande optimale nominale \mathbf{p}_n (paramètre d'optimisation a_n^k et ℓ_n^k) est appliquée (système perturbé en conditions optimales nominales). Le critère d'optimisation dépend de l'état du système et est donc influencé par ces incertitudes. Les coefficients de sensibilité relative correspondants sont donnés sur la Fig. 5.7. Ces coefficients permettent de détecter quels paramètres et/ou conditions initiales du modèle réduit ont une forte incidence sur les conditions optimales de fonctionnement du procédé. On rappelle qu'une valeur de l'ordre de 0.1, par exemple, indique qu'une erreur de 10% sur le paramètre correspondant peut induire une déviation du critère d'optimisation d'environ 1%.

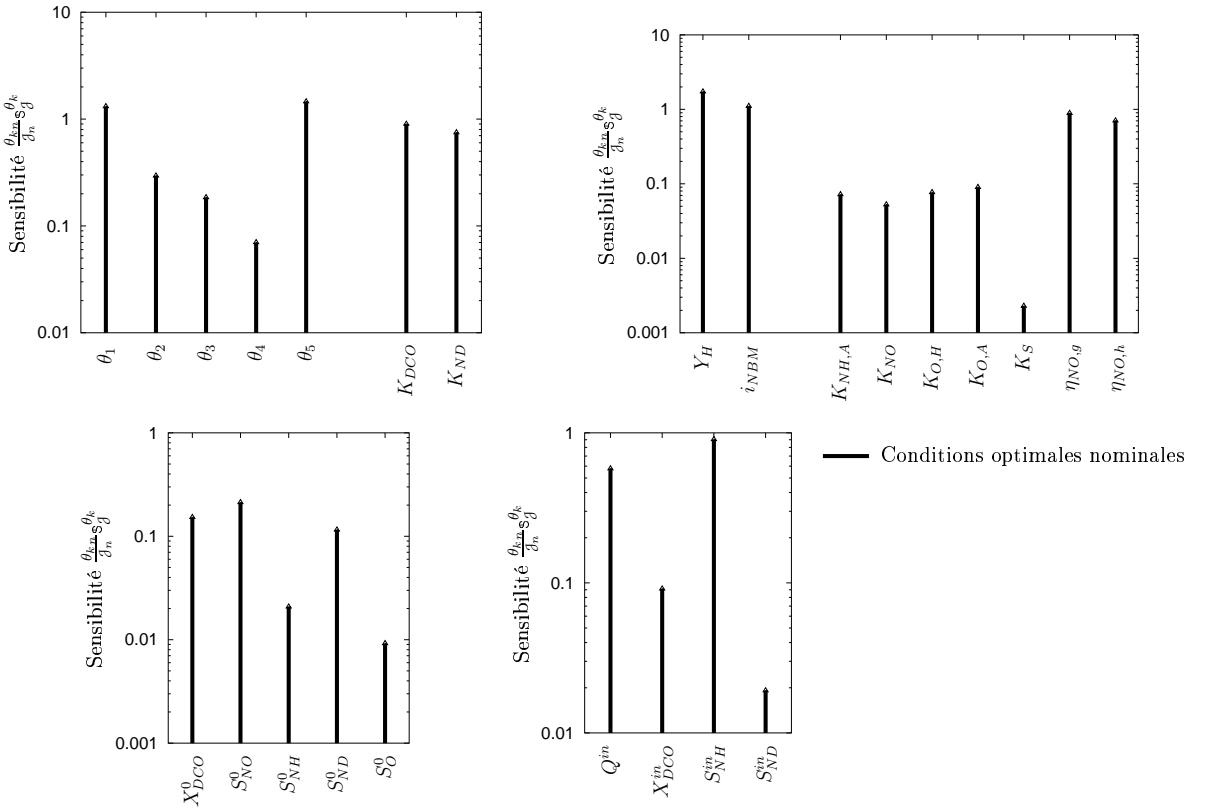


FIG. 5.7 – Sensibilité du critère de minimisation des rejets d'azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.

- La figure supérieure gauche montre que les paramètres spécifiques θ_1 , θ_5 , K_{DCO} , K_{ND} et, dans une moindre mesure, θ_2 et θ_3 ont un effet notable sur le critère d'optimisation.

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

sation du problème. Ces résultats confirment en particulier l'influence des composés organiques sur le comportement dynamique du système. Parmi les paramètres cinétiques et stoichiométriques issus du modèle ASM 1 d'autre part, seuls Y_H , i_{NBM} , $\eta_{NO,h}$ et $\eta_{NO,g}$ apparaissent influents (Fig. supérieure droite). On peut rappeler à ce propos que Y_H et i_{NBM} avaient déjà été détectés dans le cadre de l'identification paramétrique du modèle réduit en raison de leur forte sensibilité (*cf.* § 4.3.4, p. 141). Par ailleurs, le fait que $\eta_{NO,h}$ et $\eta_{NO,g}$ affectent directement les taux d'hydrolyse et de dénitrification en conditions d'anoxie justifie que ces paramètres soient influents.

- Les incertitudes relatives au débit Q^{in} et à la concentration en ammoniacal S_{NH}^{in} incidents peuvent aussi induire de forte variations du critère d'optimisation (Fig. inférieure droite). Remarquons que la forte sensibilité de ces perturbations sur le comportement dynamique du système avait également pu être établie dans le cadre de l'identification paramétrique du modèle réduit.
- En dernier lieu, l'analyse de la sensibilité des conditions initiales du modèle montre qu'aucune des 5 concentrations n'a en revanche de forte influence sur le critère d'optimisation du problème (Fig. inférieure gauche). Les variables d'état du modèle réduit évoluent rapidement dans le réacteur et les erreurs d'estimation des conditions initiales s'estompent rapidement. Comme les coefficients de sensibilité du critère tiennent compte de l'ensemble de l'opération, les valeurs des coefficients de sensibilité sont donc faibles.

L'étude du système en conditions optimales perturbées donne des résultats proches de ceux obtenus en considérant les conditions nominales de fonctionnement (Fig. 5.7). Ce constat n'est pas surprenant dans la mesure où les contraintes de fonctionnement du problème (1.36) ne dépendent que des paramètres d'optimisation. Ces contraintes sont par conséquent respectées dans les conditions de fonctionnement aussi bien nominales que perturbées du système, quelles que soient les perturbations. Elles ne contribuent donc pas aux variations du critère d'optimisation dans les conditions perturbées.

L'étude des indices $S_0^{\theta_k}$ et $S_0^{x_{0l}}$ de déviation du critère d'optimisation pour des erreurs relatives variant entre -50% et +50% dans les conditions optimales nominales et perturbées confirme que les conditions optimales de fonctionnement sont très sensibles aux erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du système. En revanche, la écarts entre ces deux indices restent limités, même lorsque ces erreurs sont importantes. Ce propos est illustré sur la Fig. 5.8 pour le paramètre θ_1 .

Sensibilité des profils d'état et de commande

L'analyse de la sensibilité du critère présentée dans le paragraphe précédent permet de caractériser l'influence des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle dynamique de manière globale, *i.e.* sur l'ensemble de l'horizon d'opération du système. D'un point de vue pratique, l'étude de la sensibilité des trajectoires d'état et du profil optimal de commande permet de localiser les périodes de l'opération durant lesquelles ces erreurs ont le plus d'influence et apparaît donc plus intéressante. Elle permet en outre de focaliser l'attention sur l'élément du système qui le mérite.

La sensibilité relative des trajectoires d'état optimales est étudiée à travers la sensibilité

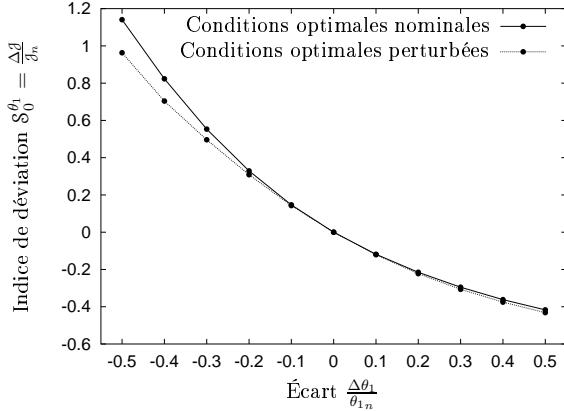


FIG. 5.8 – Comparaison des écarts relatifs du critère d’optimisation vis-à-vis de l’erreur sur le paramètre θ_1 pour le système perturbé en conditions optimales nominales et perturbées.

du profil de concentration en *NGL*. Ces fonctions de sensibilité sont représentées sur la Fig. 5.9, en conditions optimales nominales de fonctionnement, pour les paramètres les plus influents du modèle réduit (*cf.* paragraphe précédent). Compte tenu du fait que la sensibilité du critère J d’optimisation correspond à l’intégrale de ces profils de sensibilité, *e.g.*

$$s_J^{\theta_k} = \frac{1}{t_f - t_0} \int_{t_0}^{t_f} [s_{S_{NO}}^{\theta_k}(t) + s_{S_{NH}}^{\theta_k}(t) + s_{S_{ND}}^{\theta_k}(t)] dt, \quad (5.33)$$

il est en effet naturel que les paramètres les plus influents vis-à-vis du critère le soient également vis-à-vis du profil de concentration *NGL*(t).

- De manière générale, la sensibilité relative du profil de concentration en *NGL* par rapport aux paramètres du modèle réduit croît régulièrement en fonction du temps. À mesure que le temps augmente, l’effet de l’erreur de commise sur les paramètres se cumule et les trajectoires nominales et perturbées du système s’écartent en effet de plus en plus. Ceci justifie que les conditions optimales de fonctionnement du système perturbé devient progressivement de celles du système nominal.
- Les fonctions de sensibilité du profil d’azote total par rapport aux conditions initiales du modèle évoluent de façon très différente (Fig. inférieure droite). Ces sensibilités sont élevées en début d’opération et diminuent ensuite régulièrement jusqu’à l’instant final. Ce comportement résulte de l’évolution rapide des composés correspondants dans le réacteur. Il permet également d’expliquer que les coefficients de sensibilité du critère d’optimisation par rapport aux conditions initiales du modèle soient faibles sur l’ensemble de l’opération.

D’autre part, la comparaison des trajectoires de sensibilité de l’état relatives à des conditions optimales nominales et perturbées de fonctionnement donne de faibles différences pour l’ensemble des paramètres et conditions initiales du modèle. Ces écarts sont illustrés sur la Fig. 5.10 (gauche) pour le profil de concentration en *NGL* par rapport au paramètre θ_1 . Les coefficients de sensibilité $s_{a^i}^{\theta_1}$ des paramètres d’optimisation sont également représentés (Fig. 5.10 droite).

Au cours des deux premiers cycles d’aération, les durées minimales d’aération sont atteintes ($a^1 = a^2 = t_{\min}^{\text{on}}$) et les coefficients de sensibilité s_{a^1} et s_{a^2} des paramètres d’op-

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

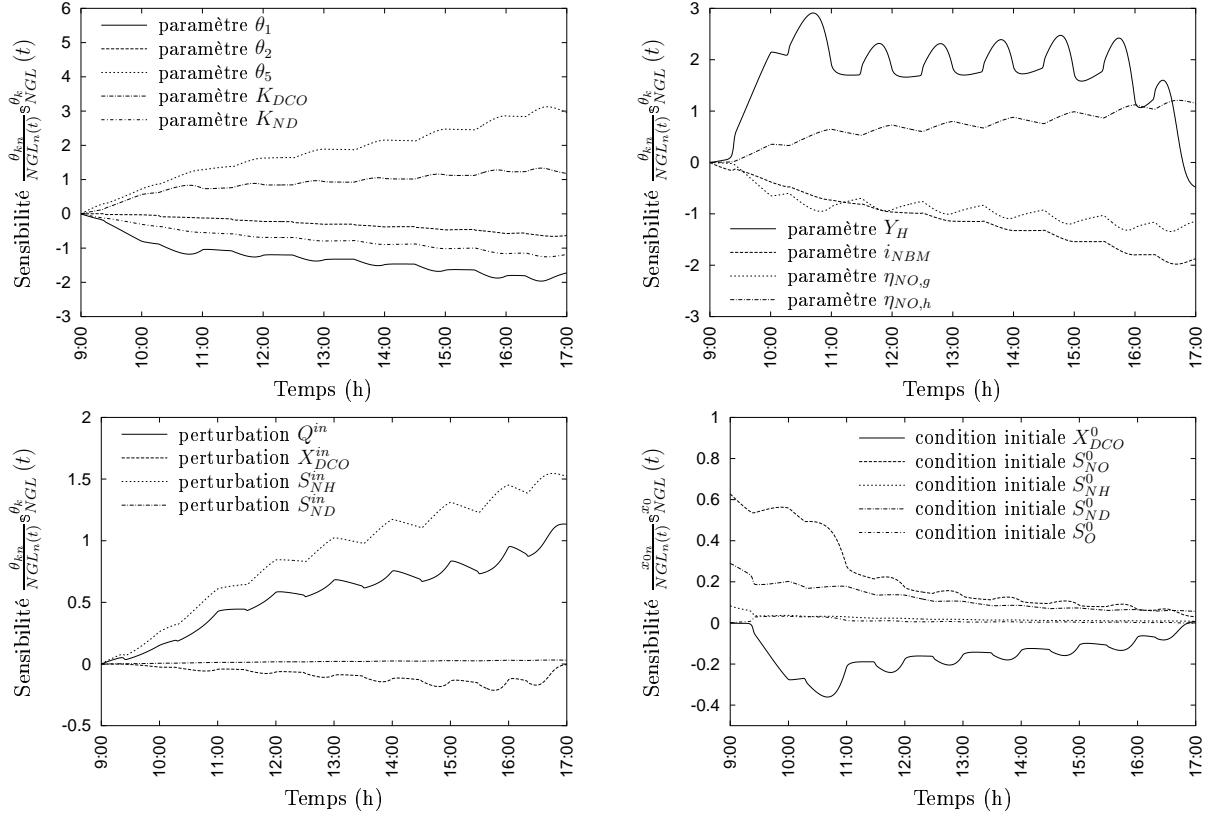


FIG. 5.9 – Sensibilité du profil de concentration en azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit en conditions optimales nominales.

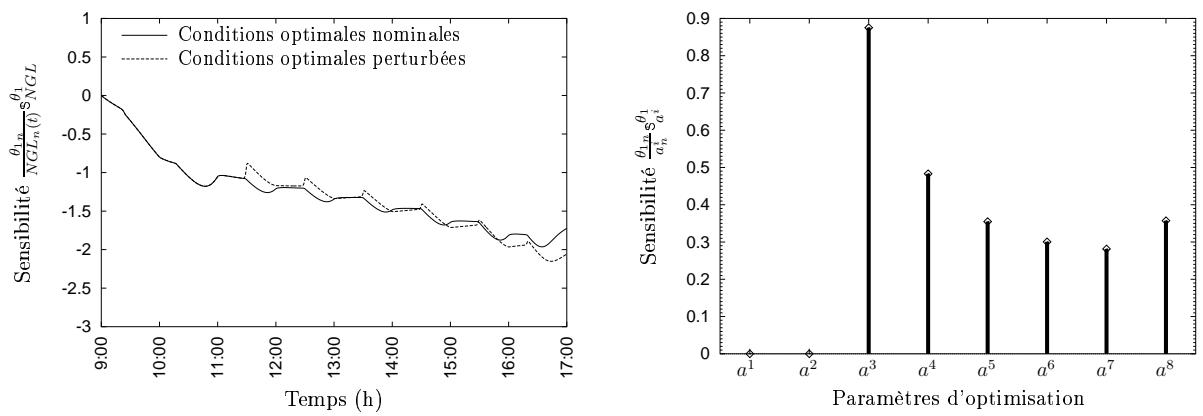


FIG. 5.10 – Sensibilité du profil de concentration en azote total et des paramètres d'optimisation par rapport au paramètre θ_1 .

timisation correspondants sont nuls. Les deux profils de sensibilité de l'état sont donc confondus jusqu'à l'instant de commutation t_b^3 du 3^{ème} cycle et ne se distinguent qu'au cours des cycles d'aération suivants. On rappelle que les équations de sensibilité sont en effet identiques dans les deux cas :

$$\left. \begin{array}{l} \dot{s}_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k}(t) = \frac{\partial \boldsymbol{f}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \boldsymbol{f}^{(1)}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \cdot s_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k} \quad \text{si } t \in [t_c^{k-1+}, t_b^{k-}] \\ \dot{s}_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k}(t) = \frac{\partial \boldsymbol{f}^{(2)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \boldsymbol{f}^{(2)}}{\partial \boldsymbol{x}^T} \cdot s_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k} \quad \text{si } t \in [t_b^{k+}, t_c^{k-}] \end{array} \right\} \quad k = 1 \dots N_c, \quad (5.34a)$$

et que seules les conditions de continuité diffèrent aux instants de commutation t_b^k . En conditions optimales nominales de fonctionnement, les trajectoires de sensibilité de l'état sont continues. En conditions optimales perturbées, elles présentent des discontinuités du fait de la prise en compte des coefficients de sensibilité $s_{\boldsymbol{\theta}}$ des paramètres d'optimisation :

$$s_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k}(t_b^{k+}) = s_{\boldsymbol{x}}^{\theta_k}(t_b^{k-}) + \left(\boldsymbol{f}^{(1)} \Big|_{t_b^{k-}} - \boldsymbol{f}^{(2)} \Big|_{t_b^{k+}} \right) \cdot s_{a^k}^{\theta_k} \quad (5.34b)$$

Les sensibilités des paramètres d'optimisation vis-à-vis des paramètres et des conditions initiales du modèle réduit sont données sur la Fig. 5.11. Pour des raisons de commodité, seule la sensibilité maximale des paramètres d'optimisation y est représentée, *e.g.*

$$\max_{i=1 \dots N_c} \left\{ |s_{a^i}^{\theta_k}| \right\}.$$

Pour la plupart des paramètres et conditions initiales du modèle, le paramètre d'optimisation le plus sensible est a^3 (Fig. 5.10 droite). Ce paramètre correspond au cycle durant lequel les charges incidentes reçues par l'unité de traitement sont les plus importantes, *i.e.* lorsque l'intensité d'aération est la plus élevée. Ce résultat confirme l'idée reçue selon laquelle les profils optimaux d'aération sont très sensibles aux fortes perturbations incidentes du procédé.

Les paramètres qui influent le plus sur le profil optimal d'aération du réacteur sont globalement similaires à ceux détectés précédemment par l'analyse de la sensibilité du critère d'optimisation (Fig. 5.7) et du profil de rejet d'azote total (Fig. 5.9). Il est également intéressant de remarquer que de nombreux paramètres et conditions initiales influents du modèle sont relatifs à l'évolution des composés organiques dans le réacteur ($\theta_1, \theta_5, Y_H, \eta_{NO,g}, X_{DCO}^{in}$ et X_{DCO}^0). Cette sensibilité montre l'importance du rôle joué par ces composés dans les processus de dégradation de l'azote et illustre parfaitement les forts couplages qui existent entre les différentes espèces chimiques dans les stations d'épuration à boues activées.

Conclusions

Les résultats de l'analyse de la sensibilité du critère, des trajectoires d'état et du profil d'aération sont cohérents et montrent que de nombreux paramètres et conditions initiales du modèle influent, dans une large mesure, sur les conditions optimales de fonctionnement du procédé. Néanmoins, il a pu être vérifié que l'application des conditions nominales au système perturbé n'occasionne que de faibles écarts par rapport aux conditions optimales perturbées, et ce du moment que les erreurs commises restent limitées. Ces résultats conduisent à aborder la mise en œuvre de la commande optimale du procédé

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

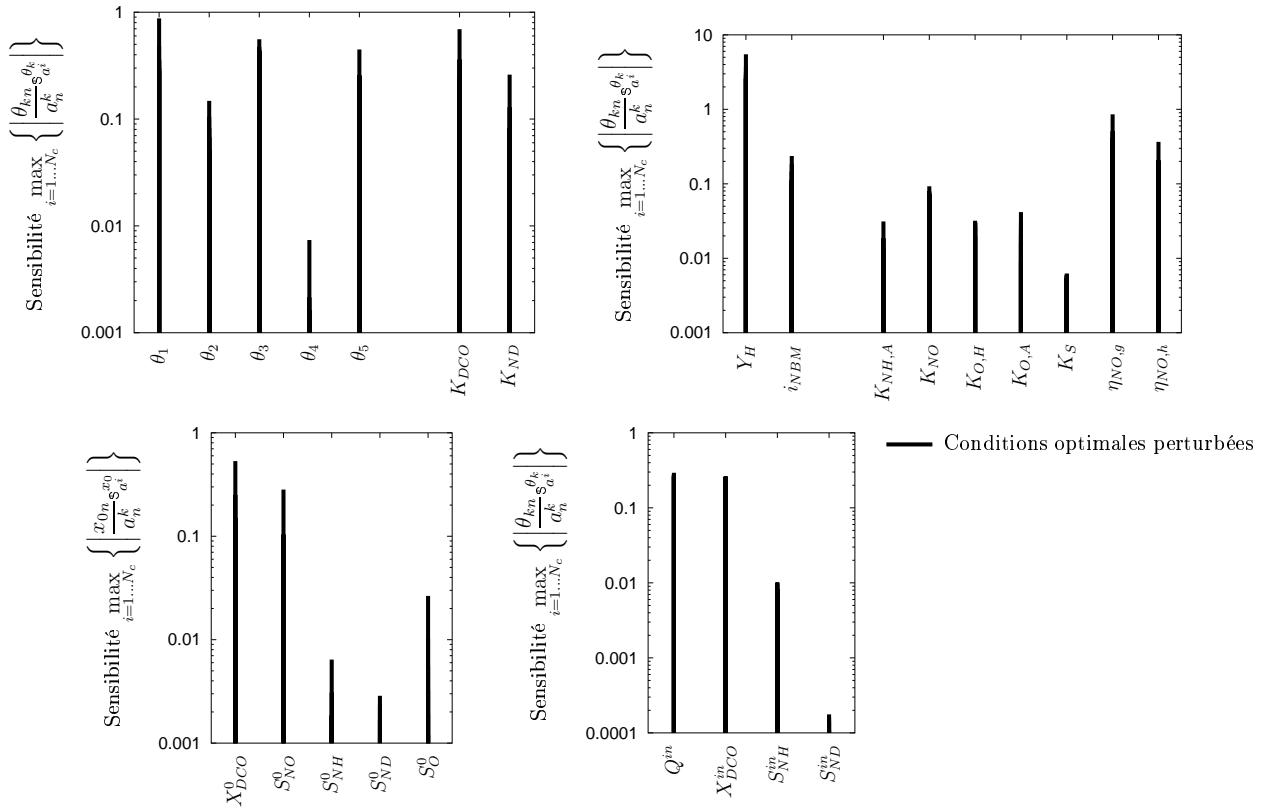


FIG. 5.11 – Sensibilité des paramètres d'optimisation vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.

dans des conditions très encourageantes. On peut cependant préciser d'ores et déjà que les performances de la commande optimale du procédé en boucle fermée seront largement conditionnées par la précision des estimations *en ligne* de l'état et des paramètres du modèle.

Une analyse similaire est menée dans le paragraphe suivant pour le problème de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur.

5.3.2 Cas de la minimisation de la consommation énergétique

L'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement relatives au problème (1.36) de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur fait l'objet de ce paragraphe. Les conditions optimales ont été préalablement calculées dans le paragraphe 5.1.2 sur un horizon de 8 heures et en considérant les paramètres identifiés dans le chapitre 4. Comme précédemment, l'analyse de la sensibilité du critère et des contraintes est d'abord effectuée ; la sensibilité des trajectoires d'état et du profil d'aération est ensuite présentée.

Sensibilité du critère et des contraintes

Le problème de minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur est décrit par le système d'équations (1.36). Le critère d'optimisation et les contraintes de fonctionnement de ce système ne dépendent pas des variables d'état du modèle. Sous des conditions optimales nominales de fonctionnement, ces grandeurs ne sont donc pas influencées par les erreurs commises sur les valeurs des paramètres et des conditions initiales du modèle réduit. En revanche, ces erreurs influent directement sur les contraintes de rejet (actives) du problème.

L'analyse de la sensibilité du système perturbé en conditions optimales perturbées permet de quantifier l'influence des contraintes du problème sur le critère d'optimisation. Le coefficient de sensibilité du critère résulte de plusieurs contributions :

$$\delta \bar{\mathcal{J}} = \delta \mathcal{J}_0 + \sum_{j=1}^r \nu_j \delta \mathcal{J}_j \quad (5.35)$$

- la variation propre du critère d'optimisation $\delta \mathcal{J}_0$ est nulle dans ce cas, puisque celui-ci ne dépend que des paramètres d'optimisation ;
- les variations induites par les contraintes de fonctionnement du système sont également nulles, puisqu'elles ne dépendent pas non plus de l'état du système ;
- seule la contribution relative à la contrainte de rejet en azote total du problème engendre donc des variations du critère d'optimisation.

Ainsi, la sensibilité du critère d'optimisation en conditions optimales perturbées s'exprime simplement sous la forme suivante¹ :

$$\begin{cases} \$_{\mathcal{J}_0}^{\theta_k} &= \nu_{NGL} \$_{\mathcal{J}_{NGL}}^{\theta_k} \\ \$_{\mathcal{J}_0}^{x_0} &= \nu_{NGL} \$_{\mathcal{J}_{NGL}}^{x_0} \end{cases} \quad (5.36)$$

¹On rappelle qu'il s'agit ici de la seule contrainte d'état active du problème.

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

où l'indice NGL fait référence à la contrainte de rejet en azote total. La comparaison des sensibilités calculées en conditions optimales nominales et perturbées permet de vérifier ces relations.

Les coefficients de sensibilité du critère d'optimisation sont donnés sur la Fig. 5.12. La comparaison de ces valeurs avec celles relatives au problème de minimisation des rejets d'azote total (*cf.* Fig. 5.7) permet de vérifier que les ordres de grandeur des coefficients de sensibilité sont globalement similaires dans les deux cas. Ce sont à nouveau les paramètres spécifiques θ_1 , θ_5 , K_{DCO} et K_{ND} (ainsi que θ_2 dans une moindre mesure) d'une part, et les paramètres cinétiques et stœchiométriques Y_H , i_{NBM} , $\eta_{NO,g}$ et $\eta_{NO,h}$ d'autre part, qui apparaissent les plus influents. Les incertitudes sur le débit Q^{in} et la concentration S_{NH}^{in} incidents peuvent également induire de larges variations du critère d'optimisation ; les coefficients de sensibilité correspondants indiquent d'ailleurs que ces perturbations sont plus influentes vis-à-vis du problème de consommation énergétique que du problème de minimisation des rejets. Les coefficients de sensibilités relatifs aux conditions initiales du modèle réduit sont en revanche faibles et du même ordre de grandeur dans les deux cas.

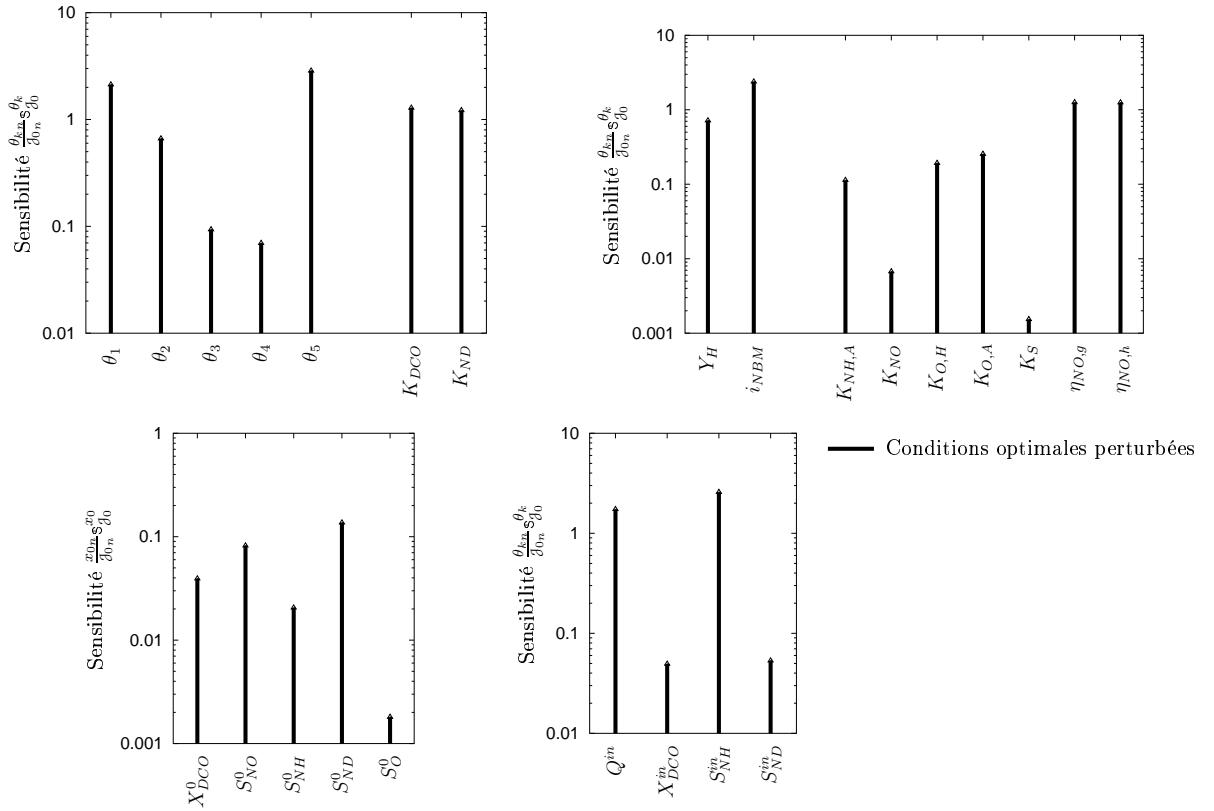


FIG. 5.12 – Sensibilité du critère de minimisation de la consommation énergétique vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.

Les valeurs élevées de certains coefficients de sensibilité confirment clairement la très forte influence de la contrainte de rejet d'azote total sur les conditions optimales de fonctionnement du procédé. Lorsque le système est perturbé, les conditions optimales de fonctionnement s'écartent sensiblement des conditions nominales. Ces différences sont illustrées sur la Fig. 5.13 pour le paramètre θ_1 . Des résultats analogues sont obtenus pour l'ensemble des paramètres influents du modèle réduit. La Fig. 5.13 gauche représente le dépassement maximal de la contrainte de rejet d'azote total en fonction de l'erreur commise. Une erreur

de 5% seulement sur la valeur de θ_1 peut induire un dépassement de la contrainte de plus de 0.3 mg.L^{-1} (soit une concentration maximale de 9.3 mg.L^{-1}). Cet écart par rapport à la limite réglementaire apparaît d'ailleurs proportionnel à l'erreur commise. D'autre part, la Fig. 5.13 droite montre qu'une augmentation supérieure à 10% du taux d'aération est nécessaire pour éviter ce dépassement.

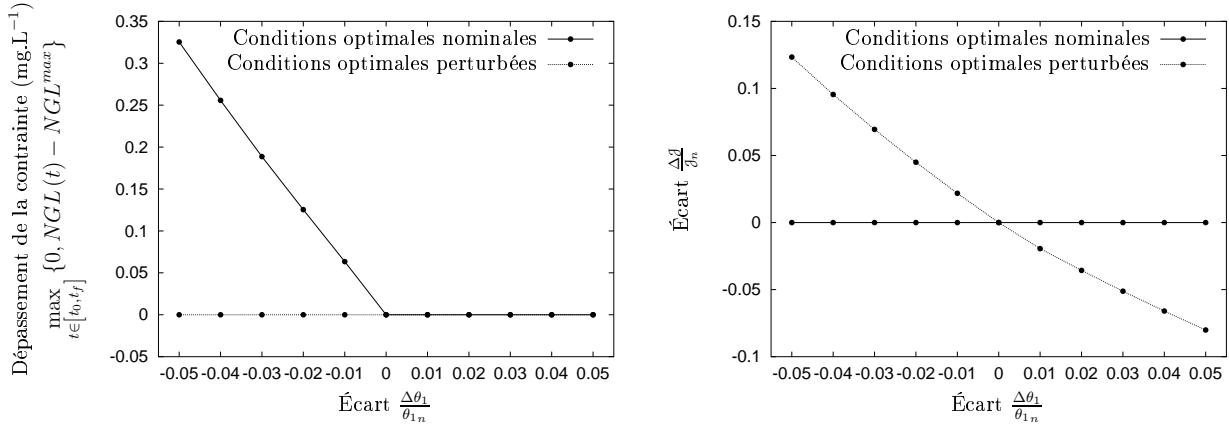


FIG. 5.13 – Comparaison des écarts relatifs de la contrainte de rejet d'azote total (Fig. gauche) et du critère d'optimisation (Fig. droite) vis-à-vis de l'erreur sur le paramètre θ_1 pour le système perturbé en conditions optimales nominales et perturbées.

Sensibilité des profils d'état et de commande

La sensibilité des trajectoires d'état et du profil d'aération est étudiée dans ce paragraphe, de manière à localiser les périodes de l'opération durant lesquelles les erreurs sur les paramètres et les conditions initiales du modèle ont le plus d'influence. L'évolution des fonctions de sensibilité des rejets $NGL(t)$ en conditions optimales nominales de fonctionnement est proche de celle obtenue dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total (*cf.* Fig 5.9) : (*i*) la sensibilité par rapport aux paramètres du modèle réduit augmente progressivement au cours de l'opération, et (*ii*) la sensibilité vis-à-vis des conditions initiales est maximale en début d'opération et diminue ensuite régulièrement jusqu'à la fin de l'horizon. Ces résultats ne sont pas présentés ici en raison de ces similitudes.

Les fonctions de sensibilité de ces mêmes trajectoires en conditions optimales perturbées sont plus intéressantes. Contrairement au problème de minimisation des rejets d'azote total, ces fonctions diffèrent sensiblement de celles obtenues en conditions optimales nominales. Cette différence est illustrée sur la Fig. 5.14 (gauche) pour le paramètre θ_1 . Les raisons de ces écarts ont déjà été précisées ; ils résultent de la prise en compte ou pas des coefficients de sensibilité s_p des paramètres d'optimisation dans les conditions de continuité de équations de sensibilité (*cf.* § 5.3.1). Les fortes valeurs des coefficients s_p (Fig. 5.14 droite) justifient que les écarts observés entre les deux fonctions de sensibilité des rejets d'azote total soient conséquents.

Pour la plupart des paramètres et des conditions initiales du modèle réduit, les fonctions de sensibilité sont alternativement positives et négatives selon les périodes de fonctionnement et d'arrêt du système d'aération (Fig 5.15). Cette alternance s'explique par la diversité des mécanismes de dégradation mis en jeu dans le réacteur. Pour l'illustrer, le cas du

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

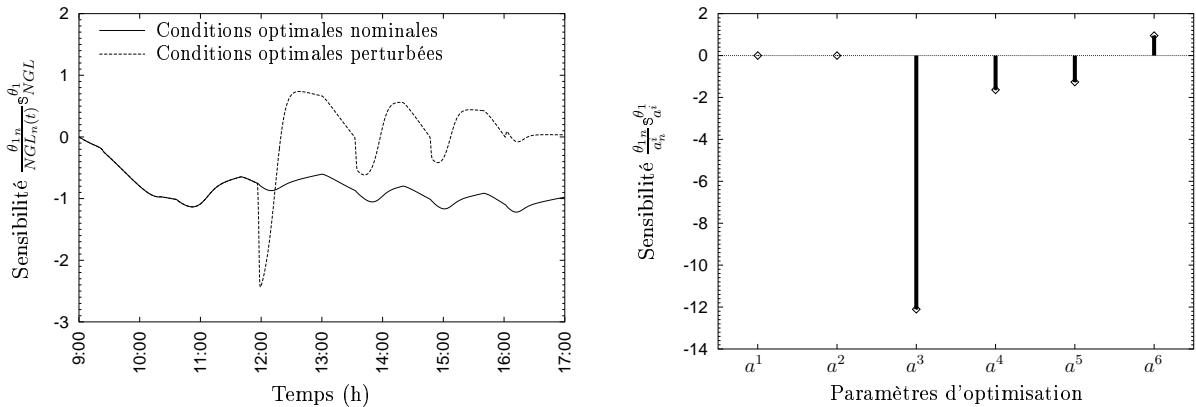


FIG. 5.14 – Sensibilité du profil de concentration en azote total et des paramètres d'optimisation par rapport au paramètre θ_1 .

paramètre θ_1 est à nouveau considéré. Durant les phases d'aérobiose, la dégradation des matières organiques est en compétition avec le processus de nitrification du point de vue de la disponibilité en oxygène dissous dans le réacteur (coefficient de sensibilité négatif) ; au cours des périodes d'anoxie en revanche, le processus de dénitrification est favorisé par la présence des composés organiques biodégradables (coefficient de sensibilité positif).

La sensibilité des paramètres d'optimisation a^k est donnée sur la Fig. 5.16. À nouveau, seuls les coefficients de sensibilité maximaux sont représentés pour des raisons de commodité. Dans la plupart des cas, c'est le paramètre relatif au 3^{ème} cycle d'aération qui présente la plus forte sensibilité (*e.g.* Fig. 5.14 droite). Ce résultat montre, comme pour le problème de minimisation des rejets, que le profil optimal d'aération est très sensible durant les périodes où la charge incidente est élevée. On peut remarquer d'autre part, que les coefficients de sensibilité relatifs aux paramètres les plus influents du modèle réduit sont ici particulièrement importants, avec des valeurs parfois supérieures à 10. La présence d'incertitudes, même faibles, sur la valeur de certains paramètres d'optimisation peut ainsi modifier sensiblement les conditions optimales de fonctionnement du procédé.

Conclusions

Les résultats obtenus au terme de l'analyse de sensibilité apparaissent moins concluants que pour le problème de minimisation des rejets d'azote total. Si les coefficients et fonctions de sensibilité du critère d'optimisation et des trajectoires d'état présentent des valeurs comparables dans les deux cas, la politique optimale d'aération apparaît en revanche beaucoup plus sensible aux erreurs commises sur certains paramètres et conditions initiales du modèle. Les perturbations incidentes influencent également notablement le profil d'aération. Une mauvaise estimation en ligne de l'état et des paramètres du système est donc susceptible de dégrader notablement le bénéfice de l'optimisation. Ceci pourrait notamment se traduire par la sous-estimation des besoins d'aération du réacteur lors de la mise en œuvre de la commande optimale du procédé, et occasionner de larges dépassements des normes de rejet. Il s'agira par conséquent d'y être particulièrement attentif.

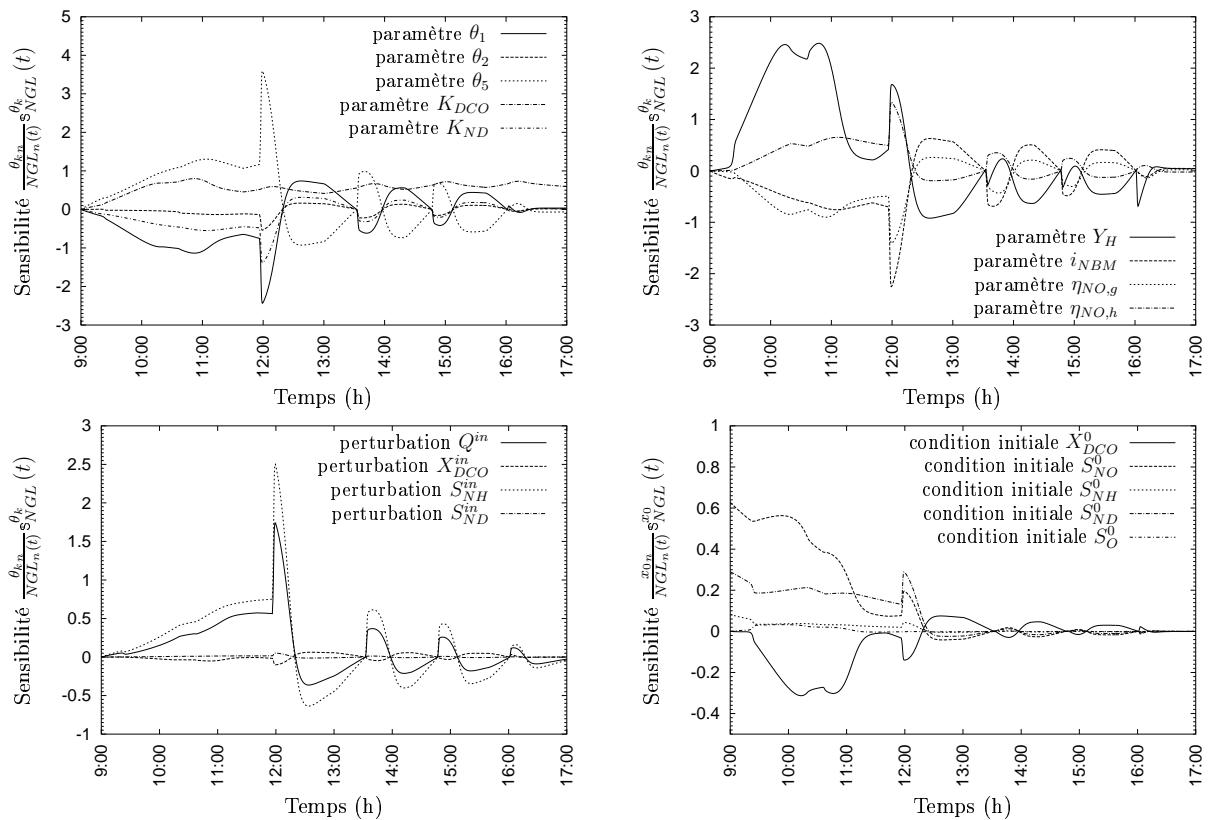


FIG. 5.15 – Sensibilité du profil de concentration en azote total vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.

5.3. Détermination de la sensibilité des politiques optimales d'aération

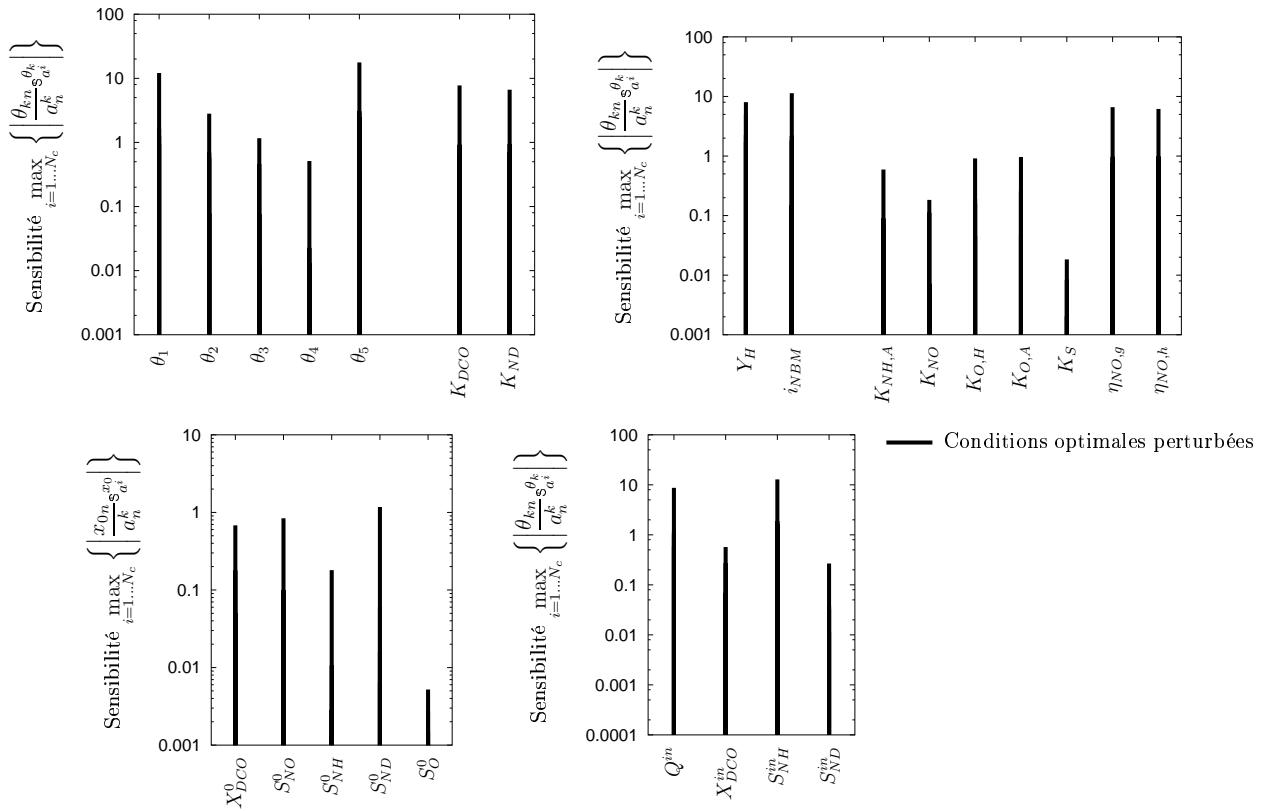


FIG. 5.16 – Sensibilité des paramètres d'optimisation vis-à-vis des erreurs commises sur les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit.

5.4 Conclusions

L'analyse de la sensibilité du modèle réduit apporte de nombreux résultats très intéressants pour une meilleure connaissance du fonctionnement optimal des petites stations d'épuration à boues activées. Certains de ces résultats ne sont que la confirmation d'idées admises, à juste titre, comme la forte sensibilité du système durant les périodes de surcharge. D'autres sont souvent intuitifs et cette analyse permet à la fois de les préciser et de les quantifier. Enfin, ce type d'analyse permet de mettre en évidence des résultats qui sont difficilement accessibles, même intuitivement, comme ceux relatifs à la sensibilité des profils optimaux d'aération en conditions optimales perturbées.

Une autre approche qu'il aurait été intéressant d'appliquer consiste à déterminer, pour chaque paramètre et condition initiale, le domaine fermé autour du profil optimal d'aération à l'intérieur duquel les écarts vis-à-vis de la valeur nominale du critère restent inférieurs à une tolérance donnée. Il deviendrait ainsi possible d'évaluer directement la précision avec laquelle les conditions initiales et les paramètres du modèle doivent être connus. La difficulté d'une telle approche réside cependant dans la formulation du problème d'optimisation correspondant et peu de résultats ont été proposés jusqu'à présent dans ce sens (*e.g.* Eaton et Rawlings, 1990).

Pour le problème de minimisation des rejets d'azote total, l'analyse de la sensibilité du critère, des trajectoires d'état et du profil d'aération montre que l'utilisation de la solution *nominale* ne dégrade pas de façon importante le bénéfice apporté par l'optimisation. Ces résultats sont encourageants pour la mise en œuvre de la commande optimale du procédé. Les résultats obtenus dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique sont en revanche moins probants. Ils indiquent que les conditions optimales de fonctionnement du procédé, et notamment le profil optimal d'aération du réacteur, sont fortement sensibles aux erreurs commises sur les paramètres, les perturbations incidentes et les conditions initiales du modèle réduit. Des erreurs d'estimations, même faibles, pourraient avoir d'importantes répercussions sur le comportement dynamique du procédé. Il conviendra donc d'y être particulièrement attentif dans le cadre de la commande optimale en *boucle fermée*.

Pour la mise en œuvre de ce type de schéma de commande, il est nécessaire de connaître l'état du système de manière à calculer les politiques optimales d'aération du réacteur. Certaines variables d'état ne sont cependant pas toujours mesurables *en ligne*. En raison de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement du système aux erreurs sur les conditions initiales du modèle, il est impératif d'utiliser un observateur d'état chargé d'estimer ces états à partir des mesures disponibles sur l'unité. D'autre part, certains paramètres, comme les paramètres spécifiques et les perturbations incidentes, sont susceptibles de varier temporellement. Lorsque ces paramètres sont influents, il devient également nécessaire de les estimer en ligne. La pertinence des politiques optimales d'aération calculées *en ligne* est ainsi directement conditionnée par la précision de l'observateur d'état et de l'estimation paramétrique. Ces aspects font l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 6

Vers la commande optimale du procédé

La totalité est plus que la somme des parties

Métaphysique
ARISTOTE

Dans tout ce qui a été fait jusqu'à présent, les algorithmes d'optimisation considérés supposent que les valeurs des variables d'état qui caractérisent le procédé sont instantanément accessibles et que les valeurs des paramètres sont connues précisément. En pratique cependant, la mesure *en ligne* de certaines variables est fastidieuse et très coûteuse, voire même impossible, et les incertitudes vis-à-vis des paramètres et des perturbations incidentes sont souvent importantes. Par ailleurs, l'analyse de sensibilité menée dans le chapitre précédent montre que les conditions optimales de fonctionnement du procédé sont fortement influencées par ces incertitudes, tant du point de vue de la minimisation des rejets d'azote que de la minimisation de la consommation énergétique. Dans ce contexte, la mise en œuvre d'un schéma de commande en *boucle fermée* du procédé apparaît indispensable.

L'objectif de ce chapitre n'est pas d'étudier de façon exhaustive les aspects relatifs à l'implémentation numérique du problème de commande optimale. Dans cette perspective, il s'agit ici de proposer une méthodologie qui permette de mettre en œuvre ce type de commande.

Pour l'application des schémas de commande en *boucle fermée*, la connaissance des variables d'état du procédé est essentielle. Ceci est d'autant plus vrai en commande optimale, puisque les variables d'état sont utilisées au sein d'un problème d'optimisation dynamique ; il est donc impératif de les connaître précisément sous peine d'optimiser un système irréaliste. Or toutes les variables d'état que comporte le modèle réduit (*cf.* chapitre 4) ne sont pas accessibles, bien que la taille de ce dernier soit nettement plus faible que celle des modèles utilisés pour le calcul *hors ligne* des profils optimaux d'aération (*cf.* Partie I). Pour pallier le manque de mesures, il est nécessaire d'avoir recours à des algorithmes d'estimation *en ligne* de l'état, appelés observateurs (ou encore capteurs logiciels). Ces derniers utilisent un modèle de connaissance du procédé et des mesures issues de capteurs physiques afin d'estimer les variables d'état qui ne sont pas accessibles. Les

Chapitre 6. Vers la commande optimale du procédé

aspects relatifs à l'utilisation de ce type d'algorithmes pour estimer l'état des petites stations d'épuration à boues activées sont présentés dans la partie 6.1.

Les simplifications apportées au modèle ASM 1 lors de l'élaboration du modèle réduit ont nécessité la définition de nouveaux paramètres susceptibles de varier temporellement. L'analyse de la sensibilité du modèle réduit montre, d'autre part, que certains paramètres influent fortement sur les conditions optimales de fonctionnement du procédé et peuvent modifier sensiblement les conditions optimales de fonctionnement du système. Il s'agit donc de pouvoir estimer en ligne ces paramètres (ainsi que les perturbations incidentes lorsqu'elles ne sont pas mesurées), conjointement à l'état du système, sous peine de calculer des politiques optimales d'aération peu réalistes et qui pourraient s'avérer préjudiciables pour le procédé. Les aspects relatifs à l'estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit font l'objet de la partie 6.2.

L'utilisation de ces algorithmes d'estimation conjointement aux algorithmes d'optimisation dynamique du procédé est envisagé dans la dernière partie du chapitre (§ 6.3). Ces derniers utilisent les estimations de l'état et des paramètres du modèle réduit de manière à actualiser les politiques optimales d'aération du réacteur, et sont basés sur les concepts de la commande prédictive des procédés.

6.1 Observateur d'état

Pour des raisons techniques ou économiques, les grandeurs susceptibles d'être mesurées *en ligne* sur les petites unités de traitement à boues activées (et plus généralement sur les bioprocédés) sont peu nombreuses. Hormis la mesure de la concentration en oxygène dissous, aujourd'hui largement répandue, seules les concentrations en azote ammoniacal et en nitrate sont accessibles en ligne à un coût modéré, avec toutefois un délai de l'ordre de 10 minutes. Des méthodes permettant de déterminer les concentrations des composés organiques biodégradables et azotés existent pourtant (dosage, spectrométrie, *etc.*), mais les durées nécessaires pour obtenir le résultat sont rédhibitoires, dans un contexte de commande, par rapport à la vitesse d'évolution du procédé.

Afin d'estimer les concentrations non mesurées, il est nécessaire d'utiliser un observateur chargé de reconstruire l'état du système à partir des grandeurs mesurées *en ligne*. L'utilisation de ce type d'algorithme est courante en Génie des Procédés ; l'estimation de l'état des procédés chimiques, pétrochimiques, biochimiques ou encore électrochimiques a fait l'objet de nombreux travaux depuis le milieu des années 1970 (Soroush, 1998). Un aperçu des principaux algorithmes d'observation est donné dans le paragraphe 6.1.1. Pour des raisons de temps, seule l'implémentation numérique du filtre de Kalman étendu est ici envisagée. Les aspects relatifs à l'implémentation numérique de ce type d'observateur sont détaillés dans le paragraphe 6.1.2, et les résultats obtenus dans le cadre de l'observation des petites stations d'épuration à boues activées sont présentés dans le paragraphe 6.1.3.

6.1.1 Position du problème

Les méthodes de supervision et de contrôle nécessitent de disposer de suffisamment d'information sur l'état d'un procédé, *i.e.* connaître les variables d'état qui le définissent à un

instant donné. En pratique, il est rare que l'ensemble des variables d'état d'un procédé soit mesuré, et on est alors amené à estimer ces variables à l'aide d'observateurs d'état.

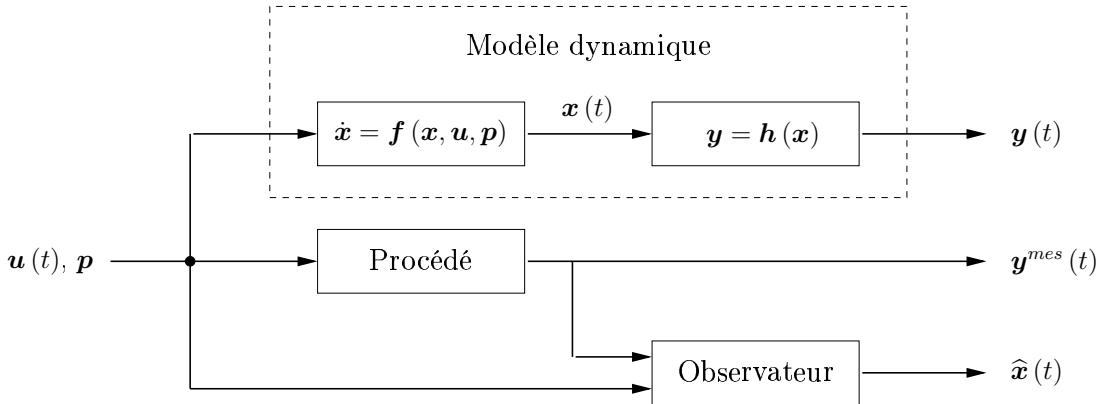


FIG. 6.1 – Observateur d'état d'un système dynamique.

Un observateur d'état est un système dynamique à la fois déterministe et stochastique par certains aspects, basé sur un modèle mathématique et capable de reconstruire les variables d'état inaccessibles à partir de mesures plus facilement disponibles. Le schéma de principe d'un observateur est donné sur la Fig. 6.1. Trois groupes sont représentés : le procédé, le modèle dynamique et l'observateur d'état.

Afin d'exprimer le problème d'observation sous forme mathématique, la classe des procédés dont le modèle dynamique est défini sous la forme générale (6.2) est ici considérée¹ :

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.2a)$$

$$\mathbf{y}(t) = \mathbf{h}(\mathbf{x}(t)) \quad (6.2b)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^\ell$ et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ désignent respectivement les vecteurs des variables d'état, des entrées mesurables (temporelles ou discrètes) et des sorties mesurables ; \mathbf{f} et \mathbf{h} sont des champs de vecteurs réguliers (\mathcal{C}^∞). À noter également que les vecteurs $\mathbf{u}(t)$ et \mathbf{p} incluent à la fois les variables manipulables et les perturbations mesurables du système.

De manière générale, un observateur d'état est un système dynamique de la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}(t) = \mathbf{F}(\boldsymbol{\eta}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.3a)$$

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{H}(\boldsymbol{\eta}(t), \mathbf{y}(t)) \quad (6.3b)$$

où $\hat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n$ correspond aux variables d'état estimées, \mathbf{F} et \mathbf{H} sont des champs de vecteurs réguliers, et $\boldsymbol{\eta}$ représente le vecteur d'état de l'estimateur. L'erreur d'observation \mathbf{e} est définie par :

$$\mathbf{e}(t) = \hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t) \quad (6.4)$$

¹Dans le cadre de cette étude, la description générale (dans l'espace d'état) des procédés biotechnologiques par le modèle non-linéaire (6.1) proposée par Bastin et Dochain (1990), n'est pas utilisée :

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathcal{K} \cdot \boldsymbol{\varphi}(\mathbf{x}) - \mathcal{D} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{Q} + \mathbf{F} \quad (6.1)$$

où $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^{n_x}$, $\boldsymbol{\varphi} \in \mathbb{R}^{n_\varphi}$, $\mathcal{K} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_\varphi}$, $\mathcal{D} \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$, $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n_x}$ et $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{n_x}$ désignent respectivement le vecteur d'état, le vecteur des cinétiques réactionnelles, la matrice des coefficients de rendement, la matrice des taux de dilution, le vecteur des taux d'alimentation et le vecteur des taux de rejets gazeux.

Chapitre 6. Vers la commande optimale du procédé

Construire un observateur d'état revient donc à choisir les fonctions \mathbf{F} et \mathbf{H} de sorte que $\mathbf{e} = \mathbf{0}$ soit un point d'équilibre asymptotiquement stable pour la dynamique de l'erreur d'observation, et que la convergence vers ce point soit *suffisamment* rapide.

Observation des systèmes non-linéaires

Historiquement développés en premier lieu pour l'estimation de l'état des système dynamiques linéaires, les observateurs de Kalman (Kalman, 1960; Kalman et Bucy, 1961) et de Luenberger (Luenberger, 1964) se sont rapidement révélés inadaptés pour observer l'état des systèmes non linéaires. De nombreuses méthodes ont ainsi été proposées depuis le début des années 1970 pour y remédier. Selon les concepts sous-jacents qu'ils mettent en jeu, ces observateurs peuvent être classés en 3 catégories (Soroush, 1998) :

- Les premiers résultent de l'extension directe des observateurs linéaires au cas des système non-linéaires, *e.g.* le filtre de Kalman étendu (Jazwinski, 1974) ou l'observateur de Luenberger étendu (Zeitz, 1987). Ils ont été appliqués avec succès à de nombreux procédés et font d'ailleurs partie des plus couramment rencontrés en Génie des Procédés. Malgré leur popularité, plusieurs études ont cependant révélé que l'approximation linéaire des système non-linéaires pouvaient être inadaptée (*e.g.* Gudi et al., 1995; Valluri et Soroush, 1996). Il n'est pas garanti, en effet, que la dynamique de l'erreur d'observation soit globalement asymptotiquement stable, et lorsque c'est le cas, la stabilité de l'observateur est difficile à démontrer analytiquement.
- D'autres observateurs sont basés sur la résolution en ligne d'un problème d'optimisation dynamique, *e.g.* la minimisation de la somme des erreurs quadratiques commises sur l'état (Robertson et al., 1996; Wang et al., 1997; Alamir, 1999, 2001). L'horizon d'optimisation (dans le passé) peut soit augmenter avec le temps, soit rester constant (horizon glissant). Dans ce dernier cas, il est possible d'effectuer le rapprochement avec les algorithmes utilisés en commande prédictive. L'intérêt de ces observateurs réside dans la possible prise en compte de contraintes dans le problème d'optimisation. Avec le développement des moyens de calcul, leur utilisation devient aujourd'hui envisageable, de façon quasi systématique, pour de nombreux procédés.
- Enfin, les observateurs non-linéaires sont basés sur la notion de linéarisation du système non-linéaire (vis-à-vis des variables d'état) par changement de variable, *i.e.* empruntent les concepts utilisés en commande non-linéaire des procédés (Krener et Isidori, 1983; Isidori, 1995). Cette classe inclue notamment l'observateur *grand gain* (*e.g.* Gauthier et al., 1992; Gibon-Fargeot et al., 1994) et l'observateur asymptotique (Bastin et Dochain, 1990; Dochain et al., 1992). La plupart des résultats récents relatifs à l'observation des systèmes non-linéaires concernent ce type d'observateur.

Observateurs multi-taux

Pour de nombreux procédés, certaines mesures ne sont disponibles qu'à des instants assez espacés et/ou de façon irrégulière, et peuvent présenter d'importants délais. Ces problèmes sont généralement la conséquence d'une instrumentation inadaptée du procédé. Il s'agit cependant d'intégrer le maximum d'information afin d'estimer l'état du procédé le

plus précisément possible, *i.e.* utiliser des observateurs *multi-taux*. Le besoin de ce type d'observateurs a d'ailleurs été reconnu à de nombreuses reprises, pour les procédés chimiques, pétrochimiques et biochimiques (*e.g.* Ellis et al., 1988; Gudi et al., 1994, 1995, 1997; Mutha et al., 1997; Tatiraju et al., 1999a,b). Des exemples de mesures fréquentes et sans délais sont la température, la pression, la concentration en oxygène dissous ou encore le potentiel redox ; d'autre part, la concentration en biomasses pour les bioprocédés ou de la masse moléculaire moyenne des polymères en polymérisation sont des exemples de mesures peu fréquentes et qui présentent des délais significatifs.

Le problème général de l'observation non-linéaire multi-taux consiste à définir un système de la forme :

$$\dot{\boldsymbol{\eta}}(t) = \tilde{\mathbf{F}}(\boldsymbol{\eta}(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.5a)$$

$$\hat{\mathbf{x}}(t) = \tilde{\mathbf{H}}(\boldsymbol{\eta}(t), \mathbf{y}(t)) \quad (6.5b)$$

pour un procédé non-linéaire décrit par le modèle suivant :

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.6a)$$

$$y_i(t) = h_i(\mathbf{x}(t)), \quad i = 1 \dots p \quad (6.6b)$$

$$y'_i(t_{ik}) = h'_i(\mathbf{x}(t_{ik} - \tau_i)), \quad i = 1 \dots p', \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.6c)$$

avec $\mathbf{y}' \in \mathbb{R}^{p'}$ le vecteur des mesures *lentes*, t_{ik} ($k = 1, 2, \dots$) les instants de mesure correspondants, τ_i le délai associé aux mesures y'_i et $\tilde{\mathbf{F}}$, $\tilde{\mathbf{H}}$, \mathbf{h}' des champs de vecteurs réguliers. Une condition nécessaire à l'observation de ce type de systèmes est que le procédé soit localement observable par rapport aux mesures *rapides* et aux mesures *lentes*. Il est en effet fréquent en pratique que les seules mesures *rapides* ne permettent d'observer qu'une partie de l'état du système.

L'observation multi-taux a initialement été étudiée dans le cadre du filtre de Kalman étendu, pour un procédé de polymérisation (Ellis et al., 1988) ; Gudi et al. (1994, 1995, 1997) ont proposé un algorithme similaire, intégrant deux échelles de temps, pour des procédés biochimiques. Les problèmes relatifs à l'utilisation de ce filtre pour l'observation des systèmes non-linéaires se retrouvent cependant avec l'observateur de Kalman étendu multi-taux (*cf.* paragraphe précédent). Ces aspects ont motivé le développement d'observateurs non-linéaires multi-taux, mieux adaptés aux cas de fortes non-linéarités (*e.g.* Tatiraju et al., 1999a,b). Une autre approche, couramment utilisée en Génie Électrique, consiste à combiner des algorithmes *lissants* avec des filtres de Kalman (Hong, 1994; Williamson et al., 1996).

6.1.2 Observation de l'état du modèle réduit

Le système dynamique utilisé pour décrire l'évolution du procédé (modèle réduit (4.21)) est non-linéaire et les mesures disponibles sont deux types : d'une part, des mesures fréquentes de la concentration en oxygène dissous dans le réacteur (*e.g.* toutes les 10 secondes), qui permettent d'observer le système durant les phases aérobies ; d'autre part, des mesures de la concentration en azote ammoniacal et en nitrate, moins fréquentes (toutes les 10 minutes environ), afin d'observer le système en phases d'anoxie¹. Dans ce

¹On rappelle également que la concentration des composés organiques X_{DCO}^{ba} n'est pas observable durant les phases d'anaérobiose à partir de ces mesures. Étant donné que ces phases sont cycliques et de

contexte, il s'agit donc d'utiliser un observateur adapté à l'étude des systèmes non-linéaires et de type multi-taux.

L'observation de l'état des bioprocédés a été largement étudiée au cours des deux dernières décennies. En raison de leur facilité d'utilisation et de la simplicité des concepts sous-jacents qu'ils intègrent, l'observateur de Luenberger étendu et le filtre de Kalman étendu ont fréquemment été appliqués, avec succès le plus souvent, pour l'estimation des procédés de traitement des eaux à boues activées notamment (*e.g.* Bastin et Dochain, 1990; Ayesa et al., 1991; Zhao et Kümmel, 1995; Jeppsson, 1996; Julien, 1997; de Assis et Filho, 2000).

La mise en œuvre d'observateurs non-linéaires est de plus en plus fréquente pour l'estimation de l'état des bioprocédés (*e.g.* Gauthier et al., 1992; Farza et al., 1997). En raison de sa facilité d'implémentation, l'observateur asymptotique a fait l'objet de nombreuses applications en traitement des eaux à boues activées (Bastin et Dochain, 1990; Marsili-Libelli et Giovannini, 1997; Ryckaert, 1998; Hadj-Sadok et Gouzé, 2001). L'intérêt de ce type d'observateur est de supposer les cinétiques réactionnelles non structurées. Dans le cadre de l'utilisation du modèle réduit (4.21) cependant, les conditions d'application de l'observateur asymptotique ne sont pas satisfaites. Comme le vecteur φ des cinétiques réactionnelles du modèle réduit (4.21) est de dimension 5, le nombre de mesures ($m = 3$) est en effet inférieur au rang de la matrice \mathcal{K} des coefficients de rendement ($\text{rg } \mathcal{K} = 5$) (*cf.* note de bas de page ¹, p. 183). Pour l'appliquer, il s'agirait de supposer certaines cinétiques réactionnelles connues, ce qui limiterait alors son intérêt. L'utilisation d'observateurs basés sur la linéarisation exacte du système dynamique ou *grand gain* en revanche, est restée marginale jusqu'à présent en traitement des eaux usées (Ryckaert, 1998).

Il conviendrait de comparer les performances de ces divers observateurs dans le cas de figure étudié. Faute de temps cependant, seule l'utilisation du filtre de Kalman étendu multi-taux a pu être envisagée. Malgré les problèmes mentionnés précédemment à propos de ce type d'observateurs, les résultats obtenus sont concluants. Il est toutefois vraisemblable que l'implémentation d'observateurs non-linéaires pourraient permettre d'améliorer ces performances. Ces aspects devront faire l'objet d'études ultérieures.

Représentation du procédé

Faute de disposer des mesures expérimentales nécessaires, le procédé est représenté au moyen de modèles mathématiques (modèle ASM 1 ou modèle réduit selon le cas), auxquels des perturbations stochastiques sont superposées. La non-idealité du procédé réel est ainsi représentée par des systèmes de la forme :

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{u}, \mathbf{p}, t) + \boldsymbol{\omega}(t) \quad (6.7a)$$

$$\mathbf{y}^{mes} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) + \boldsymbol{\nu}(t) \quad (6.7b)$$

courtes durées, la non-observabilité des composés organiques durant ces périodes n'est cependant pas problématique. Elle est néanmoins susceptible de ralentir la convergence de l'observateur.

où les perturbations stochastiques $\boldsymbol{\nu}(t)$ et $\boldsymbol{\omega}(t)$ sont des bruits blancs gaussiens centrés de covariances respectives $\mathcal{R}_f(t)$ et $\mathcal{Q}_f(t)$:

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\omega}(t_k)] = \mathbf{0} \quad (6.8a)$$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\omega}(t_k) \cdot \boldsymbol{\omega}^T(t_k)] = \mathcal{Q}_f(t_k) \quad (6.8b)$$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\nu}(t_k)] = \mathbf{0} \quad (6.8c)$$

$$\mathbb{E}[\boldsymbol{\nu}(t_k) \cdot \boldsymbol{\nu}^T(t_k)] = \mathcal{R}_f(t_k) \quad (6.8d)$$

L'initialisation des grandeurs \mathcal{Q}_f et \mathcal{R}_f qui caractérisent la nature stochastique du modèle est basée sur les écarts-types des erreurs impliquées :

$$\mathcal{Q}_f = \text{diag}[(\sigma_{x_i})^2]_{1 \leq i \leq n} \quad (6.9a)$$

$$\mathcal{R}_f = \text{diag}[(\sigma_{y_i})^2]_{1 \leq i \leq q} \quad (6.9b)$$

Le filtre de Kalman étendu (EKF)

La technique des filtres de Kalman (Kalman, 1960; Kalman et Bucy, 1961) est une technique de filtrage générale applicable à des problèmes d'estimation optimale, de prédiction, de filtrage de bruit ou encore de commande stochastique. Leur construction est basée sur la recopie de la dynamique du système original auquel un terme de correction est ajouté en fonction des mesures disponibles. Pour le système dynamique (6.2) par exemple :

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{f}(\hat{\mathbf{x}}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, t) + \mathcal{K}_f \cdot [\mathbf{y}^{mes}(t) - \mathbf{h}(\hat{\mathbf{x}}(t))] \quad (6.10)$$

où la matrice de paramètres ajustables $\mathcal{K}_f \in \mathbb{R}^{n \times q}$, appelée matrice de *gain*, est déterminée de sorte que les variances des erreurs de mesure et d'estimation soient minimales. En ce sens, le filtre de Kalman est un *observateur optimal*. Bryson et Ho (1975) présentent d'ailleurs le filtre de Kalman dans une approche mettant en parallèle la nature optimale de cet observateur et l'optimisation dynamique.

Différentes formes du filtre EKF sont distinguées en fonction de la manière dont sont considérées (*i*) la propagation de l'état estimé entre deux mesures et, (*ii*) la correction de l'estimation au moment de la mesure. Dans le contexte de l'étude, le système dynamique évolue rapidement, et les périodes d'échantillonnage des mesures peuvent être importantes (plusieurs minutes) ; ces aspects imposent la mise en œuvre d'observateurs de type *continu-discret*.

Filtre EKF simple-taux – Lorsque l'ensemble des mesures est disponible aux mêmes instants t_k , les étapes de propagation et de correction du filtre EKF sont les suivantes :

1. *Propagation des estimations de l'état et de la matrice de covariance de l'erreur* :

Durant cette phase, les équations différentielles décrivant les variations du vecteur d'état estimé $\hat{\mathbf{x}}$ et de la matrice de covariance de l'erreur \mathcal{P} sont intégrées entre t_{k-1}^+ et t_k^- afin d'en obtenir une prédiction, alors que la mesure n'a pas encore été réalisée :

$$\dot{\hat{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{f}|_{\hat{\mathbf{x}}} \quad (6.11a)$$

$$\dot{\mathcal{P}}(t) = \mathcal{P}(t) \cdot \mathbf{f}_{\mathbf{x}}^T|_{\hat{\mathbf{x}}} + \mathbf{f}_{\mathbf{x}}|_{\hat{\mathbf{x}}} \cdot \mathcal{P}(t) + \mathcal{Q}_f \quad (6.11b)$$

où $\mathbf{f}_x = \frac{\partial f}{\partial x^T}$ et $\mathcal{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ représente la matrice de covariance de l'erreur d'estimation définie par :

$$\mathcal{P}(t) = \mathbb{E} \left[(\hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t)) \cdot (\hat{\mathbf{x}}(t) - \mathbf{x}(t))^T \right] \quad (6.11c)$$

2. Correction des estimations de l'état et de la matrice de covariance de l'erreur :

Les mesures effectuées à l'intant t_k sont utilisées pour corriger les estimations $\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)$ et $\mathcal{P}(t_k^-)$ en minimisant l'erreur d'estimation :

$$\hat{\mathbf{x}}(t_k^+) = \hat{\mathbf{x}}(t_k^-) + \mathcal{K}_{fk} \cdot \left[\mathbf{y}^{mes}(t_k^-) - \mathbf{h}|_{\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)} \right] \quad (6.12a)$$

$$\mathcal{P}(t_k^+) = \left[\mathbb{1}_{n \times n} - \mathcal{K}_{fk} \cdot \mathbf{h}|_{\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)} \right] \cdot \mathcal{P}(t_k^-) \quad (6.12b)$$

$$\mathcal{K}_{fk} = \mathcal{P}(t_k^-) \cdot \mathbf{h}_x^T|_{\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)} \cdot \left[\mathbf{h}|_{\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)} \cdot \mathcal{P}(t_k^-) \cdot \mathbf{h}_x^T|_{\hat{\mathbf{x}}(t_k^-)} + \mathcal{R}_f \right]^{-1} \quad (6.12c)$$

où $\mathbf{h}_x = \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial x^T}$.

L'évolution de la matrice de covariance \mathcal{P} est donnée par l'équation de Riccati (6.11b). Aussi, le calcul du gain de Kalman \mathcal{K}_f peut être comparé avec celui du gain du régulateur optimal d'un système linéaire à critère quadratique (Bryson et Ho, 1975), ce qui rappelle son caractère optimal.

Le fait que \mathcal{P} ne constitue qu'une approximation de la matrice de covariance réelle des erreurs de prédiction explique qu'il ne soit pas possible de garantir la performance du filtre, ni même de prouver sa stabilité. Les équations du filtre EKF supposent d'autre part que le modèle du procédé est exact ; aucune robustesse n'est donc garantie contre les erreurs de modélisation.

Filtre EKF multi-taux – Lorsque les mesures sont disponibles à des instants t_k différents, l'application du filtre de Kalman est similaire dans la mesure où le modèle utilisé est observable pour les différents ensembles de mesures. Dans le contexte de l'étude, des mesures de concentration en oxygène dissous sont disponibles fréquemment, alors que les mesures des concentrations en azote ammoniacal et en nitrate ne le sont qu'à des périodes plus longues (multiples des périodes des mesures rapides). Hormis les périodes d'anaérobiose durant lesquelles aucune correction de la concentration des composés organiques n'est possible, le modèle réduit est observable à partir des seules mesures *rapides* (conditions aérobies) et des seules mesures *lentes* (conditions d'anoxie).

Entre deux points de mesure successifs, la propagation de l'état $\hat{\mathbf{x}}$ et de la matrice \mathcal{P} de covariance de l'erreur est donnée par le système (6.11). Aux instants de mesure, la matrice de gain de Kalman \mathcal{K}_{fk} est calculée par la relation (6.12c). La taille de cette matrice varie selon le type de mesure effectué et les conditions au sein du réacteur, *e.g.* $\dim \mathcal{K}_f = 5 \times 1$ lorsque seule la concentration en oxygène dissous est mesurée, $\dim \mathcal{K}_f = 5 \times 3$ lorsque les concentrations en oxygène dissous, ammoniaque et nitrate sont disponibles simultanément, *etc.* La connaissance du gain permet ensuite de corriger l'état et de la matrice de covariance de l'erreur selon les relations (6.12a) et (6.12b).

6.1.3 Application du filtre de Kalman étendu multi-taux

Les résultats relatifs à l'implémentation du filtre EKF multi-taux pour l'observation de l'état du modèle réduit (4.21) font l'objet de ce paragraphe. L'objectif est d'estimer les concentrations des composés organiques biodégradables X_{DCO}^{ba} et d'azote organique soluble S_{ND}^{ba} à partir des concentrations en oxygène dissous S_O^{ba} , en ammoniaque S_{NH}^{ba} et en nitrate S_{NO}^{ba} .

Les performances du filtre EKF sont évaluées à l'aide de simulations mettant en jeu des erreurs sur l'estimation de l'état initial $\hat{\mathbf{x}}(t_0)$. L'influence des erreurs de modélisation du procédé est également étudiée. Ces études sont nécessaires pour établir (*i*) la capacité du filtre à reconstruire l'état du système (vitesse de convergence, *etc.*) et (*ii*) sa robustesse vis-à-vis de l'inexactitude du modèle réduit (approximations relatives aux simplifications, erreurs sur les paramètres, *etc.*). Dans les deux cas, les paramètres du modèle réduit sont supposés connus : les valeurs préalablement estimées *hors ligne* données dans le Tab. 4.3 (p. 143) sont utilisées et les perturbations incidentes du système (Q^{in} , X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et S_{ND}^{in}) sont supposées mesurées *en ligne*.

L'initialisation du filtre EKF nécessite la donnée des écarts-types des erreurs de mesure σ_y , de modélisation $\sigma_{\dot{\mathbf{x}}}$ et d'estimation initiale $\sigma_{\mathbf{x}}$. Les valeurs utilisées sont précisées dans le Tab. 6.1.

TAB. 6.1 – Initialisation de l'observateur de Kalman.

Paramètres	Valeurs
σ_y	$[2.10^{-1} \quad 2.10^{-1} \quad 10^{-1}]^T$
$\sigma_{\dot{\mathbf{x}}}$	$[2.5 \cdot 10^{-2} \quad 2.5 \cdot 10^{-3} \quad 2.5 \cdot 10^{-3} \quad 5 \cdot 10^{-3} \quad 2.5 \cdot 10^{-3}]^T$
$\sigma_{\mathbf{x}}$	$[5.10^{-1} \quad 5.10^{-1} \quad 5.10^{-1} \quad 5.10^{-1} \quad 5.10^{-1}]^T$

- Les écarts-types des erreurs de mesure σ_y sont définis par :

$$\sigma_y = \left[\sigma_{S_{NO}^{ba}} \quad \sigma_{S_{NH}^{ba}} \quad \sigma_{S_O^{ba}} \right] \quad (6.13a)$$

En pratique, ces valeurs doivent être représentatives de la précision des mesures fournies par les capteurs utilisés. Dans le cadre de cette étude, elles correspondent aux bruits ajoutés aux mesures simulées par un modèle de référence (modèle réduit ou modèle ASM 1 selon le cas).

- D'autre part, les écarts-type des erreurs de modélisation $\sigma_{\dot{\mathbf{x}}}$ sont définis par :

$$\sigma_{\dot{\mathbf{x}}} = \left[\sigma_{\dot{X}_{DCO}^{ba}} \quad \sigma_{\dot{S}_{NO}^{ba}} \quad \sigma_{\dot{S}_{NH}^{ba}} \quad \sigma_{\dot{S}_{ND}^{ba}} \quad \sigma_{\dot{S}_O^{ba}} \right] \quad (6.13b)$$

Le choix de ces valeurs est plus délicat. Il doit résulter d'un compromis entre deux aspects du filtre. Considérer des valeurs élevées permet d'améliorer la vitesse de convergence de l'observateur, mais augmente en contrepartie la sensibilité des estimations vis-à-vis des bruits de mesure, *i.e.* diminue donc la robustesse du filtre. Les valeurs données dans le Tab. 6.1 ont été obtenues par une approche de type essais/erreurs.

- Enfin, l'initialisation de la matrice de covariance $\mathcal{P}(t_0)$ est basée sur les écarts-types des erreurs d'estimation initiale :

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{bmatrix} \sigma_{X_{DCO}^{ba}} & \sigma_{S_{NO}^{ba}} & \sigma_{S_{NH}^{ba}} & \sigma_{S_{ND}^{ba}} & \sigma_{S_O^{ba}} \end{bmatrix} \quad (6.13c)$$

$$\mathcal{P}(t_0) = \text{diag}[(\sigma_{x_i})^2]_{1 \leq i \leq n} \quad (6.13d)$$

Ces valeurs conditionnent la convergence du filtre en début d'opération, mais ont en revanche peu d'incidence sur la précision des estimations. Les valeurs adoptées par la suite (Tab. 6.1) ont également été choisies sur la base des résultats de différents essais.

Erreur d'estimation de l'état initial

Considérer des erreurs d'estimation sur l'état initial permet d'évaluer la capacité du filtre à reconstruire l'état du procédé, ainsi que sa vitesse de convergence. Afin de s'affranchir des erreurs de modélisation du procédé, les trajectoires de référence sont simulées au moyen du modèle réduit et les mesures sont obtenues en superposant un bruit blanc à ces trajectoires. Les conditions initiales de référence et estimées sont données dans le Tab. 6.2.

TAB. 6.2 – Conditions initiales du modèle de référence et de l'estimation.

	Valeurs				
$\boldsymbol{x}(t_0)$	$[114.93 \quad 4.06 \quad 0.47 \quad 2.05 \quad 3.60]^T$				
$\hat{\boldsymbol{x}}(t_0)$	$[229.86 \quad 8.12 \quad 0.94 \quad 4.10 \quad 7.21]^T$				

Les erreurs d'estimation et la comparaison des profils *réels* et estimés des grandeurs mesurées S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} sont respectivement représentées sur les Fig. 6.2 gauches et droites. En raison du nombre important de mesures, l'estimation de la concentrations en oxygène dissous converge rapidement vers la trajectoire de référence (courbes superposées) et les écarts correspondants sont réduits (inférieurs à 0.1 mg.L^{-1}). Ces résultats illustrent également la capacité de l'observateur à filtrer les bruits de mesure. La convergence des estimations des concentrations en ammoniacal et en nitrate est nettement plus lente, de l'ordre de plusieurs heures. Les écarts autour des trajectoires de référence sont également plus importants pour les mesures lentes (compris entre 0.1 et 0.2 mg.L^{-1}). Augmenter les valeurs des paramètres $\sigma_{S_{NO}}$ et $\sigma_{S_{NH}}$ permet d'améliorer la convergence du filtre, mais entraîne une plus forte sensibilité de l'estimation vis-à-vis des bruits de mesure. Rappelons que les valeurs des paramètres $\boldsymbol{\sigma}_x$ du filtre EKF ont été choisies de manière à réaliser un compromis entre ces deux aspects (*cf.* Tab. 6.1).

Les résultats de l'observation des concentrations X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} sont donnés sur la Fig. 6.3. Afin d'illustrer les propriétés de convergence du filtre EKF, une comparaison est établie avec le comportement du système en boucle ouverte, *i.e.* sans observateur d'état.

- L'analyse du gain du filtre pour les différentes mesures montre que la correction de l'estimation \hat{X}_{DCO}^{ba} est en grande partie liée aux mesures de concentration en nitrate, et à moindre échelle, aux mesures d'oxygène dissous. Cette deuxième contribution

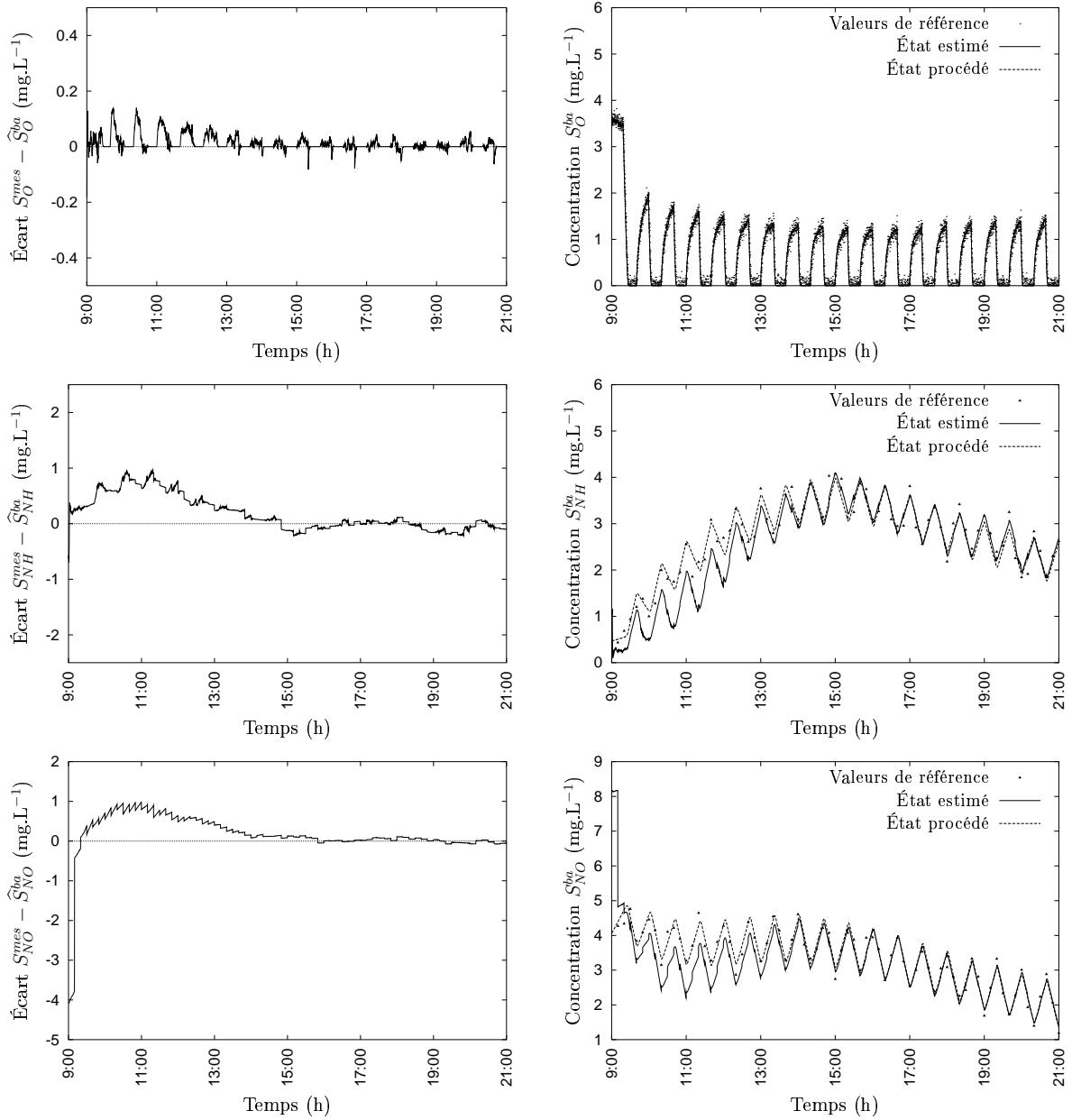


FIG. 6.2 – Résultats de l’observation du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} : erreurs d’observation (Fig. gauche) et estimations des concentrations (Fig. droite).

est cependant erronée (signe contraire) lorsque les erreurs d'estimation sont importantes ; la convergence de l'estimation apparaît ainsi plus rapide en boucle ouverte, qu'en utilisant le filtre EKF (Fig. 6.3 haut). Ces aspects illustrent clairement les limites du filtre EKF, et en particulier les problèmes liés à la linéarisation du système dynamique. Cette tendance s'inverse toutefois à mesure que l'estimation \hat{X}_{DCO}^{ba} se rapproche de la valeur de référence, et l'utilisation du filtre de Kalman permet, à terme, de reconstruire l'état X_{DCO}^{ba} de façon pertinente (écart inférieur à 1 mg.L^{-1}), alors que l'estimation obtenue en boucle ouverte est biaisée.

- Contrairement au cas des composés organiques, l'observation de l'état S_{ND}^{ba} repose essentiellement sur les mesures d'azote ammoniacal, les contributions des autres mesures étant réduites. La convergence de l'estimation \hat{S}_{ND}^{ba} est rapide durant les premiers instants. Elle est ensuite sensiblement plus lente, voire comparable à l'estimation obtenue en boucle ouverte (Fig. 6.3 bas).

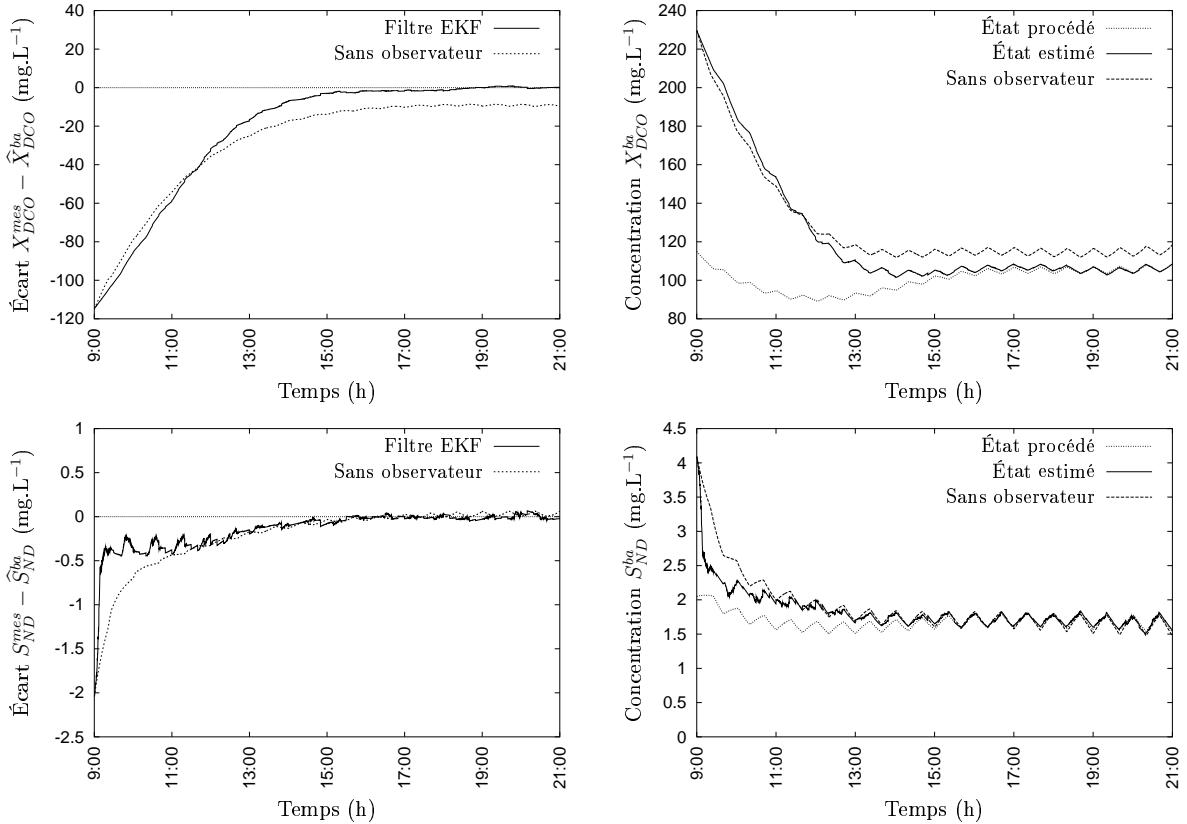


FIG. 6.3 – Résultats de l'observation des états S_{ND}^{ba} et X_{DCO}^{ba} du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} : erreurs d'observation (Fig. gauche) et estimation des concentrations (Fig. droite).

Les résultats obtenus en considérant des erreurs sur l'estimation de l'état initial montrent que le filtre EKF permet de reconstruire les deux variables d'état X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} à partir des mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} de façon satisfaisante, mais que la vitesse de convergence de l'observateur est malgré tout lente. L'estimation de ces deux concentrations repose en grande partie sur les mesures en ammoniaque et en nitrate. Elle est donc largement pénalisée par leurs faibles fréquences. L'utilisation du filtre EKF peut également être mise en cause. Ce type d'observateur est en effet basé sur la linéarisation du système

dynamique, et le nombre élevé de paramètres (*cf.* Tab. 6.1) rend leur réglage parfois délicat. L'utilisation d'observateurs non-linéaires, plus simples à régler et réputés plus performants, devrait vraisemblablement permettre d'améliorer la qualité de l'observation.

Erreur de modélisation du procédé

Afin d'établir l'influence des erreurs de modélisation sur le comportement de l'observateur, l'estimation de l'état du modèle réduit est ici étudiée en générant les mesures au moyen du modèle ASM 1. Les paramètres du filtre EKF, ainsi que les états initiaux de référence et estimés, sont identiques à ceux utilisés précédemment (*cf.* Tab. 6.1 et 6.2).

Les estimations des concentrations mesurées S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} ne posent pas de problèmes particuliers : la convergence des estimations de concentration en oxygène dissous vers l'état de référence du procédé est rapide en raison du nombre important de mesures, alors que les estimations des concentrations en ammoniaque et nitrate convergent plus lentement, après plusieurs heures. Ces résultats ne sont pas représentés ici en raison de leurs fortes similitudes avec ceux donnés sur la Fig. 6.2.

Les estimations des concentrations X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} présentent plus d'intérêt. Une comparaison est établie entre les profils de référence (modèle ASM 1) et les profils estimés (filtre EKF) sur la Fig. 6.4. Durant les premières heures, le comportement du filtre est similaire à celui obtenu précédemment en générant les mesures par le biais du modèle réduit (Fig. 6.3) ; les estimations convergent vers le profil de référence en quelques heures. Au cours de la seconde partie de la journée cependant, les estimations présentent des différences de faibles amplitudes avec les profils de référence. L'utilisation du filtre EKF n'est pas le seul responsable de ce comportement. Ces écarts résultent également des erreurs de modélisation du procédé, et notamment des erreurs commises sur les paramètres du modèle réduit (variations temporelles, erreurs d'estimation, *etc.*). Comme les composés non mesurés apparaissent uniquement sous la forme de termes cinétiques $\theta_1 \frac{X_{DCO}^{ba}}{K_{DCO} + X_{DCO}^{ba}}$ et $\theta_4 S_{ND}^{ba}$ dans les dynamiques des concentrations en S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} , des erreurs sur les valeurs des paramètres θ_1 , θ_4 et K_{DCO} peuvent biaiser les estimations des concentrations \hat{X}_{DCO}^{ba} et \hat{S}_{ND}^{ba} : une surestimation (resp. sous-estimation) du paramètre θ_4 par exemple, donne lieu à une sous-estimation (resp. surestimation) de la concentration S_{ND}^{ba} . Il a pu être vérifié qu'en revanche les valeurs de ces termes cinétiques sont correctes, proches de celles des termes $\mu_H X_{B,H}^{ba} \frac{S_S^{ba}}{K_S + S_S^{ba}}$ et $\kappa_a X_{B,H}^{ba} S_{ND}^{ba}$ définis dans le modèle ASM 1 (*cf.* Tab. 1.2, p. 18).

6.1.4 Conclusions

Les aspects relatifs à l'observation du modèle réduit ont fait l'objet de cette partie. Les résultats présentés sont relatifs à l'utilisation du filtre de Kalman étendu. Ils montrent que l'application de cet observateur permet de reconstruire les variables d'état non mesurées du procédé de façon précise lorsque les paramètres du modèle et les perturbations incidentes sont connues. La vitesse de convergence des estimations est cependant lente en raison de la faible fréquence des mesures en ammoniaque et en nitrate, et des défaillances du filtre de Kalman étendu ont pu être détectées lorsque les écarts avec les trajectoires de référence sont importants. L'utilisation d'observateurs non linéaires pourrait permettre d'améliorer

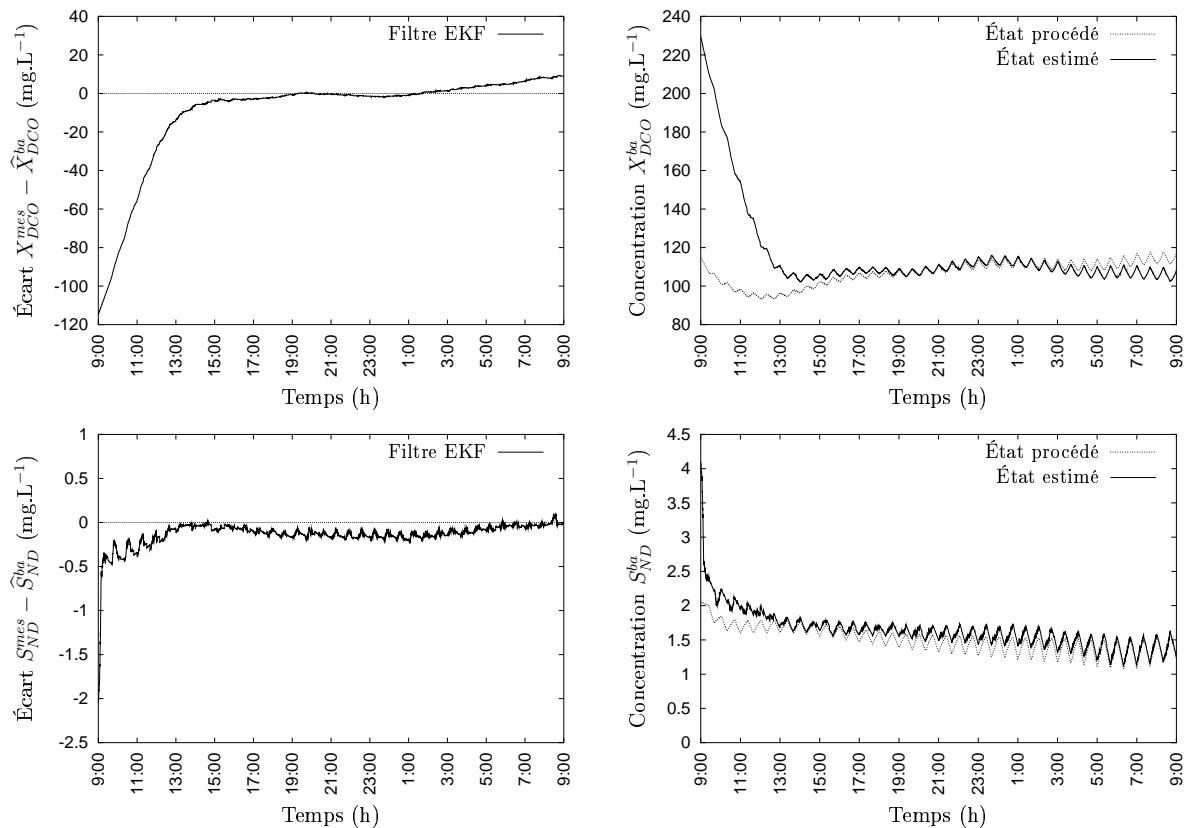


FIG. 6.4 – Résultats de l’observation des états S_{ND}^{ba} et X_{DCO}^{ba} du modèle réduit pour les mesures de S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} : erreurs d’observation (Fig. gauche) et estimation des concentrations (Fig. droite).

ces estimations.

D'autre part, lorsque les erreurs de modélisation sont prises en compte, une dégradation des performances de l'observation est également constatée. Ces biais d'estimation sont en grande partie liés aux erreurs commises sur les paramètres du modèle réduit. La mise en œuvre d'une estimation conjointe des paramètres et de l'état du système apparaît donc clairement nécessaire. Ces aspects font l'objet de la partie suivante.

6.2 Estimation conjointe de l'état et des paramètres

L'estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit résulte d'une double nécessité. D'une part, l'analyse de la sensibilité réalisée dans le chapitre 5 démontre que certains paramètres sont très influents vis-à-vis des conditions optimales de fonctionnement du procédé. D'autre part, les résultats présentés dans la partie précédente montrent que les erreurs commises sur les valeurs des paramètres peuvent biaiser l'estimation des variables d'état non mesurées.

Les aspects relatifs à l'estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit font l'objet de cette partie. Les principales méthodes d'estimation paramétrique, puis d'estimation conjointe des paramètres et de l'état, sont brièvement rappelées dans le paragraphe 6.2.1. Il n'a pas été possible, pour des raisons de temps, de comparer ces différentes approches. Seule l'utilisation d'un algorithme des moindres carrés non récursifs est ici envisagée. L'application de cette méthode est détaillée dans le paragraphe 6.2.2 ; les résultats obtenus sont ensuite présentés dans le paragraphe 6.2.3.

6.2.1 Position du problème

Le problème général de l'estimation paramétrique est celui de représenter des mesures données à partir d'un modèle du procédé. Étant donné un modèle comportant des paramètres indéterminés, un estimateur paramétrique calcule la valeur des paramètres de sorte que les prédictions du modèle soient *les plus proches possibles* des mesures correspondantes. L'identification *hors ligne* permet de caler le modèle à partir d'un ensemble donné de mesures (issues d'une ou de plusieurs phases d'opération du procédé). Dans le cadre de l'identification *en ligne* en revanche, le procédé est en opération et il s'agit d'estimer les paramètres à partir des seules mesures passées et présentes disponibles. C'est ce second type d'estimation qui est ici étudié.

Estimation en ligne des paramètres

De manière générale, un estimateur paramétrique est un système dynamique de la forme :

$$\dot{\xi}(t) = \mathbf{G}(\xi(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.14a)$$

$$\widehat{\theta}(t) = \mathbf{Q}(\xi(t), \mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}) \quad (6.14b)$$

pour un procédé non-linéaire décrit par le modèle :

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{y}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{p}, \boldsymbol{\theta}) \quad (6.14c)$$

où $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^q$ désigne les paramètres du procédé, le vecteur $\widehat{\boldsymbol{\theta}} \in \mathbb{R}^q$ est constitué des valeurs des paramètres estimés, \mathbf{G} , \mathbf{Q} , \mathbf{g} sont des champs de vecteurs réguliers, et $\boldsymbol{\xi}$ représente le vecteur d'état de l'estimateur paramétrique. La construction de l'estimateur consiste à choisir les fonctions vectorielles \mathbf{G} et \mathbf{Q} de sorte que l'écart entre les valeurs réelles et estimées des paramètres tende asymptotiquement vers zéro et que cette convergence soit suffisamment rapide.

Parmi les méthodes existantes d'estimation *en ligne* des paramètres, on peut citer les suivantes :

- **L'estimation des paramètres via la prédition de l'erreur d'estimation** – Cette approche est basée sur les méthodes de gradients, *e.g.* l'algorithme des moindres carrés récursifs (et ses variantes), avec ou sans facteur d'oubli, en utilisant une matrice de gain de trace constante ou non, *etc.* (Söderström et Stoica, 1989; Aström et Wittenmark, 1990; Landau, 1990; Corriou, 1996).
- **L'estimation des paramètres via l'observation de l'état du procédé** – Ce type de méthode nécessite de définir un modèle dynamique pour chaque paramètre inconnu ; l'utilisation de modèles de type *marche aléatoire* ou *rampe aléatoire* est fréquente en pratique (Stephanopoulos et San, 1984; Kosanovitch et al., 1995). Un observateur d'état, *e.g.* observateur EKF (de Valière et Bonvin, 1989; Gudi et al., 1994, 1995; Eliçabe et al., 1995; Semino et al., 1996; Sirohi et Choi, 1996) ou observateur non-linéaire (Oliveira et al., 1996; Farza et al., 1997, 1998; Soroush, 1997; Perrier et al., 2000), est utilisé afin d'estimer les paramètres, au même titre que les autres variables d'état du système dynamique étendu.
- **L'estimation des paramètres via l'application des méthodes d'optimisation** – Par cette approche, les paramètres estimés s'obtiennent en résolvant *en ligne* un problème d'optimisation dynamique, *e.g.* la minimisation de la somme des carrés des écarts de prédition (algorithme des moindres carrés non récursif, Robertson et al., 1996; de Mathelin et Lozano, 1999; Dimogianopoulos et Lozano, 2001). L'implémentation numérique est plus fastidieuse que celle des deux approches précédentes. Les temps de calcul impliqués sont également plus longs, mais ne sont désormais plus problématiques avec l'amélioration des moyens de calcul.

Sous certaines hypothèses, il est possible de démontrer que ces trois méthodes peuvent conduire à des résultats analogues. L'estimation des paramètres par la résolution d'un problème d'optimisation sur un horizon glissant, par exemple, peut donner des résultats analogues à ceux de l'algorithme des moindres carrés récursifs avec facteur d'oubli (de Mathelin et Lozano, 1999).

Estimation conjointe de l'état et des paramètres

L'estimation *adaptative* est un moyen d'améliorer les performances d'un observateur d'état lors d'un changement de conditions opératoires et en présence de perturbations non mesurées et d'erreurs de modélisation. Elle permet d'estimer conjointement l'état et les paramètres du modèle du procédé. Deux types d'approches peuvent être appliquées.

- **Estimer simultanément l'état et les paramètres** – Un modèle dynamique est défini pour chaque paramètre (*e.g. marche aléatoire*). L'utilisation d'un observateur d'état (*e.g.* EKF, observateur non-linéaire) permet alors d'estimer les variables d'état

du modèle dynamique étendu, *i.e.* les variables d'état et les paramètres du modèle initial (Stephanopoulos et San, 1984; de Valière et Bonvin, 1989; Bastin et Dochain, 1990; Limqueco et al., 1991; Gudi et al., 1994; Eliçabe et al., 1995; Semino et al., 1996).

- **Estimer l'état et les paramètres de façon séquentielle** – Les estimations des variables d'état obtenues au moyen d'un observateur d'état sont utilisées pour l'estimation des paramètres (Bastin et Dochain, 1990; Dochain et Perrier, 1993; Zhao et Kümmel, 1995; Stigter et al., 1999). En pratique, les différents types d'observateurs présentés dans le paragraphe 6.1.1 sont susceptibles d'être appliqués (*e.g.* EKF, observateur *grand gain*, *etc.*) ; l'estimation paramétrique, d'autre part, peut être réalisée par les méthodes d'estimation *en ligne* décrite dans le paragraphe précédent. C'est ce type d'approche, dont le schéma de principe est détaillé sur la Fig. 6.5, qui est utilisé par la suite.

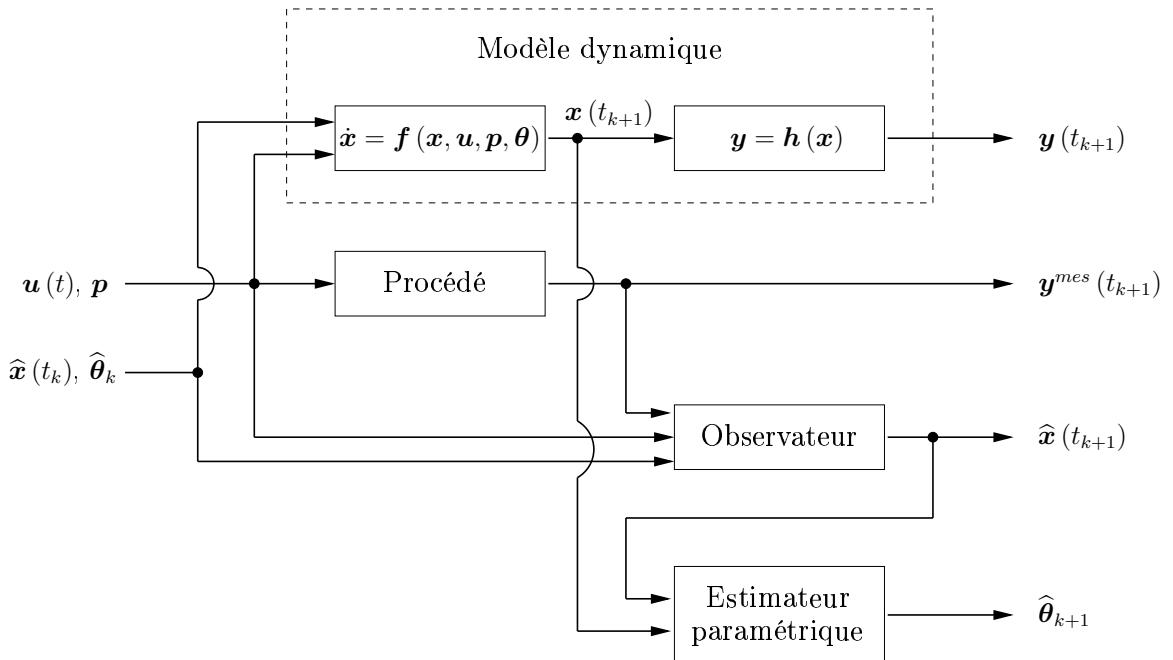


FIG. 6.5 – Estimation conjointe de l'état et des paramètres d'un système dynamique par l'approche séquentielle.

6.2.2 Estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit

Lorsque les paramètres du modèle réduit sont connus, l'utilisation d'un observateur d'état permet de reconstituer de façon précise l'état du procédé (*cf.* § 6.1.2). En revanche, une dégradation des performances de l'observateur est constatée lorsque ces paramètres présentent des variations temporelles. Ceci se manifeste notamment par la présence d'un biais d'estimation lors de la reconstruction des variables d'état non mesurées du système dynamique. Afin d'améliorer la qualité de l'observation, il apparaît nécessaire d'estimer conjointement les paramètres et les variables d'état. Cette nécessité est d'ailleurs d'autant plus marquée que les conditions optimales de fonctionnement du procédé sont très sensibles aux erreurs commises sur certains paramètres du modèle réduit (*cf.* chapitre 5).

L'estimation *en ligne* des paramètres est ici envisagée par la méthode des moindres carrés non récursifs (*non recursive least square*, NRLS). Le problème d'optimisation dynamique correspondant est formulé sur un horizon de durée constante (horizon glissant) et un facteur d'oubli μ est utilisé afin de limiter l'influence des mesures passées au bénéfice des mesures plus récentes. Ce problème s'écrit :

$$\begin{aligned} \widehat{\boldsymbol{\theta}}_k &= \arg \left\{ \min_{\boldsymbol{\theta}_k, \mathbf{x}_{k-N_m}} \mathcal{J} = \sum_{i=k-N_m}^k e^{-\mu(k-i)} \left[(\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})^T \cdot \mathcal{W} \cdot (\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) \right]_{t_i} \right\} \\ \text{soumis à : } \quad \dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}^{(1,2)}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}_k), \quad t_{k-N_m} \leq t \leq t_k \\ \mathbf{x}(t_{k-N_m}) &= \mathbf{x}_{k-N_m} \\ \boldsymbol{\theta}^L &\leq \boldsymbol{\theta}_k \leq \boldsymbol{\theta}^U \\ \mathbf{x}^L &\leq \mathbf{x}_{k-N_m} \leq \mathbf{x}^U \end{aligned} \quad (6.15)$$

où N_m représente le nombre de mesures sur l'horizon d'identification, t_i ($k - N_m \leq i \leq k$) les instants d'échantillonnage, $\widehat{\mathbf{x}}$ l'estimation de l'état du procédé, \mathcal{W} une matrice de pondération (diagonale) et $\mathbf{f}^{(1)}$, $\mathbf{f}^{(2)}$ le modèle réduit (4.21) respectivement avec et sans le terme d'apport d'oxygène k_{La} ($S_O^{sat} - S_O^{ba}$).

Il est à noter que le système (6.15) est équivalent au problème (4.41) défini pour l'identification *hors ligne* des paramètres du modèle réduit (*cf.* § 4.3.3, p. 139). L'application de la méthode de l'adjoint permet d'exprimer analytiquement le gradient du critère \mathcal{J} d'identification :

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}_k} \mathcal{J} = \sum_{i=k-N_m+1}^k \int_{t_{i-1}^+}^{t_i^-} \boldsymbol{\lambda}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \Big|_{\boldsymbol{\theta}_k} dt \quad (6.16a)$$

$$\nabla_{\mathbf{x}_{k-N_m}} \mathcal{J} = \boldsymbol{\lambda}(t_{k-N_m}^+) \quad (6.16b)$$

où les variables adjointes $\boldsymbol{\lambda}$ sont solutions du système différentiel suivant¹ :

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T = -\boldsymbol{\lambda}^T \cdot \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (6.16c)$$

$$\text{avec la condition terminale : } \boldsymbol{\lambda}(t_k^-) = 2e^{-\mu(k-i)} (\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})_{t_k^+}^T \cdot \mathcal{W} \quad (6.16d)$$

$$\text{et les conditions de discontinuité : } \boldsymbol{\lambda}(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}(t_i^+) + 2e^{-\mu(k-i)} (\widehat{\mathbf{x}} - \mathbf{x})_{t_i^+}^T \cdot \mathcal{W} \quad (6.16e)$$

Comme précédemment, le problème d'optimisation (6.15) est résolu par la méthode SQP (code de calcul NLPQL, Schittkowski, 1985) et l'intégration du TPBVP état/adjoint est assuré par la méthode DASSL (Brenan et al., 1989).

¹On rappelle que le système adjoint est continu aux instants de commutation t_b^j et t_c^j de l'aérateur :

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\lambda}(t_b^{j-}) &= \boldsymbol{\lambda}(t_b^{j+}), \quad j = 1 \dots N_c \\ \boldsymbol{\lambda}(t_c^{j-}) &= \boldsymbol{\lambda}(t_c^{j+}), \quad j = 1 \dots N_c - 1 \end{aligned}$$

6.2.3 Applications de l'algorithme des moindres carrés non récursif

Les résultats relatifs à l'estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit par la méthode NRLS font l'objet de ce paragraphe. Cet algorithme d'estimation est utilisé conjointement à l'observateur EKF selon le principe illustré sur la Fig. 6.5. Les paramètres de réglage et d'initialisation de l'observateur sont les mêmes que ceux définis dans le Tab. 6.1 (p. 189). D'autre part, l'estimation des paramètres par l'algorithme NRLS est effectuée sur un horizon glissant de 2 heures, avec des périodes d'échantillonnage de 10 minutes entre deux points de mesure successifs et en considérant un facteur d'oubli $\mu = 10^{-1}$. Considérer un horizon de 2 heures permet notamment d'assurer qu'une partie du fonctionnement du réacteur se fait en condition d'aérobiose, et évite ainsi les problèmes liés à l'identifiabilité de certains paramètres en conditions d'anoxie ou d'anaérobiose. À noter également que ce type d'approche est tout à fait applicable en pratique dans la mesure où la résolution du problème (6.15) nécessite entre 60 s et 90 s de temps de calcul¹.

Les résultats présentés sont de deux types :

- Dans un premier temps, l'ensemble des variables d'état du modèle réduit est supposé mesuré en ligne. Le rôle joué par l'observateur EKF est alors limité au filtrage des mesures disponibles, dans le but de réduire l'influence des bruits de mesure, *i.e.* robustifier l'algorithme d'estimation paramétrique. Les trajectoires de référence sont directement simulées au moyen du modèle réduit et des échelons sont imposés sur les valeurs des paramètres. Procéder ainsi permet de tester la capacité de l'algorithme NRLS à estimer les variations des paramètres du modèle réduit, ainsi que sa vitesse d'adaptation.
- En second lieu, l'état du procédé est supposé partiellement mesuré (concentrations S_{NO}^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_O^{ba} uniquement) et les trajectoires de référence correspondent au modèle ASM 1 de manière à tenir compte des erreurs de modélisation du procédé. La procédure d'estimation conjointe séquentielle est appliquée : les estimations des variables d'état X_{DCO}^{ba} , S_{ND}^{ba} sont utilisées pour actualiser les valeurs des paramètres du système. Ce type d'approche permet d'évaluer les performances de l'observateur/estimateur conjoint dans un contexte de fonctionnement proche de celui du procédé.

Validation de la méthode d'estimation

L'étape de validation nécessite d'analyser les performances de l'algorithme NRLS pour l'estimation en ligne des paramètres du modèle réduit. Il s'agit notamment d'évaluer la précision des estimations et la rapidité de convergence de l'algorithme. Pour cela, l'ensemble des concentrations du système est supposé mesuré (modèle réduit + bruit) et des échelons sont imposés sur les valeurs des paramètres du modèle réduit. Les cas où les concentrations incidentes du système sont mesurées ou pas sont envisagés successivement.

Cas où les perturbations incidentes sont mesurées *en ligne* :

L'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement du procédé

¹Temps CPU pour des PC équipés de processeurs AMD-Athlon® cadencés à 1.2 GHz.

permet d'établir que certains paramètres du modèle réduit sont fortement influents (*cf.* § 5.3). Les aspects relatifs à l'identifiabilité théorique et pratique de ce modèle interdisent cependant d'identifier, de façon systématique, l'ensemble de ces paramètres (*cf.* § 4.3). Il existe en effet de fortes corrélations entre les paramètres stœchiométriques Y_H , i_{NBM} et les paramètres spécifiques θ_1 , θ_2 , θ_4 et K_{DCO} ; des corrélations existent également entre certains paramètres spécifiques, *e.g.* θ_5 , K_{ND} et θ_1 , K_{DCO} . Conformément à ces résultats, seule l'estimation des paramètres θ_i ($1 \leq i \leq 5$) est ici envisagée; les valeurs des autres paramètres sont celles définies par défaut dans le Tab. 4.1 (p. 141). En pratique, faute de pouvoir estimer *en ligne* certains paramètres importants, il sera nécessaire d'effectuer une identification paramétrique *hors ligne*, préalablement à la mise en œuvre de l'observateur/estimateur conjoint.

Les résultats de l'estimation en ligne sur une journée sont présentés sur la Fig. 6.6. Ces résultats établissent clairement la capacité de l'algorithme NRLS à estimer les variations des paramètres du modèle réduit. Il permettent également de vérifier que l'adaptation est rapide suite à une variation brutale des paramètres. Des variations d'amplitudes parfois importantes sont cependant constatées autour des valeurs de référence des paramètres. Ces incertitudes résultent en partie des bruits de mesure, et ce malgré l'utilisation de l'observateur EKF pour le filtrage des données. L'existence de faibles corrélations entre les paramètres estimés peut également en être à l'origine. C'est le cas notamment pour les paramètres θ_1 et θ_2 , ou encore pour les paramètres θ_4 et θ_5 ; on peut d'ailleurs vérifier que l'augmentation de l'un des paramètres entraîne une augmentation de l'autre, et réciproquement.

Cas où les concentrations incidentes ne sont pas mesurées *en ligne* :

Les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} disposent également d'une forte influence vis-à-vis des conditions optimales de fonctionnement du procédé (*cf.* § 5.3). La méconnaissance de ces perturbations rend nécessaire leur estimation au même titre que les autres paramètres du modèle réduit. Du point de vue de l'identifiabilité pratique, les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} sont cependant respectivement corrélées avec les paramètres θ_2 et θ_4 (*cf.* § 4.3.4). L'estimation de ces concentrations est ici retenue au détriment des paramètres θ_2 et θ_4 . Ce choix est motivé par les fortes variations journalières que connaissent ces perturbations.

Les résultats de l'estimation des concentrations X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} au cours d'une journée sont donnés sur la Fig. 6.7 (les résultats relatifs à l'estimation des paramètres θ_1 , θ_3 , θ_5 ne sont pas présentés ici du fait de leurs similitudes avec ceux obtenus précédemment, Fig. 6.6). Ils démontrent que l'application de l'algorithme NRLS permet d'estimer ces perturbations de façon pertinente. À nouveau, les variations observées autour des valeurs de référence sont induites par les bruits de mesure. Elles résultent également de la compensation des erreurs commises sur les valeurs des paramètres θ_2 et θ_4 (paramètres non estimés).

Estimation conjointe de l'état et des paramètres

L'application de l'algorithme NRLS permet d'estimer les variations des paramètres et des perturbations incidentes du procédé de façon satisfaisante lorsque l'ensemble des variables d'état du procédé est mesuré. En pratique cependant, certaines concentrations ne sont

6.2. Estimation conjointe de l'état et des paramètres

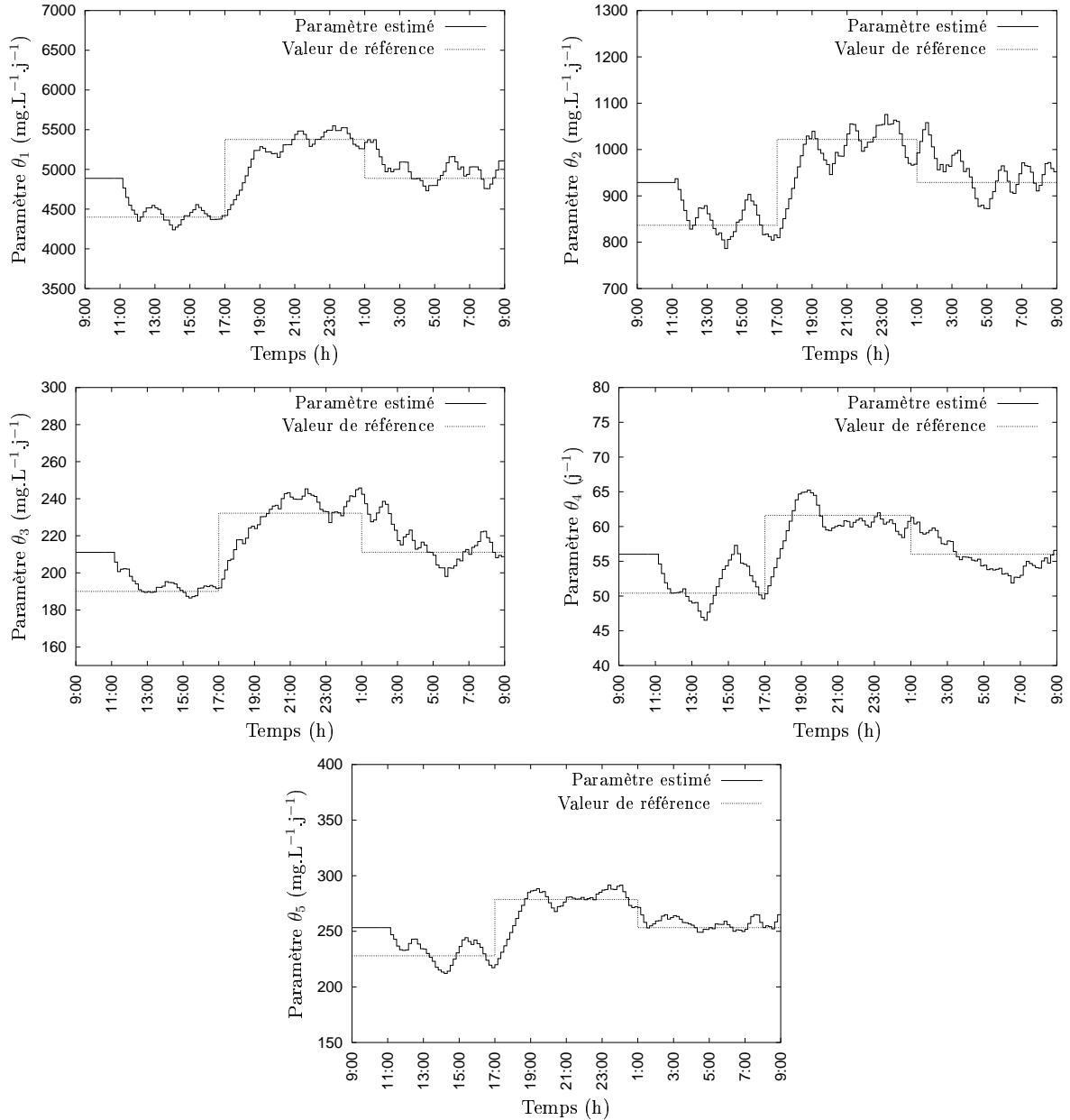


FIG. 6.6 – Résultats de l'estimation *en ligne* des paramètres du modèle réduit par la méthode des moindres carrés non récursifs lorsque les perturbations incidentes sont mesurées.

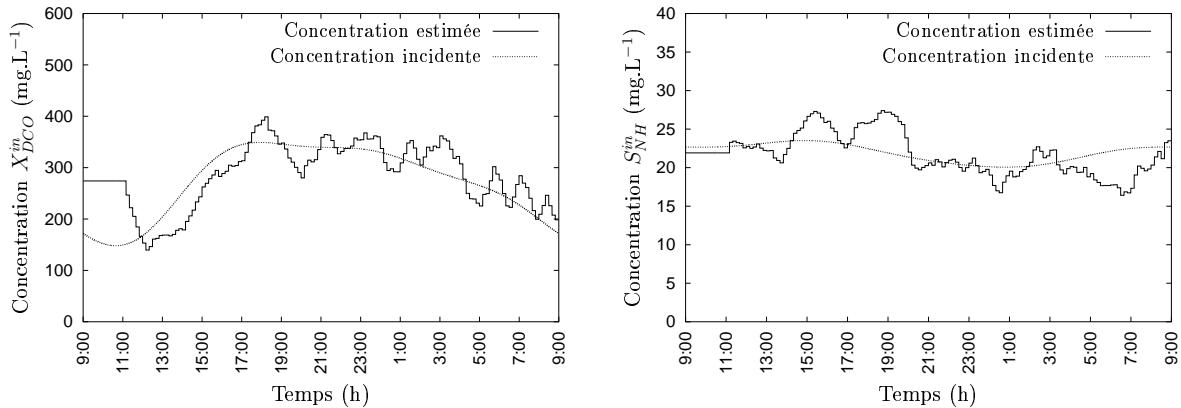


FIG. 6.7 – Résultats de l'estimation *en ligne* des concentrations incidentes X_{DCO}^{in} et S_{NH}^{in} par la méthode des moindres carrés non récursifs.

pas accessibles *en ligne*. Il devient alors nécessaire d'estimer conjointement l'état et les paramètres du modèle réduit (concentrations incidentes incluses).

Les résultats présentés dans ce paragraphe correspondent à l'utilisation séquentielle de l'observateur EKF et de l'algorithme NRRLS. Les concentrations incidentes sont supposées inconnues et les mesures de référence en S_O^{ba} , S_{NO}^{ba} et S_{NH}^{ba} sont générées par le modèle ASM 1. Ceci permet de tenir compte des erreurs de modélisation du procédé et de se rapprocher ainsi le plus possible des conditions réelles d'application de l'observateur/estimateur conjoint. En raison des corrélations qui existent entre les paramètres du modèle, seuls les paramètres spécifiques θ_1 , θ_3 , θ_5 et les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} sont estimés; les valeurs des autres paramètres du modèle réduit étant celles définies par défaut dans le Tab. 4.1 (p. 141).

Les résultats de l'estimation des paramètres et des concentrations incidentes sur 24 heures sont illustrés sur la Fig. 6.8. Les estimations des trois paramètres spécifiques θ_1 , θ_3 , θ_5 sont précises et les fluctuations autour des valeurs de référence sont limitées. L'évolution de la concentration incidente X_{DCO}^{in} est également correctement représentée. Un certain retard vis-à-vis du profil de référence est toutefois constaté lorsque ce dernier évolue rapidement en raison du temps d'adaptation de l'algorithme d'estimation. La concentration incidente S_{NH}^{in} est en revanche largement sous-estimée. Cet écart résulte de la surestimation de la valeur du paramètre θ_4 (valeur par défaut) : sous-estimer la valeur de S_{NH}^{in} permet ainsi d'équilibrer le bilan global d'apport en ammoniacal $D^{in} S_{NH}^{in} + \theta_4 S_{ND}^{ba}$. L'estimation de ce terme d'apport est illustrée sur la Fig. 6.9 (droite).

Les résultats de l'observation des variables d'état non mesurées X_{DCO}^{ba} et S_{ND}^{ba} sont représentés sur la Fig. 6.10.

- La concentration des composés azotés organiques solubles est correctement estimée. Seuls de faibles écarts (inférieurs à 0.1 mg.L^{-1}) sont en effet constatés par rapport à la concentration de référence. Ceci est lié au fait que le paramètre θ_5 est estimé avec précision (Fig. 6.8).
- Au contraire, l'estimation de la concentration des composés organiques biodégradables est largement biaisée. L'origine de cette surestimation (de l'ordre de 30 mg.L^{-1}) réside dans la mauvaise estimation du terme global d'apport de ces composés en début d'opération (Fig. 6.9 gauche). Mais bien que l'estimation de ces apports converge

6.2. Estimation conjointe de l'état et des paramètres

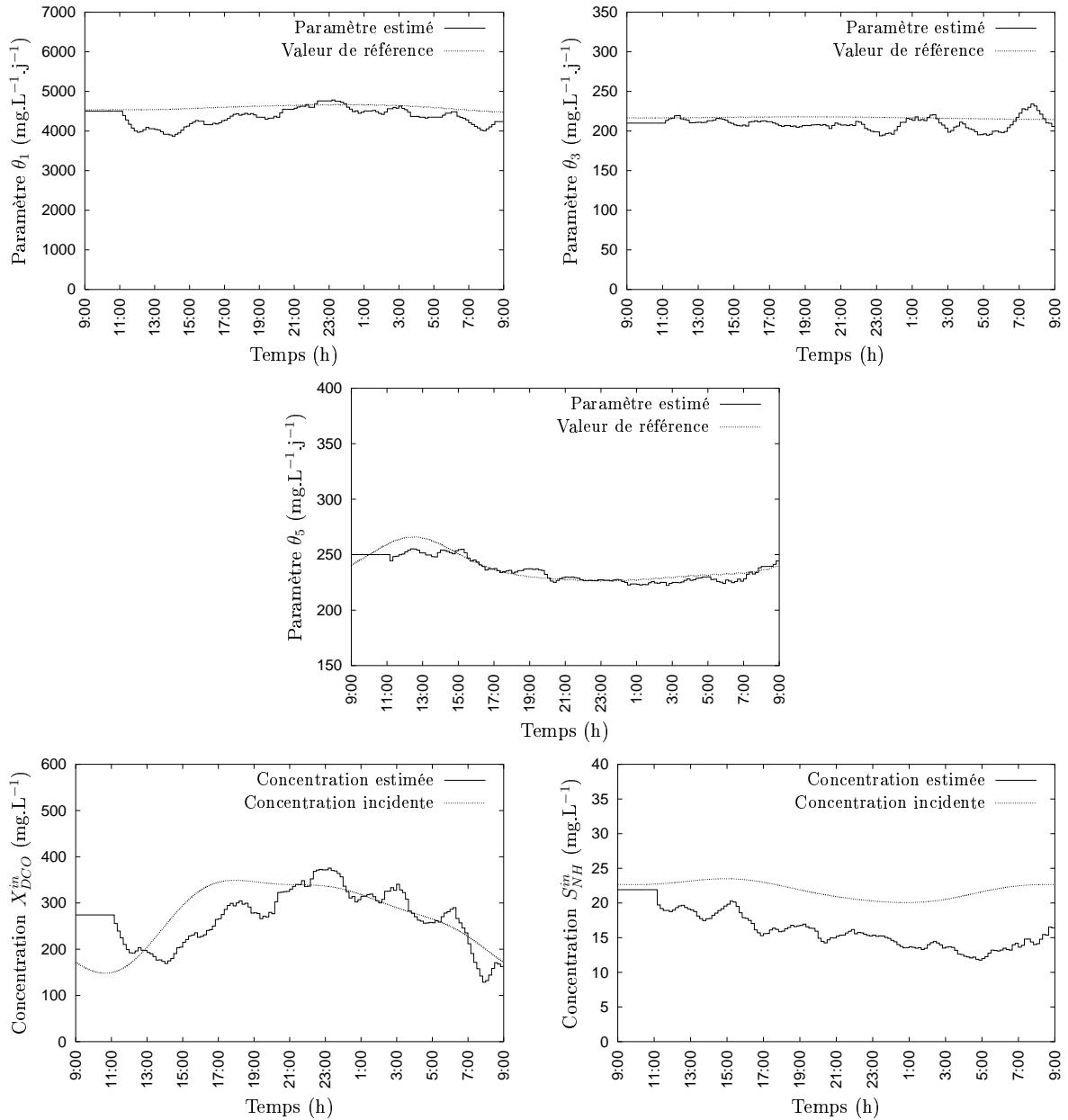


FIG. 6.8 – Résultats de l'estimation *en ligne* des paramètres et des perturbations du modèle réduit par la méthode des moindres carrés non récursifs lorsque les concentrations incidentes ne sont pas mesurées.

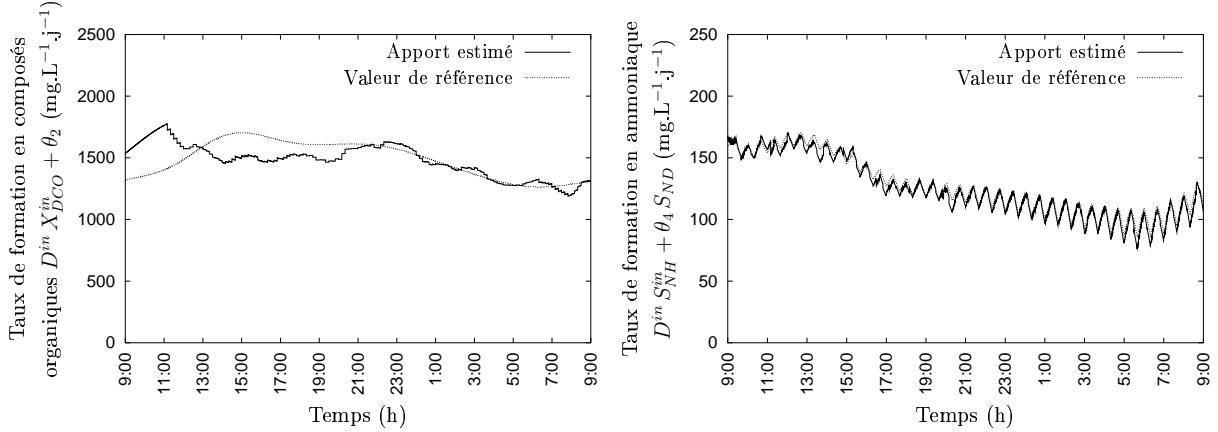


FIG. 6.9 – Résultats de l'estimation *en ligne* des taux de formation interne et d'apport des composés X_{DCO}^{ba} (Fig. gauche) et S_{ND}^{ba} (Fig. droite) par la méthode des moindres carrés non récursifs.

vers la valeur *réelle* après une dizaine d'heures, le biais d'observation ne s'atténue pas. L'observateur EKF n'apparaît pas en mesure de corriger l'estimation de \hat{X}_{DCO}^{ba} .

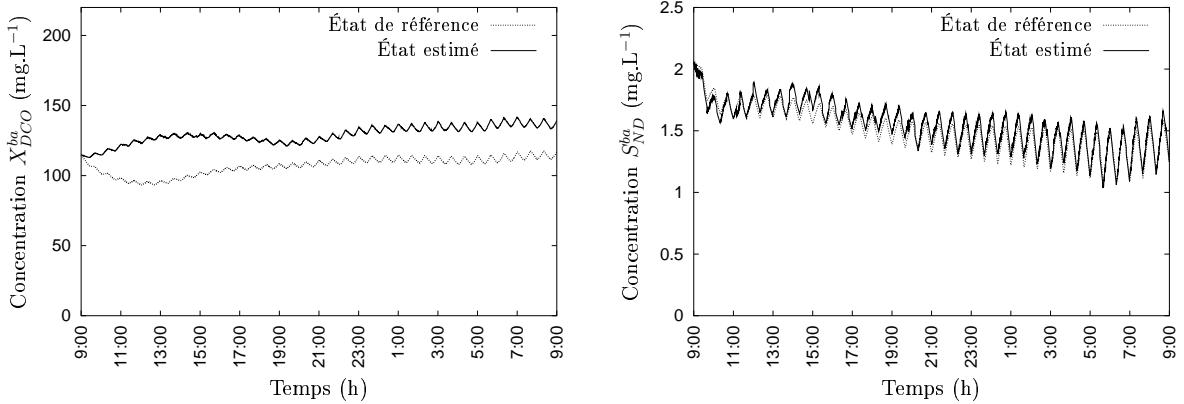


FIG. 6.10 – Résultats de l'observation des concentrations X_{DCO}^{ba} (Fig. gauche) et S_{ND}^{ba} (Fig. droite) lors de l'estimation conjointe de l'état et des paramètres du modèle réduit.

6.2.4 Conclusions

L'estimation conjointe de l'état et des paramètres par l'utilisation séquentielle du filtre de Kalman étendu et de l'algorithme des moindres carrés non récursif a été présentée dans cette partie. Les résultats obtenus en considérant toutes les variables d'état mesurées démontrent l'aptitude de l'algorithme NRLS à estimer les valeurs des paramètres et, le cas échéant, des concentrations incidentes du système. Lorsque l'état du procédé est partiellement mesuré et que les erreurs de modélisation sont prises en compte, les résultats obtenus sont moins concluants. En particulier, la concentration des composés organiques biodégradables apparaît biaisée lorsque l'estimation initiale de la concentration incidente de ces mêmes composés est incorrecte.

À nouveau, il semble que l'utilisation d'un observateur non-linéaire puisse permettre

d'améliorer l'estimation des composés X_{DCO}^{ba} . Ce même type d'observateur pourrait également être appliqué pour l'estimation conjointe et simultanée de l'état et des paramètres du modèle réduit. Si aucune amélioration majeure n'était malgré tout obtenue, il serait nécessaire de considérer des mesures supplémentaires. Faute de pouvoir mesurer directement la concentration de X_{DCO} , il pourrait être intéressant d'évaluer l'apport de la mesure du potentiel redox, des mesures respirométriques (OUR) ou encore de la spectrométrie UV.

Précisons également que l'utilisation de la simulation numérique pour évaluer les performances des algorithmes d'observation et d'estimation ne constitue qu'une première étape, et ce malgré tout le soin qui est apporté à la reproduction des conditions réelles de fonctionnement du procédé. La validation de ces méthodes d'estimation doit impérativement être envisagée dans un cadre plus pratique, en s'intéressant notamment à des installations de traitement existantes.

L'algorithme d'estimation conjointe de l'état et des paramètres du système a été développé dans la perspective de la commande optimale en *boucle fermée* du procédé. Étant donné ses faiblesses, il sera nécessaire d'être particulièrement vigilant quant aux répercussions que cela peut avoir sur les performances de ce type de commande. Ces aspects sont développés dans la dernière partie du chapitre.

6.3 Commande optimale du procédé

La résolution d'un problème d'optimisation dynamique est basée sur un modèle du procédé supposé idéal. En pratique, cette hypothèse n'est généralement pas concevable, en raison des nombreuses sources d'écart qui existent entre le système idéal modélisé et le système réel.

- Les modèles de connaissance sont établis sur la base de considérations physiques des phénomènes mis en jeu dans un procédé. Il ne constituent donc qu'une approximation du procédé et ne représentent pas nécessairement la réalité.
- La modélisation du système conduit à négliger certains phénomènes de faible ampleur, et à globaliser les phénomènes majeurs en les caractérisant par des paramètres constants régis par des lois de variations plus ou moins élémentaires (relation linéaire, exponentielle, *etc.*). Certains d'entre eux peuvent présenter des écarts, parfois importants, par rapport à la réalité. L'analyse de la sensibilité permet, à cet égard, d'identifier les paramètres dont les écarts ont la plus forte influence sur les conditions optimales de fonctionnement du procédé.
- Des perturbations externes, qui se manifestent sous la forme de bruits ou de brusques variations aléatoires, peuvent écarter le système réel de la trajectoire de référence déterminée par l'application des méthodes d'optimisation dynamique.

La mise en œuvre de la commande optimale en *boucle fermée* est indispensable pour tenir compte des effets de ces différentes sources d'erreurs sur les objectifs fixés. Un aperçu des différentes techniques de commande optimale est donné dans le paragraphe 6.3.1. Les aspects relatifs à l'implémentation numérique de la commande prédictive du procédé sont ensuite précisés (§ 6.3.2), et quelques résultats sont présentés dans le cadre de la

minimisation des rejets d'azote total des petites stations d'épuration à boues activées (§ 6.3.3).

6.3.1 Position du problème

Plusieurs techniques de mise en œuvre de la commande optimale en *boucle fermée* se distinguent. Dans le cadre d'une commande continue, l'utilisation d'une loi de retour d'état est souvent retenue. Dans les cas les plus simples, *i.e.* pour les systèmes dynamiques linéaires affines en la commande, la loi de commande est connue pour être de type *bang-bang* et les transitions entre les arêtes d'un polyèdre défini par le domaine de commande dépendent du signe de fonctions analytiques données par les conditions d'optimalité (Bryson et Ho, 1975). Pour les problèmes quadratiques, les conditions d'optimalité permettent également d'élaborer une expression analytique de la loi de retour d'état optimale $u(t) = k(\mathbf{x})$. Dans les cas plus complexes, la synthèse d'une loi de commande optimale est plus délicate. Elle peut être déduite de la dérivation des conditions d'optimalité (Modak et Lim, 1987), mais reste limitée aux cas où le système dynamique non-linéaire est simple du point de vue de l'index et est affine en la commande (Palanki et al., 1993, 1994), *e.g.*

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = f(\mathbf{x}) + u g(\mathbf{x}) \quad (6.17)$$

Cette forme n'est cependant pas assez générale pour représenter le système dynamique étudié. L'utilisation d'autres approches apparaît nécessaire.

- Une première approche consiste à linéariser le système au voisinage de la trajectoire optimale, et à poursuivre la trajectoire optimale de référence au moyen d'un régulateur classique de type PI ou PID. Cette approche, basée sur les récents développements en commande des systèmes non-linéaires (Isidori, 1995; Corriou, 1996), est couramment utilisée en pratique. Toutefois, la correction des écarts n'est plus optimale au sens du critère, puisque le retour sur la trajectoire de référence ne constitue plus une politique optimale. Une amélioration vis-à-vis de l'utilisation de régulateurs PI ou PID consiste à optimiser les variations du critère autour de la valeur optimale, à partir du modèle linéarisé. La résolution du problème d'optimisation quadratique sous contraintes linéaires correspondant permet alors de déterminer une loi de commande optimale *analytique*, en fonction des variations de l'état et des contraintes du problème (Bryson et Ho, 1975; Fournier, 1998; Fournier et al., 1999).
- Une autre alternative consiste à calculer (*hors ligne*) et à stocker un ensemble de trajectoires optimales $(\mathbf{x}_V(t), \mathbf{u}_V(t), \mathbf{p}_V)$ sur un voisinage $V \subset \mathbb{R}^n$ des conditions optimales nominales de référence $(\mathbf{x}_n(t), \mathbf{u}_n(t), \mathbf{p}_n)$. En cas d'écart par rapport aux conditions de fonctionnement nominales, la commande optimale en boucle fermée consiste à sélectionner, parmi toutes les trajectoires possibles, celle étant la plus proche des conditions de fonctionnement réelles du procédé, et à appliquer la commande correspondante. Cette approche, aussi connue sous le nom de *commande par faisceau de trajectoires optimales*, évite le calcul en ligne des politiques de commande optimales et ne nécessite aucun développement théorique. Elle est cependant inapplicable dès lors que la dimension du système est supérieure à 2 ou 3, en raison du nombre de trajectoires perturbées qu'il devient nécessaire de calculer au préalable

(temps de calcul et capacité de stockage). Elle est également peu adaptée aux cas où les écarts par rapport aux conditions nominales sont importants.

- Une troisième approche, plus naturelle du point de vue intuitif, consiste à actualiser de façon régulière les solutions optimales du problème, et à les appliquer partiellement sur un intervalle prédéfini (horizon glissant). L'application de cette approche, également connue sous le nom de *commande prédictive*, est aujourd'hui en pleine expansion du fait de l'amélioration des moyens de calcul. La possibilité de prendre en compte des contraintes lors de l'actualisation du profil de commande la rend particulièrement attractive.

Pour la commande optimale des petites unités de traitement à boues activées, les politiques d'aération sont définies par le vecteur de paramètres $\mathbf{p} = [a^1, \ell^1, \dots, a^{N_c}, \ell^{N_c}]^T$. À l'instar des développements théoriques utilisés pour définir une loi de retour d'état pour les variables continues $u(t)$, il est ici possible de définir une loi de retour d'état donnant les variations $\delta\mathbf{p}$ du vecteur de commande en fonction des écarts $\delta\mathbf{x}$ et $\delta\phi$ sur l'état et les contraintes du problème ; l'objectif étant par exemple de poursuivre les trajectoires optimales calculées (*hors ligne*) sur le long terme dans la Partie I (*cf.* § 3.5, p. 99). Cette approche s'avère malgré tout inadaptée en pratique, en raison des larges écarts que peuvent induire les perturbations incidentes du système vis-à-vis de ces conditions optimales nominales de fonctionnement. D'autre part, il est difficile d'intégrer les contraintes de fonctionnement et d'état du problème. Compte tenu de la dimension du système et des fortes variations du procédé, la mise en œuvre de la commande par faisceau de trajectoires optimales n'est pas non plus envisageable. L'utilisation des méthodes de commande prédictive (non-linéaire) constitue donc la principale alternative.

6.3.2 Mise en œuvre de la commande prédictive

Les méthodes de commande prédictive (*Model-based Predictive Control*, MPC) constituent une large classe de méthodes qui partagent toutes les caractéristiques suivantes (Fikar, 1999) :

- un modèle de procédé est explicitement utilisé pour prédire la sortie du procédé sur un horizon fini donné ;
- un profil de commande est calculé de manière à minimiser une certaine fonction objectif (généralement quadratique) sur cet horizon ;
- l'application du profil optimal de commande n'est effectué que sur une partie de l'horizon de prédiction (période d'échantillonnage).

Ces méthodes sont réputées pour leur robustesse en commande des procédés. Leurs performances surpassent généralement celles des contrôleurs PID et leurs applications sont possibles avec des procédés à non minimum de phase, instables en boucle ouverte, multivariables ou qui présentent des retards purs (Corriou, 1996). La MPC permet également de prendre en compte des contraintes, ce qui, du point de vue de la mise en œuvre pratique, constitue un avantage certain par rapport aux autres méthodes de commande usuelles.

Chen et Allgöwer (1998) posent le problème de la MPC comme la résolution *en ligne* et en *boucle ouverte* d'un problème d'optimisation dynamique (linéaire ou non-linéaire), éventuellement sous contraintes, sur un horizon de temps fini. Le principe de la méthode

est détaillé sur la Fig. 6.11.

1. Le modèle du procédé est utilisé pour prédire les sorties $\hat{y}(t)$ futures sur un horizon $T_p = t_{k+N_p} - t_k$, avec N_p le nombre de points d'échantillonnage sur l'horizon de prédiction. Ces prédictions sont calculées sur la base des informations disponibles à l'instant t_k et du profil de commande futur à déterminer.
2. Un problème d'optimisation constitué d'une fonction objectif et d'éventuelles contraintes est résolu afin de déterminer le profil de commande futur. La fonction objectif peut être basée sur les prédictions futures $\hat{y}(t)$, le profil de commande futur $u(t)$ et, le cas échéant, le profil de référence futur $r(t)$.
3. Bien que le profil de commande optimal soit calculé sur l'horizon de commande $T_u = t_{k+N_u} - t_k$, seule la partie comprise entre l'instant initial et l'instant d'échantillonnage suivant est appliquée au procédé. La procédure est alors répétée, selon le concept de l'*horizon glissant*.

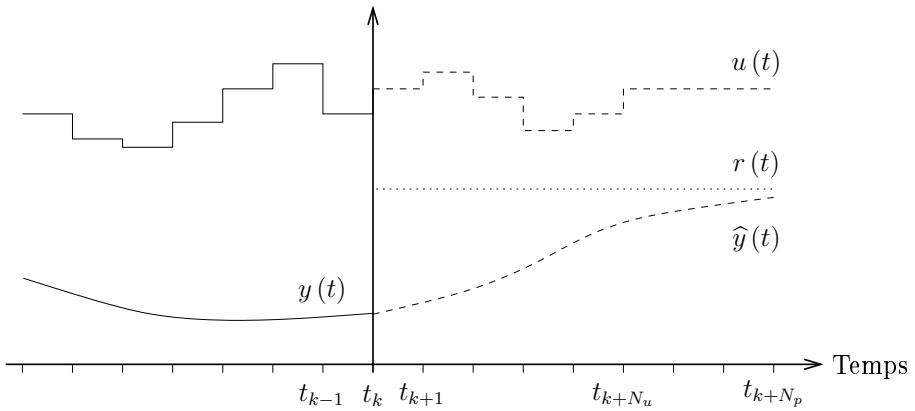


FIG. 6.11 – Schéma de principe de la commande prédictive.

Les aspects relatifs à la stabilité de cette méthode sont d'une importance particulière. Si de nombreux résultats ont pu être établis dans le cadre des systèmes dynamiques linéaires (e.g. Rawlings et Muske, 1993; Polak et Yang, 1993), la question reste ouverte, dans le cas général, pour la commande prédictive des systèmes non-linéaires. Dans la mesure où l'optimisation est effectuée sur un horizon de temps fini, il n'est en effet pas possible de statuer sur la stabilité asymptotique du système en *boucle fermée*. D'importantes contributions dans le domaine ont été proposées par Mayne et Michalska (1990), Michalska et Mayne (1993), Yang et Polak (1993) et, plus récemment, Chen et Allgöwer (1998). Ces problèmes sortent cependant du cadre de ce travail. Ils ne devraient toutefois pas se poser étant donné que le procédé est naturellement stable en *boucle ouverte*. Il s'agira malgré tout d'apporter une attention particulière au réglage des paramètres de l'algorithme, notamment le choix de l'horizon de prédiction et de l'horizon de commande.

La MPC a fait l'objet de très nombreuses applications pour la commande des procédés chimiques (Lee et Cooley, 1997; Qin et Badgwell, 1997). Dans le domaine du traitement des eaux en revanche, seules quelques applications ont été proposées. On peut notamment citer les travaux de Lukasse (Lukasse et al., 1997, 1998; Lukasse, 1999), de Nejjari (Nejjari et al., 1997, 1998, 1999) et de Weijers (Weijers et al., 1995, 1997; Weijers, 2000). L'objectif est généralement la poursuite d'une trajectoire de référence (consigne sur les rejets d'azote ou d'ammoniaque, consigne sur la concentration en oxygène dissous, etc.) par l'application

6.3. Commande optimale du procédé

des méthodes de commande prédictive linéaires ou non-linéaires. Il s'agit de déterminer la commande discrétisée $\Delta \mathbf{u}_k, \dots, \Delta \mathbf{u}_{k+N_u}$ (ou paramétrée \mathbf{p}) qui minimise un critère \mathcal{J} de la forme¹ :

$$\begin{aligned} \min_{\Delta \mathbf{u}_k, \dots, \Delta \mathbf{u}_{k+N_u}} \mathcal{J} = & \sum_{i=k}^{k+N_p} \|\hat{\mathbf{y}}(t_i) - \mathbf{r}(t_i)\|_{\Gamma^p} + \sum_{i=k}^{k+N_u} \|\Delta \mathbf{u}_i\|_{\Gamma^u} \\ & + \text{contraintes sur } \mathbf{u}, \Delta \mathbf{u} \text{ et } \mathbf{y} \end{aligned} \quad (6.18)$$

où $\Gamma^p \in \mathbb{R}^{p \times p}$, $\Gamma^u \in \mathbb{R}^{m \times m}$ sont des matrices de pondération symétriques définies positives.

L'approche adoptée dans cette étude est différente. Il ne s'agit pas de déterminer la commande qui minimise l'écart entre une trajectoire de référence donnée et les prédictions du modèle. Au contraire, la commande est déterminée en résolvant un problème d'optimisation dynamique général sur un horizon fini **sans** l'utilisation de trajectoire de référence. D'autre part, le problème étudié correspond à la commande prédictive non-linaire du procédé (*Nonlinear Model-based Predictive Control*, NMPC). Dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total des petites stations d'épuration par exemple, le problème d'optimisation *en ligne* s'écrit :

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}}_k = \arg \left\{ \min_{\mathbf{p}} \mathcal{J} = \frac{1}{T_p} \int_{t_k}^{t_k+T_p} [S_{NO}(t) + S_{NH}(t) + S_{ND}(t)] dt \right\} \\ \text{soumis à : } \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}^{(1)}(\mathbf{x}(t), \hat{\boldsymbol{\theta}}_k), \quad t_c^{i-1} \leq t \leq t_b^i \\ \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}^{(2)}(\mathbf{x}(t), \hat{\boldsymbol{\theta}}_k), \quad t_b^i \leq t \leq t_c^i \\ \mathbf{x}(t_k) = \hat{\mathbf{x}}_k \\ \mathbf{0} = \mathbf{g}(\mathbf{p}) \\ 0 = s^{(2i-1)}(\mathbf{p}, t_b^i) \\ 0 = s^{(2i)}(\mathbf{p}, t_c^i) \end{aligned} \quad (6.19)$$

où $\hat{\mathbf{p}}_k$ désigne l'estimation des paramètres de commande optimaux du procédé et $\hat{\mathbf{x}}_k$, $\hat{\boldsymbol{\theta}}_k$ sont les estimations de l'état et des paramètres du modèle réduit à l'instant t_k . La formulation du problème d'optimisation *en ligne* de la consommation énergétique de l'aérateur est similaire. À noter également que les problèmes résultants sont analogues aux problèmes d'optimisation (1.29) et (1.36) en *boucle ouverte*. L'application de la méthode de l'adjoint pour le calcul des gradients du critère \mathcal{J} par rapport aux paramètres \mathbf{p} donne d'ailleurs les mêmes expressions (*cf.* Syst. (3.3), p. 70).

La mise en œuvre de la commande prédictive non-linéaire du procédé nécessite d'utiliser séquentiellement les algorithmes d'observation/estimation conjointe et d'optimisation. Le principe de la méthode de commande est schématisé sur la Fig. 6.12.

¹Pour tout vecteur $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\|\mathbf{x}\|$ désigne la norme (norme L1 ou L2) et $\|\mathbf{x}\|_\Gamma$ la norme pondérée, *e.g.* $\|\mathbf{x}\|_\Gamma^2 = \mathbf{x}^T \cdot \Gamma \cdot \mathbf{x}$ avec Γ une matrice hermitienne définie positive.

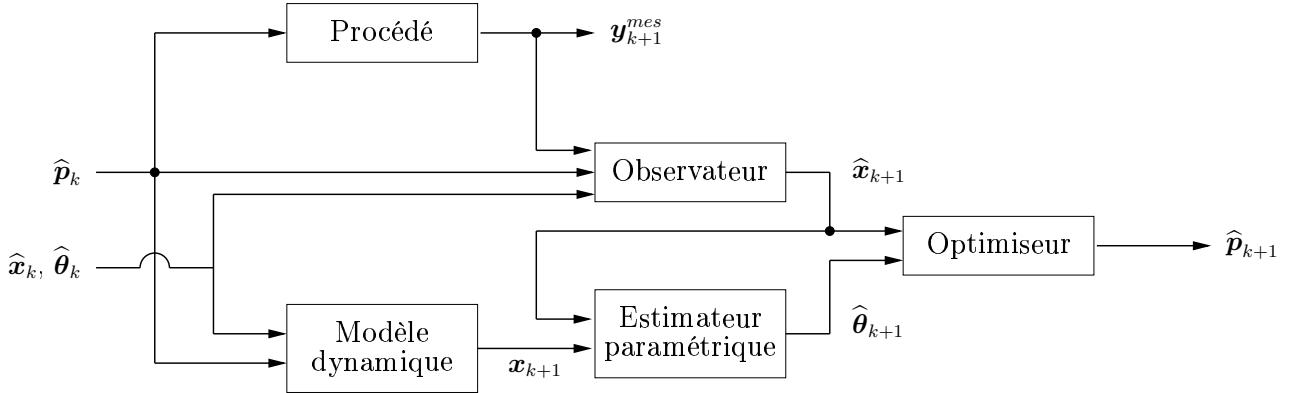


FIG. 6.12 – Mise en œuvre de la commande prédictive non-linéaire du procédé.

6.3.3 Commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées

La mise en œuvre de la commande optimale en *boucle fermée* des petites stations d'épuration à boues activées fait l'objet de ce paragraphe. Il ne s'agit pas d'effectuer l'étude exhaustive des aspects relatifs à la mise en œuvre pratique de cette approche, mais plutôt d'en démontrer l'applicabilité et les potentialités. Les résultats présentés sont relatifs au problème de la minimisation des rejets d'azote total. Le procédé est simulé au moyen du modèle ASM 1 (bruité) et les perturbations incidentes imposées correspondent aux perturbations réelles de l'unité de traitement (*cf.* Fig. 3.1, p. 65) afin de se rapprocher le plus possible du fonctionnement réel du procédé.

Les performances de la commande optimale en *boucle fermée* sont ensuite évaluées en comparant les résultats obtenus à ceux relatifs à la gestion actuelle du procédé. D'autres comparaisons avec des modes de gestions usuels, *i.e.* l'asservissement de l'aérateur à la concentration en oxygène dissous et à la concentration en ammoniaque, sont également établies.

Commande optimale en *boucle fermée* des rejets d'azote total

La mise en œuvre pratique de la commande optimale du procédé nécessite d'utiliser séquentiellement l'algorithme d'observation/estimation conjointe de l'état et des paramètres du modèle et l'algorithme d'optimisation dynamique. Les caractéristiques de l'observateur/estimateur conjoint considéré ont déjà été détaillées (*cf.* § 6.1.3 et 6.2.3). Les concentrations S_O^{ba} , S_{NH}^{ba} et S_{NO}^{ba} sont supposées mesurées *en ligne* (à des fréquences différentes), ainsi que le débit incident Q^{in} . L'utilisation de l'observateur EKF couplé à l'algorithme NRLS permet d'estimer les variables d'état X_{DCO}^{ba} , S_{ND}^{ba} , les concentrations incidentes X_{DCO}^{in} , S_{NH}^{in} et les paramètres spécifiques θ_1 , θ_3 , θ_5 .

Les politiques optimales d'aération sont déterminées en *boucle ouverte* par la résolution du problème d'optimisation dynamique (6.19). Ces profils sont actualisés toutes les 10 minutes. Conformément à la gamme de validité du modèle réduit (*cf.* § 4.3.4), le calcul est effectué sur un horizon de prédiction $T_p = T_u = 8$ heures, pour $N_c = 6$ cycles d'aération (18 cycles par jour). Sur cet horizon, les durées des cycles $\ell^1, \dots, \ell^{N_c}$ sont considérées iden-

6.3. Commande optimale du procédé

tiques (optimisation de type $(a^k, \bar{\ell})$, cf. chapitre 3) et toutes les perturbations incidentes (débit et concentrations) sont prises constantes.

Le profil optimal d'aération résultant de l'application de la commande en *boucle fermée* du procédé sur 6 jours est donné sur la Fig. 6.13. La configuration des cycles devient rapidement analogue d'un jour à l'autre. Il est également intéressant de constater que ce profil est comparable à celui obtenu en *hors ligne* sur le long terme (cf. Fig. 3.36, p. 102). Une diminution proche de 10% de la durée journalière d'aération est cependant obtenue dans ce cas, soit environ 1h05'. Cette baisse du taux moyen d'aération traduit néanmoins une dégradation des bénéfices de l'optimisation. Elle est inhérente à l'application *en ligne* des algorithmes de commande en raison (i) des erreurs de modélisation du procédé, (ii) des bruits de mesure, (iii) des perturbations incidentes et (iv) des incertitudes d'estimation de l'état et des paramètres du système.

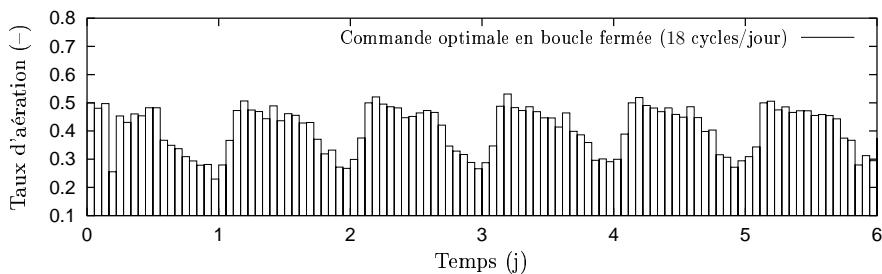


FIG. 6.13 – Commande optimale du système d'aération en *boucle fermée*.

La comparaison des profils de rejets d'azote total correspondants est présentée sur la Fig. 6.14 (haut). Alors que les rejets sont analogues le premier jour, une nette distinction des deux profils s'établit ensuite. Au cours du 6^{ème} jour, la concentration moyenne d'azote total est de l'ordre de 5.8 mg.L^{-1} contre 4.8 mg.L^{-1} en appliquant la politique d'aération déterminée *hors ligne*, soit une augmentation d'environ 20%.

D'autre part, les profils de concentration en biomasses hétérotrophe (Fig. 6.14 bas) et autotrophe (Fig. 6.14 milieu) accusent une diminution. Cette diminution se stabilise rapidement pour la biomasse hétérotrophe. Elle semble se poursuivre, en revanche, pour la biomasse autotrophe. Ces aspects soulèvent un problème important. Étant donné que la concentration $X_{B,A}^{ba}$ n'intervient qu'indirectement dans le modèle réduit (4.21) par le biais du paramètre θ_3 , il n'est pas possible de tenir compte de sa dynamique lors du calcul des politiques optimales d'aération. À terme, cette baisse ne semble toutefois pas devoir constituer une menace pour le fonctionnement de l'unité de traitement dans la mesure où elle est lente. Si ce problème s'avérait malgré tout, il serait nécessaire d'envisager une modification du modèle réduit (prise en compte de certaines dynamiques lentes).

À l'origine de la différence entre les politiques d'aération calculées *hors ligne* et *en ligne* se trouve également le problème de l'estimation de l'état et des paramètres du modèle réduit. Des faiblesses de l'algorithme utilisé ont en effet été détectées dans la partie 6.2.3, pour l'observation de la concentration X_{DCO}^{ba} en particulier. Une comparaison entre les valeurs de référence et estimées des concentrations non mesurées est présentée sur la Fig. 6.15.

- La concentration S_{ND}^{ba} est correctement estimée durant les premières 24 heures. Des différences parfois supérieures à 0.5 mg.L^{-1} apparaissent ensuite, de façon régulière, au cours des jours suivants. Elles sont liées à une mauvaise estimation des termes

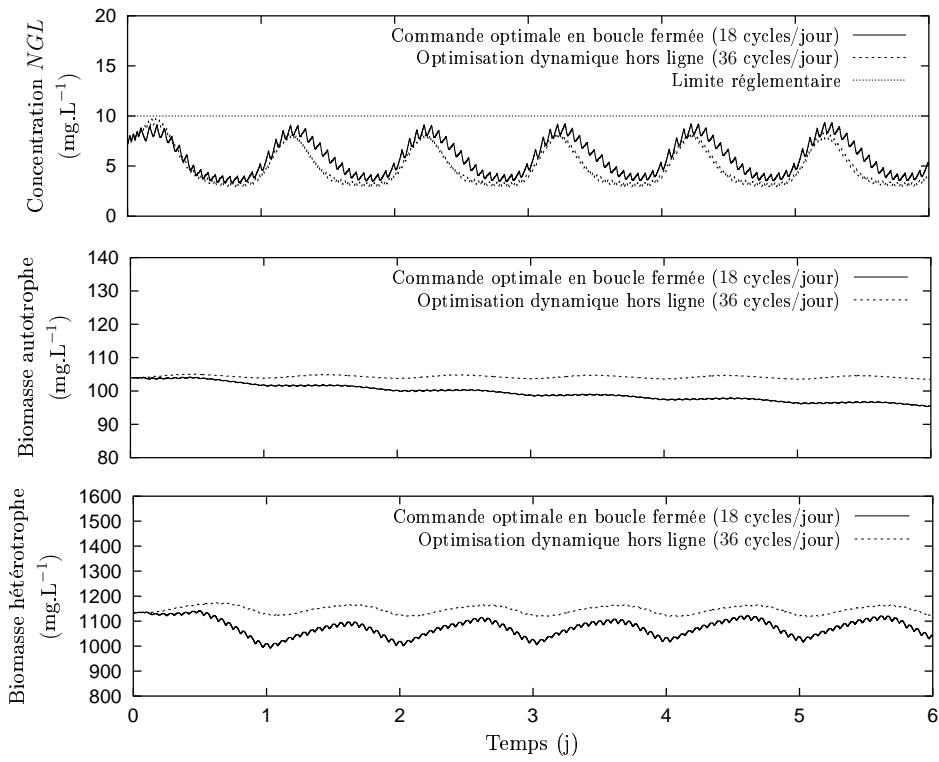


FIG. 6.14 – Comparaison des résultats relatifs à la commande optimale en *boucle fermée* et à l’optimisation dynamique *hors ligne* du procédé : profil de rejet d’azote total (Fig. haut) et évolutions des concentrations en biomasses autotrophe (Fig. milieu) et hétérotrophe (Fig. bas).

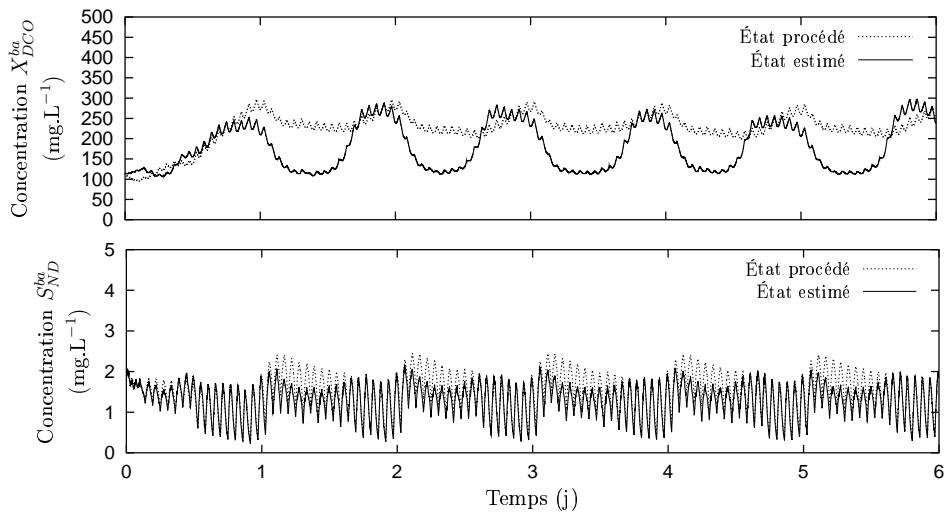


FIG. 6.15 – Résultats de l’observation des concentrations X_{DCO}^{ba} (Fig. haut) et S_{ND}^{ba} (Fig. bas) lors de l’opération.

6.3. Commande optimale du procédé

d'apport et de consommation de ces composés et sont également responsables de la sous-estimation du terme d'apport en ammoniacal (Fig. 6.16 droite). Ces différences restent malgré tout limitées et n'ont qu'une faible influence sur le calcul des conditions optimales de fonctionnement du procédé.

- Les erreurs d'estimation des composés organiques biodégradables sont en revanche plus problématiques. Si les estimations sont à nouveau satisfaisantes le premier jour, les différences constatées ensuite peuvent atteindre ponctuellement 100 mg.L^{-1} . La principale source d'écart est relative aux erreurs d'estimation de la concentration incidente X_{DCO}^{in} , erreurs qui se reportent directement sur le terme d'apport de ces composés (Fig. 6.16 gauche). Une mauvaise estimation des composés organiques présents dans le réacteur peut avoir une influence notable sur le taux de dégradation des composés nitrés (dénitrification). Or, sous-estimer la concentration X_{DCO}^{ba} revient ici à sous-estimer le taux de dénitrification et se solde par la surestimation des périodes d'anoxie. Ceci explique d'ailleurs le fait que le taux d'aération moyen résultant soit sensiblement inférieur au taux optimal déterminé *hors ligne*.

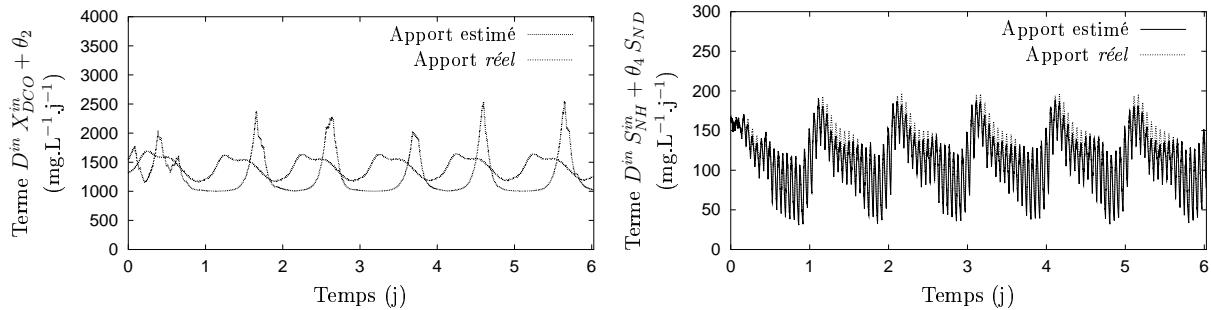


FIG. 6.16 – Résultats de l'estimation *en ligne* des taux de formation interne et d'apport des composés X_{DCO}^{ba} (Fig. gauche) et S_{ND}^{ba} (Fig. droite) lors de l'opération.

Ces aspects illustrent clairement la nécessité de mettre en œuvre des méthodes d'observation et d'estimation plus performantes, *e.g.* l'application d'observateurs non-linéaires pour l'estimation conjointe (et simultanée) de l'état et des paramètres du modèle réduit. Malgré la perte d'optimalité qui en résulte, les améliorations qui sont susceptibles d'être apportées par ce type de commande restent conséquentes. Ces résultats sont présentés ci-dessous.

Performances de la commande optimale en *boucle fermée*

L'objet de ce paragraphe est d'évaluer le gain que peut apporter la commande optimale en *boucle fermée* du procédé par rapport au fonctionnement actuel de l'unité de traitement. Pour illustrer pleinement les potentialités de la méthode, une comparaison est également effectuée avec deux modes de gestion habituels, basés respectivement sur la mesure de la concentration en oxygène dissous et le suivi de l'azote ammoniacal dans le réacteur biologique¹ :

¹L'asservissement de l'aérateur à la mesure du potentiel redox, bien que très répandu en pratique, n'est pas considéré ici. À notre connaissance, il n'existe pas de méthodes simples permettant de calculer la valeur du potentiel redox en fonction des variables d'état du procédé (modèle ASM 1). Les modèles développés

- Dans le cadre de l'asservissement à la concentration en oxygène dissous, le nombre journalier et la durée des cycles d'aération sont fixés (12 cycles de 2 heures). Le démarrage des turbines coïncide avec le début de chaque cycle et leur fonctionnement se poursuit jusqu'à ce que la concentration en oxygène dissous dépasse $S_O^{max} = 2 \text{ mg.L}^{-1}$.
- Le principe de l'asservissement à la concentration en ammoniaque est analogue. La condition d'arrêt de l'aérateur correspond alors au franchissement d'une concentration minimale en azote ammoniacal $S_{NH}^{min} = 1 \text{ mg.L}^{-1}$.

Les résultats de cette comparaison sont donnés dans le Tab. 6.3 et les profils de rejet d'azote total correspondants sont présentés sur la Fig. 6.17. Toutes ces simulations sont effectuées à partir des mêmes conditions initiales du procédé et les valeurs reportées correspondent au 6^{ème} jour de fonctionnement.

TAB. 6.3 – Comparaison des différents modes de gestion des petites stations d'épuration à boues activées

Mode de gestion	Rejets moyens d'azote total	Durée journalière d'aération (taux)	Dépassement des normes de rejet
Actuel	7.26 mg.L ⁻¹	12h45' (53.1%)	5h50'
Asserv. conc. S_O^{ba}	6.67 mg.L ⁻¹	11h05' (46.2%)	4h30'
Asserv. conc. S_{NH}^{ba}	6.87 mg.L ⁻¹	10h35' (44.1%)	3h30'
Commande optimale	5.82 mg.L ⁻¹	10h00' (41.6%)	aucun

L'application des modes de gestion habituels ne permet pas d'apporter d'améliorations substantielles vis-à-vis du fonctionnement actuel du procédé. Dans les deux cas, la réduction des rejets d'azote total n'est que de l'ordre de 0.5 mg.L⁻¹ et d'importants dépassements des normes de rejets restent à craindre. Si la durée de ces dépassements diminue, une augmentation de leurs intensités est d'ailleurs constatée (Fig. 6.17). Seule une baisse de la durée journalière d'aération, voisine de 2 heures, est ici obtenue.

L'application de la commande optimale en *boucle fermée* du procédé apporte des améliorations bien plus conséquentes par rapport au mode de fonctionnement actuel. La concentration moyenne des rejets d'azote total est réduite de 20% et les normes de rejets sont respectées. Cette réduction s'accompagne également d'un baisse supérieure à 20% de la durée journalière d'aération (environ 2h45'). Cette tendance avait déjà été constatée d'ailleurs lors de la détermination *hors ligne* des politiques optimales d'aération (*cf.* Chap. 3). Aussi, bien que la réduction du taux d'aération n'ait pas été directement recherchée, elle apporte un intérêt supplémentaire à la mise en œuvre pratique de ce type de commande.

se présentent généralement sous la forme suivante (*e.g.* Koch et Oldham, 1985; Héduit et Thévenot, 1992; Ryckaert, 1998) :

$$\text{redox} = \alpha_1 \log(10^3 S_{NH}^{ba} + 1) + \alpha_2 \log(10^3 S_{NO}^{ba} + 1) + \alpha_3 \log(10^3 X_{DCO}^{ba} + 1) + \alpha_4 \log(10^3 S_O^{ba} + 1)$$

Il devient alors nécessaire de disposer de mesures expérimentales complémentaires afin d'estimer les valeurs les paramètres $\alpha_1, \dots, \alpha_4$, qui sont de plus susceptibles de présenter des variations temporelles.

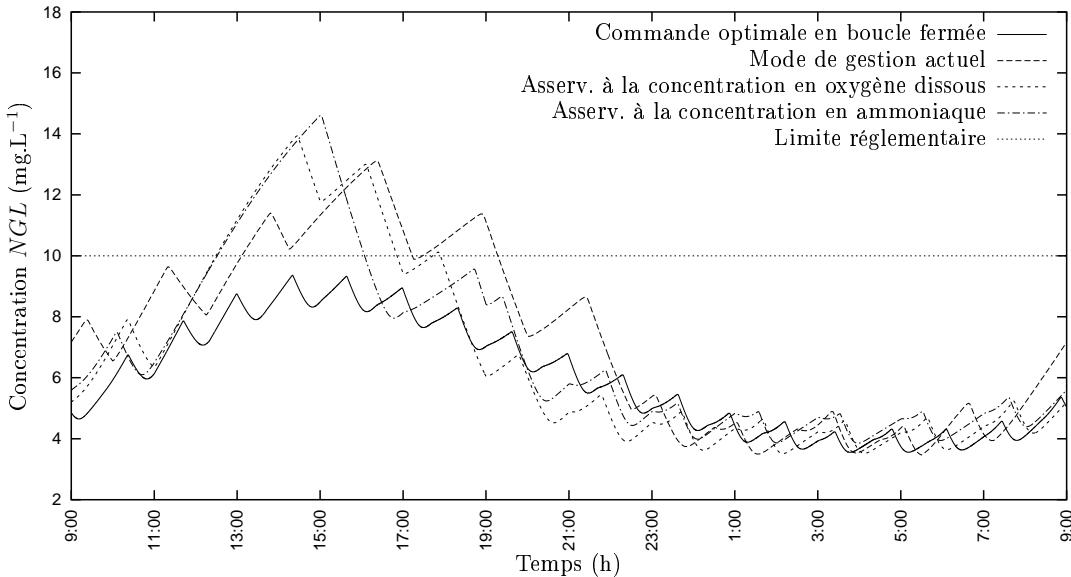


FIG. 6.17 – Comparaison de la commande optimale en *boucle fermée* avec les modes de gestion habituels du procédé.

Les résultats de cette comparaison indiquent clairement que la commande optimale du procédé est susceptible d'apporter de larges améliorations au mode de fonctionnement actuel du procédé, malgré les problèmes liés à l'observateur/estimateur conjoint. Ils démontrent également que ce type de commande est plus performant, sur de nombreux plans, que les méthodes d'asservissement habituellement proposées. Ces résultats sont très encourageants mais demandent bien entendu à être confirmés par le biais de la simulation numérique ou d'études pilotes, notamment dans des conditions de fonctionnement inhabituelles du procédé (surcharges, *etc.*). Ces études devront ensuite déboucher sur une implémentation sur un site existant, étape indispensable pour permettre de statuer sur l'applicabilité pratique et les potentialités réelles de la méthode.

6.4 Conclusions

Les aspects relatifs à l'implémentation de la commande optimale en *boucle fermée* ont été discutés dans ce chapitre. Ne disposant que de mesures partielles de l'état du procédé, l'utilisation d'un observateur est nécessaire afin de reconstruire les concentrations non mesurées. Le filtre de Kalman étendu est ici appliqué à cette fin. Cet observateur montre cependant quelques insuffisances, notamment face aux incertitudes du modèle utilisé et aux erreurs d'estimation commises sur les paramètres. L'application d'un observateur/estimateur conjoint de l'état et des paramètres du système est donc apparue nécessaire. L'algorithme d'estimation utilisé est basé sur la méthode des moindres carrés non récursif. Les résultats obtenus par le couplage de cet algorithme avec l'observateur EKF méritent malgré tout d'être davantage développés. Afin d'améliorer ces performances, il pourrait être intéressant d'envisager des méthodes d'observation non-linéaires plus performantes. La prise en compte de mesures supplémentaires, *e.g.* potentiel redox, mesures respirométriques, *etc.*, pourrait également permettre d'améliorer sensiblement les estima-

Chapitre 6. Vers la commande optimale du procédé

tions. Ces aspects devront faire l'objet d'études complémentaires.

L'algorithme d'estimation développé a malgré tout été utilisé dans le cadre de la commande prédictive du procédé pour la minimisation des rejets d'azote total des petites unités de traitement à boues activés. Les résultats obtenus, même s'ils confirment les faiblesses de l'observateur/estimateur conjoint, sont très encourageants. Ils montrent que la commande optimale en *boucle fermée* surpasse les méthodes de commande habituelles du procédé, et est seule en mesure de respecter les normes de rejets définies par l'Union Européenne. D'autre part, une baisse conséquente des besoins journaliers d'aération est également obtenue sans pour autant avoir été directement recherchée. Si cette tendance se confirmait, la réduction du coût de fonctionnement qui en résulterait pourrait permettre de financer une partie de l'investissement relatif à l'instrumentation et à l'équipement des stations d'épuration.

La commande optimale du procédé dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur n'a pas pu être étudiée faute de temps. Ce type d'approche pourrait s'avérer plus problématique que la seule minimisation des rejets d'azote. Il est en effet probable que la forte sensibilité des contraintes de rejet complique davantage l'implémentation du problème de commande. Il est également possible que l'on se heurte au problème du lessivage de la biomasse autotrophe présente dans le réacteur, en raison de l'insuffisance des horizons de commande considérés. S'ils s'avéraient, ces problèmes pourraient nécessiter l'extension du modèle réduit afin de réintégrer certaines dynamiques lentes du procédé.

Conclusions générales et perspectives

Les amis de la vérité sont ceux qui la cherchent
et non ceux qui se vantent de l'avoir trouvée

CONDORCET

L'épuration des eaux usées est aujourd'hui indispensable pour faire face à l'augmentation des concentrations en substances polluantes et des volumes d'effluent rejetés. La prise de conscience des problèmes environnementaux causés par les rejets des stations d'épuration et la volonté d'améliorer et de préserver la qualité des milieux récepteurs a entraîné l'adoption par l'Union Européenne de normes réglementaires plus strictes. Avec l'entrée en vigueur prochaine de cette nouvelle réglementation, les performances des stations d'épuration existantes doivent être améliorées tant en terme de qualité de traitement qu'en terme de fiabilité.

Le manque de moyens techniques et économiques est déjà marqué pour les petites collectivités et la mise aux normes des installations existantes est susceptible d'augmenter davantage les coûts d'exploitation à leur charge. Ceci est d'autant plus préoccupant que les modes de gestion actuels des petites stations d'épuration à boues activées, basés sur l'utilisation d'horloges ou l'asservissement de l'aérateur à la concentration en oxygène dissous ou au potentiel redox, peuvent occasionner de larges dépassements des normes de rejet et d'importantes surconsommations énergétiques. Pour y faire face, cette étude a présenté une méthodologie de l'optimisation dynamique et de la commande optimale de ces petites unités de traitement.

Le calcul des politiques optimales d'aération du réacteur, basé sur l'application des méthodes d'optimisation dynamique, a fait l'objet de la première partie du manuscrit. Les problèmes étudiés sont de deux types :

- la minimisation des rejets d'azote total, d'une part, s'inscrit dans le cadre général de la réduction des rejets des stations d'épuration afin de limiter la dégradation du milieu récepteur ;
- la minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur, d'autre part, permet de répondre de façon plus spécifique aux attentes actuelles des petites collectivités.

Ces problèmes d'optimisation dynamique sont de nature hybride et mixte. Étant donné qu'il n'existe pas, à l'heure actuelle, de méthodes de résolution générales pour ce type de problèmes, les politiques optimales d'aération ont été calculées pour un nombre préalable

CONCLUSIONS GENERALES ET PERSPECTIVES

blement fixé de cycles de fonctionnement. La détermination du nombre optimal de cycles est ensuite effectuée par simple énumération. De cette façon, les problèmes d'optimisation sont réguliers et peuvent être résolus par les approches classiques, telle que l'approche directe séquentielle utilisée dans cette étude.

L'application de ces méthodes a été envisagée dans le cas d'une station d'épuration existante. Afin de calculer des conditions optimales de fonctionnement réalistes, les modèles mathématiques ont été préalablement identifiés à partir de données expérimentales et des contraintes opératoires et de rejet sont prises en compte. Dans un premier temps, les politiques optimales d'aération ont été déterminées à court terme (1 journée), en tenant compte des processus de décantation/clarification. Les temps de calcul correspondants sont cependant rédhibitoires et ont nécessité l'application de simplifications : (i) la simplification du modèle dynamique du procédé et, (ii) la réduction de la dimension du problème d'optimisation. Il s'est avéré d'autre part que la détermination des politiques optimales d'aération sur d'aussi courtes périodes ne permet pas d'intégrer les dynamiques lentes du procédé (biomasses) et donne lieu à une rapide dégradation de la qualité du traitement. Le calcul sur le long terme (60 jours) a donc été nécessaire pour garantir des conditions de fonctionnement durables et non préjudiciables pour le procédé. Les performances correspondantes, bien qu'inférieures à celles calculées à court terme, apportent de nettes améliorations par rapport au mode de fonctionnement actuel de l'unité :

- la minimisation des rejets d'azote permet d'obtenir une réduction de près de 35% de la concentration moyenne en *NGL*, et dans le même temps, une diminution d'environ 1h40 de la durée quotidienne d'aération ;
- la minimisation de la consommation énergétique de l'aérateur entraîne une diminution de plus de 3 heures de la durée journalière d'aération, tout en respectant les normes de rejet.

Ces résultats ont permis d'établir que l'application des méthodes d'optimisation dynamique est en mesure d'améliorer sensiblement la fiabilité et les performances du procédé, tout en réduisant les coûts opératoires. Ils valident ainsi la faisabilité de l'approche proposée. Toutefois, l'utilisation des profils d'aération résultants en *boucle ouverte* n'est pas concevable en pratique du fait de la variabilité des flux de pollution incidents et des erreurs de modélisation du procédé. Aussi, la mise en œuvre de schémas de commande en *boucle fermée* a été abordée dans la seconde partie du manuscrit.

Dans ce cadre, les modèles utilisés pour le calcul des politiques optimales d'aération sont inadaptés en raison de leur complexité et du peu de variables mesurables qu'ils comportent. Un modèle simplifié du procédé a donc été élaboré sur la base du modèle ASM 1 de l'IAWQ. Il a été établi que le modèle réduit résultant est observable à partir des mesures disponibles (en phases aérobies et d'anoxie) et que les paramètres influents sont structurellement identifiables. Les résultats de l'identification paramétrique ont montré d'autre part que ce modèle dispose d'un horizon de prédiction de l'ordre d'une dizaine d'heures, ce qui est suffisant pour envisager la commande optimale du procédé. Enfin, il a pu être vérifié que les politiques optimales d'aération correspondantes sont compatibles avec celles calculées à l'aide du modèle ASM 1 complet.

La mise en œuvre de la commande optimale en *boucle fermée* du procédé s'effectue en deux parties : (i) l'observation et l'estimation *en ligne* de l'état et des paramètres du système et, (ii) le calcul des politiques optimales d'aération. Au préalable, l'analyse de la sensibilité des conditions optimales de fonctionnement vis-à-vis des erreurs commises sur

les paramètres et les conditions initiales du modèle réduit a été réalisée. Cette analyse est en effet indispensable pour replacer les résultats de l'optimisation dans un contexte de fonctionnement réel du procédé. Les résultats obtenus dans le cadre de la minimisation des rejets d'azote total sont particulièrement encourageants. Ceux relatifs au problème de la minimisation de la consommation énergétique ne sont pas encore concluants et méritent d'être davantage développés. Dans ce cas, la contrainte de rejet et la commande optimale sont en effet extrêmement sensibles aux erreurs commises sur certains paramètres et perturbations incidentes du système.

La connaissance partielle de l'état du procédé et la forte influence de certains paramètres du modèle réduit ont rendu nécessaire l'application d'un observateur/estimateur conjoint : (i) le filtre de Kalman étendu est utilisé pour la reconstruction de l'état et, (ii) la méthode des moindres carrés non récursifs est considérée pour l'identification paramétrique. S'il a pu être établi que ces deux algorithmes donnent de bons résultats lorsqu'ils sont utilisés séparément, les résultats obtenus en les couplant ont révélé quelques insuffisances, qui se manifestent sous la forme de biais d'estimation. Ces défaillances semblent être en partie liées à l'utilisation du filtre de Kalman étendu.

Cet algorithme d'estimation a malgré tout été utilisé dans le cadre de la commande prédictive du procédé pour la minimisation des rejets d'azote total. Les résultats obtenus, même s'ils confirment les faiblesses de l'observateur/estimateur conjoint sont très concluants. Il démontrent que la commande optimale en *boucle fermée* est très supérieure aux méthodes de commande habituelles de ces procédés et est seule en mesure de respecter les normes de rejets. Par ailleurs, une baisse significative du taux d'aération journalier, et donc de la consommation énergétique, apporte un intérêt supplémentaire à la mise en œuvre pratique de ce type de commande.

Perspectives de l'étude

D'un point de vue académique d'abord, plusieurs aspects relatifs à l'optimisation dynamique du procédé méritent d'être davantage développés. L'application des méthodes d'optimisation globale constitue l'une des perspectives importantes de ce travail. Ceci permettrait de vérifier si les profils calculés correspondent ou pas aux profils optimaux globaux du problème, et le cas échéant, dans quelle mesure les performances du procédé peuvent être encore améliorées. Pour cela, l'utilisation des méthodes de décomposition (*e.g. branch and bound*), initialement développées pour les problèmes non-linéaires, représente une voie de recherche très prometteuse. De nombreux travaux sont actuellement menés sur la construction de sous-estimateurs convexes pour les contraintes différentielles. Pour certains problèmes d'ailleurs, il est d'ores et déjà possible de borner les trajectoires des systèmes différentiels par l'application des concepts issus de l'algèbre des intervalles. La mise en œuvre de ces méthodes devra faire l'objet d'études complémentaires.

À terme, le problème d'optimisation devra également permettre d'intégrer le calcul du nombre optimal de cycles d'aération. L'utilisation des méthodes d'énumération est en effet fastidieuse et difficilement conciliable avec l'implémentation *en ligne* du problème. D'autre part, il serait intéressant de tenir compte des incertitudes sur les paramètres et les perturbations incidentes lors de la détermination des conditions optimales de fonctionnement du procédé. Actuellement, la résolution de ces deux problèmes est limitée par

CONCLUSIONS GENERALES ET PERSPECTIVES

l'absence de méthodes générales d'optimisation dynamique mixte.

Une des suites logiques de ces travaux concerne l'application pratique de la commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées. La simulation numérique apparaît très utile pour évaluer les performances des algorithmes de commande, mais ne constitue qu'une première étape. Malgré le souci permanent de maintenir les résultats numériques obtenus dans un contexte de fonctionnement réel du procédé, la validation de cette approche devra nécessairement être envisagée dans un cadre plus appliqué, sur une unité pilote dans un premier temps, puis sur une unité existante. Cette validation expérimentale n'a pu être abordée dans cette étude en raison de l'étendue des problèmes que soulève l'optimisation dynamique et la commande optimale des procédés. La longueur de ce document en est l'illustration.

Les conclusions quant à l'estimation de l'état et des paramètres du modèle réduit montrent cependant qu'une validation expérimentale ne sera possible qu'après la reconsideration de l'observateur/estimateur conjoint utilisé. L'utilisation de méthodes d'observation non-linéaires ou basées sur la résolution d'un problème d'optimisation dynamique pourrait améliorer sensiblement ces résultats. Des études complémentaires devront également permettre de vérifier que l'application de la commande optimale en *boucle fermée* ne conduit pas au lessivage de biomasse autotrophe présente dans le réacteur. Ces problèmes pourraient s'avérer notamment dans le cadre de la minimisation de la consommation énergétique. Cela nécessiterait de reconsidérer le modèle réduit afin de tenir compte des processus à long terme et d'étendre l'horizon de prédiction. Il est néanmoins important de prendre en compte les deux aspects antagonistes du problèmes de commande optimale : (i) la nécessité de tenir compte des dynamiques lentes du système et, (ii) la méconnaissance des perturbations incidentes du procédé qui limite la prédictibilité du modèle. Un compromis pourrait être trouvé par la mise en œuvre d'une gestion plus globale du procédé. Comme le lessivage se produit en effet lorsque le taux de croissance spécifique de la biomasse est inférieur à l'âge (aérobie) des boues (qui lui-même varie en fonction de la politique d'extraction adoptée), il serait intéressant d'envisager une gestion optimale conjointe de l'aération et de l'extraction des boues du système. Ce type de gestion présenterait d'ailleurs d'autant plus d'intérêt que le traitement des boues extraites représente également une partie importante du coût de fonctionnement de ces unités de traitement.

Cette étude marque le début d'une importante recherche sur l'optimisation dynamique et la commande optimale des procédés de traitement des eaux usées. Bien que l'application soit ici limitée au cadre des petites stations d'épuration à boues activées, cette méthodologie est en effet susceptible d'être étendue à d'autres procédés de traitement des eaux usées. En particulier, la commande optimale des filières de traitement de plus grandes tailles, *e.g.* les filières comportant des bassins d'aération et d'anoxie distincts, pourrait permettre de réduire substantiellement la consommation énergétique et les coûts opératoires tout en garantissant des performances élevées. Enfin, l'expérience acquise dans le domaine de l'optimisation dynamique et de la commande optimale des systèmes hybrides peut être partagée pour l'amélioration du fonctionnement dynamique d'autres procédés industriels.

BIBLIOGRAPHIE

- A.A. Abousam. *Development of a benchmarking methodology for evaluating oxidation ditch control strategies.* PhD thesis, Wageningen Universiteit, The Netherlands, 2001.
- C.S. Adjiman, I.P. Androulakis, et C.A. Floudas. A global optimization method, α BB, for general twice-differentiable constrained NLPs – II. Implementation and computational results. *Comp. & Chem. Engng.*, 22 :1159–1179, 1998a.
- C.S. Adjiman, I.P. Androulakis, et C.A. Floudas. Global optimization of mixed-integer nonlinear problems. *AICHE J.*, 46(9) :1769–1797, 2000.
- C.S. Adjiman, S. Dallwig, C.A. Floudas, et Neumaier A. A global optimization method, α BB, for general twice-differentiable constrained NLPs – I. Theoretical advances. *Comp. & Chem. Engng.*, 22 :1137–1158, 1998b.
- M. Alamir. Optimisation-based non-linear observers revisited. *Int. J. Cont.*, 72(13) :1204–1217, 1999.
- M. Alamir. Estimateurs d'état à horizon glissant. Dans Hermes Science Publications J.-P. Corriou, editor, *Automatique et procédés chimiques. Modélisation, estimation, cristallisoirs*, pages 147–179, 2001.
- J. Alex, J.-F. Béteau, J.B. Copp, C. Hellinga, U. Jeppsson, S. Marsili-Libelli, M.-N. Pons, H. Spanjers, et H. Vanhooren. Benchmark for evaluating control strategies in wastewater treatment plants. Dans *Proc. European Control Conference, ECC'99*, Karlsruhe, Germany, 1999.
- R.J. Allgor et P.I. Barton. Mixed-integer dynamic optimization. *Comp. & Chem. Engng.*, 21(Suppl.) :S451–S456, 1997.
- R.J. Allgor et P.I. Barton. Mixed-integer dynamic optimization – I. Problem formulation. *Comp. & Chem. Engng.*, 23 :567–584, 1999a.
- R.J. Allgor et P.I. Barton. Screening models for batch process development – Part I. design targets for reaction/distillation networks. *Chem. Eng. Sci.*, 54 :4145–4164, 1999b.

Bibliographie

- J.S. Anderson, H. Kim, T.J. McAvoy, et O.J. Hao. Control of an alternating aerobic-anoxic activated sludge system – Part 1 : Development of a linearization-based modeling approach. *Contr. Engng. Prac.*, 8 :271–278, 2000.
- I.P. Androulakis, C.D. Maranas, et C.A. Floudas. α BB : A global optimization method for general constrained nonconvex problems. *J. Glob. Opt.*, 7(4), 1995.
- E. Ardern et W. T. Lockett. Experiments on the oxidation of sewage without the aid of filters. *J. Soc. Chem. Ind. Lond.*, 33 :529–539, 1914.
- M. T. Asrar et A. S. Moharir. Optimal temperature-time policy for a packed-bed adiabatic reactor using desactivating catalyst. *Comp. & Chem. Engng.*, 15(7) :533–537, 1991.
- K. J. Aström et B. Wittenmark. *Computer controlled systems – Theory and design*. 2nd Edition, Prentice Hall Internation Editions, Englewood Cliffs, NJ, 1990.
- E. Ayesa, J. Florez, J. L. Garcia-Heras, et L. Larrea. State and coefficient estimation for the activated sludge process using a modified Kalman filter algorithm. *Wat. Sci. Technol.*, 24(6) :225–247, 1991.
- M.J. Bagajewicz et Q. Jiang. Comparison of steady state and integral dynamic data reconciliation. *Comp. & Chem. Engng.*, 24 :2367–2383, 2000.
- J.R. Banga et J.J. Casares. Integrated controlled random search : application to a wastewater treatment plant model. *ICHEE Symp. Ser.*, 100 :183–192, 1987.
- Jr V.P. Barbosa, M.R.M. Wolf, et R. Maciel Fo. Development of data reconciliation for dynamic nonlinear system : application the polymerization reactor. *Comp. & Chem. Engng.*, 24 :501–506, 2000.
- P.I. Barton. *The Modelling and Simulation of Combined Discrete/Continuous Processes*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, London, 1992.
- P.I. Barton, R.J. Allgor, W.F. Feehery, et S. Galán. Dynamic Optimization in a Discontinuous World. *I&EC Res.*, 37(3) :966–981, 1998.
- P.I. Barton, S. Galán, et J.R. Banga. Optimization of Hybrid Discrete/Continuous Dynamic Systems. *Comp. & Chem. Engng.*, 24(4) :851–864, 2000.
- P.I. Barton et C.C. Pantelides. Modelling of Combined Discrete/Continuous Processes. *AICHE J.*, 40(6) :966–979, 1994.
- P.I. Barton et T. Park. Analysis and control of combined discrete/continuous systems : progress and challenges in the chemical processing industries. *AICHE Symp. Ser.*, 93 (316) :102–114, 1997.
- G. Bastin et D. Dochain. *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*. Elsevier, 1990.
- M.S. Bazaraa, H.D. Sherali, et C.M. Shetty. *Nonlinear Programming : Theory and Algorithms*. 2nd edition, Wiley, 1993.
- R. Bellman. *Dynamic Programming*. Princeton University Press, 1957.

- L.T. Biegler. Solution of dynamic optimization problems by successive quadratic programming and orthogonal collocation. *Comp. & Chem. Engng.*, 8(3/4) :243–248, 1984.
- C. Boutin, P. Duchêne, et A. Liénard. *Filières d'épuration adaptées aux petites collectivités*. Cemagref Éditions, Antony, Coll. Documentation technique FNDAE, No. 22, 1998.
- P. Boutin. *Éléments pour une histoire des procédés de traitement des eaux résiduaires*. Minitère de l'Agriculture and Cemagref, 1985. Etude No. 23.
- K.E. Brenan, S.E. Campbell, et L.R. Petzold. *Numerical solution of initial value problem in differential-algebraic equations*. North-Holland, New York, 1989.
- A.E. Bryson et Y.-C. Ho. *Applied Optimal Control. Optimization, estimation and control*. Hemisphere Publishing Corporation, 1975.
- F. Burvingt. *Nitrification et Dénitrification des Eaux Résiduaires Urbaines dans les Stations d'Epuration. Maîtrise des Processus en Boues Activées en Bassin Unique avec Dissociation de l'Aération et du Brassage*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 1992.
- J.R. Cash et M.H. Wright. Implementation issues in solving nonlinear equations for two-point boundary value problems. *Computing*, 45 :17–37, 1990.
- J.R. Cash et M.H. Wright. A deferred correction method for nonlinear two-point boundary value problems : Implementation and numerical evaluation. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 12 :971–989, 1991.
- A. Çakici et M. Bayramoğlu. An approach to controlling sludge age in the activated sludge process. *Wat. Res.*, 29(4) :1093–1097, 1995.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Identification paramétrique et optimisation dynamique d'une station d'épuration de petite taille. Rapport technique relatif à la collaboration sur les échanges techniques en modélisation des stations d'épuration, LSGC – Anjou Recherche, 2000.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Dynamic optimisation of small size wastewater treatment plants including nitrification and denitrification processes. *Comput. & Chem. Engng.*, 25(4/5) :585–593, 2001a.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Minimisation of nitrogen discharge for small size wastewater treatment plants. Dans *Proc. 3rd European Congress of Chemical Engineering (ECCE'3), 26-28 june 2001, Nuremberg, Germany*, 2001b.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Nouvelle approche pour la gestion optimale du fonctionnement des petites stations d'épuration par boues activées. *L'eau, l'Industrie, les Nuisances*, 240 :53–59, 2001c.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Réduction du modèle ASM 1 pour un procédé de traitement à boues activées en bassin unique avec aération séquentielle de surface. Dans *Proc. 8ème Congrès International GRUTTEE, 22-23 novembre 2001, Limoges, France*, 2001d.

Bibliographie

- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Model identification and optimal control of small activated sludge treatment plants – Part II. Dynamic optimization. *Ind. & Eng. Chem. Res.*, en préparation.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Model identification and optimal control of small activated sludge treatment plants – Part I. Model identification. *Ind. & Eng. Chem. Res.*, soumis pour publicationb.
- B. Chachuat, N. Roche, et M. A. Latifi. Optimal aeration strategies of small-size wastewater treatment plants : Influence of optimisation time horizon. *Comput. & Chem. Engng.*, soumis pour publicationa.
- J.-C. Chancelier, M. Cohen de Lara, C. Joannis, et F. Pacard. New insights in dynamic modeling of a secondary settler – I. Flux theory and steady-state analysis. *Wat. Res.*, 31(8) :1847–1856, 1997a.
- J.-C. Chancelier, M. Cohen de Lara, C. Joannis, et F. Pacard. New insights in dynamic modeling of a secondary settler – II. Dynamical analysis. *Wat. Res.*, 31(8) :1857–1866, 1997b.
- E. Chekhova, P. I. Barton, et A. Gorak. Optimal operation processes of discrete-continuous biochemical processes. *Comp. & Chem. Engng.*, 24(2/7) :1167–1173, 2000.
- C.-T. Chen et C. Hwang. Optimal control computation for differential-algebraic process systems with general constraints. *Chem. Eng. Comm.*, 97 :9–26, 1990.
- H. Chen et F. Allgöwer. A quasi-infinite horizon nonlinear model predictive control scheme with guaranteed stability. *Automatica*, 34(10) :1205–1217, 1998.
- H.S. Coe et G.H. Clevenger. Methods for determining the capabilities of slime settling tanks. *Transactions, AM. Inst. of Mining Eng.*, 55 :356, 1916.
- J.-P. Corriou. *Commande des Procédés*. Tec & Doc, Lavoisier, 1996.
- D. Couillard et S. Zhu. Control strategy for the activated sludge process under shock loading. *Wat. Res.*, 26(5) :649–655, 1992.
- J.E. Cuthrell et L.T. Biegler. On the optimisation of differential-algebraic process systems. *AIChE J.*, 33(8) :1257–1270, 1987.
- J.E. Cuthrell et L.T. Biegler. Simultaneous optimization and solution methods for batch reactor control profiles. *Comp. & Chem. Engng.*, 13(1/2) :49–62, 1989.
- A. J. de Assis et R. M. Filho. Soft sensors development for on-line bioreactor state estimation. *Comp. & Chem. Engng.*, 24 :1099–1103, 2000.
- M. de Mathelin et R. Lozano. Robust adaptive identification of slowly time-varying parameters with bounded disturbances. *Automatica*, 35 :1291–1305, 1999.
- P. de Valière et D. Bonvin. Application of estimation techniques to batch reactors – II. Experimental studies in state and parameter estimation. *Comp. & Chem. Engng.*, 13 (1/2) :11–20, 1989.

- S. Diehl et U. Jeppsson. A model of the settler coupled to the biological reactor. *Wat. Res.*, 32(2) :331–342, 1998.
- D. Dimogianopoulos et R. Lozano. Adaptive control for linear time-varying systems using direct least-squares estimation. *Automatica*, 37 :251–256, 2001.
- D. Dochain et M. Perrier. Control design for nonlinear wastewater treatment processes. *Wat. Sci. Technol.*, 28(11/12) :283–293, 1993.
- D. Dochain, M. Perrier, et B. E. Ydstie. Asymptotic observers for stirred tank reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 47(15/16) :4167–4177, 1992.
- P. Duchêne et P. Rouchon. Kinetic scheme reduction via geometric singular perturbation techniques. *Chem. Eng. Sci.*, 51(20) :4661–4672, 1996.
- R. Dupont et M. Henze. Modelling of the secondary clarifier combined with the Activated Sludge Model No. 1. *Wat. Sci. Technol.*, 25(6) :285–300, 1992.
- M.A. Duran et I.E. Grossmann. An outer approximation algorithm for a class of mixed-integer nonlinear programs. *Mathematical Programming*, 36 :307–339, 1986.
- J.W. Eaton et J.B. Rawlings. Feedback control of chemical processes using on-line optimization techniques. *Comp. & Chem. Engng.*, 14(4/5) :469–479, 1990.
- W.W. Eckenfelder. *Gestion des Eaux Usées Urbaines et Industrielles - Caractérisation, Technique d'Epuration, Aspects Economiques*. Tech & Doc, Lavoisier, 1991.
- E. H. Edwin et J. G. Balchen. Dynamic optimization and production planning of thermal cracking operation. *Chem. Eng. Sci.*, 56(3) :989–997, 2001.
- G.A. Ekama, J.L. Barnard, F.W. Günthert, P. Kreps, McCorquodale J.A., D.S. Parker, et E.J. Wahlberg. *Secondary Settling Tanks : Theory, Modelling, Design and Operation*. Scientific and Technical Report No. 6, IAWQ, London, 1997.
- G. E. Eliçabe, E. Ozdeger, et C. Georgakis. On-line estimation of reaction rates in semi-continuous reactors. *I&EC Res.*, 34 :1219–1227, 1995.
- M. F. Ellis, T. W. Taylor, V. Gonzalez, et K. F. Jensen. Estimation of the molecular weight distribution in batch polymerization. *AIChE J.*, 34 :1341, 1988.
- W.R. Esposito et C.A. Floudas. Deterministic global optimization in nonlinear optimal control problems. *J. Global Opt.*, 17 :96–126, 2000a.
- W.R. Esposito et C.A. Floudas. Global optimization for the parameter estimation of differential-algebraic systems. *I&EC Res.*, 39(5) :1291–1310, 2000b.
- A.H. Evers. Sensitivity analysis in dynamic optimisation. *J. Opt. Th. & Appl.*, 32(1) :17–37, 1980.
- M. Farza, H. Hammouri, C. Jallut, V. Chouri, et J. Liéto. Nonlinear estimation strategies for parameter estimation in chemical reactors. *Comp. & Chem. Engng.*, 22(Suppl.) :S687–S690, 1998.

Bibliographie

- M. Farza, H. Hammouri, S. Othman, et K. Busawon. Nonlinear observers for parameter estimation in bioprocesses. *Chem. Eng. Sci.*, 52(23) :4251–4267, 1997.
- M. Fikar. Predictive control – an introduction. Technical report, Slovak University of Technology, http://ka.chtf.stuba.sk/staff/fikar/98r_pred.ps, 1999.
- M. Fikar, M. A. Latifi, et Y. Corriou, J.-P. and Creff. CVP-based optimal control of an industrial depropanizer column. *Comp. & Chem. Engng.*, 24(2/7) :909–915, 2000.
- M. Fikar, M. A. Latifi, et Y. Creff. Optimal changeover profiles for an industrial depropanizer. *Chem. Eng. Sci.*, 54(13/14) :2715–2720, 1999.
- C. A. Floudas. *Nonlinear and Mixed-Integer Optimization - Fundamentals and Applications*. Oxford University Press, New York - Oxford, 1995.
- C.A. Floudas et V. Visweswaran. A global optimization algorithm (GOP) for certain classes of nonconvex NLPs—I. Theory. *Comp. & Chem. Engng.*, 14(12) :1397–1417, 1990.
- F. Fournier. *Méthodologie d'optimisation dynamique et de commande optimale des réacteurs électrochimiques discontinus*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, 1998.
- F. Fournier, M. A. Latifi, et G. Valentin. Methodology of dynamic optimization and optimal control of batch electrochemical reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 54(13/14) :2707–2714, 1999.
- F. Fournier et M.A. Latifi. Sensitivity analysis of the performance index in optimal control of a batch electrochemical reactor. Dans *Proceedings of the ECCE'1*, volume 4, pages 2849–2852, Florence, Italy, 1997.
- S. Galán et P.I. Barton. Dynamic Optimization of Hybrid Systems. *Comp. & Chem. Engng.*, 22(Suppl.) :S183–S190, 1998.
- J.-P. Gauthier, H. Hammouri, et F. Celle. A simple observer for nonlinear systems – Applications to bioreactors. *IEEE Trans. Automat. Control.*, 37 :875–880, 1992.
- A.M. Geoffrion. Generalized Benders decomposition. *J. Opt. Th. & Appli.*, 10(4) :237, 1972.
- A. M. Gibon-Fargeot, H. Hammouri, et F. Celle. Nonlinear observers for chemical reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 49(14) :2287–2300, 1994.
- C.J. Goh et K.L. Teo. Control parametrization : a unified approach to optimal control problems with general constraints. *Automatica*, 24(1) :3–18, 1988.
- D.E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization, and Machine Learning*. Addison-Wesley Ed., 1989.
- K. Grijspeerdt, P. Vanrolleghem, et W. Verstraete. Selection of one-dimensional sedimentation models for on-line use. *Wat. Sci. Technol.*, 31(2) :193–204, 1995.
- I. E. Grossmann et C. A. Floudas. Active constraint strategy for flexibility analysis in chemical processes. *Comp. & Chem. Engng.*, 11 :675, 1987.

- I. E. Grossmann et R. W. H. Sargent. Optimum design of chemical plants with uncertain parameters. *AICHE Journal*, 24(6) :1021–1028, 1978.
- R. Gudi, S.L. Shah, et M.R. Gray. Adaptive multirate state and parameter estimation strategies with application to a bioreactor. *AICHE J.*, 41(11) :2451–2464, 1995.
- R. Gudi, S.L. Shah, et M.R. Gray. Adaptive multirate estimation and control of nutrient levels in a fed-batch fermentation using off-line and on-line measurements. *Can. J. Chem. Engng.*, 75(3) :562–573, 1997.
- R. D. Gudi, S.L. Shah, et M.R. Gray. Multirates state and parameter estimation in an antibiotic fermentation with delayed measurements. *Biotechnol. Bioengng.*, 44 :1271, 1994.
- W. Gujer, M. Henze, T. Mino, T. Matsuo, M.C. Wentzel, et G.v.R. Marais. The Activated Sludge Model No. 2 : Biological Phosphorus Removal. *Wat. Sci. Technol.*, 31(2) :1–11, 1995.
- W. Gujer, M. Henze, M. Takahashi, et M. van Loosdrecht. Activated Sludge Model No. 3. *Wat. Sci. Technol.*, 29(1) :183–193, 1999.
- M. Z. Hadj-Sadok et J.-L. Gouzé. Estimation of uncertain models of activated sludge processes with interval observers. *J. Proc. Control*, 11 :299–310, 2001.
- S.P. Han. Superlinearly convergent variable metric algorithms for general nonlinear programming problems. *Mathematical Programming*, 11 :263, 1976.
- E.R. Hansen. *Global optimization using interval analysis*. Marcel Dekker Inc., New York, 1992.
- O.J. Hao et J. Huang. Alternating aerobic-anoxic process for nitrogen removal : Process evaluation. *Water Environ. Res.*, 68(1) :83–93, 1996.
- L. Härtel et H.J. Pöpel. A dynamic secondary clarifier model including processes of sludge thickening. *Wat. Sci. Technol.*, 25(6) :267–284, 1992.
- A. Héduit et D. R. Thévenot. Elements in the interpretation of platinum electrode potentials in biological treatment. *Wat. Sci. Technol.*, 21 :946–956, 1992.
- A. Héduit, P. Duchêne, et L. Sintes. Optimization of nitrogen removal in small activated sludge plants. *Wat. Sci. Technol.*, 22(3-4) :123–130, 1990.
- M. Henze, C.P.L. Grady, W. Gujer, G.v.R. Marais, et T. Matsuo. Activated Sludge Model No. 1. Technical Report 1, IAWQ, London, 1987.
- L. Hong. Approximating multirate estimation using a filter bank. Dans *Proc. IEEE Conf. on Decision and Control*, page 1232, Lake Buena Vista, FL, 1994.
- R. Horst et H. Tuy. *Global Optimization : Deterministic Approaches*. Springer-Verlag, New York, 3rd Edition, 1996.
- J.M. House, J.S. Arora, et T.F. Smith. Comparison of methods for design sensitivity analysis for optimal control of thermal systems. *Opt. Contr. Appl. & Meth.*, 14 :17–37, 1993.

Bibliographie

- R.L. Iman et W.J. Conover. Small sample sensitivity analysis techniques for computer models, with application to risk assessment (with discussion). *Communications in Statistics - Theory and Methods*, A9 :1749–1874, 1980.
- S. H. Isaacs. Automatic adjustment of cycle length and aeration time for improved nitrogen removal in an alternating activated sludge process. *Wat. Sci. Technol.*, 35(1) :225–232, 1995.
- S. H. Isaccs et M. Henze. Controlled carbon source addition to an alternating nitrification-denitrification wastewater treatment process including biological P removal. *Wat. Res.*, 29(1) :77–89, 1995.
- A. Isidori. *Nonlinear Control Systems*. Springer-Verlag, Berlin, 1995.
- A. H. Jazwinski. *Stochastic processes and filtering theory*. Academic Press, New York, 1974.
- U. Jeppsson. *Modelling aspects of wastewater treatment processes*. PhD thesis, Lund Institute of Technology, 1996.
- S. Julien. *Modélisation et estimation pour le contrôle d'un procédé boues activées éliminant l'azote des eaux résiduaires urbaines*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 1997.
- R. E. Kalman. New approach to linear filtering and prediction problems. *Trans. ASME, Ser. D. J. Basic Engng*, 82 :35–45, 1960.
- R. E. Kalman et R. S. Bucy. New results in linear filtering and prediction theory. *Trans. ASME, Ser. D. J. Basic Engng*, 83 :95–108, 1961.
- Y. Kawase et M. Moo-Young. Oxygen transfer in slurry bioreactors. *Biotech. Bioengng.*, 37 :960–966, 1991.
- P. Kesavan et P.I. Barton. Decomposition algorithms for nonconvex mixed-integer nonlinear programs. *AICHE Symp. Ser.*, 96(323) :458–461, 2000a.
- P. Kesavan et P.I. Barton. Generalized branch-and-cut framework for mixed-integer nonlinear programs. *Comp. & Chem. Engng.*, 24(2/7) :1361–1366, 2000b.
- H. Kim, T.J. McAvoy, J.S. Anderson, et O.J. Hao. Control of an alternating aerobic-anoxic activated sludge system – Part 2 : Optimization using a linearized model. *Contr. Engng. Prac.*, 8 :279–289, 2000.
- S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, et M.P. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220(4598) :671–680, 1983.
- A. Klapwijk, H. Brouwer, E. Vrolijk, et K. Kujawa. Control of intermittently aerated nitrogen removal plants by detecting end-points of nitrification and denitrification using respirometry only. *Wat. Res.*, 32(5) :1700–1703, 1998.
- F. A. Koch et W. K. Oldham. Oxido-reduction potential : a tool for monitoring control and optimization of biological nutrient removal systems. *Wat. Sci. Technol.*, 17 :259–281, 1985.

- P. Kokotovic, H. Khalil, et J. O'Reilly. *Singular Perturbation Methods in Control : Analysis and Design*. Academic Press, London, 1986.
- K. A. Kosanovitch, M. J. Piovoso, V. Rokhlenko, et A. Guez. Nonlinear adaptive control with parameter estimation of a CSTR. *J. Proc. Control*, 5(3) :137–148, 1995.
- A. J. Krener et A. Isidori. Linearization by output injection and nonlinear observers. *Syst. Control Lett.*, 3 :47, 1983.
- E. Kriendler. On performance sensitivity of optimal control systems. *Int. J. Control*, 15 (3) :481–486, 1972.
- H. Laikari. Simulation of the sludge blanket of a vertical clarifier in an activated sludge process. *Wat. Sci. Technol.*, 21(6-7) :621–629, 1989.
- I. D. Landau. *System identification and control design*. Englewood Cliffs, Prentice Hall, 1990.
- M.A. Latifi, J.P. Corriou, et M. Fikar. Dynamic optimisation of chemical processes. *Trends in Chemical Engineering*, 4 :189–201, 1998.
- E.S. Lee. *Quasi-Linearisation and Invariant Imbedding*. Academic Press, 1968.
- J. Lee et W. F. Ramirez. Optimal fed-batch control of induced foreign protein production by recombinant bacteria. *AIChE J.*, 40(5) :899–907, 1994.
- J. H. Lee et B. Cooley. Recent advances in model predictive control and other related areas. *AIChE Symp. Ser.*, 93(316) :201–216, 1997.
- F. Lefèvre, J. M. Audic, et B. Bujon. Automatic regulation of activated sludge aeration - Single-tank nitrification-denitrification. *Wat. Sci. Technol.*, 28(10) :289–298, 1993.
- M.L. Lieberman, T.F. Edgar, et L.S. Lasdon. Efficient data reconciliation and estimation for dynamic process using nonlinear programming techniques. *Comp. & Chem. Engng.*, 16 :963, 1992.
- L. Limqueco, J. C. Kantor, et S. Harvey. Nonlinear adaptive observation of an exothermic stirred-tank reactor. *Chem. Eng. Sci.*, 46(3) :797–805, 1991.
- C.-F. Lindberg. *Control and Estimation Strategies Applied to the Activated Sludge Process*. PhD thesis, Uppsala University, 1997.
- C.-F. Lindberg. Multivariable modeling and control of an activated sludge process. *Wat. Sci. Technol.*, 37(12) :149–156, 1998.
- L. Ljung et T. Glad. On global identifiability for arbitrary model parametrization. *Automatica*, 2 :265–276, 1994.
- J.S. Lodgson et L.T. Biegler. Decomposition strategies for large-scale dynamic optimization problems. *Chem. Eng. Sci.*, 47(4) :851–864, 1992.
- D. G. Luenberger. Observing the state of a linear system. *IEEE Trans. Mil. Electro.*, 8 :74, 1964.

Bibliographie

- L. J. Lukasse. *Control and Identification of Activated Sludge Processes*. PhD thesis, Wageningen Agricultural University, The Netherlands, 1999.
- L. J. Lukasse, K. J. Keesman, A. Klapwijk, et G. van Straten. Adaptive receding horizon optimal control of N-removing activated sludge processes. Dans *Proc. 11th Forum for Applied Biotechnology*, pages 1665–1672, Gent University, Belgium, 1997.
- L. J. Lukasse, K. J. Keesman, A. Klapwijk, et G. van Straten. Optimal control of N-removal in ASPs. *Wat. Sci. Technol.*, 38(3) :255–262, 1998.
- A. Lynggaard-Jensen, N.H. Eismann, I. Rasmussen, H. Svankjær Jacobsen, et T. Strenstrøm. Description and test of a new generation of nutrient sensors. *Wat. Sci. Technol.*, 33(1) :25–35, 1996.
- S. Marsili-Libelli et F. Giovannini. Estimation of uncertain models of activated sludge processes with interval observers (research note). *Wat. Res.*, 31(1) :179–185, 1997.
- S. Marsili-Libelli et A. Vaggi. Estimation of respirometric activities in bioprocesses. *J. Biotechnol.*, 52 :181–192, 1997.
- Q. D. Mayne et H. Michalska. Receding horizon control of nonlinear systems. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-35(7) :814–824, 1990.
- M.D. McRay, W.J. Conover, et R.J. Beckman. A comparison of three methods for selecting values of input variables in the analysis of output from a computer code. *Technometrics*, 21 :239–245, 1979.
- H. Michalska et Q. D. Mayne. Robust receding horizon control of constrained nonlinear systems. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-38(11) :1323–1633, 1993.
- J.M. Modak et H.C. Lim. Feedback optimization of fed-batch fermentation. *Biotechnol. Bioengng.*, 30 :528–540, 1987.
- R. E. Moore. *Interval analysis*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1966.
- R. K. Mutha, W. R. Cluett, et A. Penlidis. On-line nonlinear model-based estimation and control of a polymer reactor. *AICHE J.*, 43 :3042, 1997.
- J. Nakajima et M. Kaneko. Practical performance of nitrogen removal in small-scale sewage treatment plants operated in intermittent aeration mode. *Wat. Sci. Technol.*, 24(4/6) :709–718, 1991.
- F. Nejjari, A. Benhammou, B. Dahhou, et G. Roux. Predictive control of a simulated biological wastewater treatment process. Dans *Proc. 15th IMACS World Congress on Scientific Computation, Modelling and Applied Mathematics, Vol. 6, Application in Modelling and Simulation*, pages 77–82, 1997.
- F. Nejjari, A. Benhammou, B. Dahhou, et G. Roux. Online estimation and multivariable predictive control of an activated sludge process. Dans *Proc. 4th IFAC Conference, Systems Structure and Control*, pages 207–212, 1998.
- F. Nejjari, G. Roux, B. Dahhou, et A. Benhammou. Estimation and optimal control design of a biological wastewater treatment process. *Mathematics and Computers in Simulation*, 48(3) :269–280, 1999.

- H. Nijmeijer et A. J. van der Schaft. *Nonlinear Dynamical Control Systems*. Springer-Verlag, New York, 1991.
- M. Nikolaou et V. Manousiouthakis. Sensitivity analysis of optimal control policies for batch processes. *Chem. Eng. Comm.*, 97 :27–45, 1990.
- R. Oliveira, E. C. Ferreira, et S. Feye de Azevedo. A study on the convergence of observer-based kinetics estimators in stirred tank bioreactors. *J. Proc. Control*, 6(6) :367–371, 1996.
- F. Ollivier. Identifiabilité et identification : du Calcul Formel au Calcul Numérique ? Dans J.-P. Puel, editor, *European Series in Applied and Industrial Mathematics (ESAIM)*, volume 9, pages 93–99, 2000.
- G. Olsson, H. Aspergren, et M.K. Nielsen. Operation and control of wastewater treatment – a scandinavian perspective over 20 years. *Wat. Sci. Technol.*, 37(12) :1–15, 1998.
- R. Otterpohl et M. Freund. Dynamic models for clarifiers of activated sludge plants with dry and wet weather flows. *Wat. Sci. Technol.*, 26(5-6) :1391–1400, 1992.
- S. Palanki, C. Kravaris, et H.Y. Wang. Synthesis of state feedback laws for end-point optimization in batch processes. *Chem. Eng. Sci.*, 48(1) :135–152, 1993.
- S. Palanki, C. Kravaris, et H.Y. Wang. Optimal feedback control of batch reactors with a state inequality constraint and free terminal time. *Chem. Eng. Sci.*, 49(1) :85–97, 1994.
- I. Papamichail et C.S. Adjiman. An algorithm for the global optimisation of dynamic problems. Dans *Proc. 8ème Congrès Francophone de Génie des Procédés, 17-19 octobre 2001, Nancy, France*, 2001a.
- I. Papamichail et C.S. Adjiman. A rigourous global optimization algorithm for problems with ordinary differential equations. *J. Global Opt.*, sous presse, 2001b.
- T. Park et P.I. Barton. State events location in differential-algebraic models. *ACM Trans. Mod. & Comp. Simul.*, 6(2) :137–165, 1996.
- H.D. Patterson. The errors of lattice sampling. *Journal of the Royal Statistical Society - Series B*, 16 :140–149, 1954.
- M. Perrier, S. Feye de Azevedo, E. C. Ferreira, et D. Dochain. Tuning of observer-based estimators : theory and applications to the on-line estimation of kinetic parameters. *Control Engng. Prac.*, 8 :377–388, 2000.
- L.R. Petzold et W. Zhu. Model reduction for chemical kinetics : An optimization approach. *AIChE J.*, 45(4) :869–886, 1999.
- E. N. Pistikopoulos et M. G. Ierapetritou. Novel approach for optimal process design under uncertainty. *Computers and Chemical Engineering*, 19(10) :1089–1110, 1995.
- S. Plisson-Sauné, B. Capdeville, M. Mauret, A. Deguin, et P. Baptiste. Real-time control of nitrogen removal using three ORP bending-points : signification, control strategy and results. *Wat. Sci. Technol.*, 33(1) :275–280, 1996.

Bibliographie

- E. Polak et T. H. Yang. Moving horizon control of linear systems with input saturation and plant uncertainty – Part 1. Robustness. *Int. J. Control.*, 58(3) :613–638, 1993.
- L.S. Pontryagin, V.G. Boltyanskii, R.V. Gamkrelidze, et E.F. Mishchenko. *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. Pergamon Press, New York, 1964.
- T.G. Potter, B. Koopman, et S.A. Svoronos. Optimization of a periodic biological process for nitrogen removal from wastewater. *Wat. Res.*, 30(1) :142–152, 1996.
- M. J. D. Powell. *Nonlinear programming 3*, chapter «The convergence of variable metric methods for nonlinearly constrained optimization calculations». Mangasarian, O.L. and Meyer R.R. and Robinson, S.M., New York, San Francisco, London, academ edition, 1978.
- S. J. Qin et T. A. Badgwell. An overview of industrial model predictive control technology. *AICHE Symp. Ser.*, 93(316) :232–256, 1997.
- J. B. Rawlings et K. R. Muske. The stability of constrained receding horizon control. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-38(10) :1512–1516, 1993.
- H.R. Ray et J. Szekely. *Process Optimization*. Wiley & Sons, New York, 1973.
- D.G. Robertson, J.H. Lee, et J.B. Rawlings. A moving horizon-based approach for least-square estimation. *AICHE J.*, 42(8) :2209–2224, 1996.
- G.A. Robertson et I.T. Cameron. Analysis of dynamic process models for structural insight and model reduction - Part 1. Structural identification measures. *Comp. & Chem. Engng.*, 21(5) :455–473, 1997a.
- G.A. Robertson et I.T. Cameron. Analysis of dynamic process models for structural insight and model reduction - Part 2. A multi-stage compressor shutdown case-study. *Comp. & Chem. Engng.*, 21(5) :475–488, 1997b.
- R. Ross, J. D. Perkins, E. N. Pistikopoulos, G. L. M. Koot, et J. M. G. van Schijndel. Optimal design and control of a high-purity industrial distillation system. *Comp. & Chem. Engng.*, 25(1) :141–150, 2001.
- S. Rouleau. *Impacts des rejets de temps de pluie sur une station d'épuration par boues activées : détermination, simulation et contrôle*. PhD thesis, Université Louis Pasteur, Strasbourg, France, 1997.
- A.I. Ruban. Sensitivity coefficients for discontinuous dynamic systems. *Journal of Computers and Systems Sciences International*, 36(4) :536–542, 1997.
- V. Ryckaert. *Model Based Optimization and Control of Bioprocesses - From Theory to Practice*. PhD thesis, Katholieke Universiteit Leuven, Belgium, 1998.
- K. Schittkowski. NLPQL : a fortran subroutine solving constrained nonlinear programming problems. *Annals of Operations Research*, 5(6) :485–500, 1985.
- A. Sedoglavic. A probabilistic algorithm to test local algebraic identifiability in polynomial time. Dans *Proc. International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, ISSAC'2001*, University of Western Ontario, Canada, 2001.

- P. Seferlis et A.N. Hrymak. Sensitivity analysis for chemical process optimization. *Comp. & Chem. Engng.*, 20(10) :1177–1200, 1996.
- D. Semino, M. Morretta, et C. Scali. Parameter estimation in extended Kalman filters for quality control in polymerization reactors. *Comp. & Chem. Engng.*, 20(Suppl.) : S913–S918, 1996.
- M. Sharif, N. Shah, et C. C. Pantelides. On the design of multicomponent batch distillation columns. *Comp. & Chem. Engng.*, 22(Suppl.) :S69–S76, 1998.
- A.B. Singer et P.I. Barton. Convex underestimators for dynamic optimization problems. Technical report, Dpt. of Chemical Engineering, MIT, 2001.
- A. Sirohi et Y. Choi. On-line parameter estimation in a continuous polymerization process. *I&EC Res.*, 35 :1332–1343, 1996.
- D.R. Smith. *Variational Methods in Optimization*. Prentice Hall, 1974.
- T. Söderström et P. Stoica. *System identification*. Prentice Hall International, 1989.
- M. Soroush. Nonlinear state-observer design with application to reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 52 :387, 1997.
- M. Soroush. State and parameter estimations and their applications in process control. *Comp. & Chem. Engng.*, 23 :229–245, 1998.
- H. Spanjers, P. Vanrolleghem, G. Olsson, et P. Dold. Respirometry in control of the activated-sludge process. *Wat. Sci. Technol.*, 34(3-4) :117–126, 1996.
- H. Spanjers, P. Vanrolleghem, G. Olsson, et P.L. Dold. *Respirometry in control of the activated sludge process : Principles*. IAWQ Task Group on Respirometry, Scientific and Technical Report No. 7, IAWQ, London, 1998.
- M.A. Steffens, P.A. Lant, et R.B. Newell. A systematic approach for reducing complex biological wastewater treatment models. *Wat. Res.*, 31(3) :590–606, 1997.
- M.A. Steffens et P.A. Lants. Multivariable control of nutrient-removing activated sludge systems. *Wat. Res.*, 33(12) :2864–2878, 1999.
- G. Stephanopoulos et K. Y. San. Studies on online bioreactor identification. *Biotechnol. Bioengng.*, 26 :1176–1188, 1984.
- J.-P. Steyer et M. Amouroux. Automatique et dépollution biologique : Quelles solutions pour quels besoins ? *Journée d'étude Automatique et Dépollution Biologique, 5 décembre 1995, Narbonne, France*, 1995.
- J. D. S. Stigter, P. A. Vanrolleghem, et J. van Impe. On-line estimation of parameters in a respiration model using a continuous-discrete type of recursive prediction error algorithm. Dans *Proc. European Control Conference, ECC'99*, Karlsruhe, Germany, 1999.
- S. Støren et T. Hertzberg. Obtaining sensitivity information in dynamic optimization problems solved by the sequential approach. *Comp. & Chem. Engng.*, 23 :807–819, 1999.

Bibliographie

- I.D. Sutapa. *Propriétés physico-chimiques et décantabilité des boues activées en relation avec le transfert d'oxygène et la biofloculation.* PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, France, 1996.
- I. Takács, G.G. Patry, et D. Nolasco. A dynamical model of the clarification-thickening process. *Wat. Res.*, 25 :1263–1271, 1991.
- S. Tatiraju, M. Soroush, et B.A. Ogunnaike. Multirate nonlinear state and parameter estimation in a bioreactor. *Biotechnol. Bioengng.*, 63(1) :22–32, 1999a.
- S. Tatiraju, M. Soroush, et B.A. Ogunnaike. Multirate nonlinear state estimation with application to a polymerization reactor. *AICHE J.*, 45(4) :769–780, 1999b.
- G. Tchobanoglou et E.D. Schroeder. *Water Quality.* Addison-Wesley Publishing Company, 1985.
- D. Tieu, W.R. Cluett, et A. Penlidis. A comparison of collocation methods for solving dynamic optimization problems. *Comp. & Chem. Engng.*, 19(4) :375–381, 1995.
- S. Valluri et M. Soroush. Nonlinear state estimation in the presence of multiple steady states. *I&EC Res.*, 35 :2645–2659, 1996.
- V. van Breusegem et G. Bastin. Reduced order dynamical modelling of reaction systems : a singular perturbation approach. Dans *Proc. 30th IEEE Conf. Decision and Control*, volume 2, pages 1049–1054, Brighton, England, 1991.
- V. van Breusegem et G. Bastin. Order reduction in bioprocess modelling : A singular perturbation approach. Dans *Proc. ICCAFT-5 IFAC-BIO-2, Symposium on Modelling and Control of Biological Processes*, pages 347–351, Keystone, Colorado, 1992.
- V. van Breusegem et G. Bastin. A singular perturbation approach to the reduced order dynamical modeling of reaction systems. Technical Report 92.14, CESAME, Université de Louvain-la-Neuve, Belgique, 1993.
- J.F. Van Impe, J. Vandewalle, P. Vanrolleghem, et W. Verstraete. New trends in model-based monitoring and control of the activated sludge wastewater treatment process. *Journal A*, 33(3) :19–29, 1992.
- P. Vanrolleghem. *On-line Modelling of Activated Sludge Processes : Development of an Adaptive Sensor.* PhD thesis, University of Gent, Belgium, 1994.
- P. Vanrolleghem et S. Gillot. Robustness and economic measures as control benchmark performance criteria. Dans *Proc. 1st IWA Conference on Instrumentation, Control and Automation, June 3-7 2001*, Malmö, Sweden, 2001.
- P. Vanrolleghem, M. Van Daele, et D. Dochain. Practical identifiability of a biokinetic model of activated sludge respiration. *Wat. Res.*, 29(11) :2561–2570, 1995.
- P.A. Vanrolleghem et W. Verstraete. On-line monitoring equipment for wastewater treatment processes : State of the art. Dans *TI-KVIV Studiedag Optimalisatie van Waterzuiveringinstallaties door Proceskontrole en -sturing*, pages 1–21, Gent, Belgium, 1993.

- J.-L. Vasel. *Contribution à l'étude des transferts d'oxygène en gestion des eaux*. PhD thesis, Fondation Universitaire Luxemourgeoise, Arlon, 1988.
- V.S. Vassiliadis, R.W.H. Sargent, et C.C. Pantelides. Solution of a class of multistage dynamic optimization problems. 2. problems with path constraints. *I&EC Res.*, 33 : 2123–2133, 1994.
- J. Vaxelaire. *Etude et Modélisation de l'Aération des Stations d'épuration des Eaux Usées Urbaines par Agitation Mécanique de Surface*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, France, 1994.
- H. Wacheux, S. Da Silva, et J. Lasavre. Inventory and assessment of automatic nitrate analysers for urban sewage works. *Wat. Sci. Technol.*, 28(11-12) :489–498, 1993.
- H. Wacheux, J.-L. Million, C. Guillo, et E. Alves. NH_4 automatic analysers for wastewater treatment plant : evaluation test at laboratory and field level. *Wat. Sci. Technol.*, 33 (1) :193–201, 1996.
- E.. Walter. *Identifiability of Parametric Models*. Pergamon Press, Oxford, 1987.
- E. Walter et L. Pronzato. On the Identifiability and Distinguishability of Nonlinear Parametric Models. *Math. & Comput. Simul.*, 42 :125–134, 1996.
- G. B. Wang, S. S. Peng, et H. P. Huang. A sliding observer for nonlinear process control. *Chem. Eng. Sci.*, 52 :787–805, 1997.
- R.W. Watts, S.A. Svoronos, et B. Koopman. One dimensional modelling of secondary clarifiers using a concentration and feed velocity-dependant dispersion coefficient. *Wat. Res.*, 30(9) :3113–3124, 1996.
- S. R. Weijers. *Modelling, Identification and Control of Activated Sludge Plants for Nitrogen Removal*. PhD thesis, Technische Universiteit Eindhoven, The Netherlands, 2000.
- S. R. Weijers, G. L. Engelen, H. A. Preisig, et K. van Schagen. Evaluation of Model Predictive Control of nitrogen removal with a carrousel type wastewater treatment plant model using different control goals. Dans *Proc. 7th IAWQ Workshop on Instrumentation, Control and Automation of water and wastewater treatment and transport systems, Brighton, July 6-9 1997*, pages 401–408, 1997.
- S. R. Weijers, J. J. Kok, et H. A. Preisig. Control strategies for nitrogen removal plants and MPC applied to a predenitrification plant. Dans *Proc. 9th Forum for Applied Biotechnology*, pages 2435–2443, 1995.
- G. A. Williamson, S. Dasgupta, et F. Minyue. Multistage multirate adaptive filters. Dans *Proc. IEEE IC ASSP*, page 1534, 1996.
- R.B. Wilson. *A simplicial algorithm for concave programming*. PhD thesis, School of Business Administration, Harvard University, Boston, 1963.
- K. Wouters-Wasiak. *Étude et contrôle des processus de nitrification - dénitrification - déphosphatation biologique*. PhD thesis, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, France, 1994.

Bibliographie

- T. H. Yang et E. Polak. Moving horizon control of nonlinear systems with input saturation and plant uncertainty. *Int. J. Control.*, 58(4) :875–903, 1993.
- J.M. Zamora et I.E. Grossmann. Continuous global optimization of structured process systems models. *Comp. & Chem. Engng.*, 22(12) :1749–1770, 1998.
- M. Zeitz. The Extended Luenberger Observer for Nonlinear Systems. *Syst. & Control Lett.*, 9 :149–156, 1987.
- H. Zhao, S. H. Isaacs, A. Søeberg, et M. Kümmel. An analysis of nitrogen removal and control strategies in an alternating activated sludge process. *Wat. Res.*, 29(2) :535–544, 1995.
- H. Zhao et M. Kümmel. State and parameter estimation for phosphorus removal in an alternating activated sludge process. *J. Proc. Control*, 5(5) :341–351, 1995.

Annexes

ANNEXE A

Puissance consommée aux bornes de l'aérateur

L'objectif de cette annexe est d'établir l'expression de la puissance consommée aux bornes de l'aérateur en fonction des caractéristiques du système. Dans le cas général, un problème d'agitation fait intervenir :

- 3 caractéristiques des fluides à agiter : la masse volumique μ (kg/m^3), la viscosité dynamique η (pa.s) et la tension superficielle du liquide γ (N/m) ;
- 3 caractéristiques cinématiques et dynamiques : la vitesse de l'agitateur N (tr/s), l'accélération de la pesanteur g (m/s^2) et la puissance absorbée pour vaincre les forces de résistance P (W) ;
- au moins 10 caractéristiques, aussi bien de l'agitateur lui-même, que du réacteur dans lequel il fonctionne et des accessoires qui y sont fixés (serpentins, chicanes, etc.).

Les caractéristiques de l'agitateur et du réacteur étant fixées, la relation générale liant les différentes caractéristiques du système s'écrit :

$$Np = k Re^x Fr^y We^z \quad (\text{A.1})$$

où : le nombre de puissance $Np = \frac{P}{\mu N^3 d^5}$ représente le coefficient de trainée de l'agitateur dans le fluide,

le nombre de Reynolds $Re = \frac{Nd^2 \mu}{\eta}$ caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces de viscosité où d désigne le diamètre de l'agitateur,

le nombre de Froude $Fr = \frac{Nd^2}{g}$ caractérise le rapport entre les forces d'inertie et les forces de gravité,

et le nombre de Weber $We = \frac{\mu N^2 d^3}{\gamma}$ caractérise l'action des forces de tension superficielle,

Annexe A. Puissance consommée aux bornes de l'aérateur

La vitesse d'agitation \mathcal{N} étant constante, et si l'on néglige les variations de la tension superficielle γ du fluide, la relation (A.1) se réduit à :

$$Np = k Re^x \quad (\text{A.2})$$

La valeur de l'exposant x dans la relation précédente dépend du régime d'écoulement du fluide dans le réacteur, qu'il devient par conséquent nécessaire d'identifier. Le nombre de Reynolds est défini, rappelons-le comme le rapport :

$$Re = \frac{\mathcal{N}d^2\mu}{\eta}$$

- la masse volumique de l'effluent reste, malgré la présence des micro-organismes, voisine de $1\,000 \text{ kg.m}^{-3}$;
- le diamètre du rotor varie, selon Eckenfelder (1991), entre 0,9 et 3,7 m et les vitesses de rotation s'échelonnent de 30 à 60 rpm ;
- la viscosité du liquide est moins facile à évaluer. Sutapa (1996) propose d'approcher le comportement visqueux de plusieurs types d'effluents par le modèle de *Sisko* :

$$\eta = \eta_0 + k \dot{\gamma}^{m-1} \quad (\text{A.3})$$

où $\dot{\gamma}$ désigne la vitesse de cisaillement, η_0 la viscosité du plateau et k , m deux constantes caractéristiques de l'effluent. Pour un effluent urbain, les corrélations suivantes entre les paramètres η_0 , k et m du modèle de *Sisko* et la concentration des boues X_t^{ba} dans le réacteur ont pu être établies :

$$\eta_0 = a_1 10^{b_1 X_t^{ba}} \quad \text{avec : } a_1 = 1,38 \cdot 10^{-3} \quad \text{et } b_1 = 3,84 \cdot 10^{-2} \quad (r^2 = 99\%)$$

$$k = a_2 10^{b_2 X_t^{ba}} \quad \text{avec : } a_2 = 67,2 \cdot 10^{-3} \quad \text{et } b_2 = 5,51 \cdot 10^{-2} \quad (r^2 = 99\%)$$

$$m = a_3 + b_3 \log X_t^{ba} \quad \text{avec : } a_3 = -24,4 \cdot 10^{-3} \quad \text{et } b_3 = 4,59 \cdot 10^{-2} \quad (r^2 = 55\%)$$

Contrairement aux paramètres η_0 et k , le coefficient de corrélation relatif au paramètre m est faible ; l'expérience montre cependant que $m \approx 10^{-2} \ll 1$ dans la gamme $X_t^{ba} \in [1 \text{ g.L}^{-1}; 5 \text{ g.L}^{-1}]$.

Pour déterminer la vitesse de cisaillement, on peut par exemple appliquer les résultats des travaux de Kawase et Moo-Young (1991). Selon ces auteurs, la vitesse de cisaillement moyenne en cuve agitée est proportionnelle à la vitesse de rotation de l'agitateur avec un coefficient de proportionnalité de l'ordre de 10. Ces résultats conduisent aux estimations suivantes :

$$5 \text{ s}^{-1} \leq \bar{\gamma} \leq 10 \text{ s}^{-1} \quad \text{pour } 30 \leq \mathcal{N} \leq 60 \text{ rpm} \quad (\text{A.4})$$

En appliquant les corrélations précédentes pour des concentrations en boues de 1 à 5 g/l, il vient :

$$10^{-2} \text{ pa.s} \leq \eta \leq 2 \cdot 10^{-2} \text{ pa.s} \quad (\text{A.5})$$

Au final, le nombre de Reynolds varie dans une gamme :

$$2 \cdot 10^4 \leq Re \leq 1,4 \cdot 10^6 \quad (\text{A.6})$$

Ces estimations sont caractéristiques des écoulement en régime turbulent. Or dans ces conditions, l'exposant x est nul dans (A.2), *i.e.* le nombre de puissance Np est constant. Au final, il est possible d'exprimer la puissance \mathcal{P} consommée aux bornes des turbines par la relation :

$$\mathcal{P} = Np \mu \mathcal{N}^3 d^5 \propto \mu \mathcal{N}^3 d^5 \quad (\text{A.7})$$

Cette relation est indépendante de la concentration des boues dans le réacteur.

ANNEXE B

Point sur les exigences réglementaires

La récente réglementation, prise par application de la loi sur l'eau du 3 janvier 1992 et intégrant les objectifs fixés par les directives européennes “*Eaux résiduaires urbaines*” et “*Boues*”, est aujourd’hui quasiment complète. Les divers décrets, arrêtés et circulaires d’application¹ instaurent deux cas qui se définissent, en simplifiant, en fonction de seuils de population agglomérée :

- les agglomérations dont la taille est supérieure à 2 000 E.H. (Équivalent-Habitant)
- celles dont la taille est comprise entre 200 et 2 000 E.H.

Les obligations relatives à la qualité des traitements continuent bien entendu à être fixées selon la même philosophie qu'auparavant, en fonction de l'état des milieux receuteurs aquatiques superficiels notamment, et principalement pour respecter les objectifs de qualité assignés à ces milieux.

¹Les textes qui font références sont les suivants :

- Décret n° 94-469 du **3 juin 1994** relatif à la collecte et au traitement des eaux usées mentionnées aux articles L.372.1.1 et L.372.3 du code des communes ;
- Arrêté du **22 décembre 1994** fixant les prescriptions techniques relatives aux ouvrages de collecte et de traitement des eaux usées mentionnées aux articles L.372.1.1 et L.372.3 du code des communes ;
- Arrêté du **21 juin 1996** fixant les prescriptions techniques minimales relatives aux ouvrages de collecte et de traitement des eaux usées mentionnées aux articles L.2224.8 et L.2224.10 du code général des collectivités territoriales, dispensés d'autorisation au titre du décret n° 93-743 du 29 mars 1993 relatif à la nomenclature des opérations soumises à déclaration ou à autorisation, en application de l'article 10 de la loi n° 92-3 du 3 janvier 1992 sur l'eau ;
- Circulaire du **17 février 1997** relative à l'assainissement collectif des communes - ouvrages de capacité inférieure à 120 kg de DBO₅ par jour.

B.1 Charge journalière incidente comprise entre 120 et 600 kg DBO₅/j

Au-dessus de 120 kg de DBO₅ par jour, c'est-à-dire 2 000 E.H., les installations sont soumises au régime d'autorisation. Le niveau de traitement requis est de 25 mg.L⁻¹ pour la DBO₅ (ou 70 à 80% d'abattement selon les cas) (Tab. B.1), mais surtout une obligation de fiabilité est instaurée (respect des seuils imposés 95% du temps), et plus encore le non-dépassement de valeurs rédhibitoires (50 mg.L⁻¹ pour la DBO₅ en particulier). Pour ce qui est de l'azote, les valeurs limites sont fixées par l'objectif de qualité du milieu récepteur et peuvent atteindre 10 mg.L⁻¹ pour l'azote glotal NGL (avec un rendement minimum d'élimination de 70%).

TAB. B.1 – Prescriptions minimales pour les rejets dans les eaux de surface, hors zones sensibles, pour les collectivités de plus de 2 000 E.H.

	2 000 à 10 000 E.H.		supérieur à 10 000 E.H.	
	Concentration maximale	Rendement	Concentration maximale	Rendement
DBO ₅	25 mg.L ⁻¹	70%	25 mg.L ⁻¹	80%
DCO	125 mg.L ⁻¹	75%	125 mg.L ⁻¹	75%
MES	35 mg.L ⁻¹	90%	35 mg.L ⁻¹	90%

B.2 Charge journalière incidente comprise entre 12 et 120 kg DBO₅/j

Entre 12 et 120 kg de DBO₅ par jour, c'est-à-dire entre 200 et 2 000 E.H., les installations sont soumises au régime de déclaration. Quatre niveaux minima (notés **D1** à **D4**) ont été définis en fonction de l'importance du rejet par rapport au débit d'étiage, des objectifs de qualité du milieu récepteur et des filières de traitement. Ces niveaux sont définis dans le Tab. B.2.

TAB. B.2 – Prescriptions minimales pour les rejets dans les eaux de surface, hors zones sensibles, pour les collectivités de taille comprise entre 200 et 2 000 E.H.

	D1	D2	D3	D4
DBO ₅	Rdt. ≥ 30%	Conc. ≤ 35 mg.L ⁻¹		Conc. ≤ 25 mg.L ⁻¹
DCO			Rdt. ≥ 60%	Conc. ≤ 125 mg.L ⁻¹
MES	Rdt. MES ≥ 50%			
NK				Rdt. ≥ 60%

B.2. Charge journalière incidente comprise entre 12 et 120 kgDBO₅/j

Le niveau **D4** coïncide avec le niveau classique de traitement des collectivités dont le système de traitement est soumis à autorisation. Les stations d'épuration à boues activées en aération prolongée dont la capacité est inférieure à 2 000 E.H. y sont habituellement soumises.

ANNEXE C

Programmation Quadratique Successive

La technique de programmation quadratique successive est une méthode de résolution des problèmes de programmation non-linéaire, mise au point dans les années 1970 par Han (1976) et Powell (1978) sur la base des travaux de Wilson (1963). Elle consiste à approximer le problème d'optimisation non-linéaire par un problème d'optimisation quadratique sous contraintes linéaires.

On considère le problème d'optimisation (statique) non-linéaire sous contraintes suivant :

$$\min_{\boldsymbol{x}} \mathcal{J} = f(\boldsymbol{x}) \quad (C.1a)$$

$$\text{soumis à : } g_i(\boldsymbol{x}) = 0 \quad i = 1 \dots r_e \quad (C.1b)$$

$$g_i(\boldsymbol{x}) \geq 0 \quad i = r_e + 1 \dots r \quad (C.1c)$$

$$\boldsymbol{x}^U \geq \boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{x}^L \quad (C.1d)$$

et le lagrangien associé au problème :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\nu}) = f(\boldsymbol{x}) + \sum_{i=1}^r \nu_i g_i(\boldsymbol{x}) \quad (C.2)$$

où $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ désigne le vecteur des paramètres et $\boldsymbol{\nu} \in \mathbb{R}^r$, le vecteur des multiplicateurs de Lagrange et de Kuhn-Tucker.

Soit \boldsymbol{x}^k le point courant, $\boldsymbol{\nu}^k$ une estimation du vecteur des multiplicateurs de Lagrange et de Kuhn-Tucker associé à \boldsymbol{x}^k par le problème (C.1) et \mathcal{B}^k une approximation semi-définie positive (garantissant l'existence d'une solution) du hessien de \mathcal{L} au point \boldsymbol{x}^k . En linéarisant les contraintes et en minimisant l'approximation quadratique du lagrangien \mathcal{L} , on obtient un sous-problème de la forme :

$$\min_{\delta \mathbf{x}} J^k = \frac{1}{2} \delta \mathbf{x}^T \mathcal{B}^k \delta \mathbf{x} + \nabla_{\mathbf{x}}^T f(\mathbf{x}^k) \delta \mathbf{x} \quad (C.3a)$$

$$\text{soumis à : } 0 = \nabla_{\mathbf{x}}^T g_i(\mathbf{x}^k) \delta \mathbf{x} + g_i(\mathbf{x}^k) \quad i = 1 \dots r_e \quad (C.3b)$$

$$0 \leq \nabla_{\mathbf{x}}^T g_i(\mathbf{x}^k) \delta \mathbf{x} + g_i(\mathbf{x}^k) \quad i = r_e + 1 \dots r \quad (C.3c)$$

$$0 \leq \delta \mathbf{x} - (\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^L) \quad (C.3d)$$

$$0 \leq -\delta \mathbf{x} - (\mathbf{x}^U - \mathbf{x}^k) \quad (C.3e)$$

La condition d'optimalité de ce sous-problème est donnée par l'annulation du jacobien de l'approximation quadratique. Cette condition fournit une solution explicite $\delta \mathbf{x}^k$. La direction de recherche pour atteindre le point \mathbf{x}^{k+1} de l'itération suivante est alors définie par :

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \alpha^k \delta \mathbf{x}^k \quad (C.4)$$

où α^k est la longueur du pas dans la direction de recherche. D'autre part, le rôle joué par le multiplicateur est trop important pour être supposé constant le long de la direction de recherche. Il est donc également mis à jour selon :

$$\boldsymbol{\nu}^{k+1} = \boldsymbol{\nu}^k + \alpha^k \delta \boldsymbol{\nu}^k \quad (C.5)$$

où $\delta \boldsymbol{\nu}^k$ désigne le vecteur des multiplicateurs de Lagrange et de Kuhn-Tucker associé à $\delta \mathbf{x}^k$ dans le sous-problème quadratique (C.3).

La longueur du pas α^k dans la direction de recherche est choisie pour réduire *suffisamment* une fonction de mérite μ du type :

$$\mu(\alpha^k) = \xi(\mathbf{x}^k + \alpha^k \delta \mathbf{x}^k, \boldsymbol{\nu}^k + \alpha^k \delta \boldsymbol{\nu}^k) \quad (C.6)$$

Le choix de la fonction de mérite ξ est très vaste, et conduit à un très grand nombre de variantes de la méthode *SQP*. On peut citer, par exemple, la fonction de pénalisation exacte :

$$\xi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{r_e} p_i |g_i(\mathbf{x})| + \sum_{i=r_e+1}^r p_i |\min[0, g_i(\mathbf{x})]| \quad (C.7)$$

ou encore le lagrangien augmenté, proposé par Schittkowski (1985) et qui est implémenté dans le code de calcul **NLPQL** :

$$\xi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\nu}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i \in \mathcal{I}} \left[\nu_i g_i(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} p_i (g_i(\mathbf{x}))^2 \right] + \sum_{i \in \mathcal{I}'} \frac{\nu_i^2}{p_i} \quad (C.8)$$

où les ensembles \mathcal{I} et \mathcal{I}' sont définis par :

$$\mathcal{I} = \{1, \dots, r_e\} \cup \left\{ i \mid r_e \leq i \leq r, g_i(\mathbf{x}) \leq \frac{\nu_i}{p_i} \right\}$$

$$\mathcal{I}' = \{1, \dots, r\} \setminus \mathcal{I}$$

ANNEXE D

Modélisation d'une unité de traitement existante

Afin d'établir les bénéfices qui peuvent être réalisés en optimisant la gestion des cycles d'aération des petites stations d'épuration, l'étude d'une unité de traitement existante est envisagée. Les aspects relatifs à la modélisation de cette station d'épuration sont présentés dans cette annexe¹. La configuration de la filière de traitement est précisée dans le paragraphe D.1. Les mesures utilisées pour identifier les modèles mathématiques présentés dans le chapitre 1 sont ensuite détaillées dans le paragraphe D.2. La procédure d'identification paramétrique, ainsi que les résultats des simulations, font l'objet du paragraphe D.3.

D.1 Configuration de l'unité de traitement

La station d'épuration étudiée est une filière de traitement de configuration classique comprenant un étage de pré-traitement (dégrillage, dessablage, déshuileage et décantation primaire), suivi d'un étage de traitement biologique (bassin d'aération et clarificateur). Le traitement des boues est également assuré sur le site de la station. La configuration de l'unité est donnée sur la Fig. D.1 page 250.

Concernant l'étage de traitement biologique plus spécifiquement, les réactions de dégradation s'effectuent au sein d'un réacteur unique de 2 047 m³. L'aération et le brassage de la liqueur mixte sont assurés au moyen de 3 turbines délivrant une puissance de 30 kW chacune. Des essais d'aération en eau claire ont permis d'établir, pour le coefficient k_{La} relatif au transfert d'oxygène, une valeur de 4,5 h⁻¹. Ces données sont reportées sur

¹Les mesures expérimentales utilisées pour l'identification paramétrique des modèles mathématiques ont été mises à disposition par la Direction Technique des Opérations du groupe Vivendi Environnement et de la société Anjou Recherche. Les résultats obtenus ont fait l'objet d'un rapport technique et d'une publication dans *Industrial & Engineering Chemistry Research* (Chachuat et al., 2000, soumis pour publicationb).

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

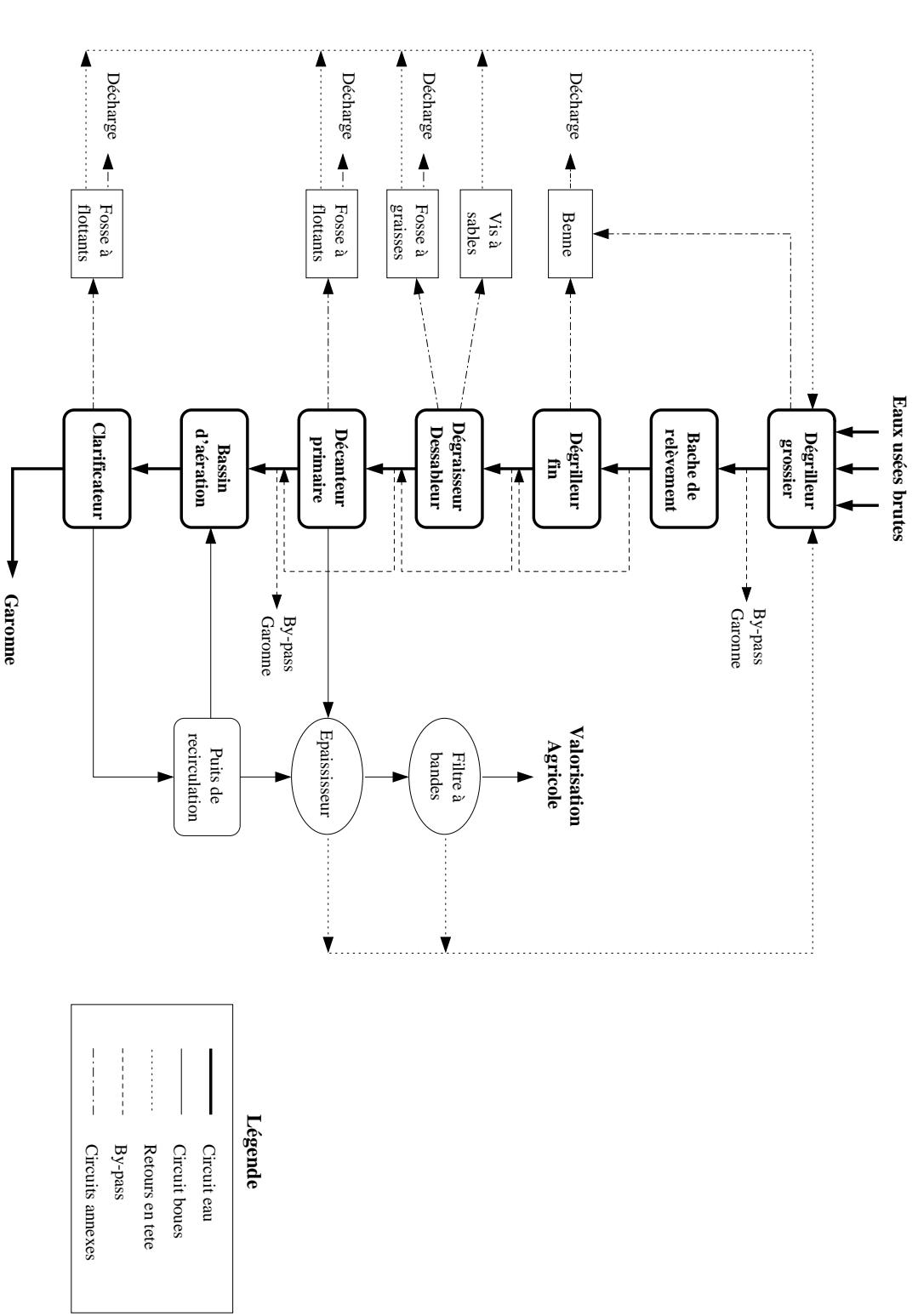


FIG. D.1 – Schémas d'ensemble de la filière de traitement : pré-traitements, étage biologique et traitement des boues.

D.1. Configuration de l'unité de traitement

la Fig. D.2. Le système d'aération du réacteur biologique fonctionne séquentiellement, de manière à alterner des conditions d'aérobiose et d'anoxie. La gestion des cycles d'aération s'effectue au moyen d'horloges, et est ainsi identique d'un jour à l'autre (Fig. D.3) ; par ce type de commande, la durée quotidienne d'aération est de 12h45. D'autre part, aucun apport de carbone externe (*e.g.* méthanol) n'est prévu sur cette unité durant les phases d'anoxie pour favoriser la dénitrification.

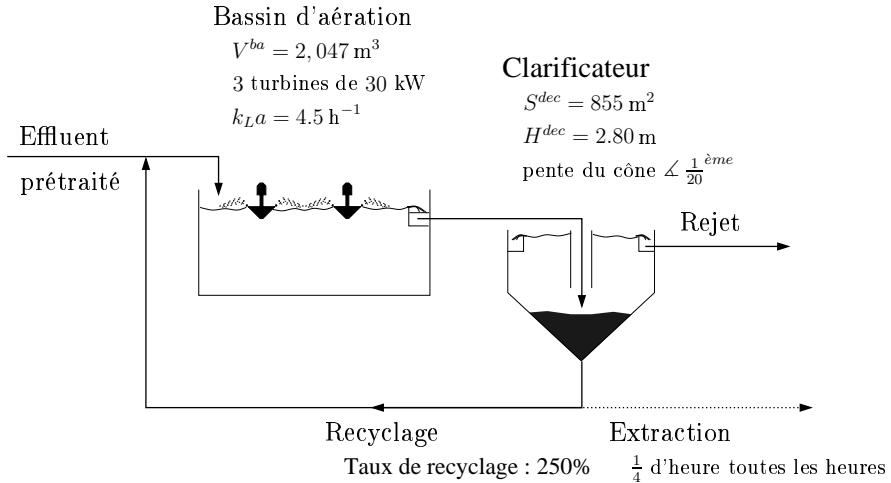


FIG. D.2 – Configuration de l'étage de traitement biologique.

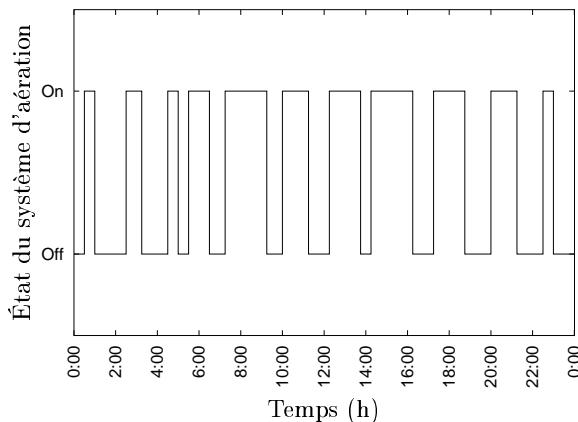


FIG. D.3 – Configuration des cycles d'aération (commande par horloges).

Le clarificateur est de type cyclindro-conique. Il présente une surface au miroir de 855 m² et une hauteur de 2,80 m en périphérie ; la pente du cône d'extraction est de $\frac{1}{20}^{\text{ème}}$. L'extraction des boues se fait à partir de cet ouvrage de manière discontinue avec $\frac{1}{4} \text{ d'heure d'extraction toutes les heures}$, soit environ 75 m³.j⁻¹. Le débit de recyclage est constant et réglé de manière à ce que le taux de recyclage soit de 250%. Aussi, comme le débit moyen journalier mesuré est de l'ordre de 3 050 m³.j⁻¹, le débit de recyclage s'élève environ à 7 600 m³.j⁻¹.

Cette installation est actuellement gérée par la *Compagnie Générale des Eaux* et est soumises aux normes de rejet suivantes :

- les valeurs limites fixées par la *Circulaire de Novembre 1980* pour les rejets de DCO, DBO₅ et MES ;

- le niveau NTK 1 pour les rejets azotés¹ ;
- l'élimination du phosphore n'est pas recherchée.

D.2 Mesures expérimentales

Les mesures servant de base à l'identification paramétrique des modèles mathématiques ont été obtenues lors d'une campagne de mesure de 24 heures, qui s'est déroulée les 10 et 11 septembre 1996 (à partir de 9h00). Ces données sont deux types :

- 12 *prélèvements d'échantillons moyens* de 2 heures durant 24 heures, sur l'effluent prétraité (après décantation primaire) et l'effluent rejeté ;
- 2 *prélèvements instantanés*, à 14 heure et 16 heures, sur la liqueur mixte présente dans le bassin d'aération et la boue de recirculation.

D.2.1 Caractérisation de l'effluent prétraité

Les mesures effectuées sur l'effluent prétraité sont relatives au débit et aux concentrations en DCO , $DCOs$, MES , MVS , NTK et NH_4 . Les mesures de MES et de MVS sont cependant difficilement exploitables d'un point de vue pratique. Il est apparu difficile, en effet, de corrélérer les concentrations en MES et en MVS avec leurs équivalents en DCO au moyen de relations simples, *e.g.* des relations linéaires du type $DCO = a MES + b MVS$. Ceci est d'autant plus regrettable que ces mesures sont généralement porteuses d'information sur la composition de l'influent (*e.g.* teneur en matières particulières biodégradables et inertes, teneur en biomasse, *etc.*) et qu'il n'a pas été possible, dans ces conditions, de les exploiter. Seules les mesures de DCO , $DCOs$, NTK et NH_4 sont ainsi prises en compte pour l'identification paramétrique.

Débit et charge incidents

Le débit et les concentrations de l'effluent prétraité sont mesurés sur des échantillons moyens de 2 heures. Ces données permettent de reconstituer les variations du débit et des concentrations incidents tout au long des 24 heures de mesure (Fig. D.4).

- Une unique pointe de débit est observée au cours de la journée, entre 11h et 13h, *i.e.* à l'heure du déjeuner (Fig. D.4 gauche). Curieusement, on ne retrouve pas ici de seconde pointe, de façon nette, le soir vers 20h, et le débit atteint son minimum durant la nuit.
- Une augmentation de la concentration en DCO se produit corrélativement à la pointe de débit, avec toutefois un certain délai et de façon plus durable (Fig. D.4 centre). Ceci résulte essentiellement de l'effet du prétraitement : le passage de l'effluent dans les ouvrages de prétraitement induit un retard et des phénomènes de mélange se produisent, alors que l'effet d'une augmentation du débit sur l'étage de traitement biologique est, en revanche, beaucoup moins amorti.

¹En pratique toutefois, et pour un plus grand confort d'exploitation, la nitrification est poussée jusqu'au niveau NTK 2.

- La concentration en azote de Kjeldhal (Fig. D.4 droite) reste, quant à elle, relativement stable, comprise entre 30 et 35 mg.L⁻¹ tout au long de la journée.

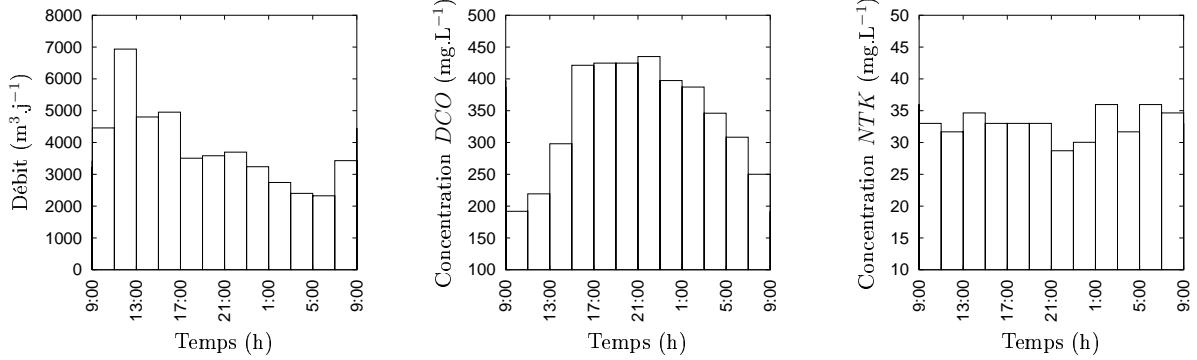


FIG. D.4 – Mesures moyennes sur 2 heures du débit et des concentrations incidents.

Modélisation des perturbations

Les perturbations incidentes (débit et concentrations moyens sur 2 heures) sont modélisées par des fonctions sinusoïdales de périodes $2k\pi$ ($k \leq 1$). L'approximation des variations du débit incident à l'ordre N , par exemple, est donnée par :

$$\tau_Q(t) \approx 1 + \sum_{k=1}^N [\alpha_k \cos(2k\pi t) + \beta_k \sin(2k\pi t)] \quad (\text{D.1})$$

où $\tau_Q(t) = \frac{Q_{in}(t)}{\bar{Q}_{in}}$, est le rapport entre le débit incident à l'instant t et le débit journalier moyen. Les coefficients α_k et β_k de la série (D.1) sont déterminés en minimisant la fonction d'écart \mathcal{E} suivante :

$$\min_{\alpha_k, \beta_k} \mathcal{E} = \sum_{j=1}^{12} \left[\frac{1}{T} \int_{t_0+(j-1)T}^{t_0+jT} \tau_Q(t) dt - \tau_Q^j \right]^2 \quad (\text{D.2})$$

où T désigne la période d'échantillonnage des prélèvements moyens ($T = 2\text{h}$) et τ_Q^j , le rapport entre le débit moyen mesuré lors de la $j^{\text{ème}}$ période (*i.e.* entre $t_0 + (j-1)T$ et $t_0 + jT$) et le débit journalier moyen. L'intégration de la fonction d'écart donne :

$$\mathcal{E} = \sum_{j=1}^{12} \left[1 + \sum_{k=1}^N \left[\alpha_k \frac{\sin(2k\pi t)}{2k\pi} - \beta_k \frac{\cos(2k\pi t)}{2k\pi} \right]_{t_0+(j-1)T}^{t_0+jT} - \tau_Q^j \right]^2 \quad (\text{D.3})$$

Les valeurs des 5 premiers coefficients α_k et β_k qui minimisent l'expression (D.3) pour le débit et les concentrations en DCO et NTK incidents sont données dans le Tab. D.1.

Les perturbations approximées par des développements de 3 et 5 termes sont présentés sur la Fig. D.5. L'écart entre l'approximation et les mesures moyennes diminue bien entendu avec l'ordre N du développement. Toutefois, au delà de 3 termes, les approximations présentent de nombreuses oscillations. Dans la suite de l'étude, les approximations adoptées correspondent ainsi à des développements du 3^{ème} ordre; la pointe de débit modélisée entre 11 et 13 heures est néanmoins plus étalée que celle de la perturbation réelle.

TAB. D.1 – Modélisation des perturbations incidentes.

k	Débit		Concentration DCO		Concentration NTK	
	$\overline{Q_{in}} = 3810 \text{ m}^3.\text{j}^{-1}$	$\overline{DCO_{in}} = 343 \text{ mg.L}^{-1}$	$\overline{DCO_{in}} = 343 \text{ mg.L}^{-1}$	$\overline{NTK_{in}} = 33 \text{ mg.L}^{-1}$	$\overline{NTK_{in}} = 33 \text{ mg.L}^{-1}$	
1	-0.325	-0.185	0.254	-0.202	-0.070	-0.014
2	0.230	-0.011	-0.093	0.067	-0.018	0.005
3	-0.063	-0.006	0.043	-0.020	0.006	-0.006
4	0.051	-0.044	-0.016	-0.017	0.063	0.058
5	-0.145	0.031	-0.039	0.015	-0.008	-0.008

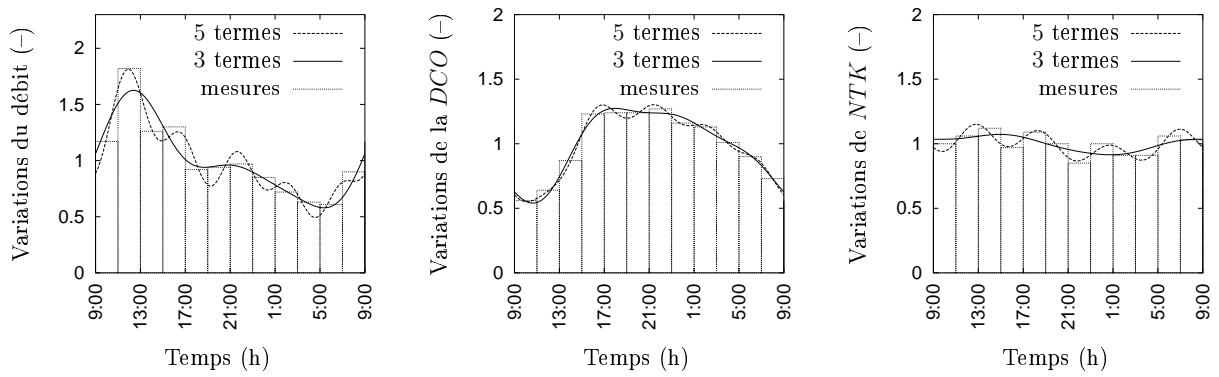


FIG. D.5 – Modélisation des perturbations incidentes : développements d'ordres 3 et 5.

Composition de la *DCO* incidente

En raison des variables d'état définies dans le modèle ASM 1 (*cf.* § 1.1.1, p. 15), 6 paramètres doivent être spécifiés pour caractériser la composition de la *DCO* incidente. Ils sont relatifs aux fractions de *DCO* soluble inerte (f_{SI}) et biodégradable (f_{SS}), de *DCO* particulaire inerte (f_{XI}) et biodégradable (f_{XS}) et de biomasses hétérotrophe (f_{XBH}) et autotrophe (f_{XBA}).

Deux contraintes lient ces paramètres :

- la première relation concerne la somme des 6 fractions de *DCO* :

$$f_{SI} + f_{SS} + f_{XI} + f_{XS} + f_{XBH} + f_{XBA} = 1 \quad (\text{D.4})$$

- l'autre contrainte est relative aux 2 fractions de *DCO* soluble, puisque le rapport entre les concentrations en *DCO* et *DCOs* mesurées varie peu au cours de la journée, de l'ordre de 40% (Tab. D.2) :

$$f_{SI} + f_{SS} \approx 0.4 \quad (\text{D.5})$$

TAB. D.2 – Comparaison des concentrations en *DCO* et *DCOs* incidentes.

période	9h–11h	13h–15h	17h–19h	21h–23h	1h–3h	5h–7h	moyenne
<i>DCO</i> moyenne (mg.L ⁻¹)	192	299	426	434	386	308	
<i>DCOs</i> moyenne (mg.L ⁻¹)	65	125	178	158	177	143	
rapport $\frac{DCOs}{DCO}$	0.34	0.42	0.42	0.36	0.46	0.46	0.40

D'autre part, la concentration en biomasse autotrophe est généralement négligeable dans l'influent, en raison du faible taux de croissance de ce type de microorganismes :

$$f_{XBA} \approx 0 \quad (\text{D.6})$$

Composition de l'azote incident

Pour des raisons de compatibilité avec le modèle ASM 1, 4 paramètres doivent également être définis pour représenter les différentes formes d'azote présentes dans l'influent. Ces paramètres sont relatifs aux fractions de nitrate (f_{SNO}), d'ammoniaque (f_{SNH}) et d'azote organique soluble (f_{SND}) et particulaire (f_{XND}) :

- la concentration d'azote nitrique incidente est généralement négligeable, étant donné que les réactions de nitrification ne se produisent pas dans les réseaux d'assainissement, milieux généralement réducteurs :

$$f_{SNO} \approx 0 \quad (\text{D.7})$$

- d'autre part, les concentrations en azote de Kjehldal et en ammoniaque incidentes sont mesurées ; leur rapport varie peu au cours de la journée (Tab. D.3), ce qui permet d'évaluer la fraction d'azote organique et d'ammoniaque de l'effluent prétraité :

$$f_{SNH} \approx 0.67 \quad (\text{D.8})$$

$$f_{SND} + f_{XND} \approx 0.33 \quad (\text{D.9})$$

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

TAB. D.3 – Comparaison des concentrations en NTK et NH_4 incidentes.

période	9h–11h	11h–13h	13h–15h	15h–17h	17h–19h	19h–21h	
NTK moyen (mg.L^{-1})	33	30	30	35	34	33	
NH_4 moyen (mg.L^{-1})	20	24	21	24	23	22	
rapport $\frac{NH_4}{NTK}$	0.61	0.80	0.70	0.69	0.68	0.67	
	21h–23h	23h–1h	1h–3h	3h–5h	5h–7h	7h–9h	moyenne
	35	37	32	36	33	28	
	21	23	22	22	22	19	
	0.60	0.62	0.69	0.61	0.66	0.68	0.67

D.2.2 Caractérisation de la liqueur mixte et des boues de recirculation

Deux échantillons de boues ont été prélevés au cours de la journée de mesure (respectivement à 14h et 16h) dans le réacteur et le recyclage. Les analyses réalisées sur ces échantillons concernent :

- les concentrations en DCO , MES et NTK pour les prélèvements de liquide mixte dans le bassin d'aération (Fig. D.6 gauche) ;
- la concentration en MES uniquement pour les prélèvements de boues de recirculation (Fig. D.6 droite).

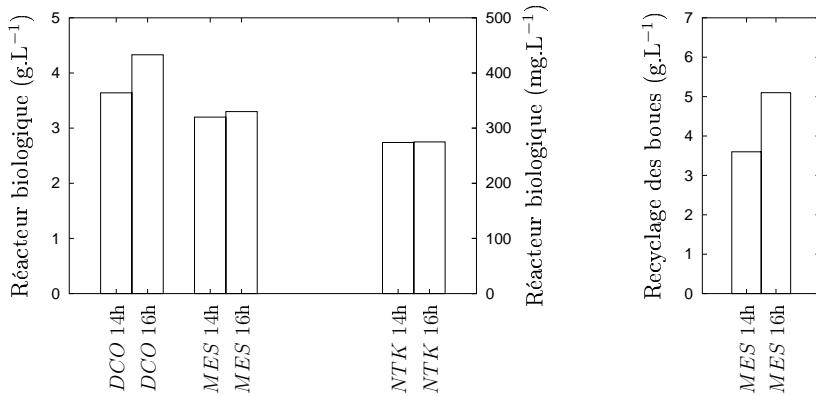


FIG. D.6 – Concentrations des prélèvements de boues du bassin d'aération et du recyclage.

Les concentrations de boues dans le bassin d'aération et le recyclage sont directement calculées à partir des variables d'état du modèle global (1.18) ou du modèle simplifié (1.23) selon le cas. Les expressions des concentrations dans le réacteur sont identiques avec les deux modèles :

$$DCO^{ba}(t) = S_I^{ba}(t) + S_S^{ba}(t) + X_I^{ba}(t) + X_S^{ba}(t) + X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t) \quad (\text{D.10})$$

$$MES^{ba}(t) = 0.75 [X_I^{ba}(t) + X_S^{ba}(t)] + 0.9 [X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t)] \quad (\text{D.11})$$

$$\begin{aligned} NTK^{ba}(t) = & S_{NO}^{ba}(t) + S_{NH}^{ba}(t) + S_{ND}^{ba}(t) + X_{ND}^{ba}(t) + i_{N XI} X_I^{ba}(t) \\ & + i_{N BM} (X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t)) \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

En revanche, elles diffèrent selon le modèle utilisé pour le calcul de la concentration en *MES* des boues de recirculation :

- *Cas du modèle global* :

$$MES^{rec}(t) = X_t^{dec,N_c} \quad (D.13a)$$

- *Cas du modèle simplifié* :

$$MES^{rec}(t) = 0.75 \vartheta [X_I^{ba}(t) + X_S^{ba}(t)] + 0.9 \vartheta [X_{B,H}^{ba}(t) + X_{B,A}^{ba}(t)] \quad (D.13b)$$

où $\vartheta = \frac{Q_{rec}+Q_{in}(1-f_{ns})+f_{ns}Q_{purg}}{Q_{rec}+Q_{purg}}$ correspond au taux de compression des boues dans le clarificateur (*cf.* § 1.1.4, p. 27).

D.2.3 Caractérisation des rejets

Les échantillons d'effluent traité correspondent à des prélèvements moyens de 2 heures et les concentrations en *DCO*, *DCOs*, *MES*, *NTK*, *NH₄* et *NO₃* sont mesurées sur chaque échantillon (Fig. D.7). On peut noter toutefois que ni les concentrations en *DCOs* des prélèvements réalisés entre 11h-13h, 15h-17h, 19h-21h, 23h-1h, 3h-5h et 7h-9h (Fig. D.7(b)), ni la concentration moyenne en *NTK* entre 13h-15h (Fig. D.7(d)) ne sont ici disponibles.

D'autre part, une mesure apparaît clairement irréaliste. La concentration en *DCO* de l'échantillon moyen prélevé entre 13h et 15h (57 mg.L⁻¹, Fig. D.7(a)) est, en effet, sensiblement plus élevée que les autres concentrations mesurées ce jour ci (entre 29 et 38 mg.L⁻¹). Il semble, à première vue, que cette augmentation soit consécutive à la pointe de débit observée entre 11h et 13h. Toutefois, ni la concentration en *DCOs* (Fig. D.7(b)), ni la concentration en *MES* (Fig. D.7(c)) n'augmentent simultanément. Aussi, une telle pointe de concentration en *DCO* n'est pas justifiée. Cette mesure ne sera donc pas prise en compte ultérieurement pour l'identification paramétrique des modèles mathématiques.

Les seules variables d'état des modèles mathématiques utilisés ne permettent pas de calculer directement les concentrations des prélèvements moyens. Le calcul d'une intégrale devient nécessaire, *e.g.* pour la concentration moyenne en *DCO* sur la période $[t_{i-1}, t_i]$:

$$\overline{DCO}|_{[t_{i-1}, t_i]} = \int_{t_{i-1}}^{t_i} [X_I^{rej}(t) + X_S^{rej}(t) + X_{B,H}^{rej}(t) + X_{B,A}^{rej}(t) + S_I^{rej}(t) + S_S^{rej}(t)] dt \quad (D.14)$$

Pour représenter ces prélèvements moyens, la variable d'état supplémentaire \tilde{x}_1 est définie :

- *Cas du modèle global* :

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{x}}_1(t) &= X_t^{dec,1}(t) \left[\frac{1}{0.75} (p_{X_I}^{dec,1}(t) + p_{X_S}^{dec,1}(t)) + \frac{1}{0.9} (p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t)) \right] \\ &\quad + S_t^{dec,1}(t) [p_{S_I}^{dec,1}(t) + p_{S_S}^{dec,1}(t)] \end{aligned} \quad (D.15)$$

$$\tilde{x}_1(t_0) = 0 \quad (D.16)$$

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

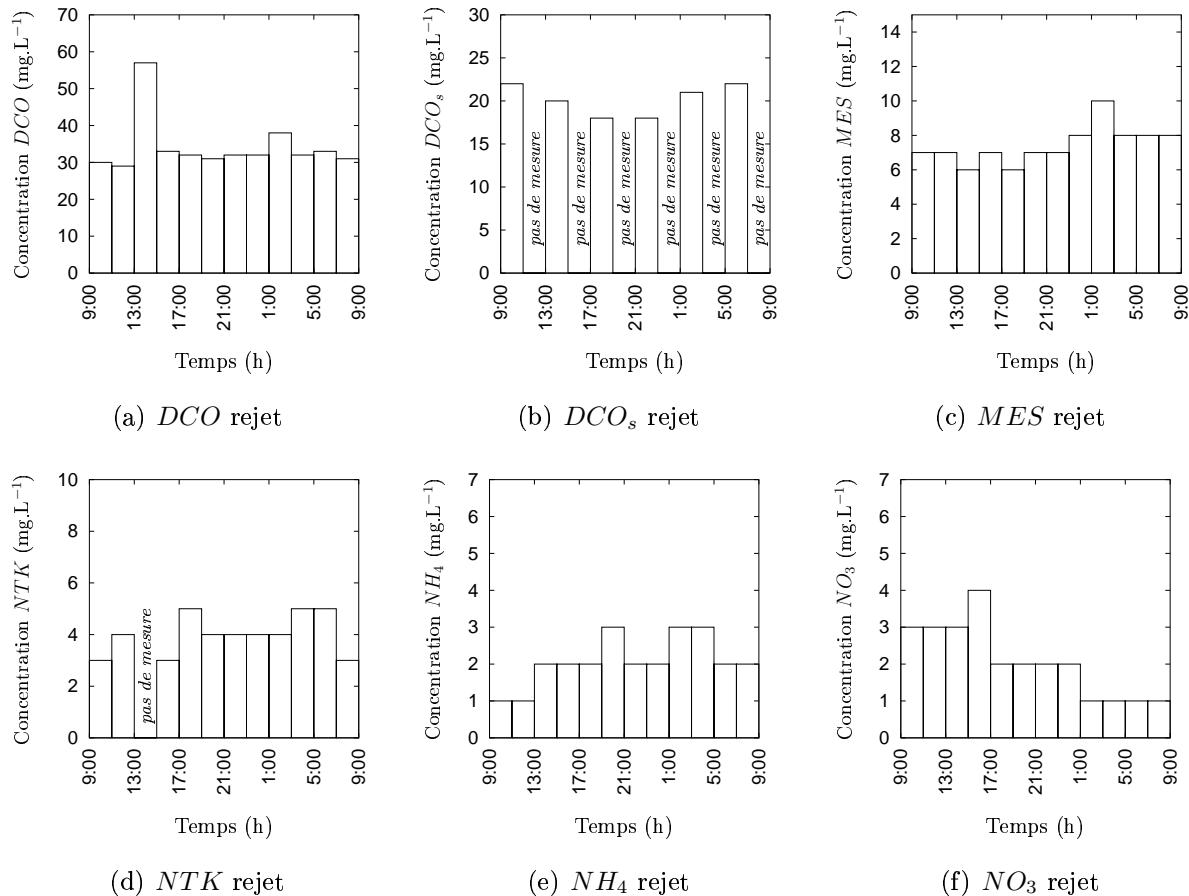


FIG. D.7 – Concentrations des prélèvements moyens sur l'effluent traité.

- Cas du modèle simplifié :

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{x}}_1(t) &= f_{ns} \left[X_I^{ba}(t - t_d) + X_S^{ba}(t - t_d) + X_{B,H}^{ba}(t - t_d) + X_{B,A}^{ba}(t - t_d) \right] \\ &\quad + S_I^{ba}(t - t_d) + S_S^{ba}(t - t_d)\end{aligned}\quad (D.17)$$

$$\tilde{x}_1(t_0) = 0 \quad (D.18)$$

où t_d représente le temps de transit de l'effluent dans le clarificateur (*cf.* § 1.1.4, p. 27)

De façon similaire pour les concentrations moyennes en DCO_s , MES , NTK , NH_4 et NO_3 , il est possible de définir les variables d'état supplémentaires $\tilde{x}_2, \dots, \tilde{x}_6$:

- Cas du modèle global :

$$\dot{\tilde{x}}_2(t) = S_t^{dec,1}(t) \left[p_{S_I}^{dec,1}(t) + p_{S_S}^{dec,1}(t) \right] \quad (D.19a)$$

$$\dot{\tilde{x}}_3(t) = X_t^{dec,1}(t) \quad (D.19b)$$

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{x}}_4(t) &= X_t^{dec,1}(t) \left[\frac{i_{NXI}}{0.75} p_{X_I}^{dec,1}(t) + \frac{i_{NBM}}{0.9} \left(p_{X_{B,H}}^{dec,1}(t) + p_{X_{B,A}}^{dec,1}(t) \right) + p_{X_{ND}}^{dec,1}(t) \right] \\ &\quad + S_t^{dec,1}(t) \left[p_{S_{NO}}^{dec,1} + p_{S_{NH}}^{dec,1} + p_{S_{ND}}^{dec,1} \right]\end{aligned}\quad (D.19c)$$

$$\dot{\tilde{x}}_5(t) = S_t^{dec,1}(t) p_{S_{NH}}^{dec,1}(t) \quad (D.19d)$$

$$\dot{\tilde{x}}_6(t) = S_t^{dec,1}(t) p_{S_{NO}}^{dec,1}(t) \quad (D.19e)$$

- Cas du modèle simplifié :

$$\dot{\tilde{x}}_2(t) = S_I^{ba}(t - t_d) + S_S^{ba}(t - t_d) \quad (D.20a)$$

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{x}}_3(t) &= f_{ns} \left[0.75 \left(X_I^{ba}(t - t_d) + X_S^{ba}(t - t_d) \right) \right. \\ &\quad \left. + 0.9 \left(X_{B,H}^{ba}(t - t_d) + X_{B,A}^{ba}(t - t_d) \right) \right]\end{aligned}\quad (D.20b)$$

$$\begin{aligned}\dot{\tilde{x}}_4(t) &= S_{NO}^{ba}(t - t_d) + S_{NH}^{ba}(t - t_d) + S_{ND}^{ba}(t - t_d) + X_{ND}^{ba}(t - t_d) \\ &\quad + i_{NXI} X_I^{ba}(t - t_d) + i_{NBM} \left(X_{B,H}^{ba}(t - t_d) + X_{B,A}^{ba}(t - t_d) \right)\end{aligned}\quad (D.20c)$$

$$\dot{\tilde{x}}_5(t) = S_{NH}^{ba}(t - t_d) \quad (D.20d)$$

$$\dot{\tilde{x}}_6(t) = S_{NO}^{ba}(t - t_d) \quad (D.20e)$$

Les concentrations moyennes rejetées sur la période d'échantillonnage $[t_{i-1}^+, t_i^-]$ sont ainsi données par :

$$\overline{DCO}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_1(t_i) - \tilde{x}_1(t_{i-1}) \quad (D.21a)$$

$$\overline{DCO_s}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_2(t_i) - \tilde{x}_2(t_{i-1}) \quad (D.21b)$$

$$\overline{MES}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_3(t_i) - \tilde{x}_3(t_{i-1}) \quad (D.21c)$$

$$\overline{NTK}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_4(t_i) - \tilde{x}_4(t_{i-1}) \quad (D.21d)$$

$$\overline{NH_4}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_5(t_i) - \tilde{x}_5(t_{i-1}) \quad (D.21e)$$

$$\overline{NO_3}|_{[t_{i-1}^+, t_i^-]} = \tilde{x}_6(t_i) - \tilde{x}_6(t_{i-1}) \quad (D.21f)$$

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

Le vecteur d'état supplémentaire $\tilde{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^6$ est défini par un système différentiel non-linéaire de la forme :

$$\dot{\tilde{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \quad (D.22a)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_0) = \mathbf{0} \quad (D.22b)$$

où $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^q$ désigne le vecteur des paramètres à identifier. Le calcul des concentrations moyennes de l'effluent traité est assuré en intégrant le système différentiel (D.22) conjointement aux systèmes d'état (1.18) ou (1.23).

D.2.4 Conclusions

L'unité de traitement étudiée présente une configuration classique. L'étage biologique est constitué d'un unique bassin d'aération, au sein duquel le système d'aération (aérateurs de surface) fonctionne en alternance de manière à assurer la dégradation de l'azote.

Les mesures effectuées sur cette unité sont de deux types : (i) des mesures sur l'effluent prétraité (débit et concentration) et (ii) des prélèvements instantanés sur la boue et la liqueur mixte ainsi que des mesures moyennes sur l'effluent traité. Les analyses effectuées sur l'effluent prétraité sont particulièrement importantes dans la mesure où elles permettent d'estimer les perturbations reçues par la station durant la journée de mesure. Les prélèvements réalisés en différents points de la filière de traitement le sont tout autant, puisqu'ils sont à la base même de l'identification paramétrique des modèles mathématiques utilisés.

La description de la procédure d'identification paramétrique, ainsi que des résultats obtenus, fait l'objet du paragraphe suivant.

D.3 Identification paramétrique des modèles mathématiques

Pour la modélisation des procédés de traitement des eaux, et en particulier celle du procédé de traitement à boues activées, la plupart des travaux réalisés au cours des trente dernières années ont porté sur l'élaboration de modèles déterministes complexes. Parmi eux, le modèle ASM 1 a fait l'objet d'une attention toute particulière. Ce modèle est constitué, on l'a vu (*cf.* Chapitre 1), de relations théoriques très détaillées (basées sur des cinétiques de Monod) pour décrire les différents processus de dégradation. Il a prouvé, à de nombreuses reprises, son aptitude à reproduire de façon pertinente le comportement dynamique du procédé à boues activées.

L'identification paramétrique du modèle ASM 1 doit être guidée par deux reflexions. Tout d'abord, le modèle est très fortement non-linéaire et comporte un nombre important de paramètres et de variables d'état mal connus et parfois non directement mesurables (*e.g.* la concentration en biomasse hétérotrophe ou autotrophe); ensuite, le problème de l'identification est très fortement lié à la qualité des mesures expérimentales et à l'information qu'elles contiennent. Lorsque les paramètres sont très fortement corrélés entre eux (*i.e.* lorsque la modification de l'un des paramètres provoque la modification d'un

D.3. Identification paramétrique des modèles mathématiques

autre), l'unicité de la solution n'est plus garantie. Ce problème peut se rencontrer lorsque seules des mesures bruitées en nombre limité sont disponibles, ce qui est très souvent le cas pour des données expérimentales sur site réel. Ces éléments rendent ainsi particulièrement délicate l'identification paramétrique de ce type de modèles.

La première partie de ce paragraphe constitue une introduction aux aspects liés à l'identifiabilité du modèle ASM 1 (§ D.3.1). La procédure appliquée pour effectuer l'identification paramétrique est ensuite décrite (§ D.3.2) ; cette procédure a bien entendu été définie en tenant compte des problèmes mentionnés précédemment. Les résultats de l'identification du modèle global et du modèle simplifié sont respectivement présentés dans les paragraphes D.3.3 et D.3.4.

D.3.1 Identifiabilité du modèle ASM 1

Il ne s'agit pas de redémontrer ici les propriétés d'identifiabilité du modèle ASM 1, mais plutôt de rappeler quelques résultats importants. Plusieurs études ont en effet été réalisées sur le sujet (*e.g.* Julien, 1997; Weijers, 2000) et le lecteur désireux d'approfondir ce point est invité à s'y référer.

À la base des problèmes d'identifiabilité se trouve la question de savoir si des mesures d'entrée/sortie sur le procédé, sous des conditions opératoires normales, donnent suffisamment d'information pour estimer de manière unique l'ensemble des paramètres du modèle. Dans l'affirmative, le modèle peut être identifié à partir de mesures réalisées sous des conditions opératoires normales.

Si ce n'est pas le cas, il s'agit de se demander si seul un jeu réduit de paramètres est important pour l'identification et si ce jeu peut être estimé de façon unique. Si c'est le cas, alors à nouveau, le modèle peut être identifié à partir de mesures d'entrée/sortie.

Dans le cas contraire, la question devient de savoir si un jeu réduit de paramètres peut être sélectionné et estimé à partir des mesures. Dans ce cas, il sera nécessaire de définir un protocole expérimental complémentaire pour estimer les paramètres (importants) non identifiés.

Les méthodes d'identifiabilité permettent de répondre aux questions soulevées ci-dessus. L'identifiabilité est la propriété de pouvoir déterminer un jeu de paramètres de façon unique, pour un jeu donné de mesures expérimentales. Une distinction est généralement établie entre identifiabilité théorique et identifiabilité pratique.

Identifiabilité théorique

L'identifiabilité théorique (ou structurelle, ou encore *a priori*) est une propriété intrinsèque du modèle. Elle correspond à la possibilité d'obtenir un unique jeu de paramètres, pour un modèle donné et un ensemble de mesures expérimentales supposées parfaites et non-bruitées. Plusieurs méthodes existent pour l'analyse de l'identifiabilité théorique des systèmes linéaires, invariants et exprimés dans l'espace d'état (*e.g.* Walter, 1987, pour la description des approches les plus couramment mises en œuvre). La situation est plus compliquée pour les modèles non-linéaires. Cinq des approches les plus couramment utilisées sont référencées et brièvement décrites par Julien (1997) :

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

- (i) développement en série de Taylor ;
- (ii) transformation du modèle non-linéaire en modèle linéaire vis-à-vis des paramètres ;
- (iii) étude de l'observabilité du vecteur d'état augmenté par un vecteur auxiliaire formé des paramètres à identifier ;
- (iv) approche de la série génératrice ;
- (v) approche de l'isomorphisme d'état local.

En utilisant l'approche de l'isomorphisme d'état local, Julien (1997) montre que le modèle ASM 1 (couplé avec un modèle de décantation idéal) est globalement structurellement identifiable lorsque les concentrations en oxygène dissous, ammoniaque et nitrate sont mesurées en-ligne. L'étude de l'identifiabilité théorique des modèles définis dans le Chapitre 1 sort du cadre de ce travail. Toutefois, le nombre important de mesures effectuées sur l'unité de traitement étudiée (*cf.* § D.2) laisse à penser que les propriétés d'identifiabilité théorique sont ici également vérifiées.

Identifiabilité pratique

L'identifiabilité pratique (ou *a posteriori*) fait référence à la possibilité d'obtenir un jeu de paramètres correct à partir de mesures entachées d'incertitudes. Un modèle structurellement identifiable peut en effet se révéler pratiquement non-identifiable si les mesures ne portent pas assez d'information. L'identifiabilité pratique dépend donc des conditions expérimentales, *i.e.* à la fois du protocole de mesure, de la qualité et de la quantité des mesures.

Pour le modèle de ASM 1 plus spécifiquement, on sait qu'en raison de la structure des cinétiques, des problèmes d'identifiabilité pratique sont à craindre ; ces problèmes sont d'ailleurs rapportés dans de nombreux travaux (*e.g.* Vanrolleghem et al., 1995; Weijers, 2000). À titre d'exemple, on peut considérer le cas où la dépendance entre le taux de croissance μ et la concentration en substrat limitant S est décrite au moyen d'une cinétique de Monod :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S} \quad (\text{D.23})$$

Les paramètres à identifier sont le taux de croissance maximal μ_{max} et la constante d'affinité K_S pour le substrat limitant. Si les concentrations en substrat et en biomasse sont mesurées, le modèle de Monod est théoriquement identifiable. De sérieux problèmes d'identifiabilité pratique apparaissent toutefois lorsque la concentration en substrat est bien supérieure à la constante d'affinité ; seul le rapport $\frac{\mu_{max}}{K_S}$ est en effet identifiable dans ce cas, et non chaque paramètre indépendamment.

Deux types de méthodes peuvent être utilisés pour l'analyse de l'identifiabilité pratique d'un modèle : l'analyse de sensibilité (linéaire ou non-linéaire) et l'estimation des covariances entre les différents paramètres (Walter, 1987). Ces deux méthodes sont appliquées dans la procédure d'identification décrite ci-dessous.

D.3.2 Procédure d'identification paramétrique

L'identification paramétrique consiste à déterminer le jeu de paramètres qui minimise l'écart entre des valeurs mesurées expérimentalement et prédictes théoriquement. Elle doit être guidée par le fait que les modèles de simulation considérés sont de grandes dimensions et qu'il n'est pas envisageable, pour les raisons suivantes, d'identifier l'ensemble des paramètres de façon systématique :

- le nombre de paramètres est important (paramètres cinétiques, paramètres stœchiométriques, paramètres de décantation et composition de l'influent) : 26 pour le modèle global (1.18) et 21 paramètres pour le modèle simplifié (1.23) ;
- certains paramètres peuvent être évalués directement à partir des mesures effectuées, ce qui permet de les éliminer de la procédure d'identification, *e.g.* les fractions f_{SI} et f_{SS} de *DCO* soluble ;
- des paramètres du modèle présentent une faible sensibilité vis-à-vis de la configuration du système, des conditions de fonctionnement du procédé ou encore de la composition de l'influent, alors que d'autres y sont fortement sensibles et doivent nécessairement être estimés ;
- enfin, certains paramètres du modèle sont fortement corrélés entre eux, ce qui peut rendre délicate leur identification (*cf.* § D.3.1).

Ces différents aspects sont pris en compte par la procédure d'identification paramétrique suivante :

- (i) Définir le jeu de paramètres par défaut, ainsi que les conditions initiales du système ;
- (ii) Éliminer de la procédure d'identification les paramètres dont les valeurs sont connues ;
- (iii) Sélectionner parmi les paramètres restants, ceux étant les plus sensibles ;
- (iv) Identifier les paramètres retenus ;
- (v) Calculer les intervalles et régions de confiance pour les paramètres identifiés, de manière à déceler les paramètres redondants et/ou peu sensibles ; le cas échéant, les éliminer de la procédure d'identification en leur fixant comme valeurs celles définies par défaut (i), et retourner à l'étape (iv).

Les différentes étapes de cette procédure sont détaillées ci-dessous.

Paramètres par défaut du système

Les paramètres stœchiométriques, cinétiques et de décantation considérés par défaut sont ceux définis dans le cadre du *benchmark* (*cf.* § 1.1.1). Ces paramètres sont rappelés dans le Tab. D.4.

Pour la composition de l'effluent prétraité, les fractions de *DCO* soluble inerte et biodégradable peuvent être directement estimées à partir des mesures expérimentales. La

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

TAB. D.4 – Paramètres cinétiques, stœchiométriques et de décantation par défaut.

paramètres cinétiques			paramètres stœchiométriques			paramètres de décantation		
Y_H	0.67	$g_{DCO} \cdot g_{DCO}^{-1}$	μ_H	4.0	j^{-1}	$u_{s,0}$	474	$m \cdot j^{-1}$
Y_A	0.24	$g_{DCO} \cdot g_N^{-1}$	K_S	10.0	$g_{DCO} \cdot m^{-3}$	$u'_{s,0}$	250	$m \cdot j^{-1}$
fr_{XI}	0.08	–	$K_{O,H}$	0.2	$go_2 \cdot m^{-3}$	r_h	$5.76 \cdot 10^{-4}$	$m^3 \cdot g_{MES}^{-1}$
i_{NBM}	0.08	$g_N \cdot g_{DCO}^{-1}$	$K_{NH,H}$	0.05	$g_N \cdot m^{-3}$	r_p	$2.86 \cdot 10^{-3}$	$m^3 \cdot g_{MES}^{-1}$
i_{NXI}	0.06	$g_N \cdot g_{DCO}^{-1}$	K_{NO}	0.5	$g_N \cdot m^{-3}$	f_{ns}	$2.28 \cdot 10^{-3}$	–
			b_H	0.3	j^{-1}	X_t^{max}	3 000	$g_{MES} \cdot m^{-3}$
			η_{NOg}	0.8	–			
			η_{NOh}	0.8	–			
			κ_h	3.0	$g_{DCO} \cdot g_{DCO}^{-1} \cdot j^{-1}$			
			K_X	0.1	$g_{DCO} \cdot g_{DCO}^{-1}$			
			μ_A	0.5	j^{-1}			
			$K_{O,A}$	0.4	$go_2 \cdot m^{-3}$			
			$K_{NH,A}$	1.0	$g_N \cdot m^{-3}$			
			b_A	0.05	j^{-1}			
			κ_a	0.05	$m^3 \cdot g_{DCO}^{-1} \cdot j^{-1}$			

DCO soluble représente environ 40% de la DCO totale, et contient approximativement 5% de composés solubles inertes (f_{SI}) et 35% de composés solubles biodégradables (f_{SS}). De la même manière, la fraction d'ammoniaque de l'influent constitue les deux tiers de la concentration d'azote incidente. En revanche, les fractions de DCO particulaire (f_{XI} , f_{XS} , f_{XBH} , f_{XBA}) et d'azote organique (f_{SNH} , f_{XND}) doivent être estimées. Les valeurs considérées par défaut sont données dans le Tab. D.5.

- la DCO particulaire incidente est supposée constituée en grande partie de composés organiques biodégradables (X_S);
- l'azote organique incident est supposé se présenter essentiellement sous la forme particulaire.

TAB. D.5 – Composition de l'influent par défaut.

	fractions de DCO soluble	fractions de DCO		fractions d'azote organique	
		particulaire			
f_{SI}	5 %	f_{XI}	10 %	f_{SNH}	67 %
f_{SS}	35 %	f_{XS}	45 %	f_{SND}	2 %
		f_{XBH}	5 %	f_{XND}	31 %
		f_{XBA}	0 %		

Conditions initiales du système

Pour l'identification paramétrique des modèles mathématiques à partir de données dynamiques, il est nécessaire de disposer des conditions initiales du système. Les prélèvements effectués dans le réacteur et le recyclage de la station donnent des indications sur la composition particulière des boues, mais restent néanmoins insuffisants pour estimer, même grossièrement, les concentrations des différents composés définis par le modèle ASM 1.

Une première alternative consiste à estimer les conditions initiales du système conjointement aux paramètres des modèles mathématiques lors de l'identification paramétrique. Cependant, ce type d'approche augmente notablement le nombre de paramètres à identifier. D'autre part, les concentrations initiales des composés particulaires sont fortement corrélées entre elles, ainsi qu'avec les paramètres cinétiques et stœchiométriques du modèle ASM 1, si bien que ces estimations sont souvent peu vraisemblables.

Afin d'éviter l'estimation conjointe des paramètres et des conditions initiales du système, une autre possibilité consiste à utiliser les conditions initiales issues du régime stationnaire du procédé. Le régime stationnaire est ici calculé pour les perturbations incidentes mesurées (Fig. D.5) avec les paramètres par défaut donnés dans les Tab. D.4 et D.5. Les conditions initiales obtenues par cette approche sont présentées dans le Tab. D.6. Il est ainsi garanti que les conditions initiales considérées sont plausibles.

Problème d'identification

L'identification du modèle consiste à déterminer le jeu de paramètres qui minimise l'écart entre les valeurs mesurées expérimentalement et simulées. La procédure d'identification est définie de la manière suivante :

1. choix d'un jeu initial de paramètres, admissible dans la mesure du possible ;
2. intégration du système d'état pour le jeu de paramètres en cours et calcul de l'écart entre les valeurs expérimentales et celles données par le modèle ;
3. modification du jeu de paramètres de manière à minimiser cet écart.

La fonction d'écart est une fonction quadratique de la forme :

$$\mathcal{J}(\boldsymbol{\theta}) = (\mathbf{y} - \mathbf{y}^{mes}) \cdot \mathcal{W} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}^{mes}) \quad (D.24)$$

où $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^q$ désigne le vecteur des paramètres, $\mathbf{y}^{mes} \in \mathbb{R}^p$ et $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^p$ les vecteurs des valeurs mesurées expérimentalement et simulées respectivement et $\mathcal{W} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ une matrice (diagonale) de pondération. Minimiser la fonction d'écart revient donc tout naturellement

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

TAB. D.6 – Etat initial du système à $t = 9h$

concentrations initiales dans le bassin d'aération à $t = 9h$									
couche	X_t^{dec}	p_{XI}^{dec}	p_{XS}^{dec}	p_{XBH}^{dec}	p_{XBA}^{dec}	p_{XND}^{dec}	S_t^{dec}	p_{SI}^{dec}	p_{SS}^{dec}
1	8.662	$4.086 \cdot 10^{-1}$	$1.228 \cdot 10^{-2}$	$5.511 \cdot 10^{-1}$	$2.803 \cdot 10^{-2}$	$1.338 \cdot 10^{-3}$	24.559	$7.088 \cdot 10^{-1}$	$4.434 \cdot 10^{-2}$
concentrations initiales dans le décanteur à $t = 9h$									
2	10.174	$4.094 \cdot 10^{-1}$	$1.088 \cdot 10^{-2}$	$5.516 \cdot 10^{-1}$	$2.809 \cdot 10^{-2}$	$1.207 \cdot 10^{-3}$	23.851	$7.334 \cdot 10^{-1}$	$4.561 \cdot 10^{-2}$
3	15.038	$4.102 \cdot 10^{-1}$	$9.143 \cdot 10^{-3}$	$5.525 \cdot 10^{-1}$	$2.817 \cdot 10^{-2}$	$1.039 \cdot 10^{-3}$	23.446	$7.455 \cdot 10^{-1}$	$4.601 \cdot 10^{-2}$
4	36.868	$4.106 \cdot 10^{-1}$	$7.937 \cdot 10^{-3}$	$5.532 \cdot 10^{-1}$	$2.823 \cdot 10^{-2}$	$9.238 \cdot 10^{-4}$	23.594	$7.352 \cdot 10^{-1}$	$4.506 \cdot 10^{-2}$
5	256.40	$4.107 \cdot 10^{-1}$	$7.587 \cdot 10^{-3}$	$5.534 \cdot 10^{-1}$	$2.825 \cdot 10^{-2}$	$8.924 \cdot 10^{-4}$	24.515	$6.962 \cdot 10^{-1}$	$4.201 \cdot 10^{-2}$
6	263.20	$4.107 \cdot 10^{-1}$	$7.620 \cdot 10^{-3}$	$5.534 \cdot 10^{-1}$	$2.824 \cdot 10^{-2}$	$8.950 \cdot 10^{-4}$	23.869	$7.221 \cdot 10^{-1}$	$4.411 \cdot 10^{-2}$
7	255.96	$4.107 \cdot 10^{-1}$	$7.654 \cdot 10^{-3}$	$5.534 \cdot 10^{-1}$	$2.824 \cdot 10^{-2}$	$8.978 \cdot 10^{-4}$	23.432	$7.407 \cdot 10^{-1}$	$4.489 \cdot 10^{-2}$
8	262.75	$4.107 \cdot 10^{-1}$	$7.690 \cdot 10^{-3}$	$5.534 \cdot 10^{-1}$	$2.824 \cdot 10^{-2}$	$9.007 \cdot 10^{-4}$	23.183	$7.524 \cdot 10^{-1}$	$4.568 \cdot 10^{-2}$
9	255.51	$4.107 \cdot 10^{-1}$	$7.725 \cdot 10^{-3}$	$5.533 \cdot 10^{-1}$	$2.824 \cdot 10^{-2}$	$9.037 \cdot 10^{-4}$	23.051	$7.594 \cdot 10^{-1}$	$4.677 \cdot 10^{-2}$
10	5097.3	$4.104 \cdot 10^{-1}$	$8.751 \cdot 10^{-3}$	$5.527 \cdot 10^{-1}$	$2.818 \cdot 10^{-2}$	$1.001 \cdot 10^{-3}$	22.996	$7.631 \cdot 10^{-1}$	$4.769 \cdot 10^{-2}$

D.3. Identification paramétrique des modèles mathématiques

à résoudre le problème d'optimisation dynamique suivant^{1,2} :

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{\theta}} \quad & \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \mathbf{r} \\ \text{soumis à : } \quad & \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}^{(1,2)}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ & \dot{\tilde{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ & \mathbf{y}(t) = \mathbf{h}(\mathbf{x}(t), \tilde{\mathbf{x}}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ & \boldsymbol{\theta}^L \leq \boldsymbol{\theta} \leq \boldsymbol{\theta}^U \\ \text{avec : } \quad & \mathbf{r} = \mathbf{y} - \mathbf{y}^{mes} \end{aligned} \quad (\text{D.25})$$

où $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^p$ désigne le vecteur des écarts entre les valeurs mesurées expérimentalement et les valeurs prédictes théoriquement :

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}(\boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{x}(t_{14h}) - \mathbf{y}_{14h}^{ba} \\ \mathcal{A}(\boldsymbol{\theta}) \cdot \mathbf{x}(t_{16h}) - \mathbf{y}_{16h}^{ba} \\ (\tilde{\mathbf{x}}(t_{9h} + 2h) - \tilde{\mathbf{x}}(t_{9h})) - \mathbf{y}_{[9h, 11h]}^{rej} \\ \vdots \\ (\tilde{\mathbf{x}}(t_{9h} + 12 \times 2h) - \tilde{\mathbf{x}}(t_{9h} + 11 \times 2h)) - \mathbf{y}_{[7h, 9h]}^{rej} \end{pmatrix} \quad (\text{D.26})$$

où le produit $\mathcal{A} \cdot \mathbf{x}(t) = (DCO^{ba}(t), MES^{ba}(t), MVS^{ba}(t), NTK^{ba}(t), MES^{rec}(t))^T$ est donné par les équations (D.10)–(D.13), et le vecteur d'état supplémentaire $\tilde{\mathbf{x}}$ est défini par le système différentiel (D.22).

Le problème d'optimisation dynamique (D.25) est résolu par la méthode *SQP* (code *NLPQL* Schittkowski, 1985). Les aspects relatifs à cette méthode ont déjà été précisés (*cf.* § 2.3.2)³. La méthode de l'adjoint est utilisée pour le calcul du gradient du critère $\mathcal{J} = \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \mathbf{r}$ d'identification par rapport aux paramètres $\boldsymbol{\theta}$:

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{J} = 2 \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \sum_{k=1}^{ne} \int_{t_{k-1}^+}^{t_k^-} \left(\boldsymbol{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^T \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} \right) dt \quad (\text{D.27a})$$

¹Dans l'expression du gradient du critère, la notation $\mathbf{f}^{(1,2)}$ est utilisée afin de simplifier l'écriture ; on rappelle que l'exposant ⁽¹⁾ désigne le modèle relatif au fonctionnement du système d'aération et l'exposant ⁽²⁾ correspond à l'arrêt de ce dernier.

²Le problème d'identification est ici présenté en l'absence de contraintes d'égalité $\phi(\boldsymbol{\theta}) = 0$. Lorsque les paramètres relatifs à la composition de l'influent font partie de l'identification, les contraintes (D.4), (D.5) et (D.9) (p. 255/255) qui lient ces paramètres sont naturellement intégrées au problème (D.25).

³Il est important de noter que les méthodes considérées ici sont des méthodes de *recherche locale*. Aussi, selon la nature du problème d'identification (non-convexités en particulier), il se peut que l'algorithme converge vers un optimum local proche du point initial choisi et n'atteigne pas l'optimum global du problème. Si l'on souhaite s'assurer de la globalité de l'optimum, il est nécessaire de mettre en œuvre les méthodes d'optimisation globale, déterministes (*e.g.* algorithme α BB, Androulakis et al., 1995) ou stochastiques (*e.g.* algorithme du recuit simulé (Kirkpatrick et al., 1983), algorithmes génétiques (Goldberg, 1989)). Ces méthodes d'optimisation impliquent cependant des temps de calcul souvent très importants.

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

où les variables d'état \mathbf{x} , $\tilde{\mathbf{x}}$ et adjointes $\boldsymbol{\lambda}$, $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ sont solutions du système différentiel aux limites partagées (TPBVP) suivant :

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{f}^{(1,2)}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \quad (D.27b)$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{x}}}(t) = \mathbf{g}(\mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta}) \quad (D.27c)$$

$$\dot{\boldsymbol{\lambda}}^T(t) = -\boldsymbol{\lambda}^T \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \mathbf{x}^T} - \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^T \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}^T} \quad (D.27d)$$

$$\dot{\tilde{\boldsymbol{\lambda}}}(t) = \mathbf{0} \quad (D.27e)$$

avec les conditions initiales : $\mathbf{x}(t_0^+) = \mathbf{x}_0^T$ (D.27f)

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_0^+) = \mathbf{0} \quad (D.27g)$$

les conditions de continuité : $\mathbf{x}(t_i^-) = \mathbf{x}(t_i^+)$ (D.27h)

$$\tilde{\mathbf{x}}(t_i^-) = \tilde{\mathbf{x}}(t_i^+) \quad (D.27i)$$

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_i^-) = \boldsymbol{\lambda}^T(t_i^+) + 2 \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{x}(t_i)^T} \quad (D.27j)$$

$$\tilde{\boldsymbol{\lambda}}^T(t_i^-) = \tilde{\boldsymbol{\lambda}}^T(t_i^+) + 2 \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}(t_i)^T} \quad (D.27k)$$

et les conditions terminales : $\boldsymbol{\lambda}^T(t_{n_e}^-) = 2 \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{x}(t_n)^T}$ (D.27l)

$$\boldsymbol{\lambda}^T(t_{n_e}^-) = 2 \mathbf{r}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}(t_n)^T} \quad (D.27m)$$

où t_i , $i = 1 \dots n_e$, désignent les instants de prélèvements ou les instants de début et de fin des périodes d'échantillonnages selon le cas. On peut remarquer que les variables adjointes $\tilde{\boldsymbol{\lambda}}$ des états supplémentaires $\tilde{\mathbf{x}}$ restent constantes entre deux instants t_i successifs, et ne sont modifiées que par les conditions (D.27k). D'autre part, le TPBVP précédent ne présente pas de discontinuités aux instants t_b^k et t_c^k de commutation du système d'aération, étant donné que ces instants sont ici fixés.

Analyse de sensibilité

L'analyse de sensibilité est un outil particulièrement intéressant pour caractériser le comportement d'un modèle de simulation. Elle permet d'exprimer l'influence d'une faible variation de l'un des paramètres sur les variables d'état, et peut ainsi donner de précieuses indications sur les paramètres difficiles à identifier (en raison de l'influence limitée qu'ils ont sur le comportement du système par exemple). Ces analyses constituent donc une étape préalable à l'étape d'identification décrite dans le paragraphe précédent.

Étant donné un jeu de paramètres $\boldsymbol{\theta}$, la sensibilité du critère \mathcal{J} d'optimisation par rapport à ces paramètres est donnée par le système d'équations (D.27). Il est important de noter que ces sensibilités sont relatives à un jeu **donné** de paramètres et ne fournissent donc que des informations **locales**. Or il est bien entendu nécessaire, pour conclure sur la sensibilité d'un paramètre, de considérer l'influence qu'il a sur l'ensemble de son intervalle de variation. Pour ces raisons, une procédure d'échantillonnage de type *latin hypercube sampling* (*LHS*) a été mise en œuvre sur l'espace des paramètres.

D.3. Identification paramétrique des modèles mathématiques

La procédure *LHS*, développée par McRay et al. (1979), est une extension de la procédure *lattice sampling* initialement proposée par Patterson (1954). Cette technique, réputée plus performante que les méthodes classiques d'échantillonnage aléatoire (*e.g.* Monte Carlo), a déjà fait l'objet de plusieurs applications en analyse de sensibilité (*e.g.* Iman et Conover, 1980; Weijers, 2000). Son principe est brièvement décrit ci-dessous :

- soit $[\theta^L, \theta^U]^q$ l'espace des paramètres et soit \mathbf{z} le vecteur défini par $\mathbf{z} = [0, 1, \dots, n_{ech} - 1]$ (où n_{ech} désigne le nombre de points d'échantillonnage considérés),
- en désignant par $\boldsymbol{\pi}^1, \dots, \boldsymbol{\pi}^q$, q permutations indépendantes du vecteur \mathbf{z} , les échantillons $\check{\boldsymbol{\theta}}^j$ ($j = 1, \dots, n_{ech}$) sont donnés par :

$$\left. \begin{array}{l} \check{\theta}_i^1 = \theta_i^L + \frac{\pi_1^i + \frac{1}{2}}{n_{ech}} (\theta_i^U - \theta_i^L) \\ \vdots \\ \check{\theta}_i^{n_{ech}} = \theta_i^L + \frac{\pi_{n_{ech}}^i + \frac{1}{2}}{n_{ech}} (\theta_i^U - \theta_i^L) \end{array} \right\} i = 1 \dots q \quad (\text{D.28})$$

Les sensibilités moyennes $\bar{s}_{[\theta_i^L, \theta_i^U]}$ sont alors calculées en moyennant les sensibilités obtenues sur l'ensemble des points d'échantillonnage $\check{\boldsymbol{\theta}}^j$ ($j = 1 \dots n_{ech}$) :

$$\bar{s}_{[\theta^L, \theta^U]} = \frac{1}{n_{ech}} \sum_{j=1}^{n_{ech}} |\nabla_{\check{\boldsymbol{\theta}}^j} \mathcal{J}| \quad (\text{D.29})$$

Avec ce type d'échantillonnage, une bonne reproductibilité des résultats est obtenue pour un nombre réduit de points, typiquement à partir de $n_{ech} = 100$ points. Les paramètres (et conditions initiales) sélectionnés à l'issue de cette procédure sont ceux dont la sensibilité moyenne est importante, typiquement une sensibilité moyenne supérieure à 0.20. Cette valeur, qui peut être vue comme une valeur *moyenne* de la sensibilité d'un paramètre sur l'intervalle $\bar{s}_{[\theta_k^L, \theta_k^U]}$ a été retenue sur la base de considérations pratiques. Elle permet de séparer l'ensemble des paramètres en deux sous-ensembles équitables. Seuls les paramètres dont la sensibilité moyenne est supérieure à cette limite sont retenus par la suite.

Analyse des intervalles et régions de confiance

L'analyse de sensibilité décrite ci-dessus permet d'effectuer une première sélection des paramètres les plus influents. Suite à cela, le nombre de paramètres peut malgré tout rester conséquent (de l'ordre de 15 paramètres) et il n'est pas rare que certaines combinaisons redondantes subsistent. Les méthodes de calcul des intervalles et des régions de confiance permettent de détecter ces redondances. Elles sont basées sur l'analyse de la matrice de covariance des paramètres.

Matrice de covariance – La matrice de covariance des paramètres ($\mathcal{C}_\theta \in \mathbb{R}^{q \times q}$) est définie par :

$$\mathcal{C}_\theta = \left[\frac{\mathcal{J}}{\nu} (\nabla_\theta \mathbf{y}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \nabla_\theta \mathbf{y})^{-1} \cdot \nabla_\theta \mathbf{y}^T \cdot \mathcal{W}^2 \cdot \nabla_\theta \mathbf{y} \cdot (\nabla_\theta \mathbf{y}^T \cdot \mathcal{W} \cdot \nabla_\theta \mathbf{y})^{-1} \right]_{\theta=\theta^*} \quad (\text{D.30})$$

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

où $\boldsymbol{\theta}^*$ désigne les paramètres optimaux obtenus en résolvant le problème d'identification (D.25) et ν , le nombre de degrés de liberté du problème, *i.e.* $\nu = p - q - r$ (avec r le nombre de contraintes entre les paramètres). Le gradient du vecteur de sortie \mathbf{y} par rapport aux paramètres $\boldsymbol{\theta}$ s'écrit :

$$\nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathbf{y} = \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}} + \frac{\partial \mathbf{y}}{\partial \tilde{\mathbf{x}}^T} \cdot \tilde{\mathbf{s}}_{\boldsymbol{\theta}} \quad (\text{D.31})$$

où les matrices de sensibilités $\mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}$ et $\tilde{\mathbf{s}}_{\boldsymbol{\theta}}$ sont données par :

$$\mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}(t) = \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \mathbf{f}^{(1,2)}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}} \quad (\text{D.32a})$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{s}}}_{\boldsymbol{\theta}}(t) = \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\theta}^T} + \frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{x}^T} \cdot \mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}} \quad (\text{D.32b})$$

$$\mathbf{s}_{\boldsymbol{\theta}}(t_0) = \mathbf{0} \quad (\text{D.32c})$$

$$\dot{\tilde{\mathbf{s}}}_{\boldsymbol{\theta}}(t_0) = \mathbf{0} \quad (\text{D.32d})$$

Intervalles de confiance – Pour un niveau de confiance $(1 - \alpha)$ donné, le calcul des intervalles de confiance permet d'estimer les bornes inférieures et supérieures entre lesquelles les valeurs réelles des paramètres sont susceptibles de se trouver. Ces bornes sont définies par :

$$\Theta = \{\theta_i, i = 1 \dots q \mid \theta_i = \theta_i^* \pm \sqrt{\mathcal{C}_{\theta ii}} t_{1-\alpha, \nu}\} \quad (\text{D.33})$$

où $t_{1-\alpha, \nu}$ correspond à l'image réciproque, par une loi de Student à ν degrés de liberté, de la densité de probabilité $\mathcal{P} = 1 - \alpha$ et $\mathcal{C}_{\theta ii}$ désigne le $i^{\text{ème}}$ terme diagonal de la matrice de covariance des paramètres. L'expression (D.33) donne des bornes pour chaque paramètre pris individuellement, et définit ainsi un hyperrectangle de dimension q dans l'espace des paramètres.

Il est possible de déduire certaines informations à partir de la connaissance des intervalles de confiance. En particulier, les larges intervalles de confiance caractérisent généralement des paramètres redondants. La redondance est ainsi plutôt caractérisée par une incertitude que par un intervalle de confiance :

$$\text{incertitude } \theta_i = \pm \frac{\sqrt{\mathcal{C}_{\theta ii}} t_{1-\alpha, \nu}}{\theta_i^*} \times 100\% \quad (\text{D.34})$$

Toutefois, bien que des redondances puissent ainsi être détectées, la méthode de calcul utilisée pour déterminer les intervalles de confiance ne donne aucune information sur d'éventuelles relations entre les paramètres, *e.g.* $\theta_1 = f(\theta_2, \dots, \theta_n)$.

Régions de confiance – À partir de la matrice de covariance, il est également possible de calculer la région de confiance qui contient l'ensemble des combinaisons entre les paramètres pour un niveau de confiance $(1 - \alpha)$ donné. Cette région de confiance est un hyperellipsoïde de dimension q défini par :

$$\Theta = \left\{ \boldsymbol{\theta} \mid (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*)^T \cdot \mathcal{C}_{\boldsymbol{\theta}}^{-1} \cdot (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*) \leq \ell_{1-\alpha}^2 \right\} \quad (\text{D.35})$$

où le paramètre $\ell_{1-\alpha}^2$ est calculé à partir de la relation suivante :

$$\frac{1}{\Gamma(\frac{q}{2})} \int_{t=0}^{t=\frac{1}{2}\ell_{1-\alpha}^2} e^{-t} t^{\frac{q}{2}-1} dt = 1 - \alpha \quad (\text{D.36})$$

Si l'on diagonalise l'inverse de la matrice de covariance :

$$\mathcal{C}_\theta^{-1} = \mathcal{Q} \cdot \Lambda \cdot \mathcal{Q}^T \quad (\text{D.37})$$

où les colonnes de la matrice $\mathcal{Q} = [\mathbf{q}_1 \cdots \mathbf{q}_{n_\theta}]$ sont les vecteurs propres de \mathcal{C}_θ^{-1} et Λ , la matrice diagonale contenant les valeurs propres (λ) de \mathcal{C}_θ^{-1} , et si l'on considère les nouvelles coordonnées $h_1 \dots h_q$ (ou composantes principales) le long des axes de l'hyperellipsoïde :

$$\mathbf{h} = \mathcal{Q}^T \cdot (\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{\theta}^*) \quad (\text{D.38})$$

la relation (D.35) peut être réécrite sous la forme :

$$\mathbf{h}^T \cdot \Lambda \cdot \mathbf{h} \leq \ell_{1-\alpha}^2 \quad (\text{D.39})$$

L'expression (D.39) indique clairement que les composantes principales (h_i) sont inversement proportionnelles aux valeurs propres :

$$h_j = \pm \frac{\ell_{1-\alpha}}{\sqrt{\lambda_j}}, \quad j = 1 \dots q \quad (\text{D.40})$$

Si $0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, la composante principale la plus intéressante est h_1 dans la mesure où elle est associée à l'intervalle de confiance le plus large. D'après (D.38), h_1 est définie par :

$$h_1 = \nu_{1,1}(\theta_1 - \theta_1^*) + \nu_{1,2}(\theta_2 - \theta_2^*) + \dots + \nu_{1,q}(\theta_q - \theta_q^*) \quad (\text{D.41})$$

où $\boldsymbol{\nu}_1 = (\nu_{1,1}, \nu_{1,2}, \dots, \nu_{1,q})^T$ désigne le premier vecteur propre (*i.e.* le vecteur propre associé à la valeur propre λ_1). Ainsi, les composantes dominantes de h_1 correspondent aux paramètres θ_j ayant des coefficients $\nu_{1,j}$ grands. Ces paramètres constituent une combinaison redondante. Il convient de les éliminer de l'identification en leur donnant une valeur (physique) qui soit constante. En procédant ainsi, les intervalles de confiance du modèle sont sensiblement réduits. Ce raisonnement doit bien entendu être appliqué à l'ensemble des composantes principales dominantes.

Conclusions

La procédure d'identification a été définie dans ce paragraphe. Une des originalités de cette procédure est d'effectuer, au moyen de l'analyse de sensibilité et avant toute identification, une première sélection des paramètres du modèle les plus influents. Pour l'identification des paramètres à proprement parler, une méthode de gradient de type *SQP* a été préférée aux méthodes d'optimisation directes (méthode du simplexe en particulier), dans la mesure où la connaissance des gradients et du multiplicateur de Lagrange et de KKT du problème permet de vérifier qu'un optimum local a bien été atteint. Enfin, les redondances entre les paramètres sont détectées après chaque identification, par le calcul des intervalles et régions de confiance ; les paramètres redondants sont ainsi éliminés de la procédure et une nouvelle identification est réalisée.

En procédant ainsi, il a été possible de réduire de façon substantielle le nombre de paramètres à identifier. Ces résultats font l'objet du paragraphe suivant.

D.3.3 Identification paramétrique du modèle global

L'identification paramétrique du modèle global (1.18) est effectuée sur la base des concentrations des rejets moyens d'effluent traité et des prélèvements instantanés de liqueur mixte et de boues de recirculation, et en tenant compte des perturbations incidentes mesurées (*cf.* § D.2). Les conditions initiales adoptées (Tab. D.6) sont celles du régime stationnaire obtenu en simulant le procédé avec les paramètres par défaut (Tab. D.4 et D.5).

Ces concentrations ayant des ordres de grandeurs très différents (*e.g.* un rapport de 1 000 entre la concentration des boues et les concentrations d'azote rejetées), il est apparu nécessaire de les pondérer dans l'expression du critère \mathcal{J} d'identification. Les poids attribués aux mesures (matrice diagonale \mathcal{W}) sont donnés dans le Tab. D.7. Il a été fait en sorte que toutes les mesures aient ainsi le même ordre de grandeur. À noter toutefois que ni les mesures moyennes de *MES* rejetées, ni les mesures de *MES* dans les boues de recirculation n'ont été retenues pour le calage (poids nuls). Il s'agira de s'assurer qu'à l'issue de l'identification, les concentrations estimées sont malgré tout en bon accord avec les mesures.

TAB. D.7 – Poids donnés aux mesures lors de la procédure d'identification.

Mesure	<i>DCO</i> rejet	<i>DCO_s</i> rejet	<i>MES</i> rejet	<i>NTK</i> rejet	<i>NH₄</i> rejet	<i>NO₃</i> rejet
Poids	10 ²	10 ²	0	10 ³	10 ³	10 ³

Mesure	<i>DCO</i> B.A.	<i>MES</i> B.A.	<i>MVS</i> B.A.	<i>NTK</i> B.A.	<i>MES</i> rec.
Poids	10 ⁻¹	10 ⁻¹	10 ⁻¹	10	0

Pour l'identification du modèle global, 26 paramètres stoechiométriques, cinétiques et de décantation, ainsi que 6 paramètres relatifs à la composition de l'effluent prétraité¹ doivent être estimés.

Analyse de sensibilité

Afin de réduire le nombre de paramètres à estimer, une analyse de sensibilité est effectuée. Il s'agit de détecter les paramètres du modèle global qui ont une forte influence sur le critère \mathcal{J} d'identification, *i.e.* sur le résultat des simulations. La procédure d'échantillonnage des sensibilités a été précisée dans le paragraphe précédent. La limite de sensibilité est ici fixée à 0,20, et la gamme de variations des paramètres $[\boldsymbol{\theta}^L, \boldsymbol{\theta}^U]$ est prise à $\pm 10\%$ des valeurs définies par défaut dans les Tab. D.4 et D.5 (p. 264). Les résultats obtenus sont consignés dans le Tab. D.8.

13 des 32 paramètres que comporte le modèle global sont ici retenus suite à l'analyse de sensibilité (colonne gauche); les autres paramètres (colonne droite) sont éliminés de la procédure d'identification et pris égaux aux valeurs par défaut préalablement définies. La plupart des paramètres sélectionnés sont des paramètres cinétiques et stoechiométriques du modèle ASM 1; parmi les autres paramètres du modèle global, seuls le paramètre de

¹les composantes $f_{SI} \approx 5\%$ et $f_{SS} \approx 35\%$ de *DCO* ne sont pas estimées

TAB. D.8 – Analyse de la sensibilité des paramètres du modèle global.

paramètres influents ($\bar{s}_{\theta_i} \geq 0, 20$)	paramètres peu influents ($\bar{s}_{\theta_i} < 0, 20$)
<u>paramètres stœchiométriques :</u> $Y_H, Y_A, i_{NBM}, i_{NXI}$	<u>paramètres stœchiométriques :</u> f_{XI}
<u>paramètres cinétiques :</u> $\mu_A, K_X, K_{NH,A}, b_H, \eta_{NO_h}, \kappa_h, S_O^{sat}$	<u>paramètres cinétiques :</u> $\mu_H, K_S, \kappa_a, K_{NH,H}, K_{O,H}, K_{O,A}, K_{NO}, b_A, \eta_{NO_g}$
<u>paramètres de décantation :</u> f_{ns}	<u>paramètres de décantation :</u> v_0, v'_0, r_h, r_p, X_t
<u>composition de l'influent :</u> f_{XS}	<u>composition de l'influent :</u> $f_{XI}, f_{XBA}, f_{XBH}, f_{SND}, f_{XND}$

décantation f_{ns} et la fraction organique biodégradable de l'effluent prétraité f_{XS} apparaissent influents (les fractions des composés organiques solubles f_{SI} et f_{SS} sont également sensibles mais ne sont pas estimées). À ce stade de la procédure d'identification, 13 paramètres sont ainsi sélectionnés.

Procédure d'identification

Le premier paramètre qu'il s'agit de déterminer est le nombre de couches de décantation N_{cc} dans le clarificateur. L'application de la procédure d'identification pour différentes valeurs de N_{cc} indique que le calage du modèle global est d'autant meilleur que le nombre de couches de décantation est élevé. Considérer un grand nombre de couches augmente cependant la taille du modèle, et donc les temps de calcul. Prendre $N_{cc} = 10$ couches de décantation apparaît comme un bon compromis entre la pertinence et la taille du modèle global résultant.

Le calcul des intervalles et régions de confiance révèle de nombreuses corrélations entre les paramètres restants. En particulier, des redondances ont pu être décelées entre :

- les paramètres $Y_H, \kappa_h, K_X, \eta_{NO,h}$ et f_{XS} (relatifs aux dynamiques des composés organiques biodégradables),
- les paramètres $Y_A, i_{NBM}, i_{NXI}, \mu_A$ et $K_{NH,A}$ (relatifs aux composés azotés)

En appliquant la procédure d'identification de façon itérative, *i.e.* en éliminant progressivement les combinaisons de paramètres redondants, il apparaît que l'estimation des paramètres Y_H, i_{NBM}, b_H et f_{ns} uniquement permet de caler de façon satisfaisante le modèle global à partir des données expérimentales. Les valeurs des 4 paramètres identifiés (pour 10 couches de décantation) sont données dans le Tab. D.9 ; les valeurs des intervalles de confiance et des sensibilités relatives à l'optimum $\frac{\delta J}{\delta \theta_i / \theta_i^*}$ (calculées pour $\delta \boldsymbol{\theta} = 0,1 \boldsymbol{\theta}^*$) y sont également reportées.

On peut remarquer, en premier lieu, que les valeurs estimées pour les paramètres sont globalement cohérentes avec les valeurs par défaut du modèle ASM 1 (Henze et al., 1987) et celles définies pour le *benchmark* (*cf.* Tab. 1.4, p. 20, et Tab. 1.5, p. 23), et appartiennent

TAB. D.9 – Paramètres estimés du modèle global.

paramètre	valeur		intervalle de confiance à 90%	sensibilité $\frac{\delta \mathcal{J}}{\delta \theta_i} / \theta_i^*$
Y_H	$6.18 \cdot 10^{-1}$	—	70.7%	1 090%
i_{NBM}	$7.10 \cdot 10^{-2}$	—	13.2%	160%
b_H	$5.49 \cdot 10^{-1}$	j^{-1}	240.4%	177%
f_{ns}	$2.89 \cdot 10^{-3}$	—	130.7%	46%
critère à l'optimum (\mathcal{J}^*) :			29 090	

aux gammes de variations données dans la littérature (lorsqu'elles sont spécifiées). La valeur de Y_H est toutefois inférieure d'environ 10% à celles données par défaut ; il semble que les erreurs commises sur les paramètres sensibles du modèle qui ne sont pas estimées soient compensées via Y_H , ce qui explique que cette valeur soit faible.

D'autre part, le critère d'identification reste élevé à l'optimum, de l'ordre de 28 400. En moyenne et compte tenu des coefficients de pondération appliqués, il subsiste un écart de l'ordre de $\pm 0.7 \text{ mg.L}^{-1}$ entre les concentrations mesurées et calculées de NO_3 , NH_4 et NTK et de l'ordre de $\pm 2 \text{ mg.L}^{-1}$ pour la DCO et DCO_s . Ces écarts sont bien entendu liés aux approximations inhérentes à la modélisation, mais résultent également en partie des imprécisions de mesure. Effectuer des prélèvements sur des unités de taille réelle est délicat ; il est en effet difficile de s'assurer de la représentativité des échantillons prélevés lorsque les bassins sont de grande taille. Par ailleurs, les méthodes de mesures utilisées peuvent s'avérer peu précises lorsqu'il s'agit d'effluents peu concentrés (rejets d'azote en particulier) ou au contraire très concentrés (liqueur mixte et boues de recirculation).

Le fait que le critère d'identification soit grand explique pourquoi, d'une manière générale, l'incertitude sur les paramètres est importante. Le calcul de l'incertitude fait, en effet, intervenir les termes diagonaux de la matrice de covariance (cf. (D.34), p. 270), qui dépendent eux même directement de la valeur du critère d'identification \mathcal{J}^* à l'optimum. Les composantes principales du système ($h_1 \geq \dots \geq h_4$) ainsi qu'une base normée de vecteurs propres de l'espace réduit des paramètres (matrice de passage \mathcal{Q}) sont données ci-dessous :

$$h_1 = 1.747 \quad h_2 = 0.512 \quad h_3 = 0.0201 \quad h_4 = 0.0051 \quad (\text{D.42})$$

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} -0.365 & 0.931 & -0.000 & -0.003 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 & -0.009 \\ -0.931 & -0.365 & 0.000 & 0.002 \\ 0.001 & 0.003 & 0.009 & 1.000 \end{pmatrix} \quad (\text{D.43})$$

L'expression de la matrice de passage \mathcal{Q} indique clairement que les quatre paramètres estimés ne sont pas redondants. Dans l'espace des paramètres, les directions des vecteurs propres sont, en effet, peu différentes de celles des paramètres (axes) : le paramètre b_H pour le premier vecteur propre (colonne 1 de \mathcal{Q}), Y_H , i_{NBM} et f_{ns} pour les suivants.

D.3. Identification paramétrique des modèles mathématiques

Les incertitudes les plus importantes sont relatives aux paramètres Y_H , b_H et f_{ns} (tab. D.9).

- Pour les paramètres Y_H et b_H , l'incertitude indiquée par le calcul des intervalles de confiance est confirmée par le calcul des régions de confiance puisque ces paramètres constituent l'essentiel des deux composantes principales dominantes h_1 et h_2 , et sont de plus légèrement corrélés ;
- Les raisons de l'incertitude qui caractérise le paramètre f_{ns} sont moins claires. La composante principale qui lui est associée est, en effet, la plus faible et il n'apparaît que très peu corrélé avec les autres paramètres. La sensibilité de f_{ns} , bien qu'importante, reste malgré tout inférieure à celles des autres paramètres, et est vraisemblablement à l'origine de cette incertitude.

Résultats de l'identification

Les résultats obtenus à l'issue de la procédure d'identification sont donnés sur les Fig. D.8 et D.9.

Les concentrations en DCO , MES et NTK relatives aux prélèvements à 14h et 16h dans le bassin d'aération sont correctement simulées (Fig. D.8 gauche). Dans ce cas, les intervalles de confiance représentés correspondent à une erreur relative de $\pm 10\%$ sur les mesures.

Les mesures de MES effectuées sur les boues de recirculation n'ont pas été utilisées lors de l'identification. La valeur simulée à 14h est sensiblement supérieure à la concentration mesurée (Fig. D.8 droite). Cette mesure apparaît cependant peu vraisemblable étant donné qu'elle est du même ordre que la concentration en MES dans le réacteur ; il ne s'agit donc pas de comparer ces deux valeurs. La valeur simulée à 16h est en revanche en bon accord avec la concentration mesurée.

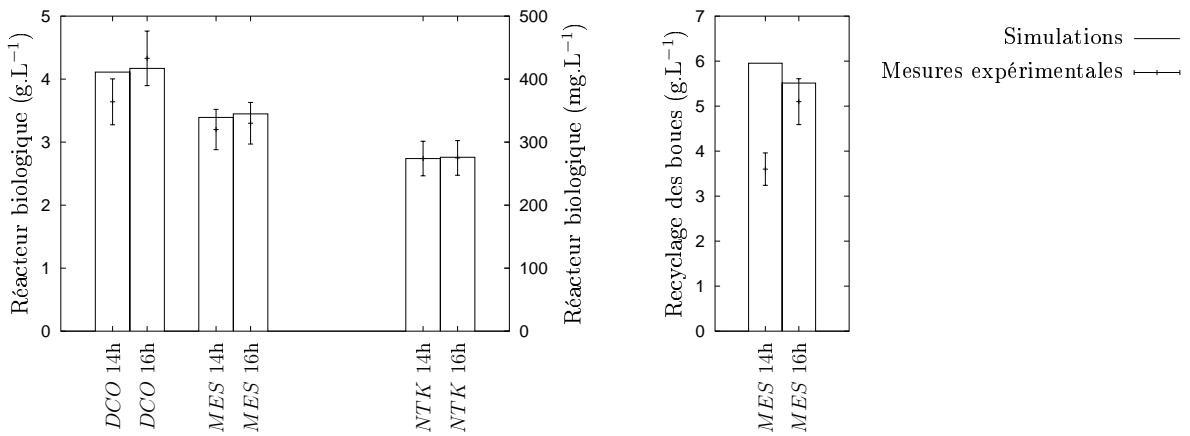


FIG. D.8 – Comparaisons des concentrations mesurées et simulées avec le modèle global (10 couches de décantation) en DCO , MES et NTK pour la liqueur mixte (Fig. gauche) et en MES pour la boue de recirculation (Fig. droite).

Les concentrations moyennes relatives aux rejets de DCO , DCO_s , NTK , NH_4 et NO_3 sont également en bon accord avec les mesures (Fig. D.9). Les intervalles de confiance qui sont représentés, correspondent à une erreur relative de $\pm 1 \text{ mg.L}^{-1}$ sur les concentrations en azote (NTK , NH_4 et NO_3), de $\pm 2 \text{ mg.L}^{-1}$ sur les mesures de DCO soluble

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

et de $\pm 2.5 \text{ mg.L}^{-1}$ sur les mesures de DCO . Les simulations de DCO soluble sont toutefois inférieures aux concentrations mesurées au début de l'horizon d'identification ; il est probable que la fraction des composés organiques inertes solubles ($f_{SI} \approx 5\%$) ait été légèrement sous-estimée.

On peut par ailleurs vérifier que l'ordre de grandeur des concentrations moyennes rejetées en MES (Fig. D.9 en bas à droite) est respecté, et ceci bien que les mesures correspondantes n'aient pas été utilisées lors de l'identification.

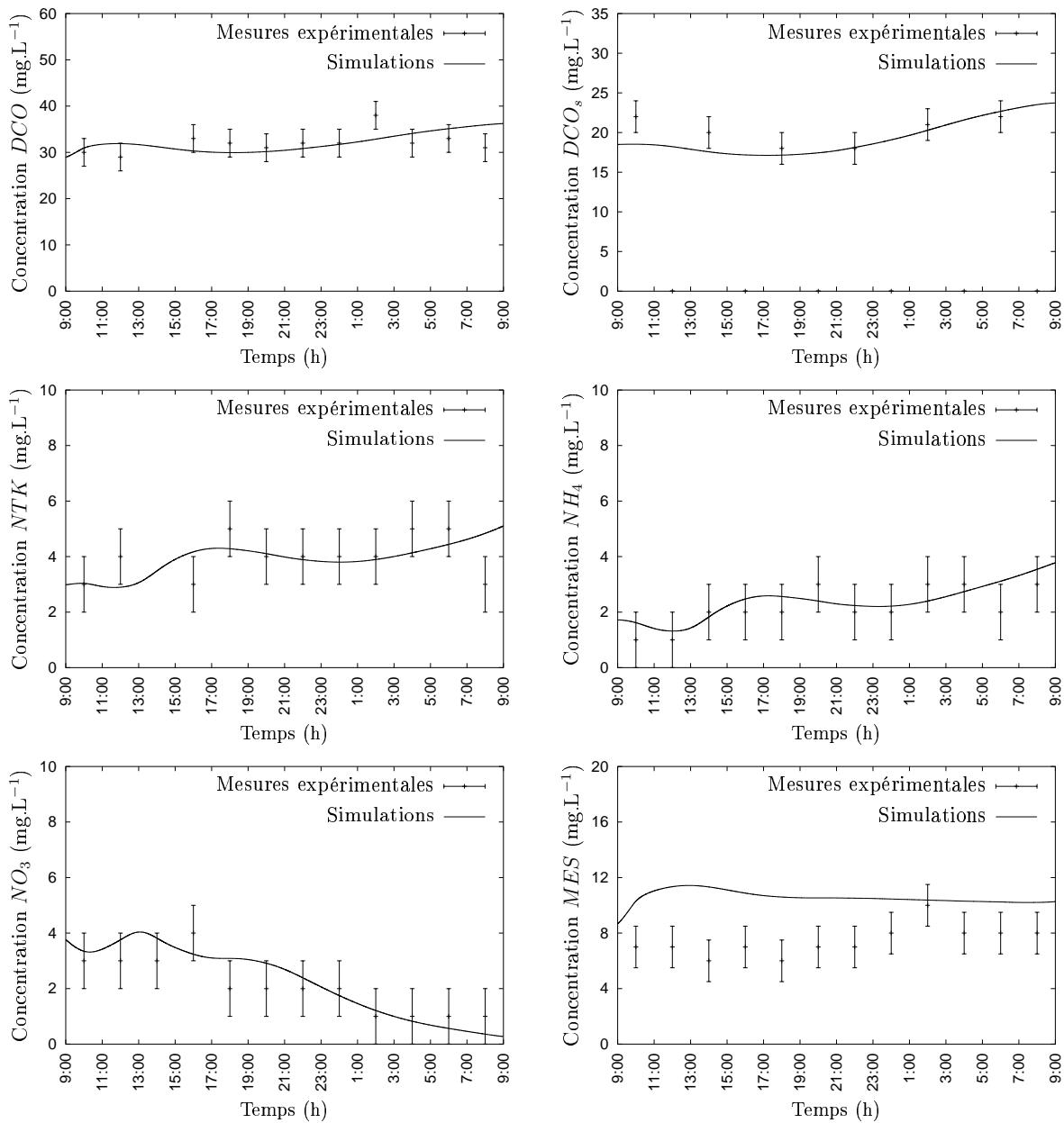


FIG. D.9 – Comparaisons des valeurs mesurées et simulées avec le modèle global (10 couches de décantation) pour les rejets de DCO , DCO_s , NTK , NH_4 , NO_3 et MES .

Il est ainsi possible de simuler le comportement de l'unité de traitement de façon très fidèle à partir du modèle global, et ceci en n'estimant qu'un nombre limité de paramètres.

D.3.4 Identification paramétrique du modèle simplifié

Les données utilisées pour le calage du modèle simplifié, ainsi que les poids attribués aux mesures (*cf.* Tab. D.7, p. 272), sont identiques à ceux utilisés précédemment. En particulier, les concentrations en *MES* mesurées dans l'effluent traité et la boue de recirculation ne sont pas prises en compte.

Le modèle simplifié comporte un unique paramètre de décantation, ce qui ramène à 28 le nombre de paramètres à identifier. Par ailleurs, il est nécessaire de déterminer le temps de séjour t_d de l'effluent dans le clarificateur préalablement aux paramètres du modèle.

Analyse de sensibilité

Comme précédemment, une analyse de sensibilité est effectuée de manière à distinguer les paramètres *sensibles* des paramètres *peu sensibles* du modèle simplifié. Ces résultats sont donnés dans le Tab. D.10.

TAB. D.10 – Analyse de la sensibilité des paramètres du modèle simplifié.

paramètres influents ($\bar{s}_{\theta_i} \geq 0,20$)	paramètres peu influents ($\bar{s}_{\theta_i} < 0,20$)
<u>paramètres stœchiométriques :</u> Y_H, i_{NBM}, i_{NXI}	<u>paramètres stœchiométriques :</u> Y_A, fr_{XI}
<u>paramètres cinétiques :</u> $\mu_A, K_{NH,A}, b_H, \eta_{NOH}, \eta_{NOg}, S_O^{sat}$	<u>paramètres cinétiques :</u> $\mu_H, K_S, K_X, \kappa_a, K_{NH,H}, K_{O,H}, K_{O,A}, K_{NO}, b_A, \kappa_h$
<u>paramètres de décantation :</u> f_{ns}	<u>paramètres de décantation :</u> —
<u>composition de l'influent :</u> f_{XS}	<u>composition de l'influent :</u> $f_{XI}, f_{XBA}, f_{XBH}, f_{SND}, f_{XND}$

On peut noter que cette sélection est proche de celle obtenue avec le modèle global (Tab. D.8, p. 273). Ce résultat n'est pas surprenant dans la mesure où les processus de dégradation sont décrits par le modèle ASM 1 dans les deux cas. À ce stade de la procédure d'identification, 11 des 30 paramètres du modèle sont ainsi sélectionnés.

Procédure d'identification

Le premier paramètre du modèle simplifié qu'il s'agit de déterminer est le décalage temporel t_d entre les sorties de l'aérateur et du clarificateur. Il s'agit bien entendu d'une approximation, étant donné que le temps de séjour de l'effluent dans le clarificateur est fonction du débit incident. Une estimation peut malgré tout être obtenue de la façon suivante :

$$t_d = \frac{H^{dec} S^{dec}}{\overline{Q^{in}}} \approx 6 \text{ h} \quad (\text{D.44})$$

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

où $\overline{Q^{in}}$ désigne le débit moyen incident, H^{dec} la profondeur d'alimentation dans le clarificateur et S^{dec} la surface au miroir du clarificateur. L'identification du modèle a été effectuée pour des temps de séjour de 2h, 4h, 6h et 8h. Les résultats obtenus confirment que le temps de séjour moyen est de l'ordre de 6 heures (Tab. D.11).

TAB. D.11 – Influence du temps de séjour dans le clarificateur sur le résultat de l'identification du modèle simplifié.

Temps de séjour t_d	2h	4h	6h	8h
critère d'identification \mathcal{J}	74 850	71 830	68 570	73 400

En effectuant l'estimation des paramètres et en calculant les intervalles et régions de confiance des paramètres estimés de façon itérative – afin d'éliminer les combinaisons redondantes –, seuls 4 paramètres sont retenus, Y_H , i_{NBM} , b_H et f_{ns} . Il est intéressant de noter que la procédure d'identification conduit au même jeu de paramètres pour les deux modèles.

Les paramètres estimés, les intervalles de confiance ainsi que les sensibilités relatives sont donnés dans le Tab. D.12. D'une manière générale, les estimations de ces paramètres sont cohérentes avec les valeurs par défaut du modèle ASM 1 (Henze et al., 1987) et celles définies dans le *benchmark* (Tab. 1.4, p. 20). On peut remarquer d'autre part qu'elles sont très proches de celles obtenues avec le modèle global (Tab. D.9, p. 274).

TAB. D.12 – Paramètres estimés.

paramètre	valeur	intervalle de confiance à 90%	sensibilité $\frac{\delta \mathcal{J}/\mathcal{J}^*}{\delta \theta_i/\theta_i^*}$
Y_H	$7.58 \cdot 10^{-1}$	–	79.7%
i_{NBM}	$6.78 \cdot 10^{-2}$	–	25.3%
b_H	$9.41 \cdot 10^{-1}$	j^{-1}	265.8%
f_{ns}	$2.45 \cdot 10^{-3}$	–	87%
critère à l'optimum (\mathcal{J}^*) :		164.4%	18%
		68 570	

L'incertitude sur les valeurs des paramètres Y_H , et surtout b_H et f_{ns} , est importante. Les raisons de ces incertitudes sont similaires à celles avancées lors de l'identification du modèle global (*cf.* § D.3.3). En particulier, il ne s'agit pas de combinaisons de paramètres redondants comme le montre le calcul des composantes principales du système :

$$h_1 = 0.552 \quad h_2 = 0.348 \quad h_3 = 0.0317 \quad h_4 = 0.0069 \quad (\text{D.45})$$

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} -0.227 & 0.973 & 0.040 & -0.004 \\ 0.002 & -0.041 & 0.999 & -0.004 \\ -0.974 & -0.227 & -0.007 & 0.002 \\ 0.001 & 0.004 & 0.004 & 1.000 \end{pmatrix} \quad (\text{D.46})$$

D.3. Identification paramétrique des modèles mathématiques

D'autre part, la valeur du critère d'identification \mathcal{J} à l'optimum est sensiblement plus élevée que lors de l'identification du modèle global. Étant donné que \mathcal{J} est un critère quadratique, les écarts sont ici environ 1.5 fois supérieurs à ceux obtenus précédemment ; compte tenu des coefficients de pondération appliqués, l'écart résiduel moyen entre les concentrations mesurées et calculées est de l'ordre de $\pm 1 \text{ mg.L}^{-1}$ pour NO_3 , NH_4 et NTK , et $\pm 3.5 \text{ mg.L}^{-1}$ pour la DCO et DCO_s .

Ces résultats permettent de confirmer l'influence du clarificateur sur le comportement global du procédé, et illustrent la nécessité de disposer de modèles de décantation/clarification performants.

Résultat de l'identification

Les résultats obtenus pour $t_d = 6 \text{ h}$ de temps de séjour dans le clarificateur sont donnés sur les Fig. D.11 et D.10 ; les intervalles de confiance sur les mesures qui sont représentés sont identiques à ceux considérés pour le modèle global (*cf.* § D.3.4).

À nouveau, les concentrations en DCO , MES et NTK relatives aux prélèvements à 14h et 16h dans le bassin d'aération sont correctement simulées (Fig. D.10 gauche). Pour les mesures de MES effectuées sur la boue de recirculation, qui n'ont pas été utilisées lors de l'identification, les conclusions sont similaires (Fig. D.10 droite) : la valeur simulée à 14h est en contradiction avec la concentration mesurée – qui apparaît irréaliste –, alors que la valeur simulée à 16h est comparable à celle mesurée expérimentalement.

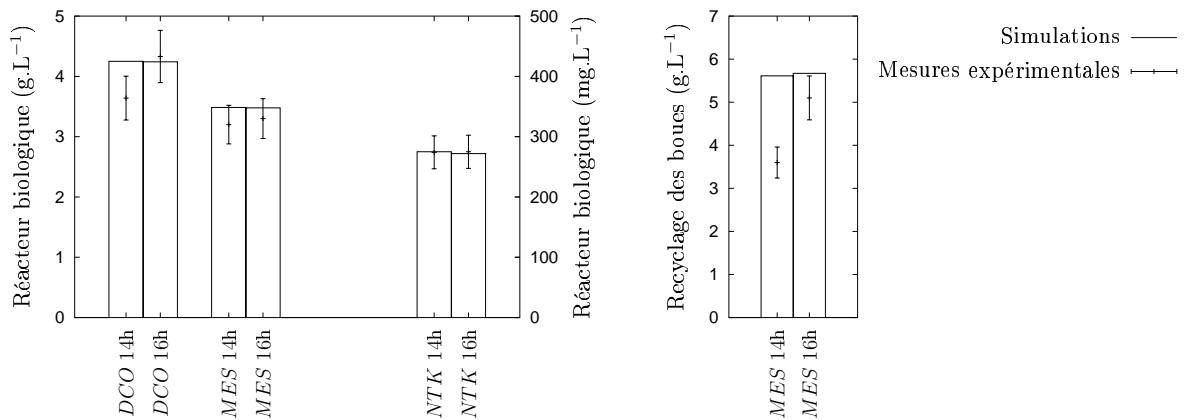


FIG. D.10 – Comparaisons des concentrations mesurées et simulées avec le modèle simplifié (6h de temps de séjour dans le clarificateur) en DCO , MES et NTK pour la liqueur mixte (Fig. gauche) et en MES pour la boue de recirculation (Fig. droite).

Au contraire, les écarts de prédictions entre les concentrations moyennes rejetées et les mesures expérimentales sont sensiblement plus importants qu'avec le modèle global (Fig.D.11), et constituent l'essentiel de la valeur du critère \mathcal{J} d'identification. De toute évidence, ces écarts sont imputables aux simplifications adoptées dans la description des mécanismes de décantation/clarification. Deux raisons principales peuvent être invoquées : (i) les phénomènes de mélange dans le clarificateur ne sont pas pris en compte dans le modèle simplifié et (ii) le temps de transit dans le clarificateur dépend du débit incident et varie donc de façon importante au cours de la journée (facteur 2 à 3, Fig. D.4 p. 253), alors que t_d est ici supposé constant. D'autre part, ce temps de transit induit un décalage

Annexe D. Modélisation d'une unité de traitement existante

des conditions initiales, *i.e.* il est nécessaire d'initialiser le système à l'instant $t_0 = t_{9h} - t_d$. Or entre l'instant initial t_0 et t_{9h} , les perturbations incidentes ne sont pas connues précisément, ce qui explique pourquoi les concentrations simulées durant les premières heures (entre 9h et 13h) sont éloignées des mesures expérimentales, *e.g.* pour les rejets de NO_3 .

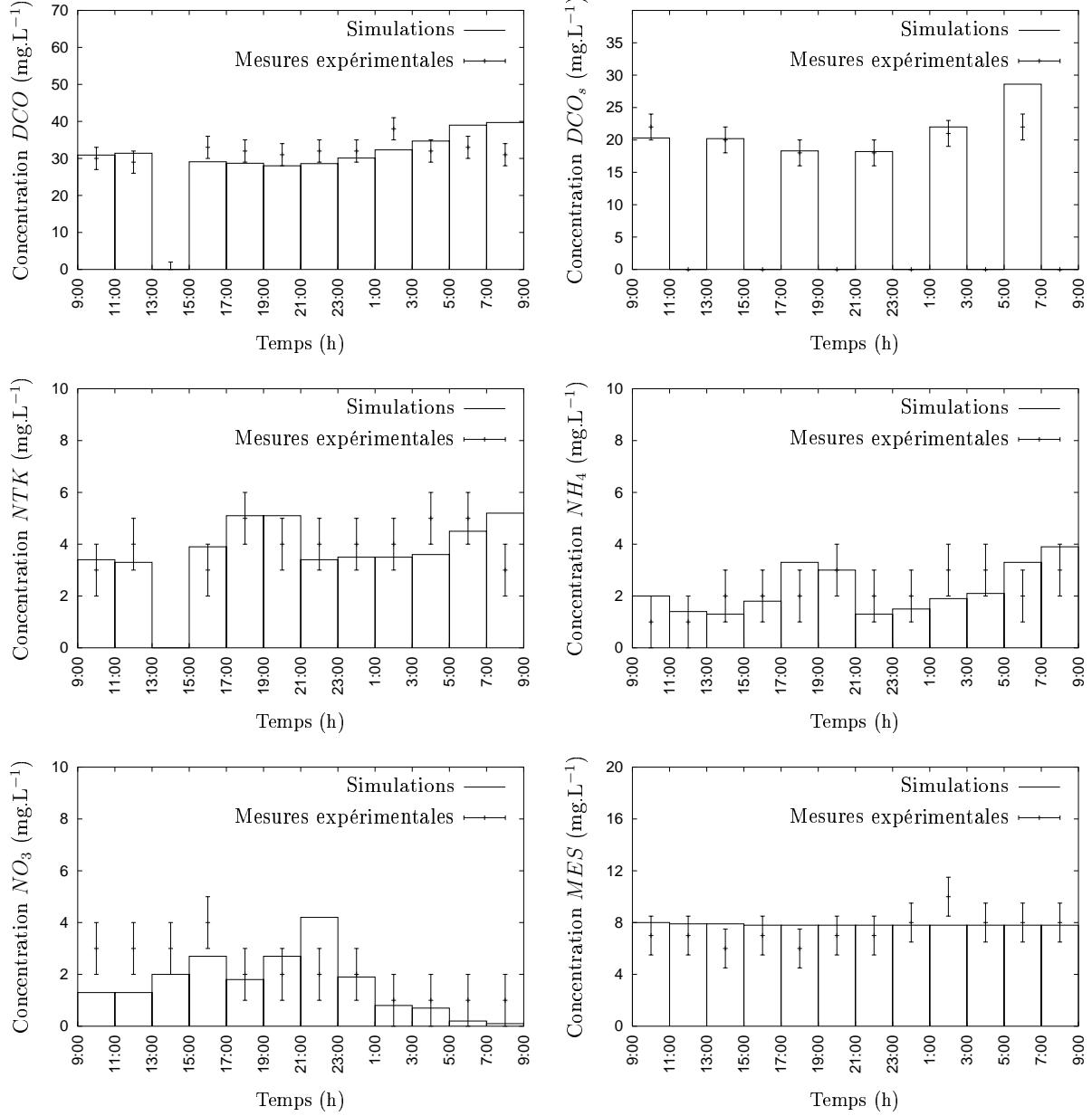


FIG. D.11 – Comparaisons des valeurs mesurées et simulées avec le modèle simplifié (6 heures de temps de séjour dans le clarificateur) pour les rejets de DCO , DCO_s , NTK , NH_4 , NO_3 et MES .

Ces résultats ne doivent cependant pas présumer de la capacité du modèle réduit à représenter le comportement de l'unité de traitement : l'identification paramétrique du modèle global a permis de vérifier que le modèle ASM 1 décrit de façon très pertinente les mécanismes de dégradation dans le réacteur biologique, et les estimations des paramètres Y_H et i_{NBM} sont proches de celles obtenues avec le modèle global. Pour améliorer les résultats

de l'identification, il aurait été préférable de disposer des concentrations des composés solubles (DCO_s , NH_4 et NO_3) à la sortie du réacteur biologique, et non du clarificateur, de sorte que les effets de retard et de mélange induits par le clarificateur ne soient pas problématiques.

D.4 Conclusions

L'étude d'une station d'épuration existante est présentée dans cette annexe. Les deux modèles mathématiques définis dans le Chapitre 1 sont considérés pour la modélisation de cette unité de traitement. Dans le premier (modèle global), les processus de décantation/clarification sont simulés finement au moyen d'un modèle à couches, alors que le second (modèle simplifié) représente ces processus de façon simplifiée en considérant des bilans de matières globaux dans le clarificateur.

Ces deux modèles ont fait l'objet d'une procédure d'identification paramétrique, basée sur des données expérimentales. Une des originalités cette procédure est d'effectuer une première sélection des paramètres du modèle les plus influents par une méthode d'analyse de sensibilité. Une méthode itérative est ensuite appliquée pour estimer les paramètres et calculer les intervalles et régions de confiances des paramètres identifiés, de manière à éliminer les combinaisons redondantes. Le même jeu de 4 paramètres a ainsi été obtenu pour les deux modèles.

Les estimations des 4 paramètres sont comparables dans les deux cas et cohérentes avec les valeurs reportées dans la littérature. Les intervalles de confiance calculés pour certains paramètres sont malgré tout importants ; ces valeurs confirment qu'il est particulièrement délicat d'identifier les modèles de traitement des eaux. Ces résultats auraient vraisemblablement été meilleurs si les mesures expérimentales avaient été préalablement réconciliées. L'objectifs de la reconciliation des données est d'utiliser les informations redondantes disponibles dans les mesures expérimentales, afin de corriger les erreurs de mesures et d'améliorer l'estimation des paramètres (*e.g.* Liebman et al., 1992; Bagajewicz et Jiang, 2000; Barbosa et al., 2000).

Les résultats de l'identification sont malgré tout très convaincants dans les deux cas. Lorsque les processus de décantation/clarification sont modélisés finement (modèle global), les écarts entre les mesures et les simulations sont réduits, ce qui confirme que le modèle ASM 1 donne une description très pertinente des mécanismes de dégradation dans le réacteur. Les erreurs de modélisation sont bien entendu plus importantes avec le modèle simplifié, en raison de la description approximative des processus de mélange et des retards liés au transit de l'effluent dans le clarificateur ; il aurait été préférable de disposer des concentrations des composés solubles (DCO_s , NH_4 et NO_3) à la sortie du réacteur biologique de manière à s'affranchir de l'effet du clarificateur.

Pour terminer, on peut remarquer que les performances de traitement de la station d'épuration étudiée sont particulièrement élevées, tant pour l'azote que pour la DCO . Ces performances ont cependant un coût, puisque le système d'aération du réacteur fonctionne pratiquement 13 heures par jour. Les résultats de l'optimisation du fonctionnement de cette unité de traitement sont présentés dans le Chapitre 3.

Résumé

L'adoption par l'Union Européenne de normes de rejet plus strictes pose d'importants problèmes aux petites collectivités qui disposent de peu de moyens financiers et techniques. Ces problèmes motivent l'élaboration de dispositifs de commande permettant d'améliorer les performances des stations d'épuration de petites tailles.

Cette étude propose une méthodologie de l'optimisation dynamique et de la commande optimale des petites unités à boues activées fonctionnant en aération séquentielle. La première partie étudie les améliorations potentielles que peut apporter l'application des méthodes d'optimisation dynamique. Deux problèmes sont abordés : la minimisation des concentrations d'azote rejetées et la réduction du coût énergétique du traitement. Ces problèmes d'optimisation sont contraints, non-convexes et de grandes dimensions ; ils présentent de plus un caractère hybride discret/continu et combinatoire. Dans les deux cas, l'application des politiques optimales d'aération donne de larges améliorations des performances du procédé, tout en respectant les normes de rejet et les contraintes opératoires ; il est vérifié qu'à long terme, ces modes de fonctionnement ne sont pas préjudiciables pour le procédé.

La mise en œuvre du calcul des politiques optimales d'aération en boucle fermée est envisagée dans la seconde partie. La commande optimale consiste à (*i*) estimer en ligne l'état et les paramètres du modèle et, (*ii*) actualiser les profils optimaux d'aération par un algorithme de commande prédictive non-linéaire. Au préalable, une réduction du modèle général du procédé est proposée et une analyse de sensibilité des conditions optimales d'aération est menée pour replacer les résultats de l'optimisation dans un contexte de fonctionnement réel du procédé. Les résultats obtenus démontrent que l'application de la commande optimale en boucle fermée surpassent largement les modes de gestion actuellement utilisés, en terme de qualité de traitement comme de coût opératoire.

Mots-clés : Stations d'épuration de petites tailles ; Procédé à boues activées ; Modélisation ; Systèmes hybrides discrets/continus ; Optimisation dynamique ; Analyse de sensibilité ; Observation et estimation ; Commande optimale.

Abstract

Title : *Methodology of dynamic optimisation and optimal control of small-size activated sludge wastewater treatment plants.*

The adoption of stricter effluent requirements by the European Union rises large problems for small communities having few economical and technical resources. These problems motivate the synthesis of advanced optimisation-based controllers in order to enhance the performances of small-size wastewater treatment plants.

The aim of this study is to develop a methodology of dynamic optimisation and optimal control of small-size alternating aerobic-anoxic activated sludge plants. The first part deals with the improvements which can be potentially obtained through the application of dynamic optimisation techniques. Two problems are considered : the minimisation of nitrogen discharge and the reduction of the operating costs. These are constrained, non-convex and high-dimensional problems that exhibit hybrid discrete/continuous and combinatorial behaviours. In both cases, the application of the resulting optimal aeration strategies leads to large improvements of the

process performances, while satisfying the discharge requirements and the operating constraints ; it is also checked that the long-term implementation of the optimal control profiles ensures permanent process performances.

The embedding of the optimal aeration strategies within closed-loop controllers is dealt with in the second part. Optimal control consists in (*i*) the on-line joint observation/estimation of both state variables and parameters and, (*ii*) the use of a non-linear model predictive control scheme to update the aeration profiles. Beforehand, a reduced model is derived by simplifying the general ASM 1 model and sensitivity analyses are performed to quantify the influence of unmeasured disturbances and model mismatch on the optimisation results. Numerical implementations show that the resulting closed-loop controller brings large improvements with respect to usual operating modes either in terms of nitrogen discharge or in terms of energy consumption.

Key words : Small-size wastewater treatment plants ; Activated sludge process ; Modelling ; Hybrid discrete/continuous systems ; Dynamic optimisation ; Sensitivity analysis ; Observation and estimation ; Optimal control.

Thèse préparée au Laboratoire des Sciences du Génie Chimique de Nancy (LSGC, UPR 6811).