

Fiche d'information

Stratégie d'échantillonnage pour les petites STEP



Dans le cadre du contrôle du traitement des micropolluants par les autorités cantonales, il est recommandé de prendre les échantillons pour l'analyse des micropolluants en sortie de la décantation primaire, indépendamment de la taille de la STEP. Ceci permet de lisser les pics de concentrations et d'obtenir des échantillons composites représentatifs des concentrations réelles.

Rédaction : J. Grelot (VSA)

Accompagnement technique : C. Ort (Eawag), A. Joss (Eawag), A. Scheidegger (Eawag), A. Meier (VSA), C. Abegglen (VSA), D. Dominguez (OFEV), Groupe de travail de la plateforme « Techniques de traitement des micropolluants »

Photo : STEP de Penthaz, Triform SA

Version 1

1. Introduction

Dans le cadre de la modification de la Loi et de l'Ordonnance sur la protection des eaux (LEaux, OEaux) entrée en vigueur le 1^{er} janvier 2016, des stations d'épurations (STEP) sélectionnées doivent s'équiper d'un traitement des micropolluants. Le calcul de l'efficacité d'élimination des micropolluants se base sur l'Ordonnance du DETEC entrée en vigueur le 1^{er} décembre 2016 : le rendement d'épuration doit être calculé en se basant sur la différence de concentration entre l'entrée et la sortie de la STEP d'au moins six substances choisies parmi les douze substances à mesurer [1], dont dix sont des composants pharmaceutiques. Or, dans de petits bassins versants de STEP, les charges des substances pharmaceutiques sont sujettes à des variations plus importantes que dans de grands bassins versants [2]. En effet, ces substances sont rejetées de manière intermittente par les individus vivant dans ces bassins versants [3]. De plus, les temps de résidence dans les canalisations d'eaux usées sont plus courts dans les petits bassins versants, ce qui diminue l'effet de dispersion. Ainsi les concentrations peuvent fortement varier d'un instant à l'autre (variation intra-horaire) et, étant donné le petit nombre de potentiels consommateurs de médicaments, les concentrations peuvent aussi varier de manière importante d'un jour à l'autre (variation inter-journalière) [2]. Lors d'échantillonnages proportionnels au débit avec des intervalles traditionnels de 30 min, les pics de concentration ne sont donc que rarement pris en compte [3]. Par conséquent, les échantillons recueillis dans les eaux brutes ne sont pas représentatifs des charges réelles parce que la charge est systématiquement sous-estimée. Dans ces petites stations d'épuration, il serait potentiellement avantageux d'échantillonner l'affluent de la STEP après le décanteur primaire (voir Figure 1 illustrant la problématique). En effet, le temps de rétention dans le décanteur primaire permet de lisser les pics de concentrations (voir la différence du profil de concentration de $MP_{in,1}$ et $MP_{in,2}$ dans la Figure 1). Grâce au temps de séjour dans la biologie, ce problème d'échantillonnage ne se pose pas en sortie de la STEP (MP_{out} dans la Figure 1), raison pour laquelle une sous-estimation de la charge en entrée se traduit directement par une sous-estimation du taux d'épuration.

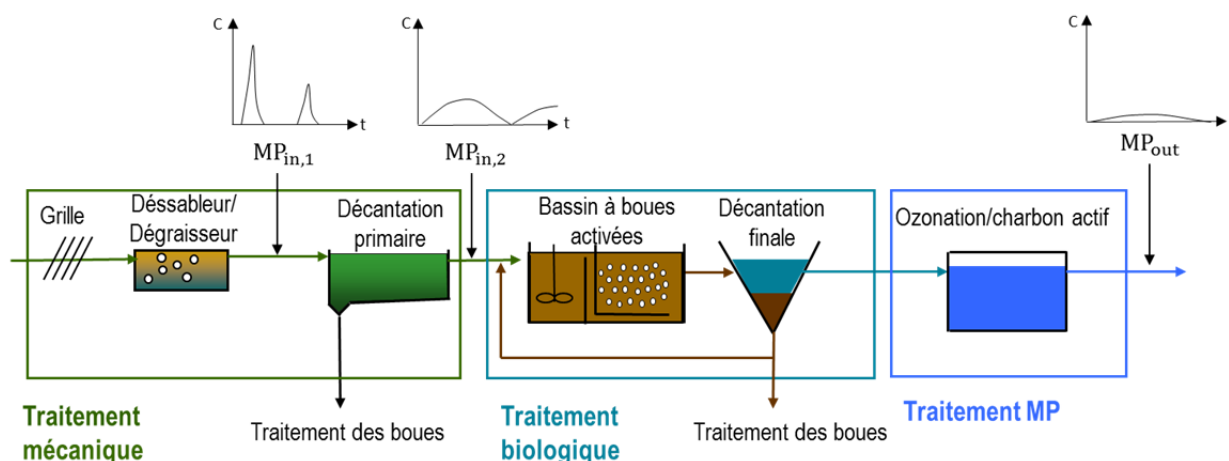


Figure 1 - Schéma du traitement mécanique, biologique et micropolluants d'une STEP avec échantillonnage de l'entrée de la STEP avant ou après le décanteur primaire (adapté de [4])

Dans l'aide à l'exécution « Exploitation et contrôle des stations d'épuration » [5], le chapitre 2.6.1. détermine que les échantillons doivent être prélevés à l'entrée et à la sortie de la STEP. Cependant « d'autres points de prélèvements sont envisageables si les résultats sont

Etat: Juin 2018

comparables. Le prélèvement à l'entrée de la STEP peut ainsi être remplacé par un prélèvement à la sortie de la décantation primaire si les valeurs mesurées permettent de déterminer la composition des eaux brutes avec une précision comparable. » [5]. Environ trois quarts des STEP suisses procèdent déjà à un échantillonnage en sortie de la décantation primaire. Etant donné que l'adsorption des micropolluants aux boues est négligeable [6], ne sont pas éliminés par le traitement mécanique, un échantillonnage en sortie du décanteur primaire est en principe comparable à un échantillonnage en entrée de STEP ; mais en pratique il permet des résultats plus précis. Le but de ce projet est donc de déterminer, à partir de combien d'habitants raccordés, une STEP devrait procéder à un échantillonnage après le décanteur primaire de manière à obtenir des résultats représentatifs.

2. Modélisation et méthode

La première partie de la modélisation (modélisation des variations de concentrations en entrée de STEP) est effectuée sur le logiciel R à l'aide du package *SPG* (*sewage pattern generator*) élaboré par l'Eawag [7]. Ce modèle permet de simuler les variations des concentrations de composés traces dans l'affluent d'une STEP à laquelle un nombre défini de personnes est raccordé, à partir du nombre attendu de pics par jour ainsi que de la masse de chaque pic. Ces deux caractéristiques sont établies à partir de la consommation de chaque produit pharmaceutique [8] et de la dose journalière recommandée [9]. Il est supposé que les substances ne sont pas métabolisées par le corps humain (donc la dose avalée est équivalente à la dose rejetée) et qu'elles sont rejetées en 5 fois (i.e. le consommateur va aux toilettes 5 fois par jour). La masse rejetée est à chaque fois la même (elle est équivalente à la dose journalière divisée par 5). Ces trois hypothèses sont des simplifications de la réalité mais n'ont qu'un faible impact sur les résultats (si les pics modélisés ne sont pas tous de taille équivalente, des intervalles de mesure plus courts sont nécessaires. De plus, certaines substances sont rapidement rejetées, dans ce cas le seul pic engendré sera plus difficile à échantillonner). La taille de la STEP a été variée entre 1'000 et 20'000 habitants raccordés (les simulations sont effectuées pour 1'000, 5'000, 8'000, 10'000, 15'000 et 20'000 habitants raccordés).

Les débits d'eaux usées sont basés sur une consommation d'eau par personne et par jour de 160 l/s, sans débit de base et en supposant une variation journalière. Le SPG compose les débits et profils des substances pour le nombre de jours simulés et la résolution temporelle choisie. Ici, la modélisation est effectuée sur 100 jours consécutifs avec une résolution temporelle de 2 min. Le système d'écoulement gravitaire est constitué par l'addition des différents flux.

La modélisation du décanteur primaire est basée sur la simulation de deux *CSTR* (*completely stirred tank reactor*) en série. L'hypothèse est faite que les substances considérées ne sont pas dégradées dans le décanteur primaire. Le temps de séjour hydraulique moyen de ce décanteur primaire est d'environ 1.5 à 3 h par temps de pluie et temps sec respectivement.

L'échantillonnage est effectué de manière identique en entrée et en sortie du décanteur primaire. Il est de type proportionnel au volume et les échantillons composites sont prélevés sur 48 heures, comme préconisé par l'OEaux. Vu la durée de la modélisation (100 jours consécutifs), ceci représente un total de 50 échantillons de 48 heures. En se basant sur la directive du canton de Zürich [10], par temps sec, un échantillon composite journalier est composé de 120 sous-échantillons alors que, par temps de pluie, le nombre de sous-échantillons prélevés par jour augmente.

Etat: Juin 2018

Le code utilisé pour modéliser les variations de concentration de l'amisulpride en entrée et sortie du décanteur primaire par temps sec et l'échantillonnage est ajouté comme exemple en annexe B.

3. Résultats

Les 10 substances modélisées ont été classées en 3 groupes en fonction de l'erreur relative maximale d'échantillonnage en entrée de STEP par temps sec pour toutes les tailles de STEP modélisées (voir Tableau 1). Les gammes d'erreurs relatives maximales indiquées sont valables pour toutes les tailles de STEP modélisées.

Tableau 1 – Classement des 10 substances modélisées en fonction de l'erreur relative maximale d'échantillonnage en entrée de STEP (avant la décantation primaire), les substances entre parenthèses sont des substances qui suivent la tendance générale du groupe mais avec quelques exceptions

Erreur relative maximale faible (<15%)	Erreur relative maximale assez élevée (10 à 30%)	Erreur relative maximale élevée (30 à >100%)
hydrochlorothiazide	candésartan, citalopram, (irbésartan),(diclofénac), (metoprolol)	amisulpride, clarithromycine (carbamazépine), (venlafaxine)

Les substances pour lesquelles l'échantillonnage comporte les erreurs relatives les plus grandes sont l'amisulpride, la clarithromycine et, dans une moindre mesure, la carbamazépine et la venlafaxine. Ces substances sont celles qui sont consommées par moins de 1% de la population en Suisse. Ainsi, dans un petit bassin versant, une faible fraction de la population consomme ces produits pharmaceutiques. Les pics de concentration engendrés par cette consommation ne sont pas plus petits (car la consommation moyenne par habitant est identique, les charges sont donc concentrées dans les pics) mais ils sont plus rares. Dans ce cas-là, les erreurs d'échantillonnage sont plus importantes en comparaison avec un bassin versant de plus grande taille, où la fraction de consommateurs est plus élevée et la charge en produits pharmaceutiques par conséquent plus distribuée dans le temps. Dans les petits bassins versants, la probabilité d'échantillonner « par hasard » un de ces pics est faible, il est plus probable de rater des pics et d'échantillonner des concentrations moins élevées. Ainsi les concentrations en entrée de STEP (MP_{in}) sont sous-estimées, alors que les concentrations mesurées en sortie de STEP (MP_{out}) sont lissées par le séjour hydraulique dans la STEP et ont une plus grande probabilité d'être correctement échantillonnées. Il en résulte une sous-estimation du taux d'épuration des micropolluants sur l'ensemble de la STEP.

3.1 Echantillonnage en entrée du décanteur primaire

Les Figures 2 A, B et C montrent les erreurs relatives d'échantillonnage de l'amisulpride, du candésartan et de l'hydrochlorothiazide (3 substances représentatives des 3 groupes du Tableau 1) à l'aide de boxplots¹. Ces erreurs relatives ont été calculées pour un échantillonnage en entrée

¹ *Boxplot* : un boxplot ou graphique à moustaches est une représentation graphique de données statistiques. Le rectangle va du premier au troisième quartile (respectivement $P_{25\%}$ et $P_{75\%}$), coupé par la médiane et représente donc la distribution de 50% des données. La « moustache » inférieure représente la plus grande valeur parmi le minimum de la distribution et le quantile $P_{25\%} - 1.5$ fois la valeur de l'écart interquartile (entre $P_{25\%}$ et $P_{75\%}$). La « moustache » supérieure représente la plus petite valeur parmi la valeur maximale des données et le quantile $P_{75\%} + 1.5$ fois la valeur de l'écart interquartile. Les deux « moustaches » représentent donc approximativement les erreurs minimales et maximales d'échantillonnage.

Etat: Juin 2018

de STEP (avant le décanteur primaire) par temps sec pour les 6 tailles de STEP modélisées. Pour toutes les substances, l'erreur relative d'échantillonnage diminue avec l'augmentation de taille de la STEP (augmentation du nombre d'habitants raccordés qui consomment potentiellement une des substances échantillonnées).

Les erreurs relatives maximales d'échantillonnage de l'*amisulpride* sont les plus élevées (jusqu'à $\pm 200\%$). Même pour les STEP de plus de 8'000 habitants raccordés, les erreurs relatives maximales s'élèvent à $\pm 50\%$. Pour le *candésartan*, les erreurs relatives d'échantillonnage sont plus faibles (max. $\pm 30\%$) et diminuent pour les STEP de plus de 8'000 habitants raccordés pour atteindre au maximum $\pm 10\%$. Quant à l'*hydrochlorothiazide*, les erreurs relatives d'échantillonnage s'élèvent au maximum à $\pm 15\%$ pour les STEP de petite taille mais ces erreurs diminuent à maximum $\pm 5\%$ pour les STEP de plus de 8'000 habitants raccordés).

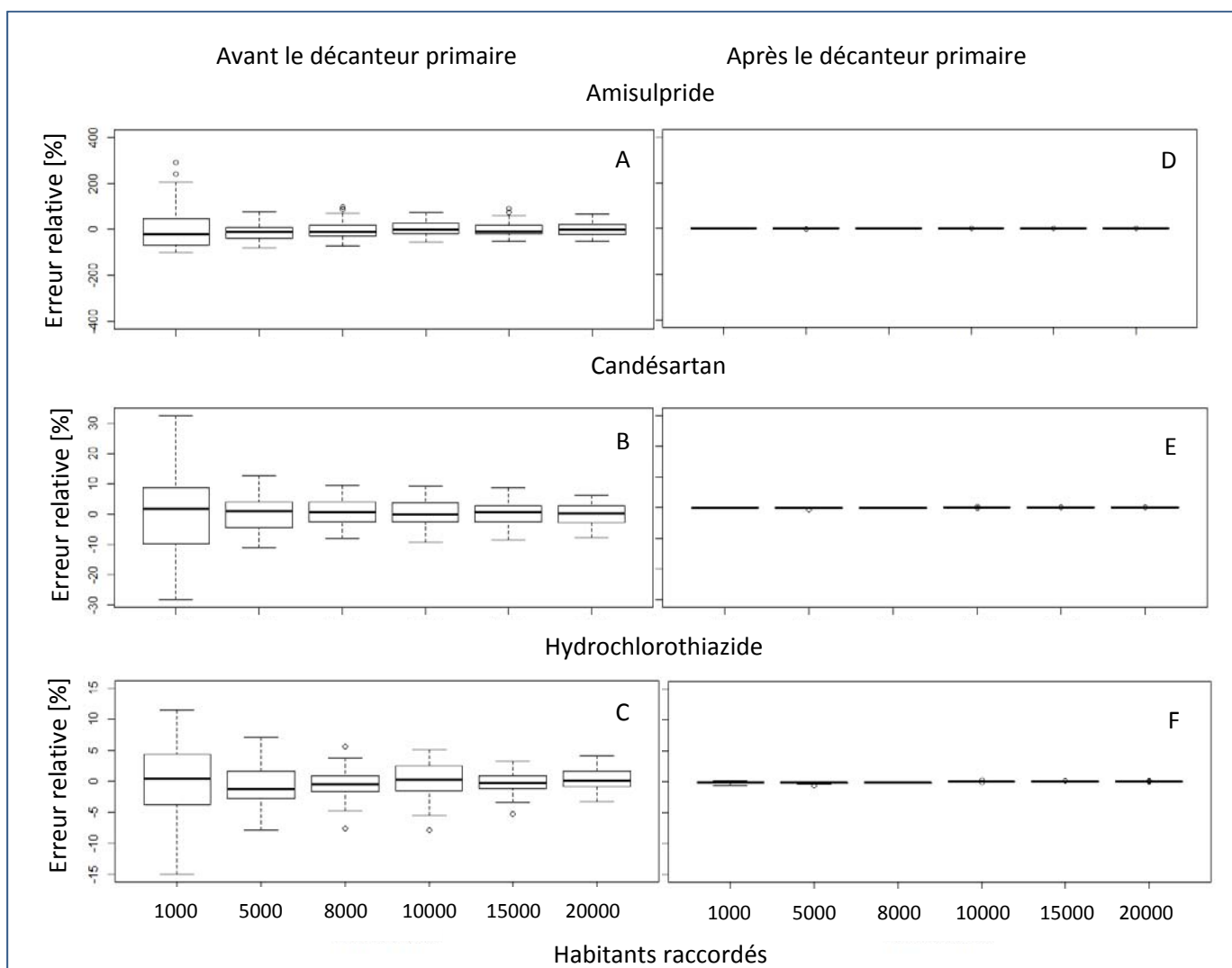


Figure 2 – Erreurs relatives d'échantillonnage de l'Amisulpride, du Candésartan et de l'Hydrochlorothiazide avant le décanteur primaire (à gauche) et en sortie du décanteur primaire (à droite) pour les 6 tailles de STEP modélisées

3.2 Echantillonnage en sortie du décanteur primaire

Les Figures 2 D, E et F montrent les erreurs relatives d'échantillonnage de l'Amisulpride, du Candésartan et de l'Hydrochlorothiazide (3 substances représentatives des 3 groupes du Tableau 1). Ces erreurs relatives ont été calculées pour un échantillonnage en sortie du décanteur primaire par temps sec pour les 6 tailles de STEP modélisées. Les erreurs d'échantillonnage

Etat: Juin 2018

diminuent pour toutes les substances par rapport à l'échantillonnage avant le décanteur primaire. De plus, pour toutes les substances, l'erreur relative d'échantillonnage diminue en fonction de la taille de la STEP (nombre d'habitants raccordés) (voir aussi Figures A1, A2 et A3 en annexe pour plus de détails).

Les erreurs relatives d'échantillonnage de l'*amisulpride* sont toujours les plus élevées, mais elles s'élèvent au maximum à $\pm 10\%$. Pour les STEP de plus grande taille (dès 10'000 habitants raccordés), les erreurs relatives diminuent à $\pm 1\%$. Pour le *candésartan*, les erreurs relatives d'échantillonnage sont plus faibles (max. $\pm 0.7\%$) et diminuent pour les plus grandes STEP. Les erreurs relatives d'échantillonnage diminuent de manière comparable pour l'*hydrochlorothiazide*. En considérant les autres sources d'imprécision dans l'évaluation du taux d'épuration des micropolluants (l'analyse au laboratoire, les effets de matrice, le décalage dû au séjour hydraulique dans la STEP, etc.) il est possible de généraliser, qu'en-dessous de quelques pourcentages d'erreur, l'échantillonnage ne représente plus la principale source de l'erreur totale et peut donc être négligée.

Les erreurs relatives d'échantillonnage en entrée de STEP ont aussi été modélisées par temps de pluie pour l'*amisulpride* et pour les 6 tailles de STEP modélisées (voir Figure A4 en annexe). Dans ce cas, le temps de séjour dans le décanteur primaire est divisé par deux (1.5 au lieu de 3 h). Les pics de concentration sont donc moins bien lissés par le séjour dans le décanteur primaire. De plus, le débit ainsi que le nombre d'échantillons sont augmentés de 50% (le nombre d'échantillons passe de 120 à 180 par jour). Malgré l'augmentation du nombre d'échantillons (et donc un raccourcissement de l'intervalle d'échantillonnage), les erreurs relatives d'échantillonnage sont légèrement plus élevées que par temps sec (au maximum $\pm 15\%$). Elles diminuent cependant avec l'augmentation de la taille de la STEP pour atteindre $\pm 5\%$.

Dans le cas de décanteurs primaires dimensionnés moins généreusement (p.ex. temps de séjour hydraulique de 1 heure par temps sec et 30 min par temps de pluie), l'effet du placement de l'échantillonneur en sortie du décanteur primaire est le même (diminution des erreurs d'échantillonnage), mais de moindre intensité (les erreurs relatives d'échantillonnage pour un temps de séjour de 30 min s'élèvent à maximum $\pm 20\%$; voir Figure A5 en annexe). Ainsi, indépendamment du dimensionnement du décanteur primaire, la représentativité de l'échantillonnage est fortement améliorée par le temps de séjour hydraulique dans le cas d'un échantillonnage en sortie du décanteur primaire.

4. Limitations

Comme le montre la modélisation, le décanteur primaire permet aussi d'atténuer les erreurs relatives d'échantillonnage par *temps de pluie*. Cependant, le temps de séjour raccourci dans le décanteur primaire ne permet pas de lisser les pics de concentration aussi bien que par temps sec. Il est donc important d'augmenter le nombre d'échantillons prélevés par jour afin d'obtenir un échantillon composite représentatif. Le canton de Zürich recommande d'augmenter le nombre d'échantillons par jour à 360 par temps de pluie [10]. De plus, à partir d'un certain débit, l'échantillonnage passe en mode proportionnel au temps. Ce nombre d'échantillons et le changement à l'échantillonnage proportionnel au temps n'ont pas pu être modélisés dans ce projet.

Les *erreurs analytiques* n'ont pas été considérées dans ce projet. Cependant, il faut partir du principe que celles-ci seront plus élevées pour les échantillons prélevés en entrée de STEP (effet de la matrice, stabilité de l'échantillon). Les erreurs analytiques dépendent fortement de la

Etat: Juin 2018

méthode et des appareils utilisés, mais il est estimé que les erreurs relatives de mesure des substances individuelles s'élèvent à environ 10%. La combinaison de toutes les substances et le calcul du taux d'épuration permettent de diminuer les écarts systématiques et donc d'évaluer le taux d'épuration avec une précision d'environ 2 à 3% [11].

L'effet de la *recirculation* des boues en excès est négligeable si, comme à la STEP de Werdhölzli, les boues en excès représentent 1 à 2% du volume de l'affluent de la STEP. Mais si le volume de boues recirculées est important (ou si la STEP accepte des boues d'autres STEP), ces recirculations peuvent influencer la charge en entrée (à considérer au cas par cas). La recirculation des eaux de retour de digestion ne devraient pas avoir d'influence sur la charge en entrée de STEP. Dans tous les cas, il est conseillé de placer l'échantillonneur en sortie du décanteur primaire avant les éventuelles recirculations (p.ex. eaux de lavage des filtres) qui pourraient mener à une erreur d'estimation de la charge des eaux usées brutes.

Dans le cas d'une station de *pompage* en amont de la STEP, les concentrations sont lissées par le séjour dans le puisard par temps sec. Mais si les pompes ne fonctionnent qu'un court laps de temps, alors elles peuvent artificiellement recréer les pics engendrés par le rejet de produits pharmaceutiques par les consommateurs. Dans le cas où les pompes fonctionnent de manière continue, il ne serait pas forcément plus avantageux de placer l'échantillonneur après le décanteur primaire (à voir au cas par cas, en fonction du débit de la pompe et du temps de séjour hydraulique dans le puisard).

5. Conclusion

Il ressort de cette modélisation que les erreurs relatives d'échantillonnage sont élevées (pour la majorité des substances modélisées aux maximum entre ± 10 à 30%) en entrée de STEP, si l'échantillonneur est placé avant le décanteur primaire. Ces erreurs sont particulièrement élevées pour les petites STEP avec 1'000 habitants raccordés. De manière générale, à partir de 8'000 habitants raccordés, les erreurs relatives d'échantillonnage diminuent et ne sont plus significativement différentes des erreurs d'échantillonnage des STEP de plus grande taille.

En plaçant l'échantillonneur en sortie du décanteur primaire, les erreurs relatives diminuent fortement. Ainsi, à partir de 10'000 habitats raccordés, les erreurs relatives d'échantillonnage sont de ± 0.1 à 1%, ce qui paraît acceptable. De manière générale, il est donc recommandé, dans la mesure du possible, de prendre les échantillons pour évaluer le taux d'épuration des micropolluants en sortie du décanteur primaire.

Pour l'instant, le critère «petites STEP»² qui pourrait concerner des STEP avec moins de 8'000 habitants raccordés n'est pas encore entré en vigueur. Le problème posé par l'échantillonnage de composés traces dans l'affluent des STEP de petite taille (entre 1'000 et 8'000 habitants raccordés) n'est donc pas encore d'actualité. Dans le cadre des projets de traitement des micropolluants, il est néanmoins recommandé pour toutes les tailles de STEP de placer l'échantillonneur en sortie du décanteur primaire. Ceci permet de lisser les pics de concentrations et d'obtenir des échantillons composites représentatifs des concentrations réelles

² Critère s'appliquant aux STEP avec plus de 1000 habitants raccordés, déversant leurs eaux polluées dans un cours d'eau contenant plus de 5% d'eaux polluées non épurées des composés traces organiques, qui se situe dans un périmètre écologiquement sensible ou est indispensable pour l'approvisionnement en eau potable et qui a été désignée par le canton pour prendre des mesures visant à éliminer les composés traces organiques.

Etat: Juin 2018

et n'apporte aucun désavantage, vu que les micropolluants ne sont pas éliminés dans le traitement mécanique.

Lors d'un essai pilote mené à la STEP de Penthaz (environ 9'500 habitants raccordés), des taux d'élimination négatifs ont fréquemment été obtenus pour la moitié des 12 substances du DETEC (amisulpride, carbamazépine, citalopram, clarithromycine, venlafaxine, candésartan) [12]. L'échantillonneur a donc été déplacé en sortie du décanteur primaire, dans le but d'obtenir des échantillons plus représentatifs en entrée de STEP. Si des rendements négatifs sur la biologie (sans le pilote) ont encore été observés par la suite (valeurs en entrée plus faibles que les valeurs en sortie), leur variabilité a cependant nettement diminué. Ce cas concret permet de consolider les résultats obtenus dans la modélisation et souligne l'importance de place l'échantillonneur en sortie du décanteur primaire.

6. Bibliographie

- [1] Ordonnance du DETEC visant à contrôler l'efficacité des mesures d'élimination des composés traces organiques dans les installations d'épuration des eaux usées, 814.201.231, du 3 novembre 2016, (état au 1er décembre 2016).
- [2] Ort, C., Eppler, J. M.; Scheidegger, A., Rieckermann, J., Kinzig, M., Sörgel, F. (2014). Challenges of surveying wastewater drug loads of small populations and generalizable aspects on optimizing monitoring design, *Addiction*, 109(3), 472-481.
- [3] Ort, C., Lawrence, M.G., Reungoat, J., Mueller, J.F. (2010). Sampling for PPCPs in wastewater systems: A comparison of different sampling modes and optimization strategies". *Environmental Science & Technology*, 44 (16), pp 6289-6296.
- [4] Abegglen, C., Siegrist, H. 2012: Micropolluants dans les eaux usées urbaines. Etape de traitement supplémentaire dans les stations d'épuration. Office fédéral de l'environnement, Berne, *Connaissance de l'environnement n° 1214*: 87 p.
- [5] Schärer, M., Abegglen, C., Dominguez, D., Purtschert, I., Weber, S. (2014). Exploitation et contrôle des stations d'épuration. Aide à l'exécution pour les stations centrales d'épuration des eaux usées. Office fédéral de l'environnement, Berne. *L'environnement pratique n° 1418*: 37 p.
- [6] Joss A., Ternes T.A., Alder A., McArdell C.S., Göbel A., Keller E., Siegrist H. 2005. Removal of pharmaceuticals and fragrances in biological wastewater treatment. *Water Research n° 39*: 3139-3152 p.
- [7] Ort, C., Scheidegger, A. Sewage pattern generator (R-package)
www.eawag.ch/en/departement/sww/software
- [8] Verbrauchszahlen, document interne Eawag
- [9] Compendium de Swissmedic, <http://www.swissmedicinfo.ch/>
- [10] Directive du canton de Zürich « ARA-Untersuchungsprogramme Kanton Zürich», valable à partir du 1^{er} janvier 2017
- [11] Götz, C. (2018). Amt für Abfall, Wasser, Energie und Luft, Kanton Zürich. Communication personnelle

Plateforme «Techniques de traitement des micropolluants»
www.micropoll.ch

Etat: Juin 2018



[12] Horisberger, M. (2018). Triform. Communication personnelle.

Etat: Juin 2018

Annexe A

Echantillonnage en entrée de STEP (avant décanteur primaire)

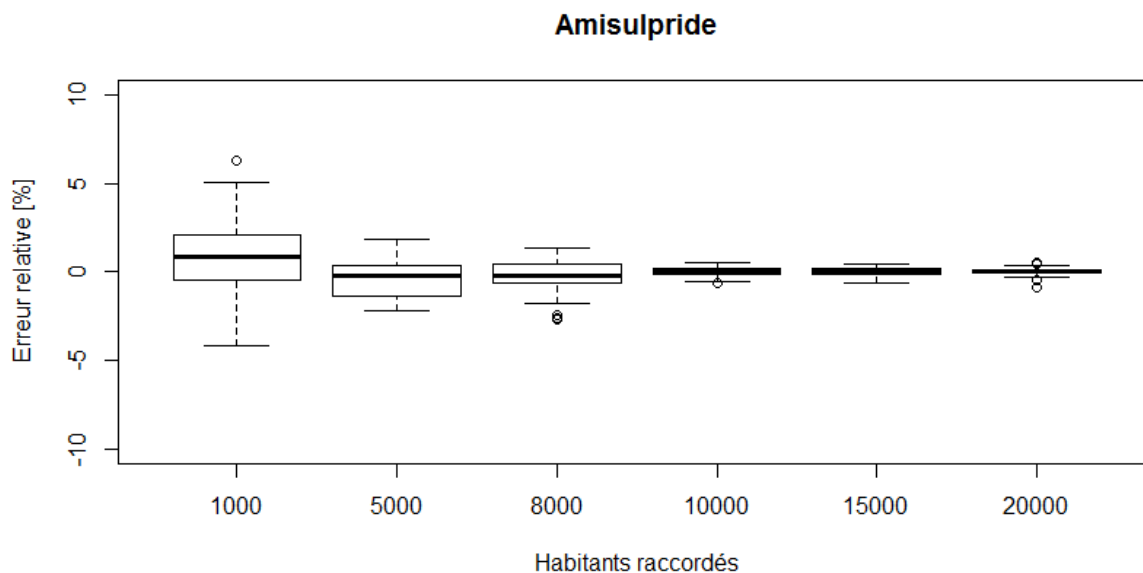


Figure A1 - Erreurs relatives d'échantillonnage de l'amisulpride en sortie du décanteur primaire pour les 6 tailles de STEP modélisées

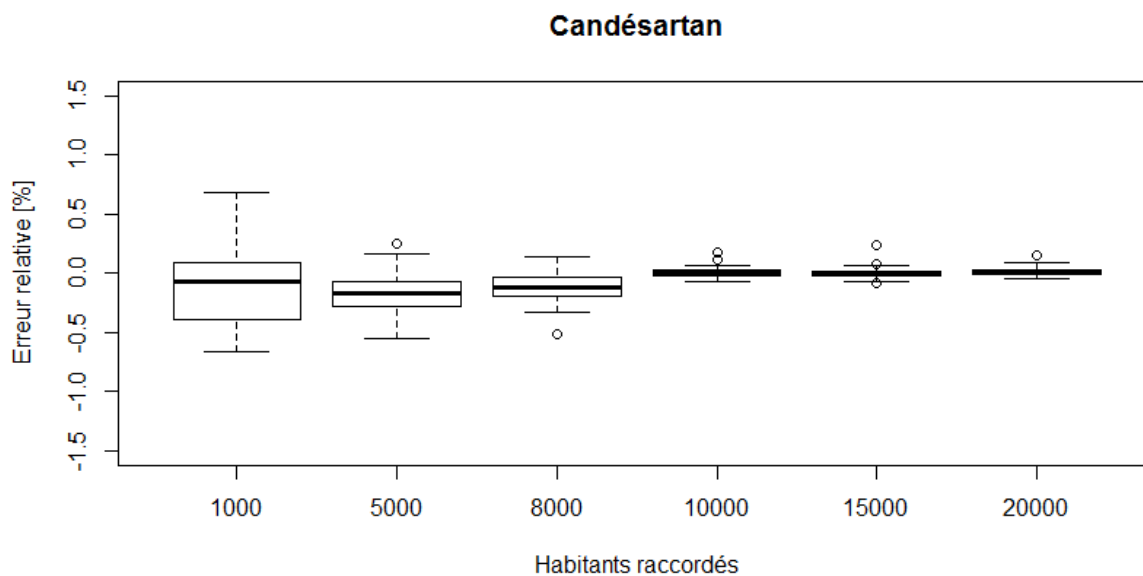


Figure A2 - Erreurs relatives d'échantillonnage du candésartan en sortie du décanteur primaire pour les 6 tailles de STEP modélisées

Hydrochlorothiazide

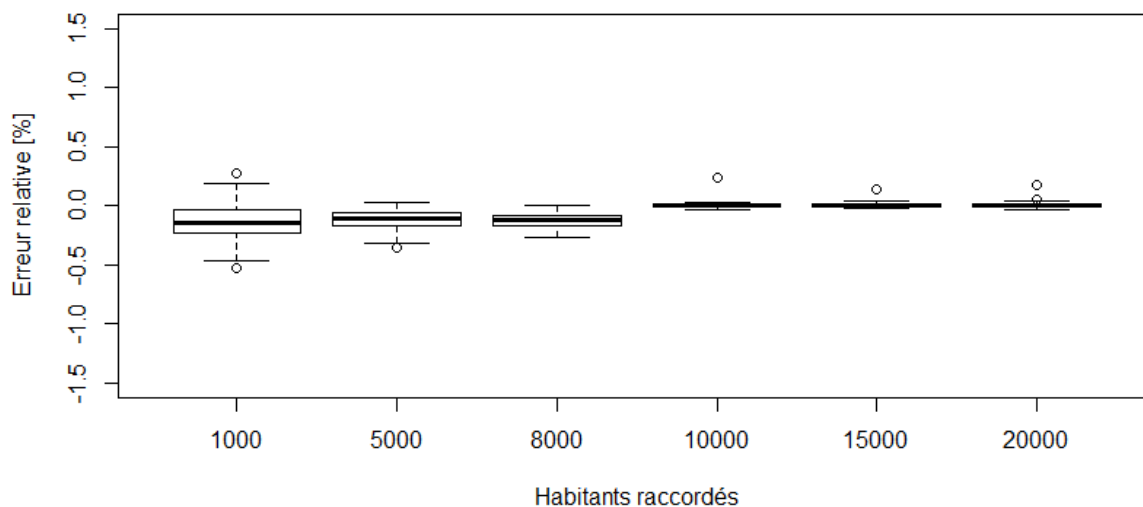


Figure A3 - Erreurs relatives d'échantillonnage de l'hydrochlorothiazide en sortie du décanteur primaire pour les 6 tailles de STEP modélisées

Echantillonnage par temps de pluie

Amisulpride (temps de pluie)

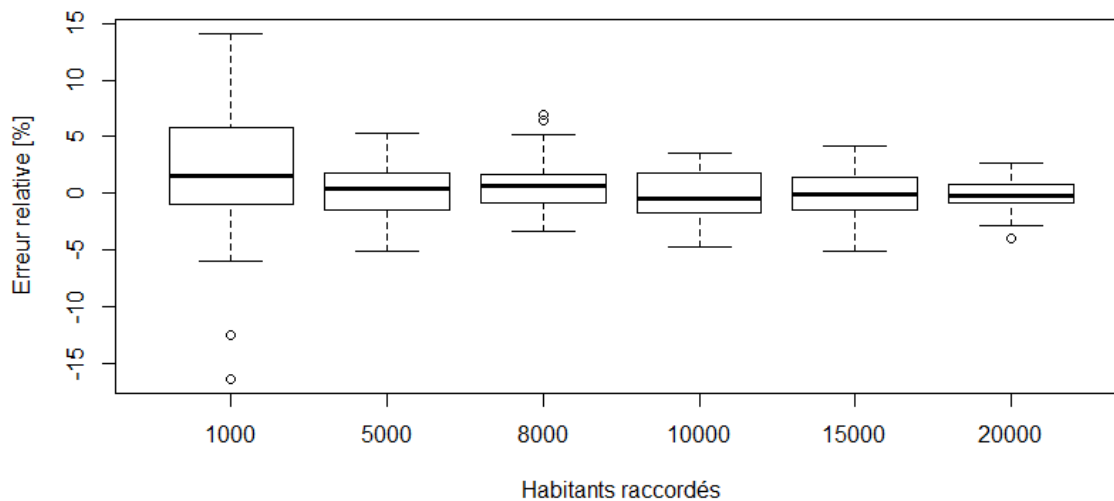


Figure A4- Erreurs relatives d'échantillonnage de l'amisulpride en sortie du décanteur primaire pour les 6 tailles de STEP modélisées par temps de pluie (temps de séjour hydraulique dans le décanteur primaire de 1.5 h)

Etat: Juin 2018

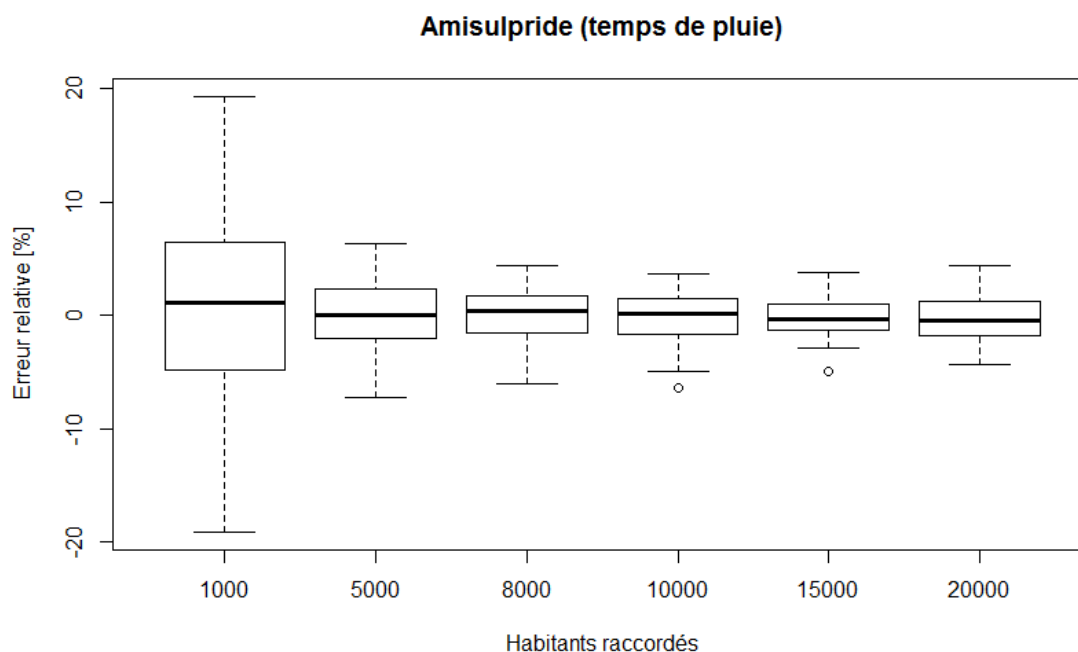


Figure A5- Erreurs relatives d'échantillonnage de l'amisulpride en sortie du décanteur primaire pour les 6 tailles de STEP modélisées par temps de pluie (temps de séjour hydraulique dans le décanteur primaire de 0.5 h)

Annexe B (adapté de [7])

```
library(SPG)
rm(list=ls())

populations = c(1000, 5000, 8000, 10000, 15000, 20000)
plot.path <- "C:/Micropoll/06_Plattform-Projekte/6.10_Probenahmestrategie/Modellierung/simulations sortie DP"
for(pop in populations) {
  print(paste("population:", pop))
  ## =====
  ## define gravity systems
  ## =====

  # the following vector describes the diurnal variation in 2-h steps, in this
  # example it is the same for the substance and for the flow
  # -----
  diurnal.variation.Q.S <- c(4, 8, 15, 20, 12, 10, 11, 7, 6, 10, 8, 5)

  # in a first scenario we assume that the substance of interest is consumed by
  # 0.0229% of the population and that the consumers are distributed homogeneously
  # over all sub-catchments
  # -----

  G1.S1 <- def.grav(population=pop,
    exp.n.pulses=0.000229*pop*5,
    pulse.mass=600,
    diurnal.S.WD=diurnal.variation.Q.S,
    diurnal.S.WE=diurnal.variation.Q.S,
    Q.c.day=160,
    diurnal.Q=diurnal.variation.Q.S,
    Q.base=0,
    flow.distance=10000)

  # calculate flow [m3/d] for increment v-proportional sampling
  flow1 <- pop*160/1000

  #AWEL defines 120 Teilproben bei TW, 360 Teilproben bei RW
  Teilproben.TW <- 120
  teilproben.RW <- 360

  incl <- flow1/Teilproben.TW
```

Etat: Juin 2018

```
## =====  
## build the system and generate the patterns  
## =====  
  
sim.dur <- 100 # simulate 100 days  
  
temp.res <- 2 # a temporal resolution of 2 minutes is recommended  
  
# calling the gravity system functions defined above (Gx.Sy) calculates wastewater  
# flows and substance patterns for the number of days (sim.dur) and temporal  
# resolution (temp.res). Compose the drainage system by simply adding the  
# different flows. If the flows from a gravity system are collected in a pump sump and  
# then pumped towards the point where the pattern should be evaluated (i.e. the  
# sampling point) or towards the next pump station you simply embrace the gravity system  
# function with a pump function:  
# -----  
  
flow.s1 = G1.S1(sim.dur, temp.res)  
  
## flow = matrix with flows (column 1: Q[l/sec], column 2: S[mg/sec])  
## vol = reactor volume [l]  
CSTR <- function(flow, vol=10*pop) {  
  ## read temporal resolution [sec]  
  temp.res.sim <- attr(flow, "temp.res.sim")  
  
  ## mass of substance in reactor  
  S <- rep(0, nrow(flow))  
  
  ## water flow out is always the same as inflow  
  Q.out <- flow[, 1]  
  
  ## substance flow out of reactor  
  S.out <- rep(0, nrow(flow))  
  
  ## mass balances  
  for(t in 2:nrow(flow)) {  
    ## mass balance for SUBSTANCE  
    S.out[t-1] <- S[t-1]/vol * Q.out[t-1]  
  
    S[t] <- S[t-1] + flow[t-1, 2]*temp.res.sim - S.out[t-1]*temp.res.sim  
    ## prevent rounding errors (due to subtraction of similar numbers)  
    if(S[t]<0) S[t] <- 0  
  }  
  
  ## return matrix with flows  
  flow.out <- matrix(c(Q.out, S.out), ncol=2)  
  dimnames(flow.out) <- dimnames(flow)  
  class(flow.out) <- "flow"  
  attr(flow.out, "temp.res.sim") <- temp.res.sim # store resolution as attribute  
  
  return(flow.out)  
}  
  
## =====  
## take composit samples  
## =====  
  
flow.CSTR.out <- CSTR(CSTR(flow.s1))  
  
# take 48-hour composite samples with 15 minutes sampling interval  
# -----  
  
samples.s1 <- take.samples(flow.CSTR.out, composite.duration=48, v.prop.vol=inc1)  
  
# compare results, plot and print sampling errors  
# -----  
  
pdf(paste0(plot.path, "/pop_", pop, ".pdf"), width=6, height=5)  
plot(samples.s1, type="relative") # the errors will be displayed as %  
  
dev.off() #close pdf  
  
print(samples.s1)  
}
```