

Université de Tlemcen
Faculté de technologie
Département de GEE

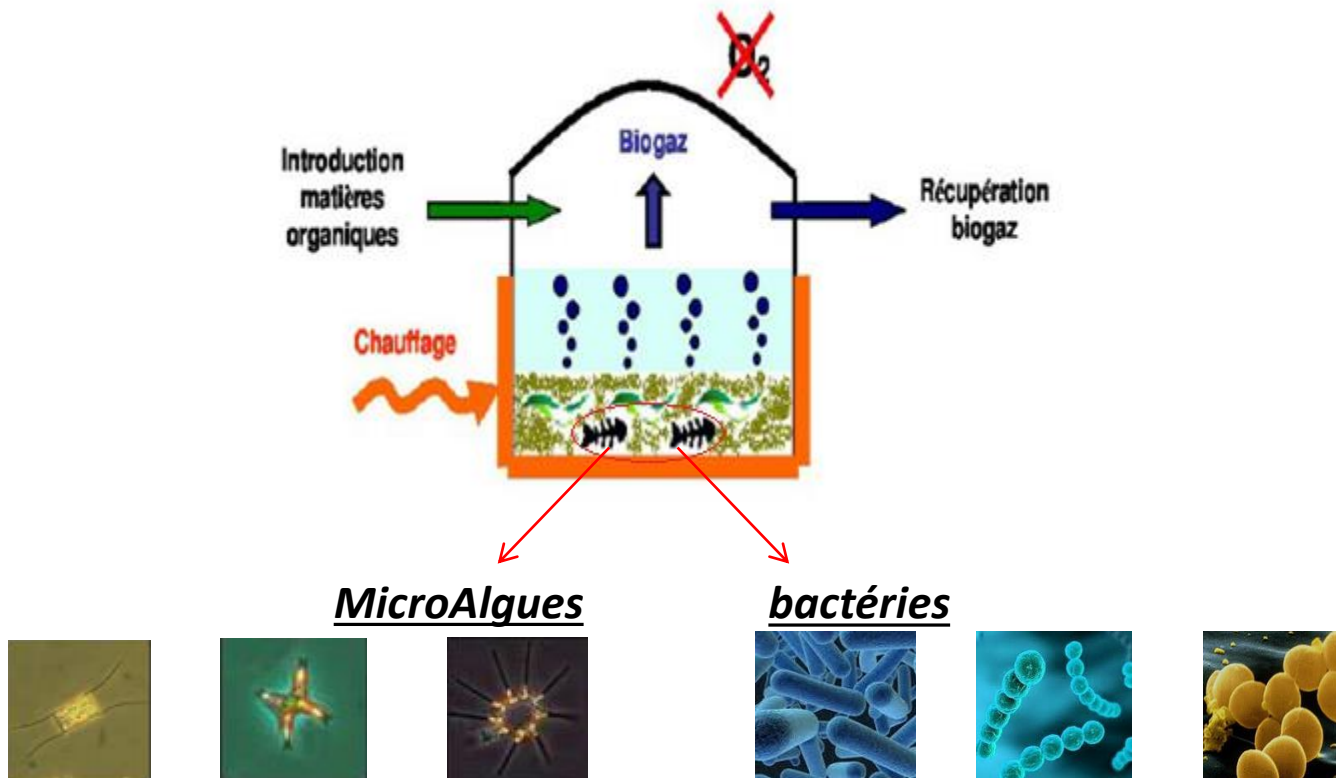
*Identification et modélisation:
Applications à la Digestion Anaérobie*

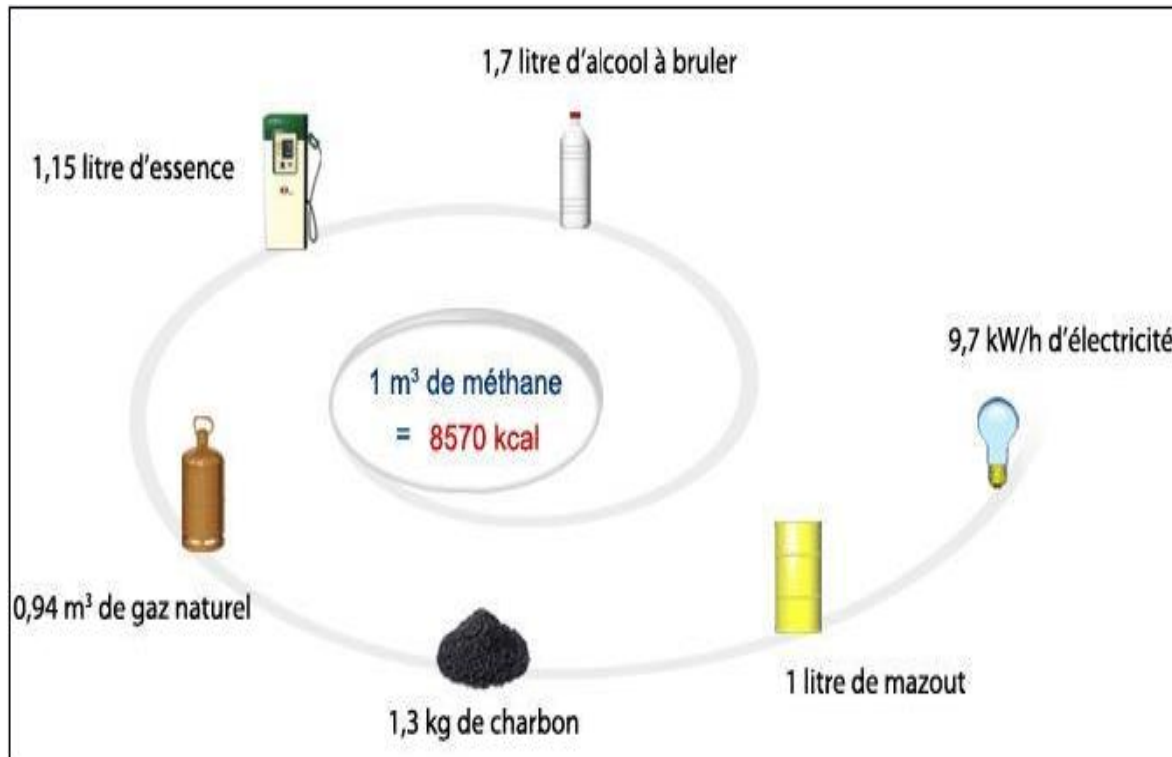
KHEDIM Zeyneb,

C'est quoi la digestion anaérobie?

Définition

La digestion anaérobie est la dégradation de la matière polluante par des micro organismes dont l'oxygène leur est **toxique**.





Mais des problèmes se posent!

- Sensibilité extrême du procédé envers les conditions opérationnelles,
- Difficulté de contrôle du comportement bactérien

➔ Nécessité extrême d'une modélisation mathématique de la digestion anaérobie

Comment modéliser?

Traduire sous forme d'équations mathématiques les cinétiques réactionnelle qui se produisent au cours du procédé,

Pourquoi Modéliser?

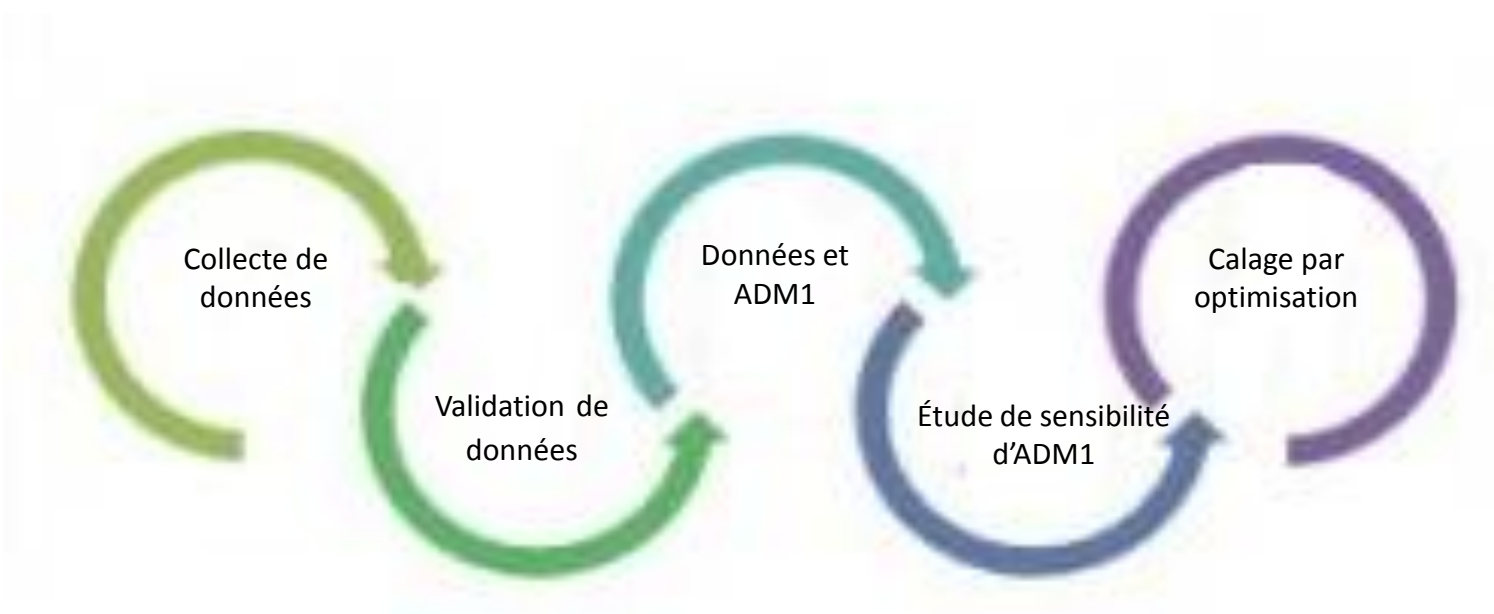
- ✓ Décrire et comprendre les réactions mis en jeu.
- ✓ Prédire le comportement du procédé.
- ✓ Contrôler- commander le bioréacteur.
- ✓ Optimiser le rendement
- ✓ Identifier les variables /paramètres
- ✓ ...

Classification des modèles

- modèles phénoménologiques : généralement complexes, développés par les praticiens pour comprendre le détail du processus (ADM1).
- modèles empiriques : décrire les phénomènes par des courbes expérimentales (représenter les données et interpréter).
- modèles dédiés au contrôle (pour l'automaticien) : simples, capables de reproduire le comportement du système.
 - des modèles qui ont montré leur efficacité dans le contrôle et l'observation des systèmes de digestion anaérobie,
 - des modèles qui peuvent être modifiés pour ajouter certaines dynamiques (sans trop compliquer), ou les réduire encore,
 - des modèles qui peuvent avoir besoin des deux autres types de modèles.

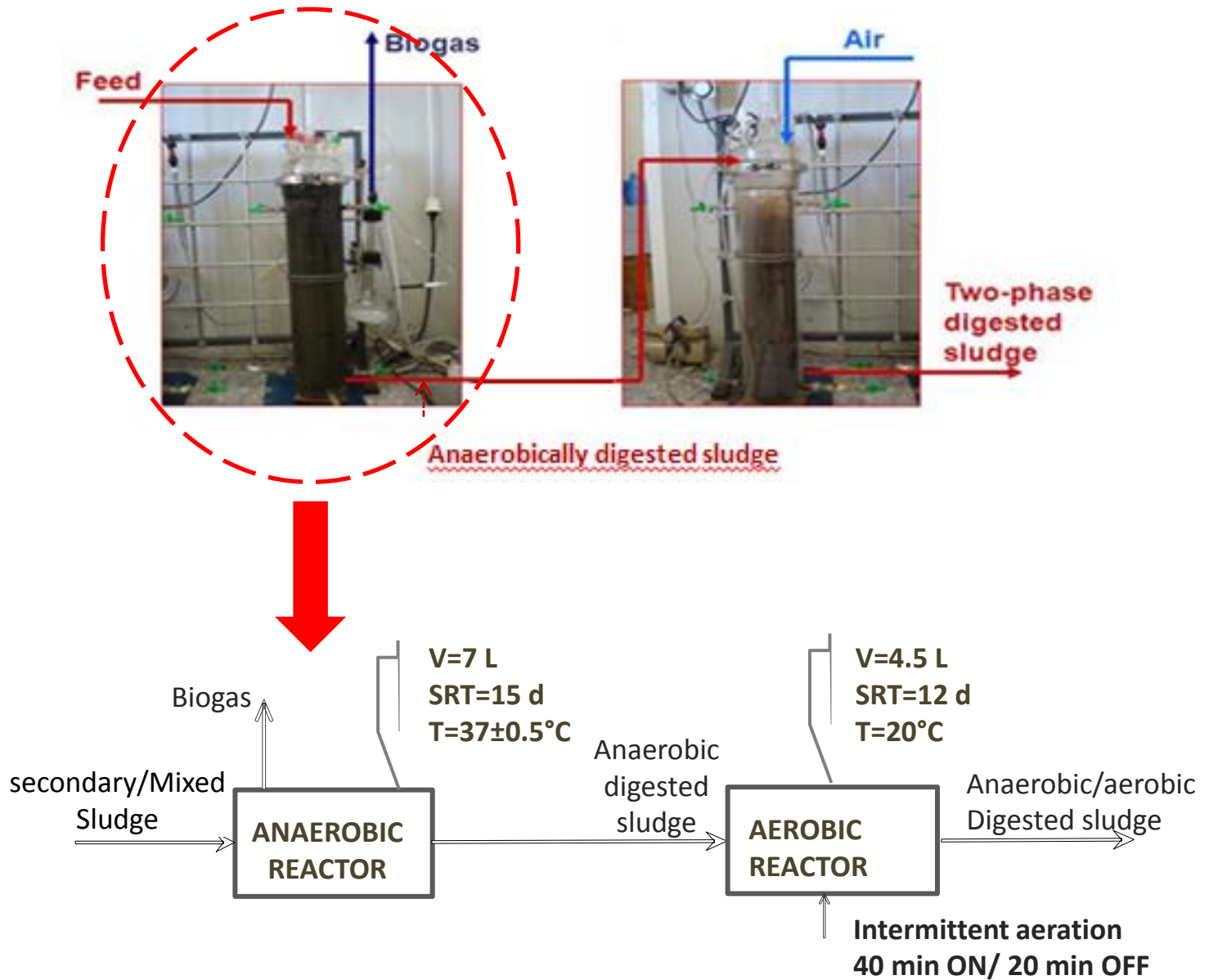
Positionnement du travail de thèse

I/ Caler le modèle ADM1 sur des données expérimentales



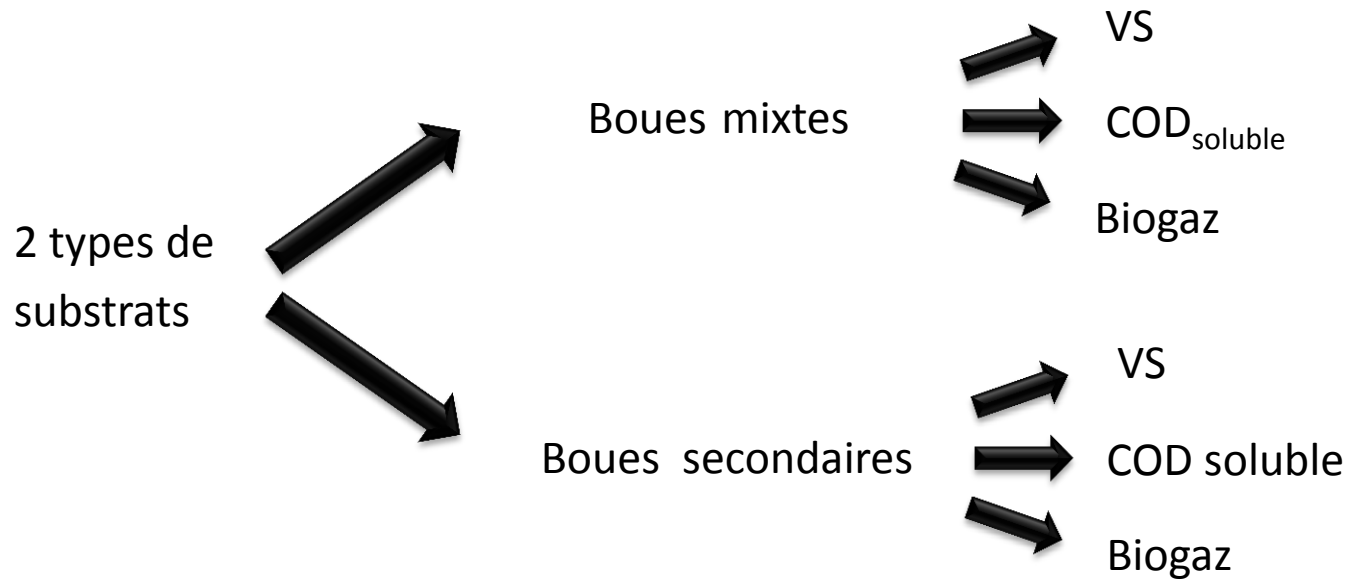
II/ Modifier un modèle de digestion anaérobie des micro Algues en jouant sur l'une de ses dynamiques

Partie I : Calage du modèle ADM1

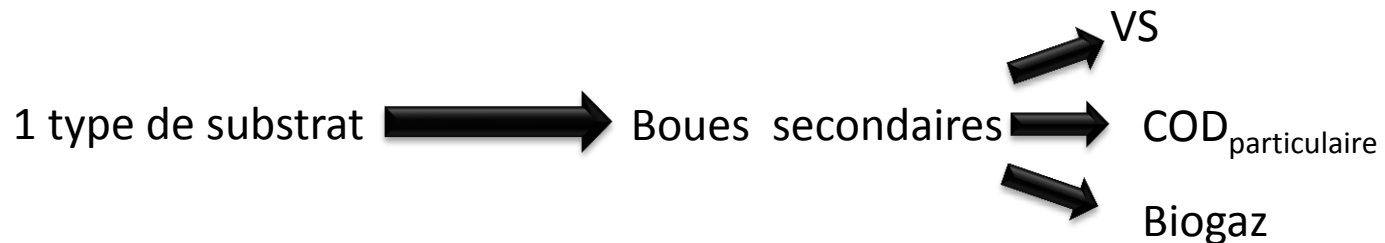


1- Collecte des données

□ Données pour le calage



□ Données pour la validation



2-Validation des données

Bilan de DCO

Entrée=Sortie_liquide+Sortie_gaz+Accumulation

Boues secondaires



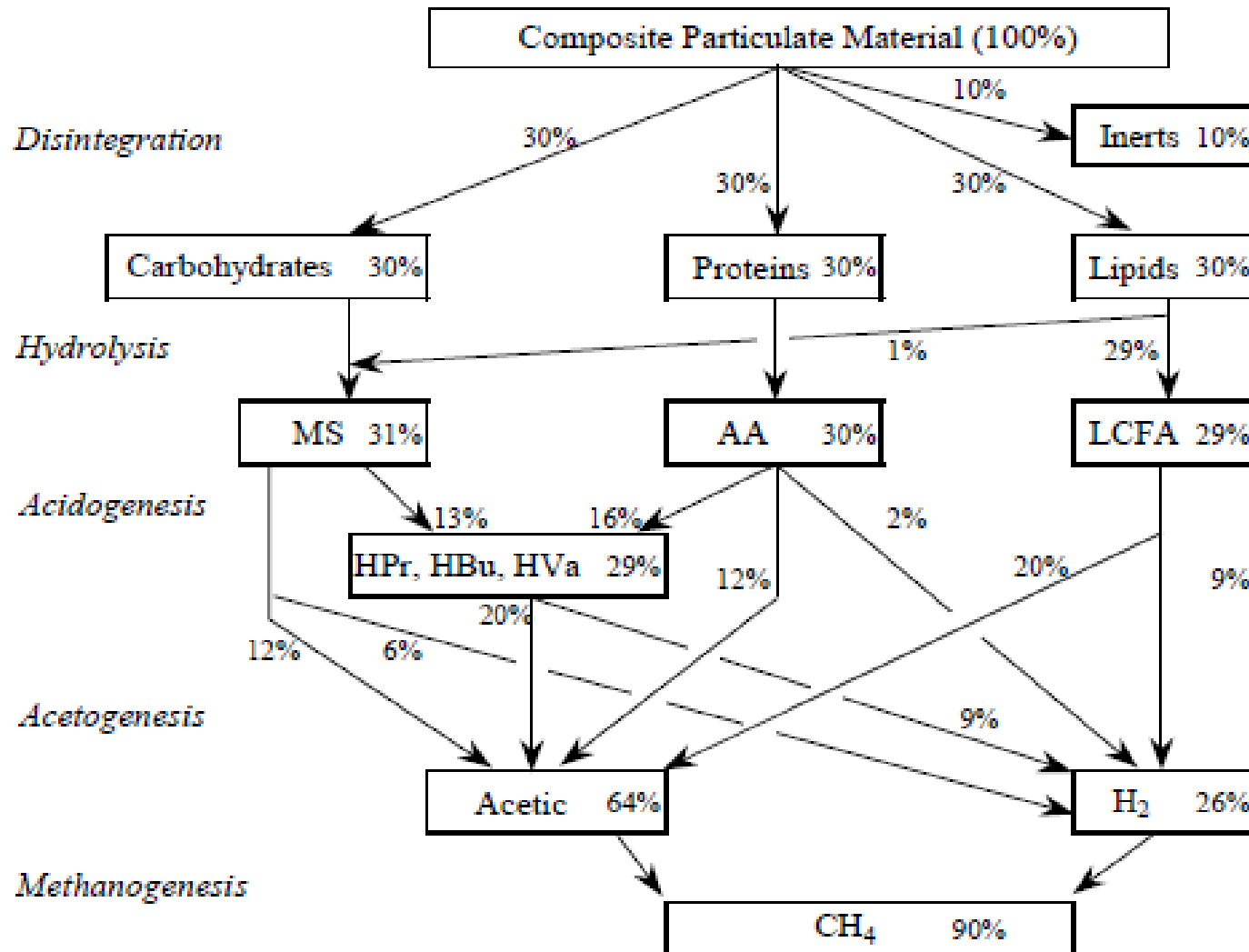
$$\frac{DCO}{VS} = 1,62$$

Boues mixtes



$$\frac{DCO}{VS} = 1,41$$

Bref aperçu sur ADM1⁽²⁾



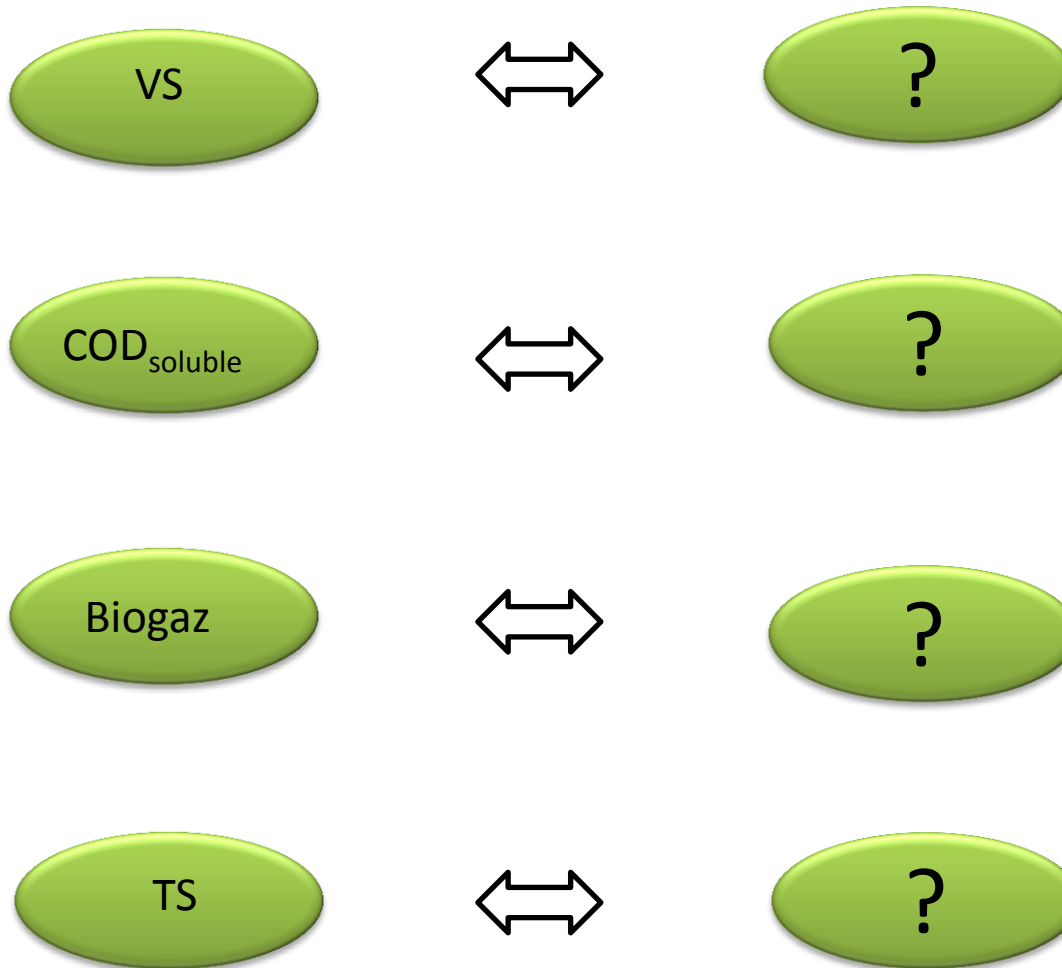
¹ IWA Task Group For Modelling of Anaerobic Wastewater Processes. "Anaerobic digestion Model No.1(ADM1)". IWA, 2002.

ADM1 : Matrice de Petersen⁽²⁾

Component →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Rate (ρ_j , kg COD.m ⁻³ .d ⁻¹)
j	Process ↓	S _{su}	S _{aa}	S _{fa}	S _{va}	S _{bu}	S _{pro}	S _{ac}	S _{h2}	S _{ch4}	S _{ic}	S _{in}	S _{sl}	
1	Disintegration												f _{sl,se}	k _{dis} · X _s
2	Hydrolysis Carbohydrates	1												k _{hyd,ch} · X _{ch}
3	Hydrolysis of Proteins		1											k _{hyd,pr} · X _{pr}
4	Hydrolysis of Lipids	1-f _{fa,li}		f _{fa,li}										k _{hyd,li} · X _{li}
5	Uptake of Sugars	-1				(1-Y _{su}) · f _{bu,su}	(1-Y _{su}) · f _{pro,su}	(1-Y _{su}) · f _{ac,su}	(1-Y _{su}) · f _{h2,su}	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,5}$		-(Y _{su}) · N _{bac}		k _{m,su} · $\frac{S_{su}}{K_S + S}$ · X _{su} · I ₁
6	Uptake of Amino Acids		-1		(1-Y _{aa}) · f _{va,aa}	(1-Y _{aa}) · f _{bu,aa}	(1-Y _{aa}) · f _{pro,aa}	(1-Y _{aa}) · f _{ac,aa}	(1-Y _{aa}) · f _{h2,aa}	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,6}$		$\frac{N_{aa}}{(Y_{aa}) \cdot N_{bac}}$		k _{m,aa} · $\frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}}$ · X _{aa} · I ₁
7	Uptake of LCFA			-1				(1-Y _{fa}) · 0.7	(1-Y _{fa}) · 0.3					k _{m,fa} · $\frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}}$ · X _{fa} · I ₂
8	Uptake of Valerate				-1		(1-Y _{va}) · 0.54	(1-Y _{va}) · 0.31	(1-Y _{va}) · 0.15					k _{m,va} · $\frac{S_{va}}{K_S + S_{va}}$ · X _{va} · $\frac{1}{1 + S_{bu}/S_{va}}$ · I ₂
9	Uptake of Butyrate					-1		(1-Y _{bu}) · 0.8	(1-Y _{bu}) · 0.2					k _{m,va} · $\frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}}$ · X _{va} · $\frac{1}{1 + S_{bu}/S_{va}}$ · I ₂
10	Uptake of Propionate						-1	(1-Y _{pro}) · 0.57	(1-Y _{pro}) · 0.43	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,10}$				k _{m,pr} · $\frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}}$ · X _{pro} · I ₂
11	Uptake of Acetate							-1		$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,11}$				k _{m,ac} · $\frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}}$ · X _{ac} · I ₃
12	Uptake of Hydrogen								-1	$-\sum_{i=1-9,11-24} C_i V_{i,12}$				k _{m,h2} · $\frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}}$ · X _{h2} · I ₁
13	Decay of X _{su}													k _{dec,Xsu} · X _{su}
14	Decay of X _{aa}													k _{dec,Xaa} · X _{aa}
15	Decay of X _{fa}													k _{dec,Xfa} · X _{fa}
16	Decay of X _{c4}													k _{dec,Xc4} · X _{c4}
17	Decay of X _{pro}													k _{dec,Xpro} · X _{pro}
18	Decay of X _{ac}													k _{dec,Xac} · X _{ac}
19	Decay of X _{h2}													k _{dec,Xh2} · X _{h2}
		Monosaccharides (kg COD.m ⁻³)	Amino Acids (kg COD.m ⁻³)	Long chain fatty acids (kg COD.m ⁻³)	Total valerate (kg COD.m ⁻³)	Total butyrate (kg COD.m ⁻³)	Total propionate (kg COD.m ⁻³)	Total acetate (kg COD.m ⁻³)	Hydrogen gas (kg COD.m ⁻³)	Methane gas (kg COD.m ⁻³)	Inorganic Carbon (kg-mole C.m ⁻³)	Inorganic nitrogen (kg-mole N.m ⁻³)	Soluble inerts (kg COD.m ⁻³)	Inhibition factors (3.7): I ₁ = I _{pH} · I _{N,lim} I ₂ = I _{pH} · I _{N,lim} · I _{h2} I ₃ = I _{pH} · I _{N,lim} · I _{NH3,Xac}

Component →	i	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24	Rate (ρ , kg COD·m ⁻³ ·d ⁻¹)
j Process ↓		X _c	X _{ch}	X _{pr}	X _{li}	X _{su}	X _{aa}	X _{fa}	X _{c4}	X _{pro}	X _{ac}	X _{h2}	X _i	
1 Disintegration		-1	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$								$f_{xi,xc}$	$k_{dis} \cdot X_c$
2 Hydrolysis Carbohydrates			-1											$k_{hyd, ch} \cdot X_{ch}$
3 Hydrolysis of Proteins				-1										$k_{hyd, pr} \cdot X_{pr}$
4 Hydrolysis of Lipids					-1									$k_{hyd, li} \cdot X_{li}$
5 Uptake of Sugars						Y _{su}								$k_{m, su} \cdot \frac{S_{su}}{K_S + S} \cdot X_{su} \cdot I_1$
6 Uptake of Amino Acids							Y _{aa}							$k_{m, aa} \cdot \frac{S_{aa}}{K_S + S_{aa}} \cdot X_{aa} \cdot I_1$
7 Uptake of LCFA								Y _{fa}						$k_{m, fa} \cdot \frac{S_{fa}}{K_S + S_{fa}} \cdot X_{fa} \cdot I_2$
8 Uptake of Valerate									Y _{c4}					$k_{m, c4} \cdot \frac{S_{va}}{K_S + S_{va}} \cdot X_{c4} \cdot \frac{1}{1 + S_{va}/S_{bu}} \cdot I_2$
9 Uptake of Butyrate									Y _{c4}					$k_{m, c4} \cdot \frac{S_{bu}}{K_S + S_{bu}} \cdot X_{c4} \cdot \frac{1}{1 + S_{va}/S_{bu}} \cdot I_2$
10 Uptake of Propionate										Y _{pro}				$k_{m, pr} \cdot \frac{S_{pro}}{K_S + S_{pro}} \cdot X_{pro} \cdot I_2$
11 Uptake of Acetate											Y _{ac}			$k_{m, ac} \cdot \frac{S_{ac}}{K_S + S_{ac}} \cdot X_{ac} \cdot I_3$
12 Uptake of Hydrogen												Y _{h2}		$k_{m, h2} \cdot \frac{S_{h2}}{K_S + S_{h2}} \cdot X_{h2} \cdot I_1$
13 Decay of X _{su}		1				-1								$k_{dec, Xsu} \cdot X_{su}$
14 Decay of X _{aa}		1					-1							$k_{dec, Xaa} \cdot X_{aa}$
15 Decay of X _{fa}		1						-1						$k_{dec, Xfa} \cdot X_{fa}$
16 Decay of X _{c4}		1							-1					$k_{dec, Xc4} \cdot X_{c4}$
17 Decay of X _{pro}		1								-1				$k_{dec, Xpro} \cdot X_{pro}$
18 Decay of X _{ac}		1									-1			$k_{dec, Xac} \cdot X_{ac}$
19 Decay of X _{h2}		1										-1		$k_{dec, Xh2} \cdot X_{h2}$
														Composites (kg COD·m ⁻³) Carbohydrates (kg COD·m ⁻³) Proteins (kg COD·m ⁻³) Lipids (kg COD·m ⁻³) Sugar degraders (kg COD·m ⁻³) Amino acid degraders (kg COD·m ⁻³) LCFA degraders (kg COD·m ⁻³) Valerate and butyrate degraders (kg COD·m ⁻³) Propionate degraders (kg COD·m ⁻³) Acetate degraders (kg COD·m ⁻³) Hydrogen degraders (kg COD·m ⁻³) Particulate inerts (kg COD·m ⁻³) Inhibition factors (3.7): $I_1 = I_{pH} \cdot I_{DN, lim}$ $I_2 = I_{pH} \cdot I_{DN, lim} \cdot I_{b_2}$ $I_3 = I_{pH} \cdot I_{DN, lim} \cdot I_{NH3, Xac}$

3-Données expérimentales et ADM1



Données expérimentales

ADM1

VS



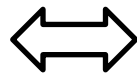
$$X_c + X_{ch} + X_{pr} + X_{li} + X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{c4} + X_{pro} + X_{ac} + X_{h2} + X_i + S_{aa} + S_{su} + S_{fa} + S_i$$

COD_{soluble}



$$S_{su} + S_{aa} + S_{fa} + S_{va} + S_{bu} + S_{pro} + S_{ac} + S_{h2} + S_i$$

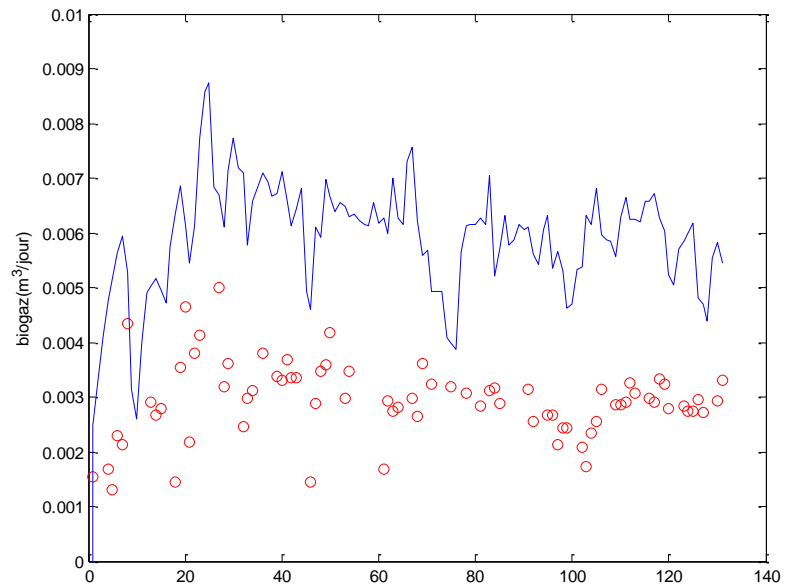
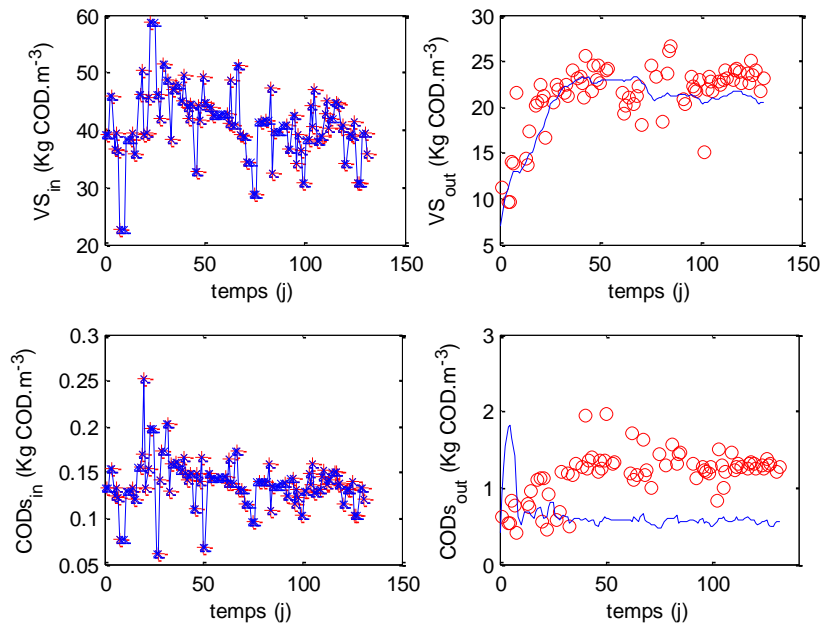
Biogaz



$$q_{gaz}$$

4- Simulation du modèle ADM1

Boues secondaires



Question

Comment peut-on coller les sorties de ADM1 aux sorties expérimentales?

Proposition

Essayer de jouer sur les paramètres **clés** du modèle ADM1 pour pouvoir le calibrer sur ces données

5- Etude de la sensibilité (RSF)

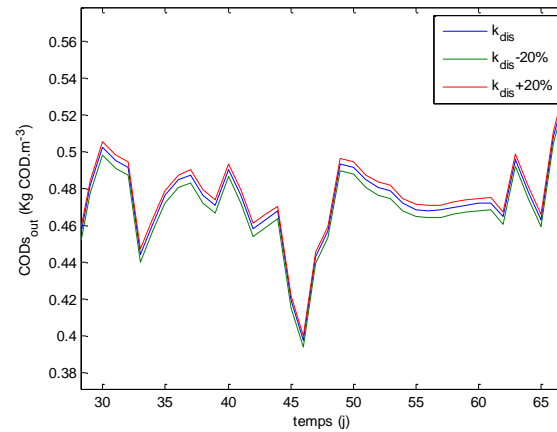
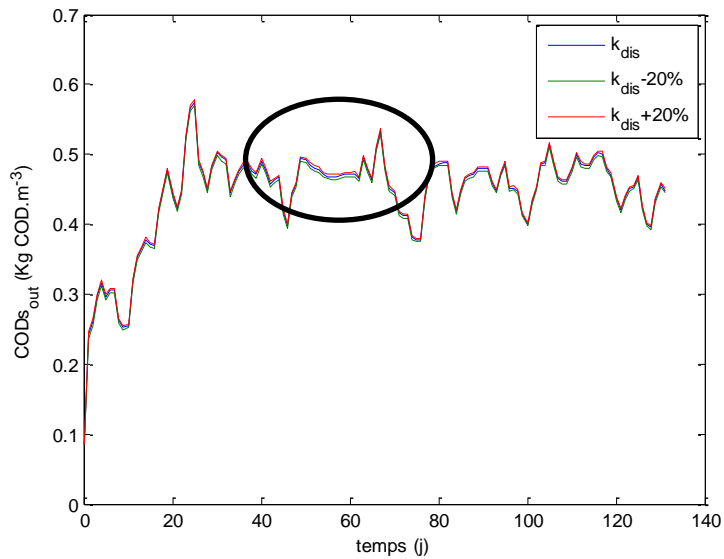
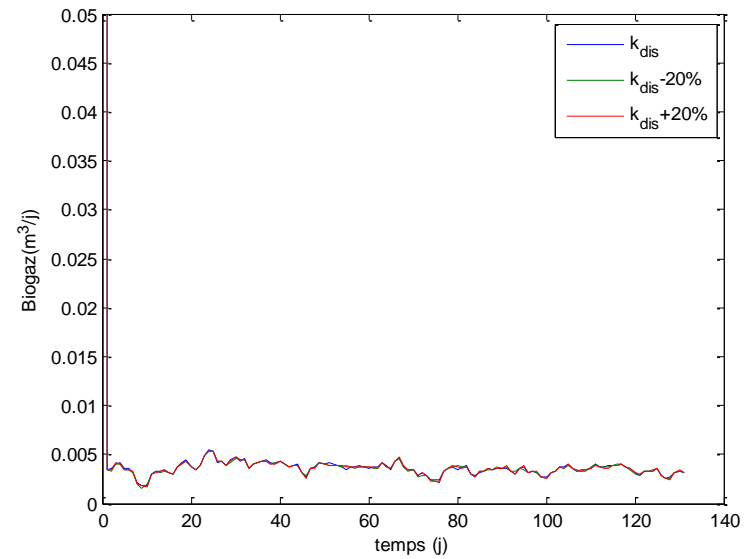
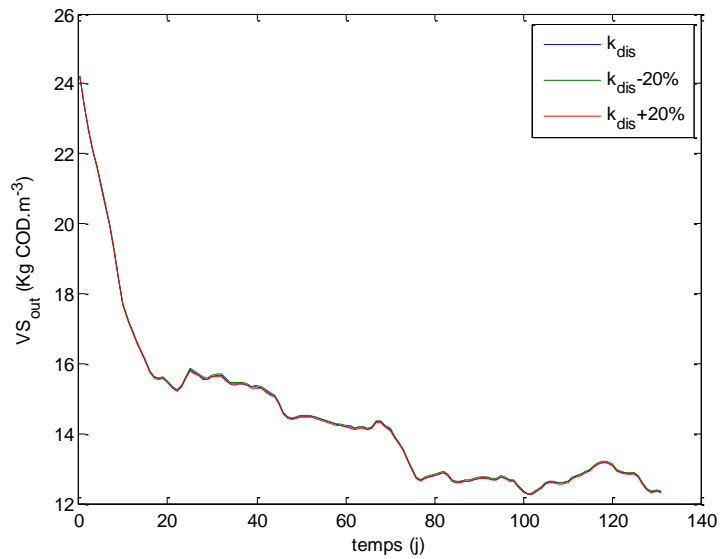
Proposée par (Petersen, 2002) , Relative Sensitive fonction est définie par :

$$RSF = \frac{p}{y(p)} \frac{y(p \mp \Delta p) - y(p)}{y(p)}$$

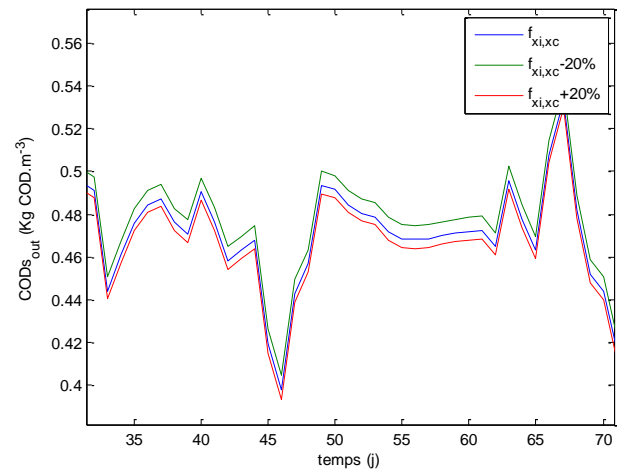
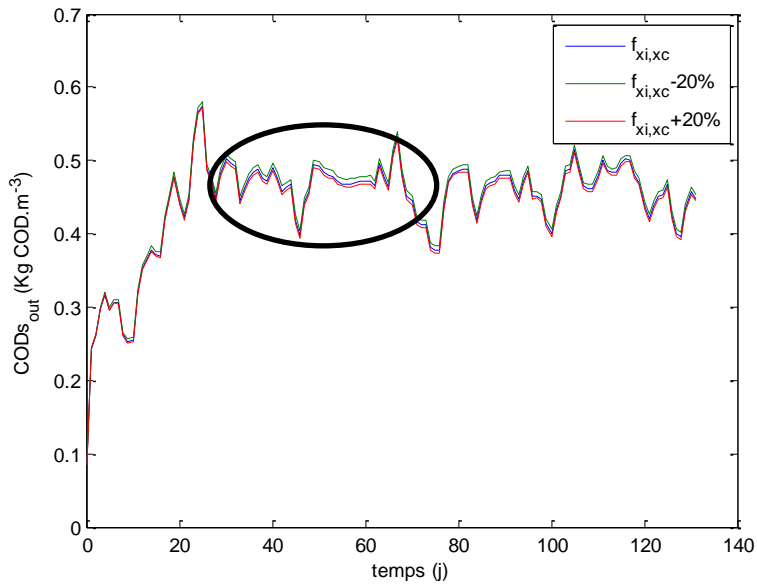
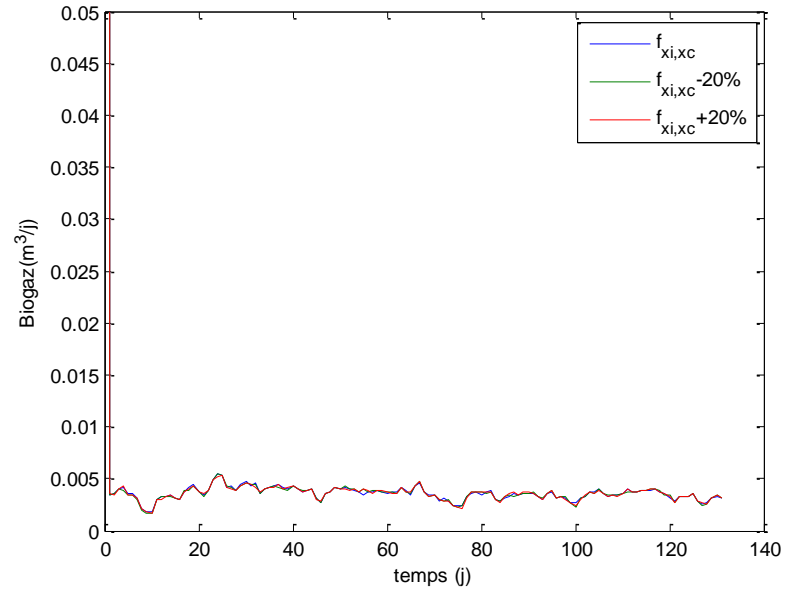
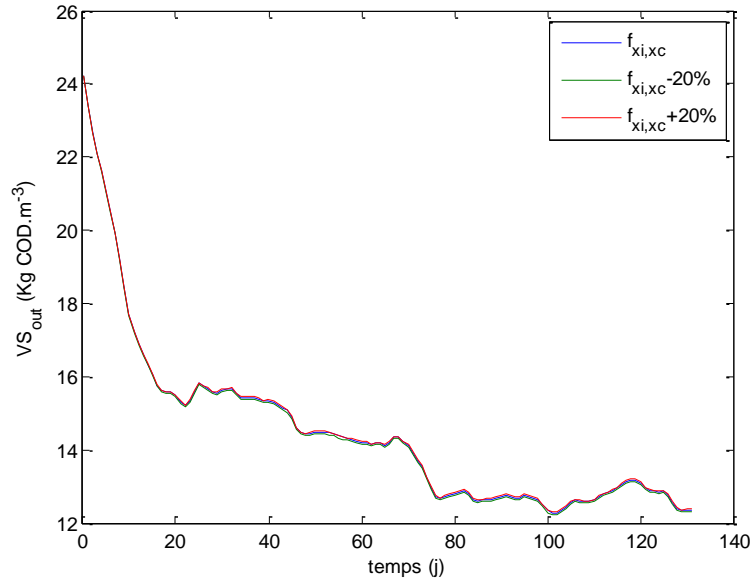
- $RSF < 0,25$: aucune influence « 0 »
- $0,25 < RSF < 1$: sensible « +/- »
- $1 < RSF < 2$: très sensible « ++/-- »
- $RSF > 2$: extrêmement sensible « +++/--- »

	VS	DCOsol	qgas	Xc	Spro
k_{dis}	0	+	0	---	0
$f_{xi,xc}$	0	-	-	-	0
$f_{si,xc}$	-	+	+	+	0
$k_{m,pr}$	0	-	+	-	--
$k_{m,ac}$	0	--	+	+	+++

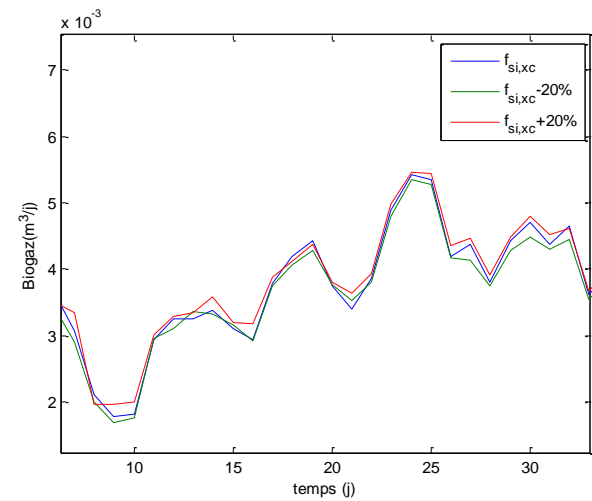
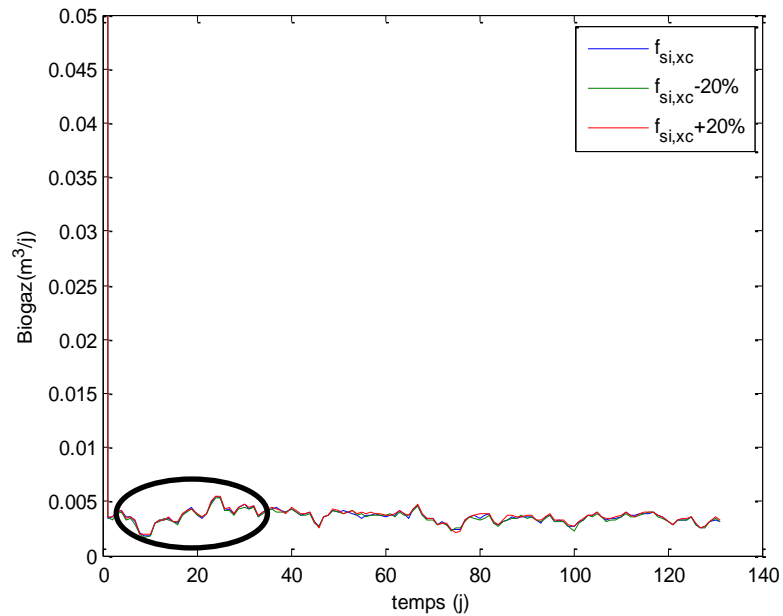
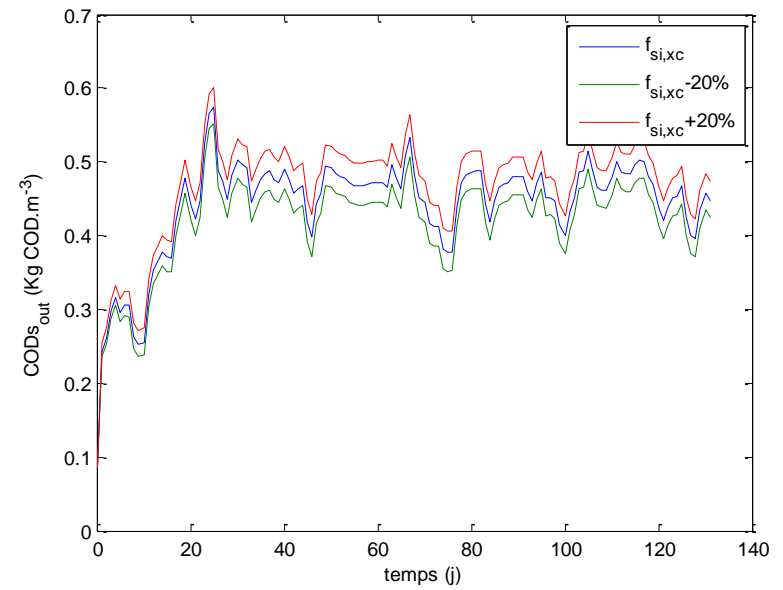
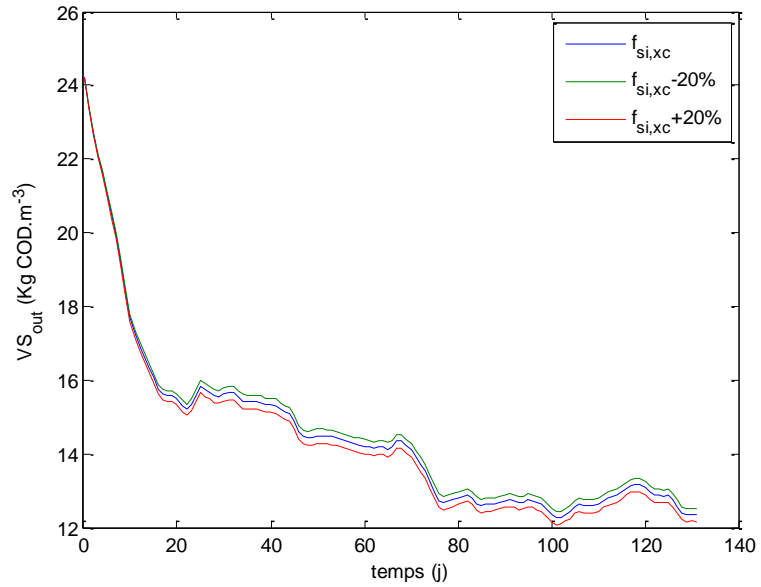
Influence de la variation du paramètre cinétique K_{dis}



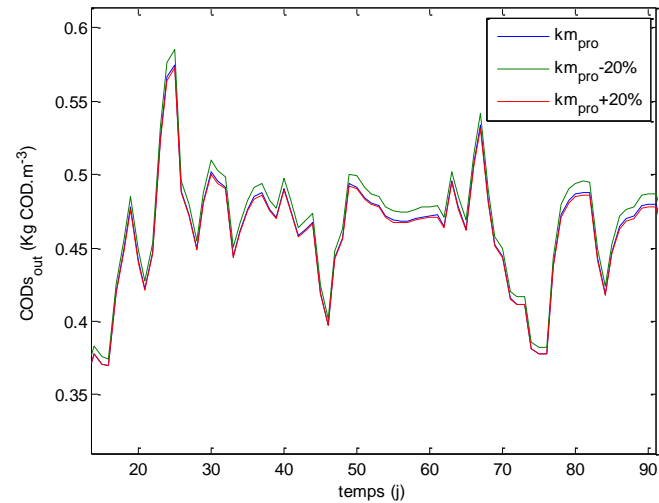
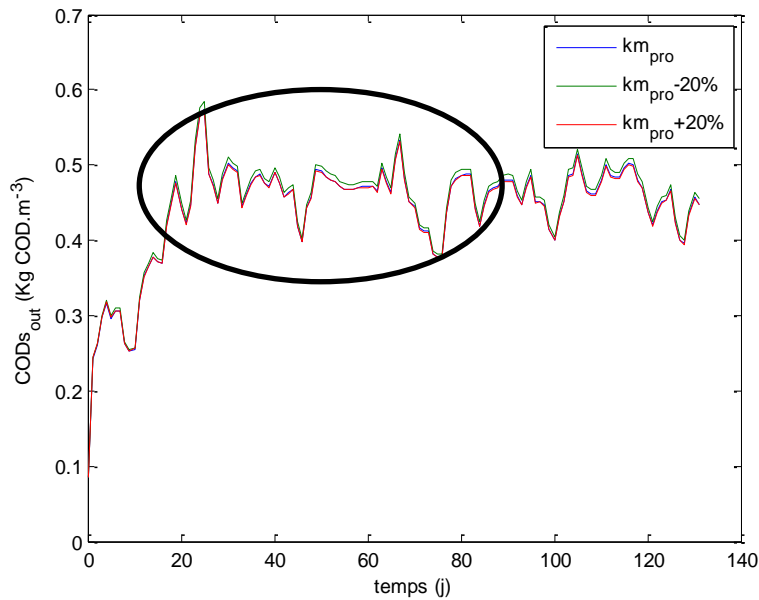
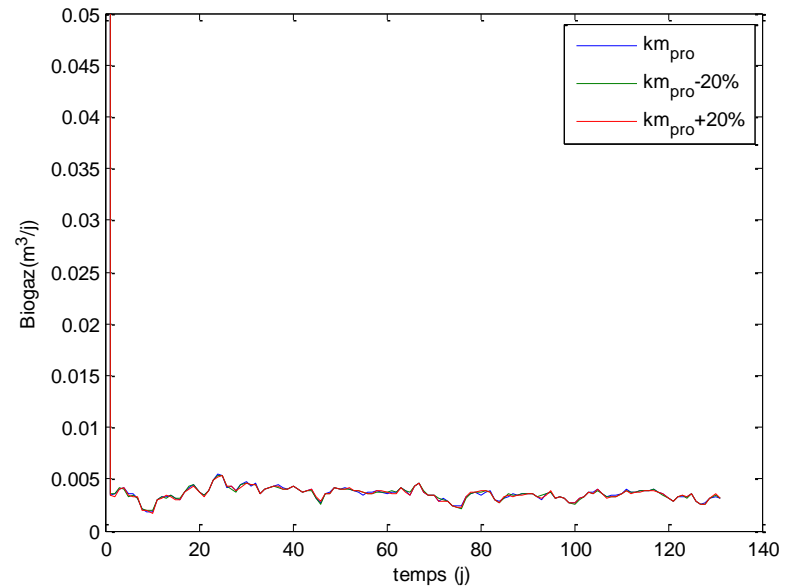
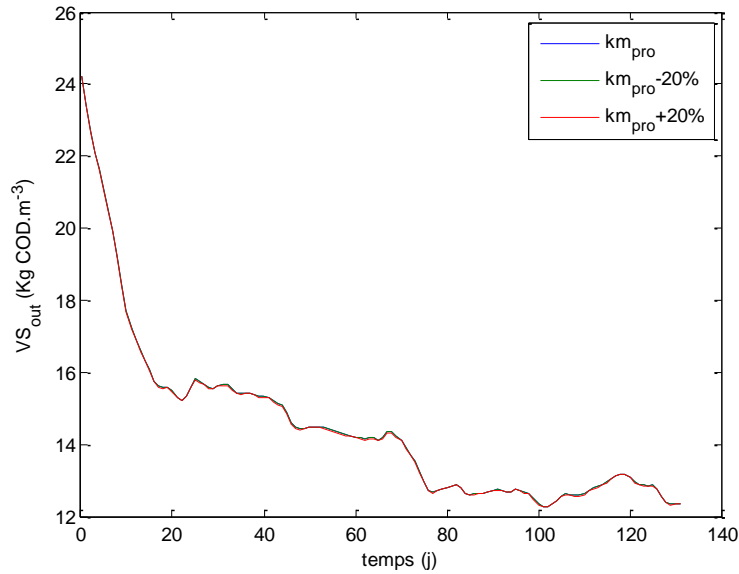
Influence de la variation du coefficient stœchiométrique $f_{xi,xc}$



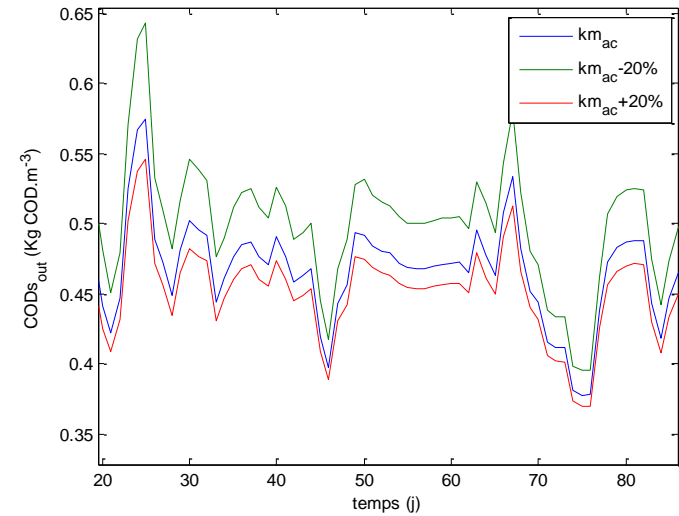
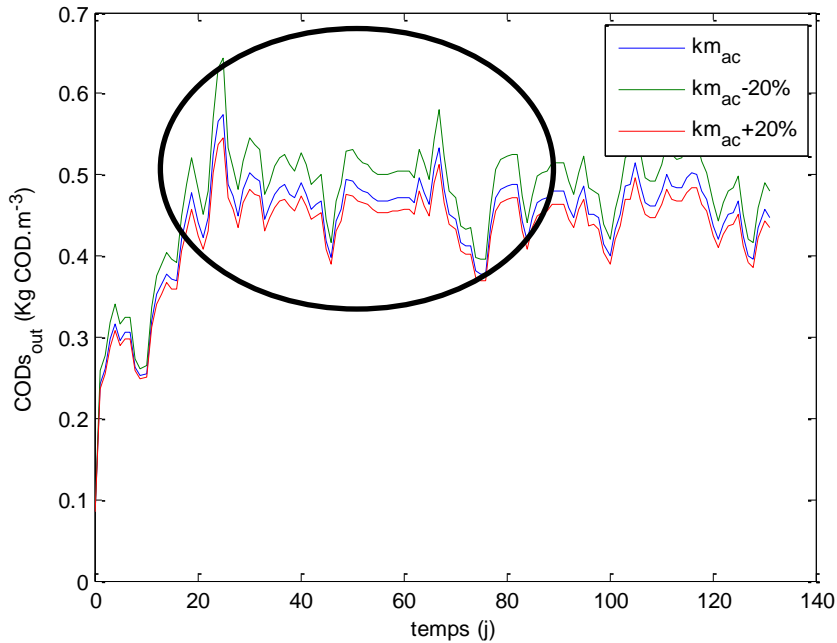
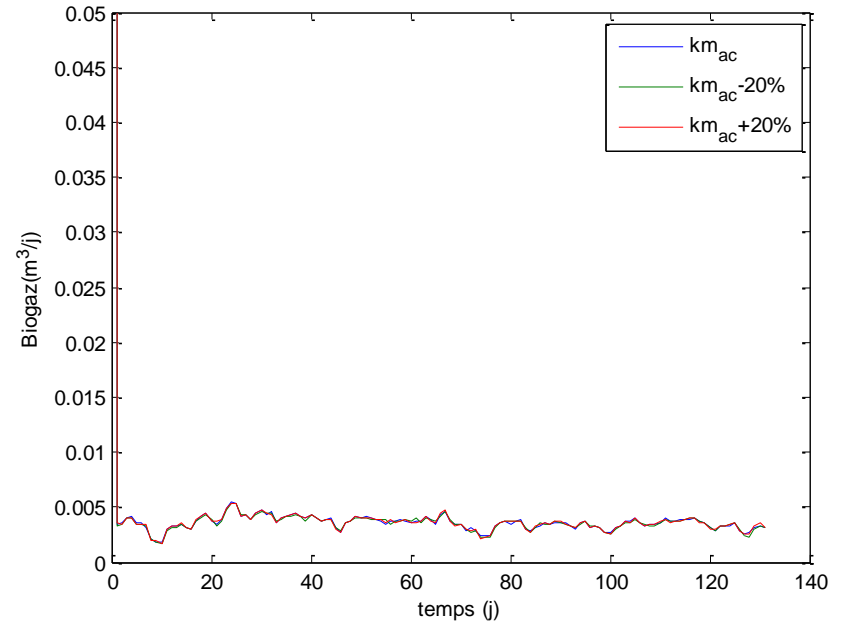
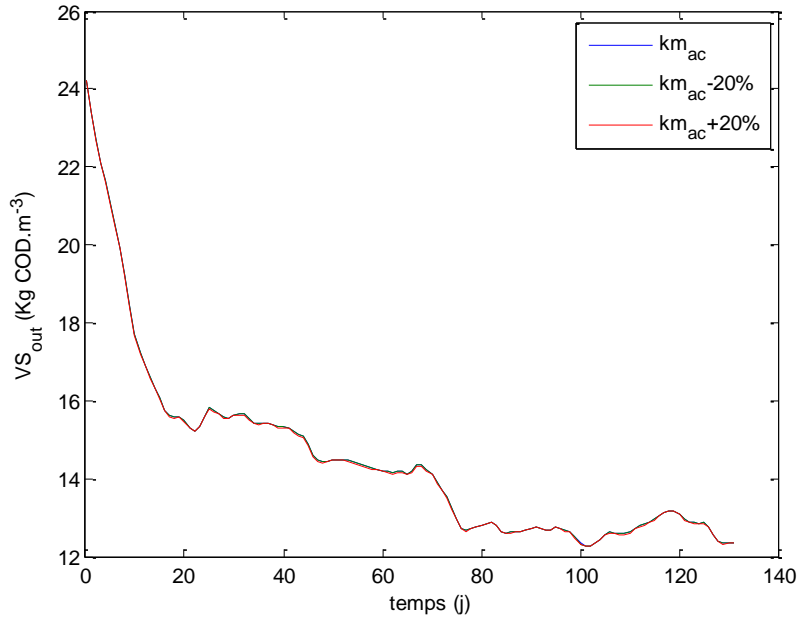
Influence de la variation du coefficient $f_{si,xc}$



Influence de la variation du coefficient cinétique $k_{m,pr}$



Influence de la variation du coefficient cinétique $k_{m,ac}$



6- Calage d'ADM1

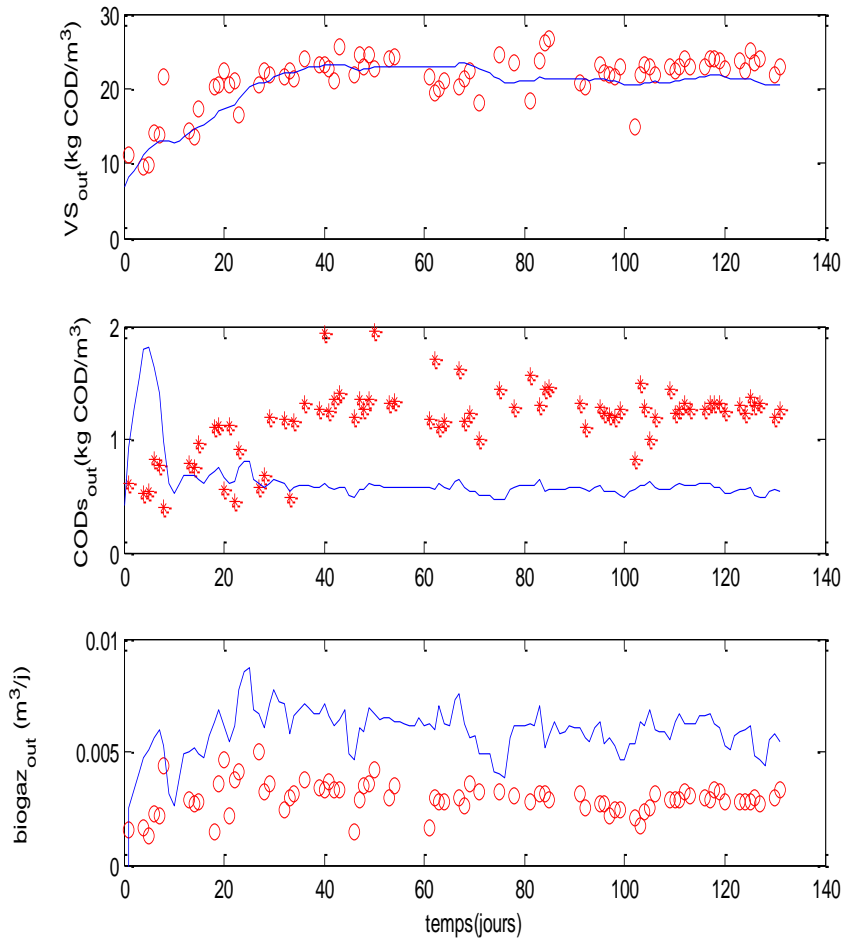
Comment?

Jouer sur les paramètres k_{dis} , $f_{xl,xc}$, $f_{si,xc}$, $k_{m,pro}$, $k_{m,ac}$ en basculant leur valeurs entre -50% et 190% de la valeur initiale définie dans ADM1 \longleftrightarrow **OPTIMISATION**

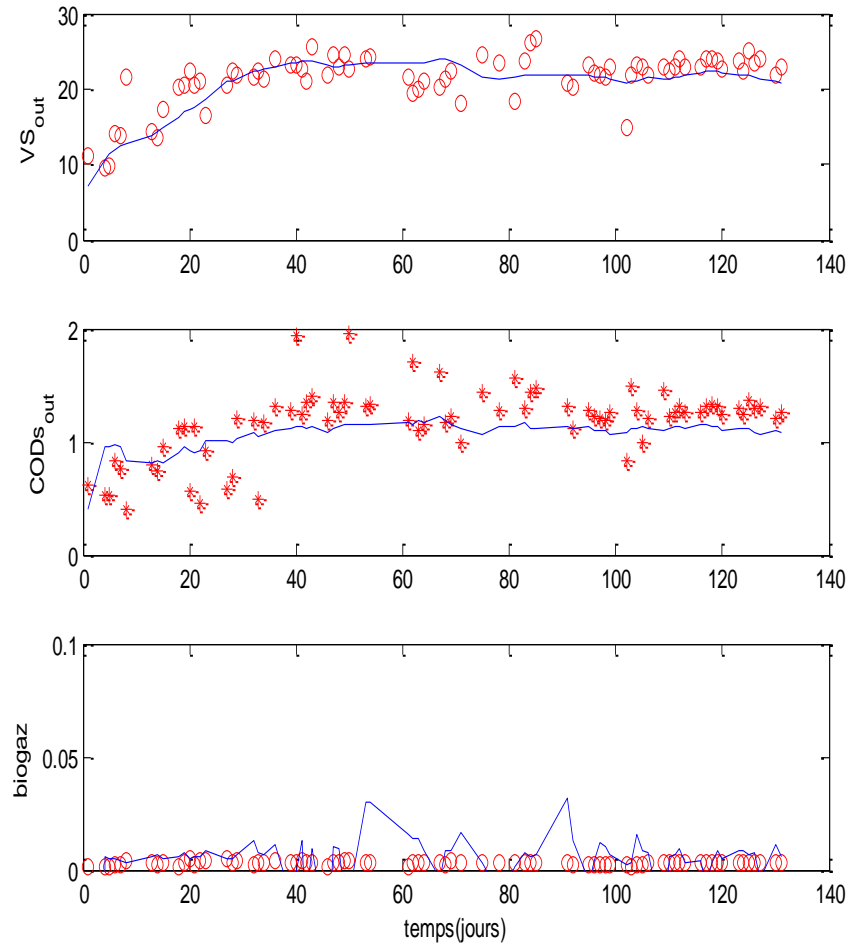
\longrightarrow par défaut on a

- $k_{dis} = 0.5000,$
- $f_{xl,xc} = 0.2000,$
- $f_{si,xc} = 0.1000,$
- $k_{m,pro} = 13,$
- $k_{m,ac} = 8,$

Optimisation : Boues Secondaires

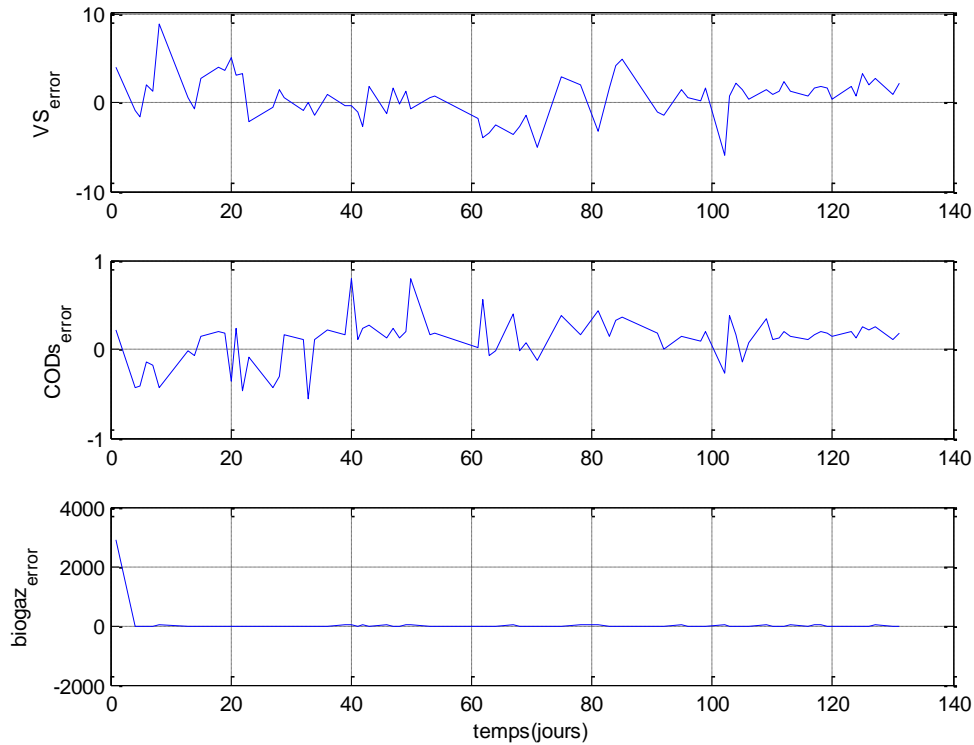


Avant optimisation



Après optimisation

Figures d'erreur

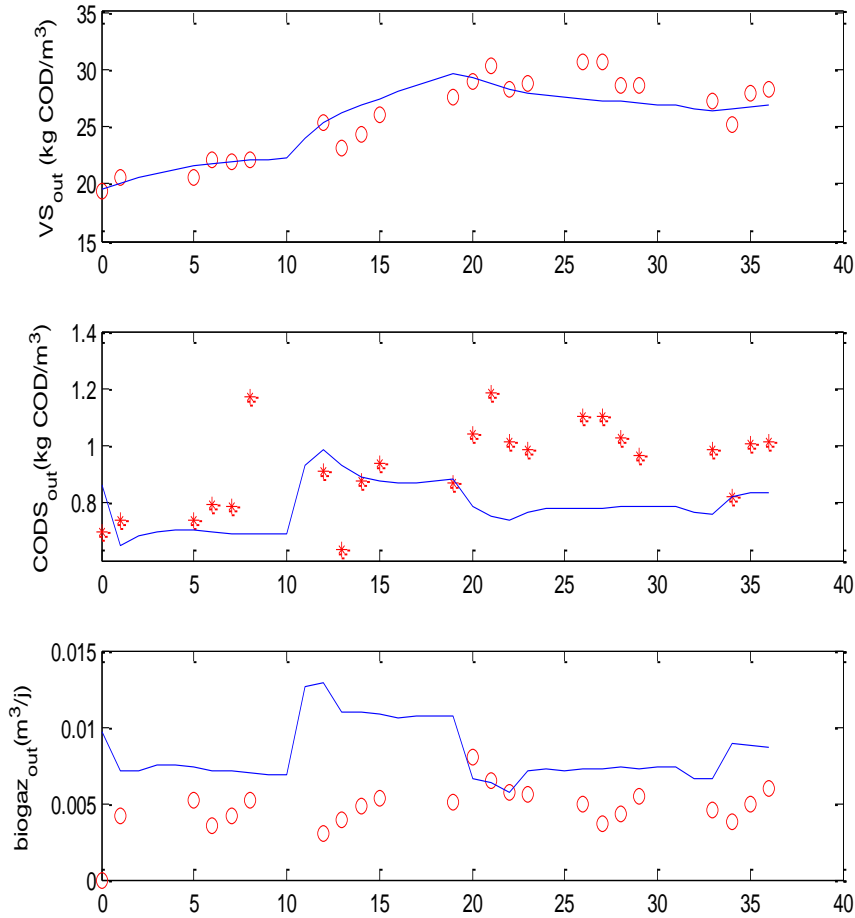


Avec $k_{dis} = 1.5869$, $f_{xl,xc} = 0.2016$, $f_{si,xc} = 0.3947$, $k_{m,pro} = 33,2065$, $k_{m,ac} = 22,5183$

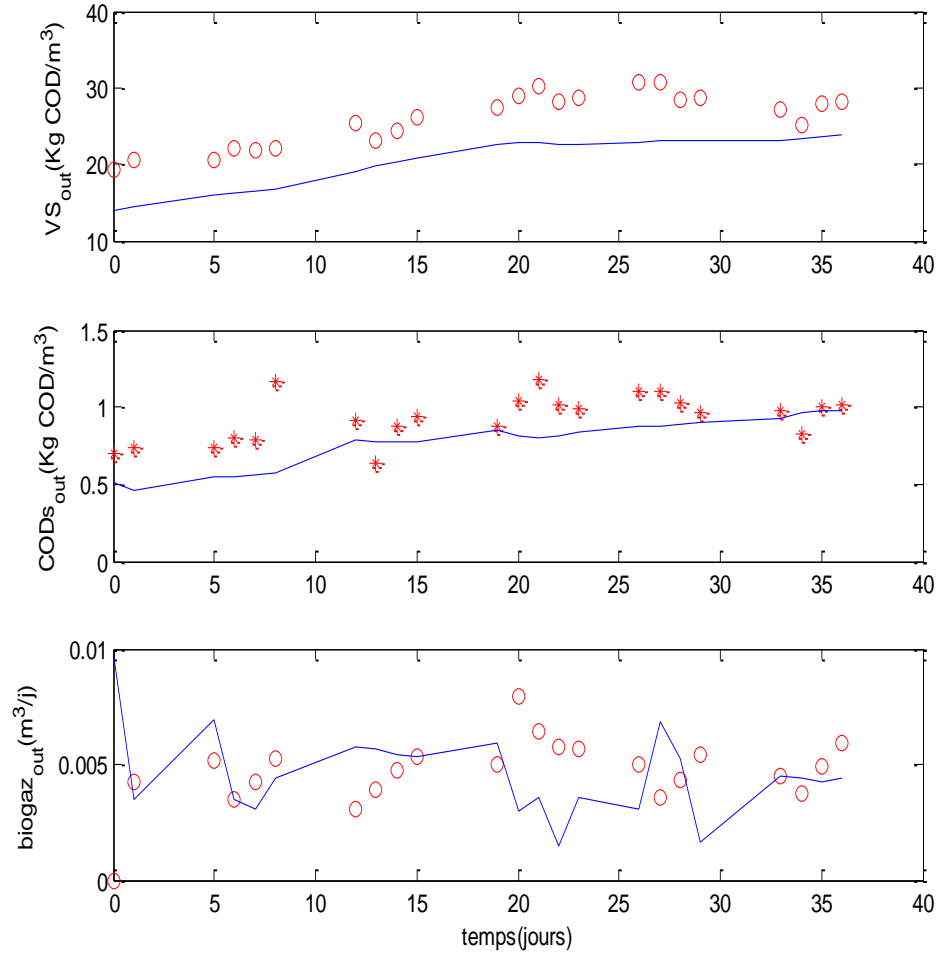
Observation

ADM1 et les données expérimentales collent bien **➡** Les paramètres sont optimaux

Optimisation : Boues Mixtes

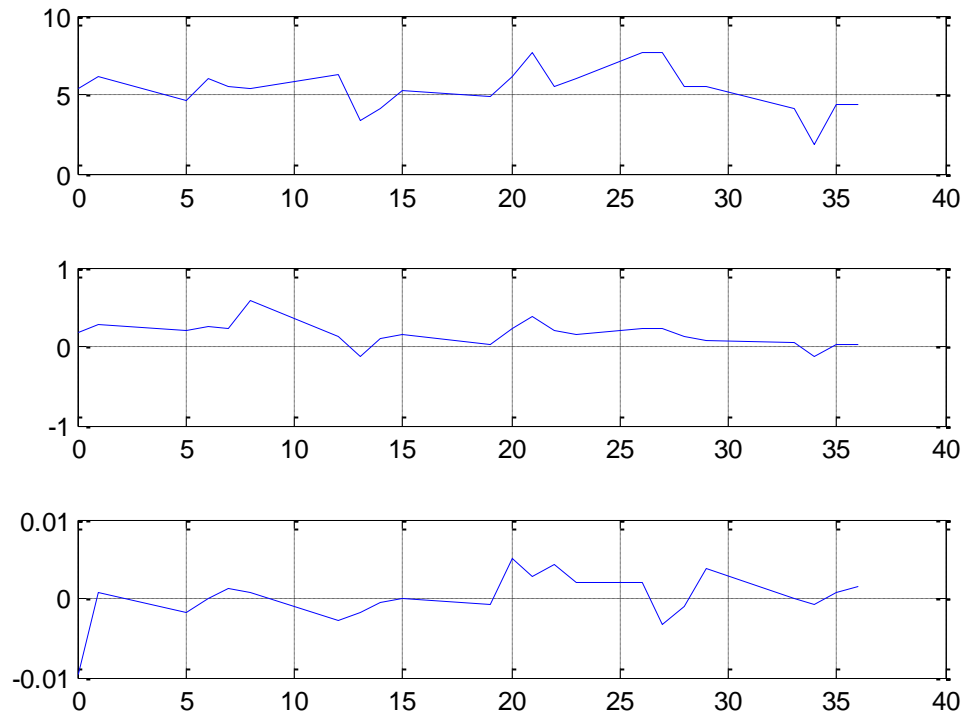


Avant optimisation



Après optimisation

Figures d'erreur



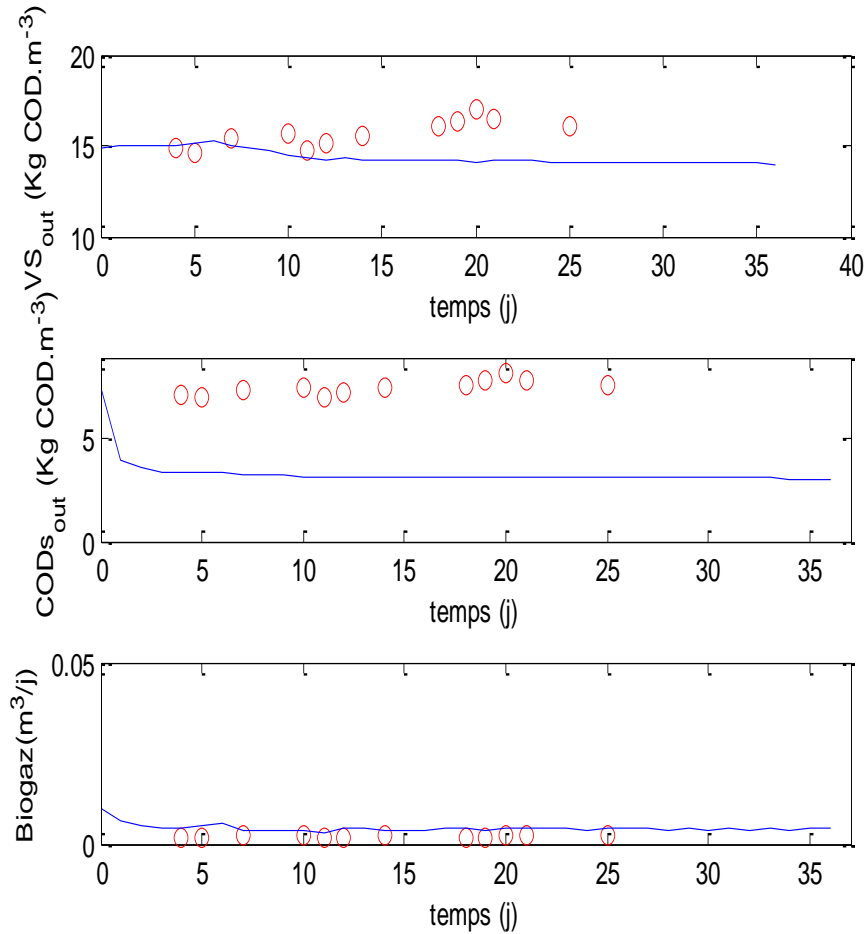
Avec $k_{dis} = 0.4430$, $f_{xl,xc} = 0.1898$, $f_{si,xc} = 0.2410$, $k_{m,pro} = 28.6213$, $k_{m,ac} = 20$

Observation

Les courbes ont la même allure mais elles ne collent pas parfaitement

➔ jouer sur d'autres paramètres ou augmenter encore le pourcentage

7-Validation du modèle

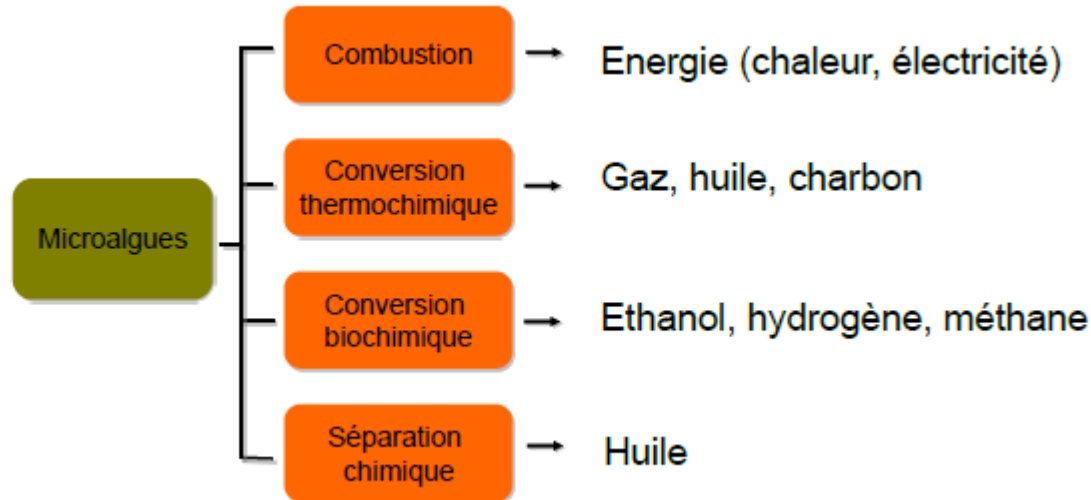


Partie II- Digestion anaérobie des micro Algues

Définition

Les micro algues sont des organismes microscopique à croissance très rapide et servent à produire le biodiesel ainsi que de nombreux sous produits valorisables

Avantages



Cas étudié (2)

ARTICLE

BIOTECHNOLOGY
and
BIOENGINEERING

Three-Reaction Model for the Anaerobic Digestion of Microalgae

Francis Mairet,^{1,2} Olivier Bernard,¹ Elliot Cameron,³ Monique Ras,⁴ Laurent Lardon,^{4,1} Jean-Philippe Steyer,^{4,1} Benoît Chachuat^{5,3}

¹BIOCORE-INRIA, BP93, 06902 Sophia-Antipolis Cedex, France;

telephone: +56 32 265 47 85; fax: +56 32 265 45 63; e-mail: francis.mairet@usm.cl

²Departamento de Matemática, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile

³Department of Chemical Engineering, McMaster University, Canada

⁴INRA, UR050, Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement, Avenue des Etangs, Narbonne, France

⁵Centre for Process Systems Engineering, Department of Chemical Engineering, Imperial College, London, UK

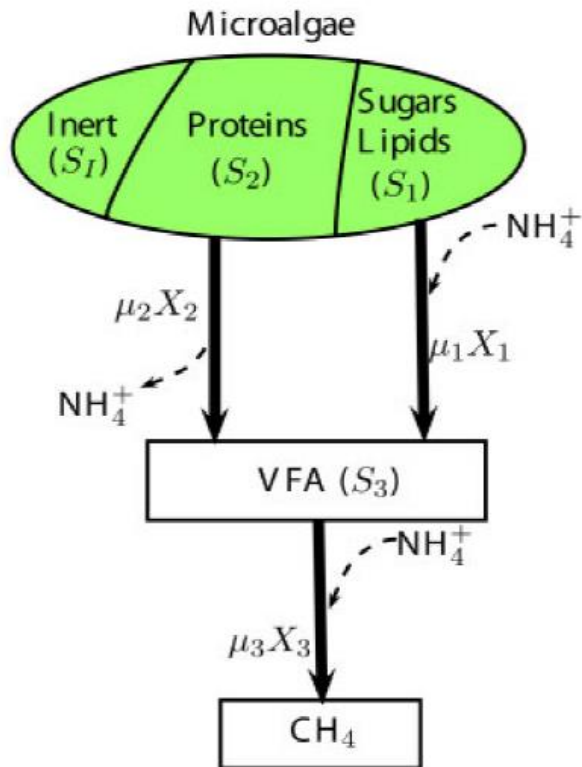
Received 4 August 2011; revision received 27 September 2011; accepted 30 September 2011

Published online 21 October 2011 in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com). DOI 10.1002/bit.23350

ABSTRACT: Coupling an anaerobic digester to a microalgal culture has received increasing attention as an alternative process for combined bioenergy production and depollution. In this article, a dynamic model for anaerobic digestion of microalgae is developed with the aim of improving the

management of large quantities of residual algal biomass along with the supply of large amounts of fertilizers. Not only does anaerobic digestion appear to be in an ideal position for addressing these two challenges, but it also presents encouraging economic and energetic performances

Microalgae Anaerobic Digestion model (MAD) (2)



$$\begin{aligned} \dot{S}_1 &= D(\beta_1 S_{in} - S_1) - \alpha_1 \mu_1 X_1 \\ \dot{S}_2 &= D(\beta_2 S_{in} - S_2) - \alpha_5 \mu_2 X_2 \\ \dot{S}_3 &= -D S_1 + \alpha_5 \mu_1 X_1 + \alpha_6 \mu_2 X_2 - \alpha_9 \mu_3 X_3 \\ \dot{X}_1 &= (\mu_1 - D) X_1 \\ \dot{X}_2 &= (\mu_2 - D) X_2 \\ \dot{X}_3 &= (\mu_3 - D) X_3 \\ \dot{N} &= D(N_{in} - N) - \alpha_2 \mu_1 X_1 + \alpha_7 \mu_2 X_2 - \alpha_{10} \mu_3 X_3 \\ \dot{C} &= D(C_{in} - C) + \alpha_4 \mu_1 X_1 + \alpha_8 \mu_2 X_2 + \alpha_{12} \mu_3 X_3 - \rho_{CO_2} \\ \dot{z} &= D(z_{in} - z) \\ \dot{S}_I &= D(\beta_I S_{in} - S_I) \\ \dot{P}_{CO_2} &= -P_{CO_2} \frac{q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{CO_2} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}} \\ \dot{P}_{CH_4} &= -P_{CH_4} \frac{q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{CH_4} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}} \end{aligned}$$

Avec $\mu_i(S_i, X_i) = \bar{\mu}_i \frac{S_i}{S_i + K_{S_i}} X_i, i = 1, 2$

et $\mu_3(S_3, \text{NH}_3) = \bar{\mu}_3 \frac{S_3}{S_3 + K_{S_3} + S_3^2/K_{I3}} \frac{K_{I_{NH_3}}}{K_{I_{NH_3}} + \text{NH}_3}$

Alcalinité

Somme des concentrations de toute les bases dans la solution (AGV^- , HCO_3^- , NH_3)

Dans MAD $z \approx [\text{Cat}] - [\text{An}] \rightarrow \dot{z} = D(z_{in} - z)$

Proposition

Prendre en considération l'influence du cycle du Nitrogène sur l'alcalinité

Car

90% de la composition des micro algues sont des PROTÉINES \rightarrow libération intense d'azote \rightarrow $[z]$ augmente

Donc $z \approx [\text{Cat}] - [\text{An}] \rightarrow \dot{z} = D(z_{in} - z)$

Plutôt

$$\dot{z} = D(z_{in} - z) + (K_1 N_{S_2} - N_{bac}) \mu_2(S_2) X_2 - N_{bac} \mu_1(S_1) X_1 - N_{bac} \mu_3(S_3) X_3 + k_{d,1} N_{bac} X_1 + k_{d,2} N_{bac} X_2 + k_{d,3} N_{bac} X_3$$

Modèle MAD modifié

$$\dot{S}_1 = D(\beta_1 S_{in} - S_1) - \alpha_1 \mu_1 X_1$$

$$\dot{S}_2 = D(\beta_2 S_{in} - S_2) - \alpha_5 \mu_2 X_2$$

$$\dot{S}_3 = -DS_3 + \alpha_5 \mu_1 X_1 + \alpha_6 \mu_2 X_2 - \alpha_9 \mu_3 X_3$$

$$\dot{X}_1 = (\mu_1 - D)X_1$$

$$\dot{X}_2 = (\mu_2 - D)X_2$$

$$\dot{X}_3 = (\mu_3 - D)X_3$$

$$\dot{N} = D(N_{in} - N) - \alpha_2 \mu_1 X_1 + \alpha_7 \mu_2 X_2 - \alpha_{10} \mu_3 X_3$$

$$\dot{C} = D(C_{in} - C) + \alpha_4 \mu_1 X_1 + \alpha_8 \mu_2 X_2 + \alpha_{12} \mu_3 X_3 - \rho_{CO_2}$$

$$\dot{z} = D(z_{in} - z) + (K_1 N_{S_2} - N_{bac}) \mu_2 (S_2) X_2 - N_{bac} \mu_1 (S_1) X_1 - N_{bac} \mu_3 (S_3) X_3 \\ + k_{d,1} N_{bac} X_1 + k_{d,2} N_{bac} X_2 + k_{d,3} N_{bac} X_3$$

$$\dot{S}_I = D(\beta_I S_{in} - S_I)$$

$$\dot{P}_{CO_2} = -P_{CO_2} \frac{q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{CO_2} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}}$$

$$\dot{P}_{CH_4} = -P_{CH_4} \frac{q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{CH_4} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}}$$

Positivité des variables

Nous avons

$$X_1(t) = X_1(0)e^{\int_0^t \mu_1(S_1(\tau))d\tau}$$

$$X_2(t) = X_2(0)e^{\int_0^t \mu_2(S_2(\tau))d\tau}$$

$$X_3(t) = X_3(0)e^{\int_0^t \mu_3(S_3(\tau))d\tau}$$

D'où

$$X_1(0) = 0 \Rightarrow X_1(t) = 0 \text{ et } X_2(0) = 0 \Rightarrow X_2(t) = 0 \text{ et } X_3(0) = 0 \Rightarrow X_3(t) = 0$$

$$X_1(0) > 0 \Rightarrow X_1(t) > 0 \text{ et } X_2(0) > 0 \Rightarrow X_2(t) > 0 \text{ et } X_3(0) > 0 \Rightarrow X_3(t) > 0$$

Et si nous annulons les variables dans le reste des équations on obtient

$$\dot{S}_1 = D\beta_1 S_{in} > 0$$

$$\dot{S}_2 = D\beta_2 S_{in} > 0$$

$$\dot{S}_3 = 0$$

$$\dot{N} = DN_{in} > 0$$

$$\dot{C} = DC_{in} > 0$$

$$\dot{z} = Dz_{in} > 0$$

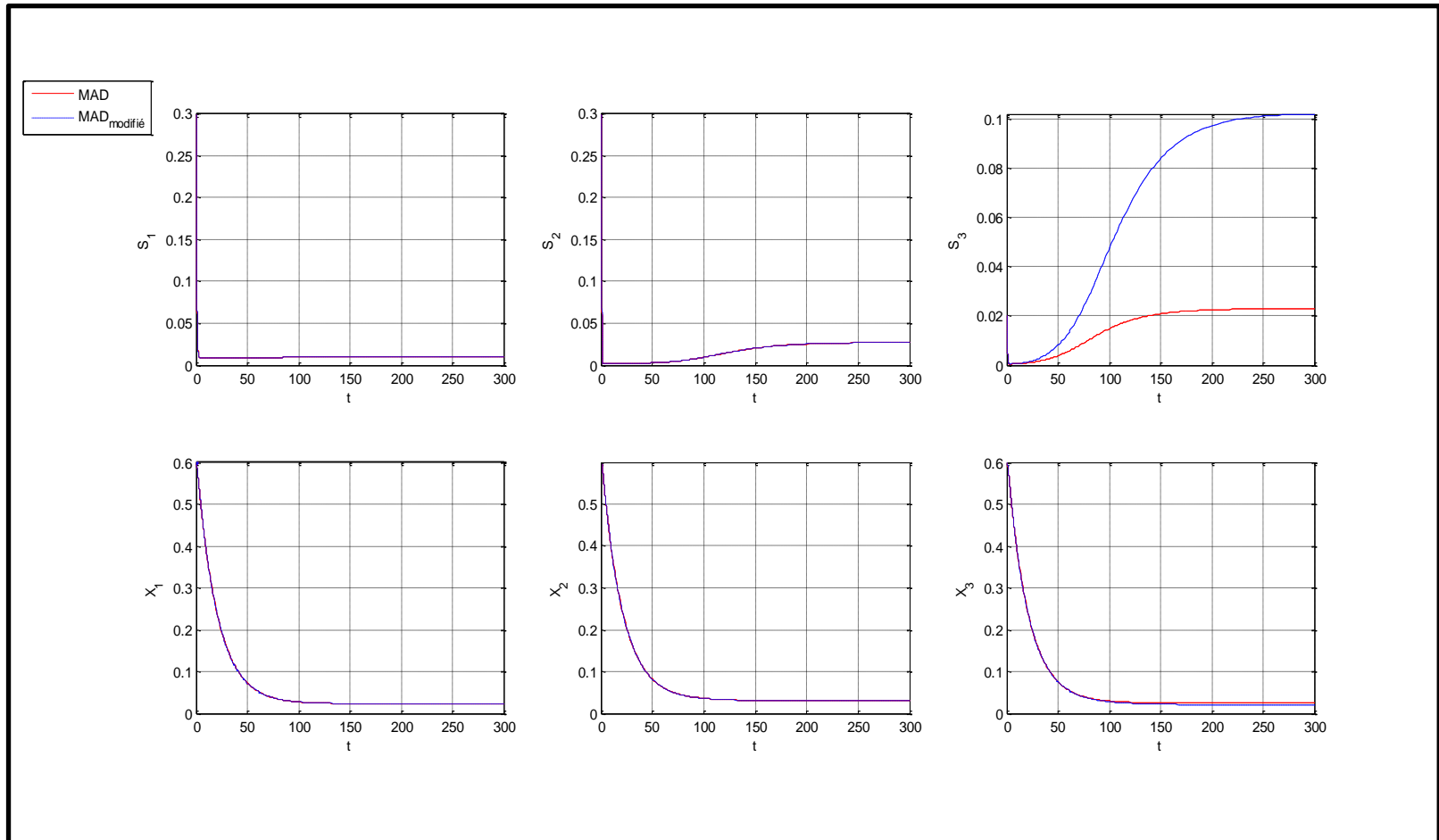
$$\dot{S}_I = D\beta_I S_{in} > 0$$

$$\dot{P}_{CO_2} = \rho_{CO_2} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}} > 0$$

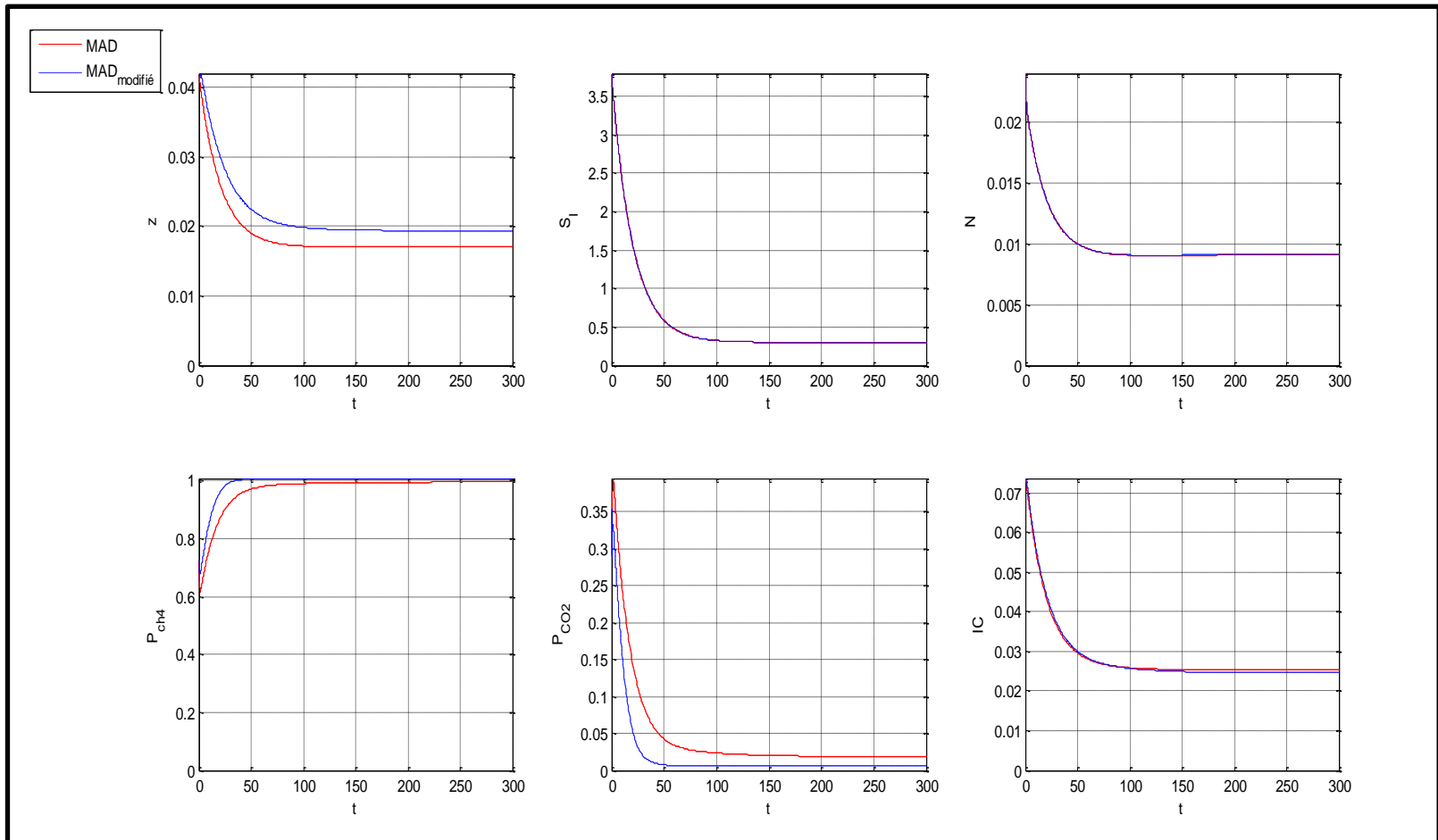
$$\dot{P}_{CH_4} = \rho_{CH_4} \frac{V_{liq} R T_{op}}{V_{gas}} > 0$$

$(\dot{S}_1, \dot{S}_2, \dot{S}_3, \dot{N}, \dot{C}, \dot{z}, \dot{S}_I, \dot{P}_{CO_2}, \dot{P}_{CO_2}) > 0$ Donc les variables du système sont positives

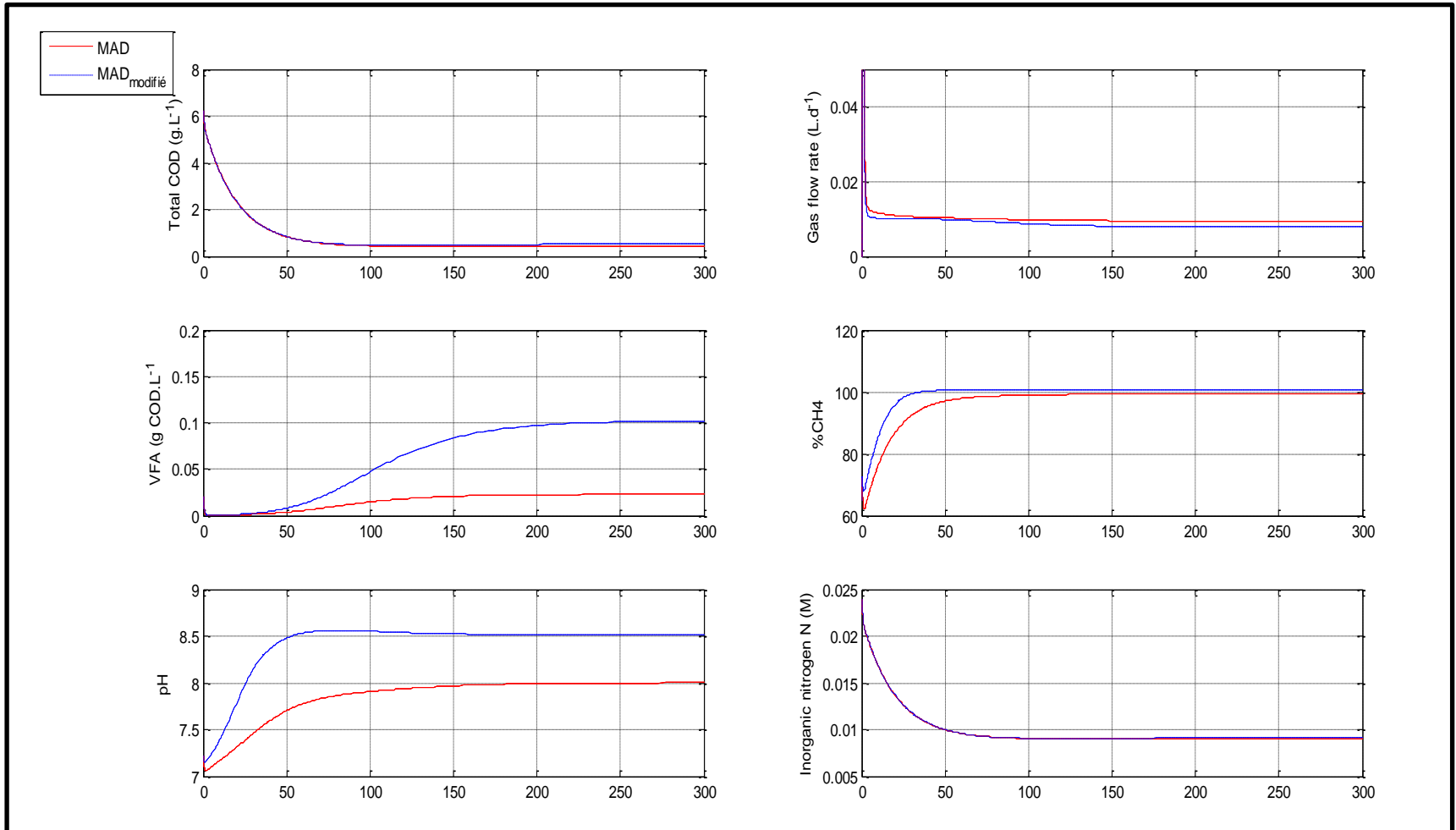
Simules MAD et MAD modifié



Simules MAD et MAD modifié



Simules MAD et MAD modifié



Estimation des paramètres du modèle MAD modifié

Paramètres stœchiométriques

Déduit de Bastone et al . ,(2002) et à partir des lois de conservation basés sur substrat, produit et biomasse

Paramètres cinétiques

A déduire du modèle ADM1 adapté à la Digestion Anaérobie des microAlgues (ADM1*) en utilisant la méthode d'association des variables proposée par Sonia et al. ,(2015).

Comment?

- ✓ Écrire les variables de MAD en fonction des variables du modèle ADM1*
- ✓ Générer un jeu de données à l'équilibre en jouant sur le taux de dilution d'ADM1*
- ✓ Ecrire les formules des taux de réaction à l'équilibre
- ✓ Appliquer la régression linéaire pour conclure les paramètres

ADM1* dédié au micro algues (3)

Component →	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Rate (kg COD·m ⁻³ ·d ⁻¹)
Process ↓		S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	S _{su}	f _{1,bae}
1 Disintegration														$k_{dis} \cdot X_{su}$
2 Hydrolysis Carbohydrates	1													$k_{hyd,ch} \cdot X_{ch}$
3 Hydrolysis of Proteins		1												$k_{hyd,pr} \cdot X_{pr}$
4 Hydrolysis of Lipids			1-f _{li}	f _{li}										$k_{hyd,li} \cdot X_{li}$
5 Uptake of Sugars		-1				(1-Y _{su})·f _{su,ss}	(1-Y _{su})·f _{su,ss}	(1-Y _{su})·f _{su,ss}	(1-Y _{su})·f _{su,ss}		$-\sum_{i=1,9,11-24} C_i V_{i,5}$	-(Y _{su})·N _{bae}		$k_{m,ss} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_1$
6 Uptake of Amino Acids			-1		(1-Y _{su})·f _{su,aa}	(1-Y _{su})·f _{su,aa}	(1-Y _{su})·f _{su,aa}	(1-Y _{su})·f _{su,aa}	(1-Y _{su})·f _{su,aa}		$-\sum_{i=1,9,11-24} C_i V_{i,6}$	$\frac{N_{su}}{(Y_{su})N_{bae}}$		$k_{m,aa} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_1$
7 Uptake of LCFA				-1				(1-Y _{su})·0.7	(1-Y _{su})·0.3				-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,li} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_2$
8 Uptake of Valerate					-1		(1-Y _{su})·0.54	(1-Y _{su})·0.31	(1-Y _{su})·0.15				-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,v} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot \frac{1}{1 + S_{su}/S_{v,8}} \cdot I_2$
9 Uptake of Butyrate						-1		(1-Y _{su})·0.8	(1-Y _{su})·0.2				-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,b} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot \frac{1}{1 + S_{su}/S_{b,9}} \cdot I_2$
10 Uptake of Propionate							-1	(1-Y _{su})·0.57	(1-Y _{su})·0.43		$-\sum_{i=1,9,11-24} C_i V_{i,10}$		-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,p} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_2$
11 Uptake of Acetate								-1		(1-Y _{su})	$-\sum_{i=1,9,11-24} C_i V_{i,11}$		-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,ac} \cdot \frac{S_{su}}{K_s + S_{su}} \cdot X_{su} \cdot I_1$
12 Uptake of Hydrogen									-1	(1-Y _{su})	$-\sum_{i=1,9,11-24} C_i V_{i,12}$		-(Y _{su})·N _{bae}	$k_{m,h_2} \cdot \frac{S_{h_2}}{K_s + S_{h_2}} \cdot X_{su} \cdot I_1$
13 Decay of X _{su}														$k_{dec,su} \cdot X_{su}$
14 Decay of X _{aa}														$k_{dec,aa} \cdot X_{aa}$
15 Decay of X _{li}														$k_{dec,li} \cdot X_{li}$
16 Decay of X _{C4}														$k_{dec,C4} \cdot X_{C4}$
17 Decay of X _{pro}														$k_{dec,pro} \cdot X_{pro}$
18 Decay of X _{ac}														$k_{dec,ac} \cdot X_{ac}$
19 Decay of X _{h2}														$k_{dec,h_2} \cdot X_{h_2}$
		Monosaccharides (kg COD·m ⁻³)	Amino Acids (kg COD·m ⁻³)	Long chain fatty acids (kg COD·m ⁻³)	Total valerate (kg COD·m ⁻³)	Total butyrate (kg COD·m ⁻³)	Total propionate (kg COD·m ⁻³)	Total acetate (kg COD·m ⁻³)	Hydrogen gas (kg COD·m ⁻³)	Methane gas (kg COD·m ⁻³)	Inorganic Carbon (kg·mole C·m ⁻³)	Inorganic nitrogen (kg·mole N·m ⁻³)	Soluble inerts (kg COD·m ⁻³)	Inhibition factors (3.7): I ₁ = I _{pH} · I _{N,lim} I ₂ = I _{pH} · I _{N,lim} · I _{h_2} I ₃ = I _{pH} · I _{N,lim} · I _{NH3,acc}

Substrate	Rate	Original ADM1	Modified ADM1
Carbohydrate	ρ_2	$= k_{hyd,ch} X_{ch}$	$= k_{hyd,ch}^* \frac{X_{ch}}{K_{S,ch} X_{su} + X_{ch}} X_{su}$
Protein	ρ_3	$= k_{hyd,pr} X_{pr}$	$= k_{hyd,pr}^* \frac{X_{pr}}{K_{S,pr} X_{su} + X_{pr}} X_{su}$
Lipid	ρ_4	$= k_{hyd,li} X_{li}$	$= k_{hyd,li}^* \frac{X_{li}}{K_{S,l} X_{li} + X_{li}} X_{li}$

³ Francis M. and al. , Modeling Anaerobic Digestion of Microalgae using ADM1,(2011), 415-425.

Association des variables ADM1*-MAD modifié

Variable	Modèle	ADM1	Conversion
S_1 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	$S_{su}, S_{fa}, X_c, X_{ch}, X_{li}$ (kg COD/m ³)	$S_{su} + S_{fa} + X_c + X_{ch} + X_{li}$
S_2 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	S_{aa}, X_{pr} (kg COD/m ³)	$S_{aa} + X_{pr}$
S_3 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	$S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, S_{ac}$ (kg COD/m ³)	$\frac{S_{va}}{208} + \frac{S_{bu}}{160} + \frac{S_{pro}}{112} + \frac{S_{ac}}{64}$
X_1 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	X_{su}, X_{fa} (kg COD/m ³)	$X_{su} + X_{fa}$
X_2 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	X_{aa} (kg COD/m ³)	—
X_3 (g COD/l)	$MAD_{modifié}$	$X_{c4}, X_{pro}, X_{ac}, X_{h2}$ (kg COD/m ³)	$X_{c4} + X_{pro} + X_{ac} + X_{h2}$

Association des variables ADM1*-MAD modifié

Variable	Modèle	ADM1	Conversion
$N(M)$	$MAD_{modifié}$	S_{in} (kg-mole.N/m ³)	—
$C(M)$	$MAD_{modifié}$	S_{ic} (kg-mole.C/m ³)	—
$z(M)$	$MAD_{modifié}$	$S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, S_{ac}$ $S_{hco_3^-}, S_{h^+},$ S_{OH^-}, S_{NH_3} (?)	$\frac{S_{va^-}}{208} - \frac{S_{bu^-}}{160} - \frac{S_{pro^-}}{112} - \frac{S_{ac^-}}{64} -$ $S_{hco_3^-} + S_{h^+} + S_{OH^-} + S_{NH_4}$
$P_{CO_2}(bar)$	$MAD_{modifié}$	$P_{gas,co2}$ (bar)	—
$P_{CH_4}(bar)$	$MAD_{modifié}$	$P_{gas,ch4}$ (bar)	—
$S_I(g\ COD/l)$	$MAD_{modifié}$	S_i, X_I (kg COD/m ³)	$S_i + X_I$

Données d'ADM1* générées à l'équilibre

Qin	HRT_MAD	S1	S2	S3	X1	X2	X3	NH3	Ph	D=1/HRT	X1/S1	X2/S2	1/S3	NH3/S3
2,00E-04	5	6,4489	20,5189	0,0035	0,4244	0,0145	0,2898	2,79E-05	6,5493	0,2	0,06580967	0,00070667	285,714286	7,97E-03
1,25E-04	8	1,7368	20,5232	0,0019	0,6644	0,0209	0,4963	2,09E-05	6,5987	0,125	0,38254261	0,00101836	526,315789	1,10E-02
1,00E-04	10	1,0439	20,4283	0,0014	0,6788	0,0298	0,5198	2,46E-05	6,6261	0,1	0,65025386	0,00145876	714,285714	1,76E-02
7,69E-05	13	0,7341	19,6673	0,0011	0,6626	0,0806	0,5605	6,06E-05	6,7298	0,07692308	0,90260183	0,00409817	909,090909	5,51E-02
6,67E-05	15	0,6634	11,1011	0,0016	0,6523	0,6141	1,0819	0,0012	7,2213	0,06666667	0,98326801	0,05531884	625	7,50E-01
6,25E-05	16	0,6449	6,0854	0,0024	0,6476	0,9143	1,3749	2,40E-03	7,3628	0,0625	1,0041867	0,15024485	416,666667	1,00E+00
5,88E-05	17	0,6184	4,1148	0,0028	0,6413	1,0214	1,476	0,003	7,4083	0,05882353	1,03703105	0,24822592	357,142857	1,07E+00
5,00E-05	20	0,5443	2,0799	0,0029	0,6204	1,0999	1,5393	0,0037	7,4551	0,05	1,1398126	0,5288235	344,827586	1,28E+00

Identification des paramètres cinétiques à partir d'ADM1

A l'équilibre on a

$$\mu_1(S_1) = D$$

$$\mu_2(S_2) = D$$

$$\mu_3(S_3) = D$$

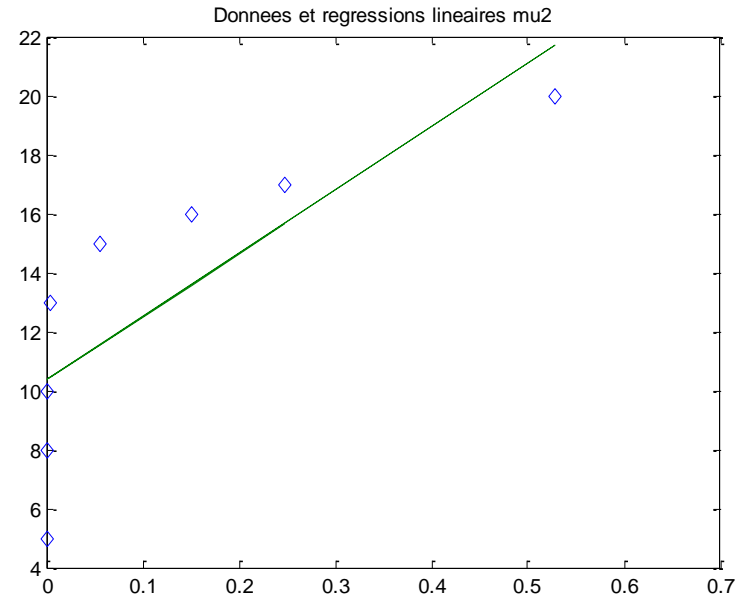
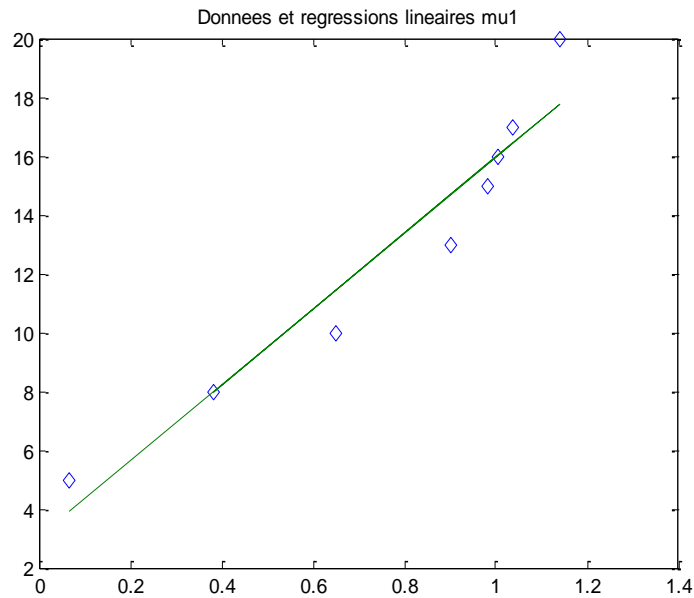
Ce qui nous donne

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{m_1} + \frac{K_{S1}}{m_1} \frac{\bar{X}_1}{S_1}$$

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{m_2} + \frac{K_{S2}}{m_2} \frac{\bar{X}_2}{S_2}$$

$$\frac{1}{D} = \frac{1}{m_3} + \bar{S}_3 \left(\frac{K_{I3}}{m_3} + \frac{1}{m_3 K_{INH3} K_{I3}} \right) + \frac{1}{\bar{S}_3} \frac{K_{S3}}{m_3} + \frac{\bar{NH}_3}{\bar{S}_3} \frac{K_{S3}}{m_3 K_{INH3}} + \bar{NH}_3 \frac{1}{m_3 K_{INH3}}$$

Résultats de régression

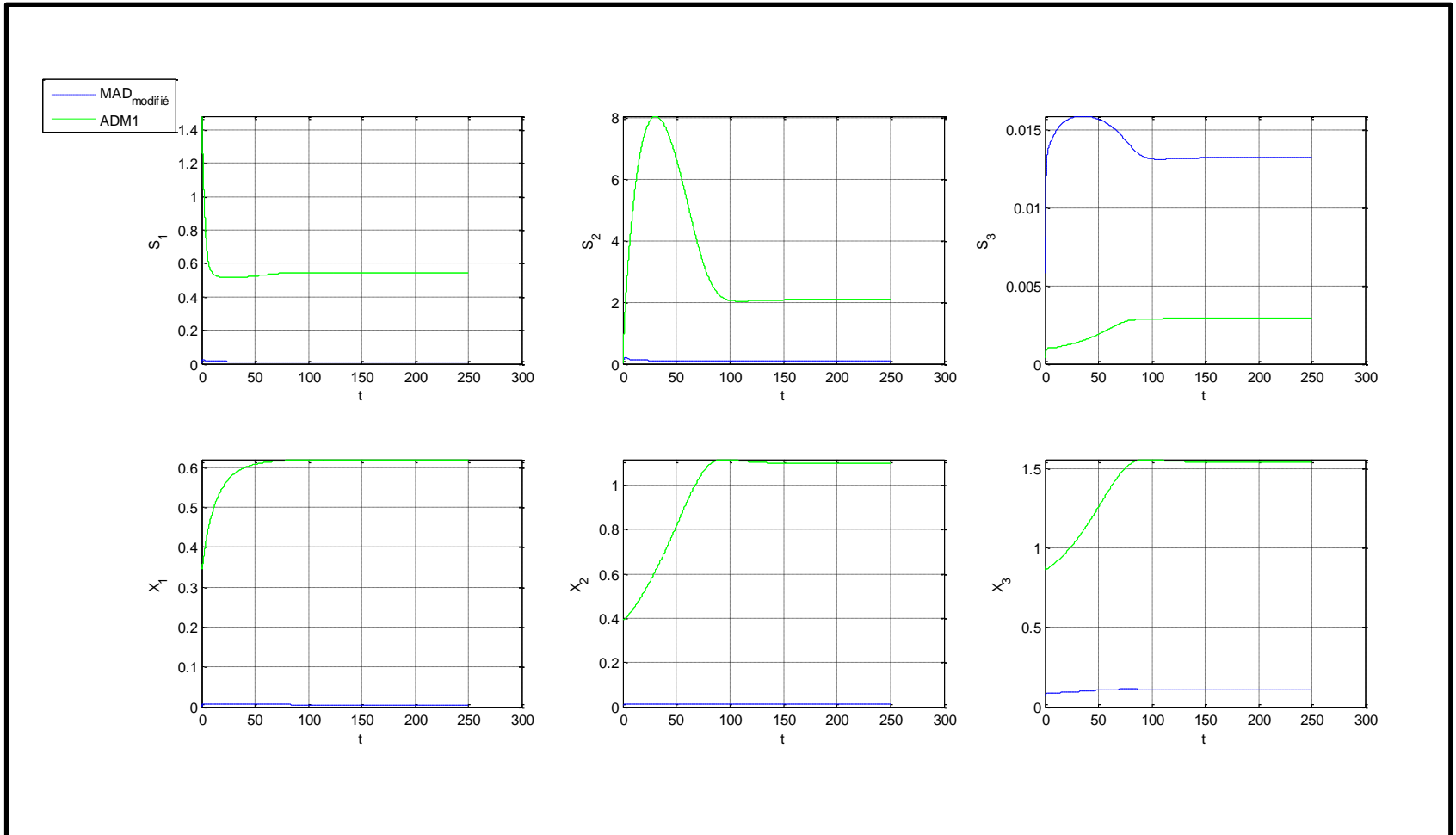


Paramètres déduit

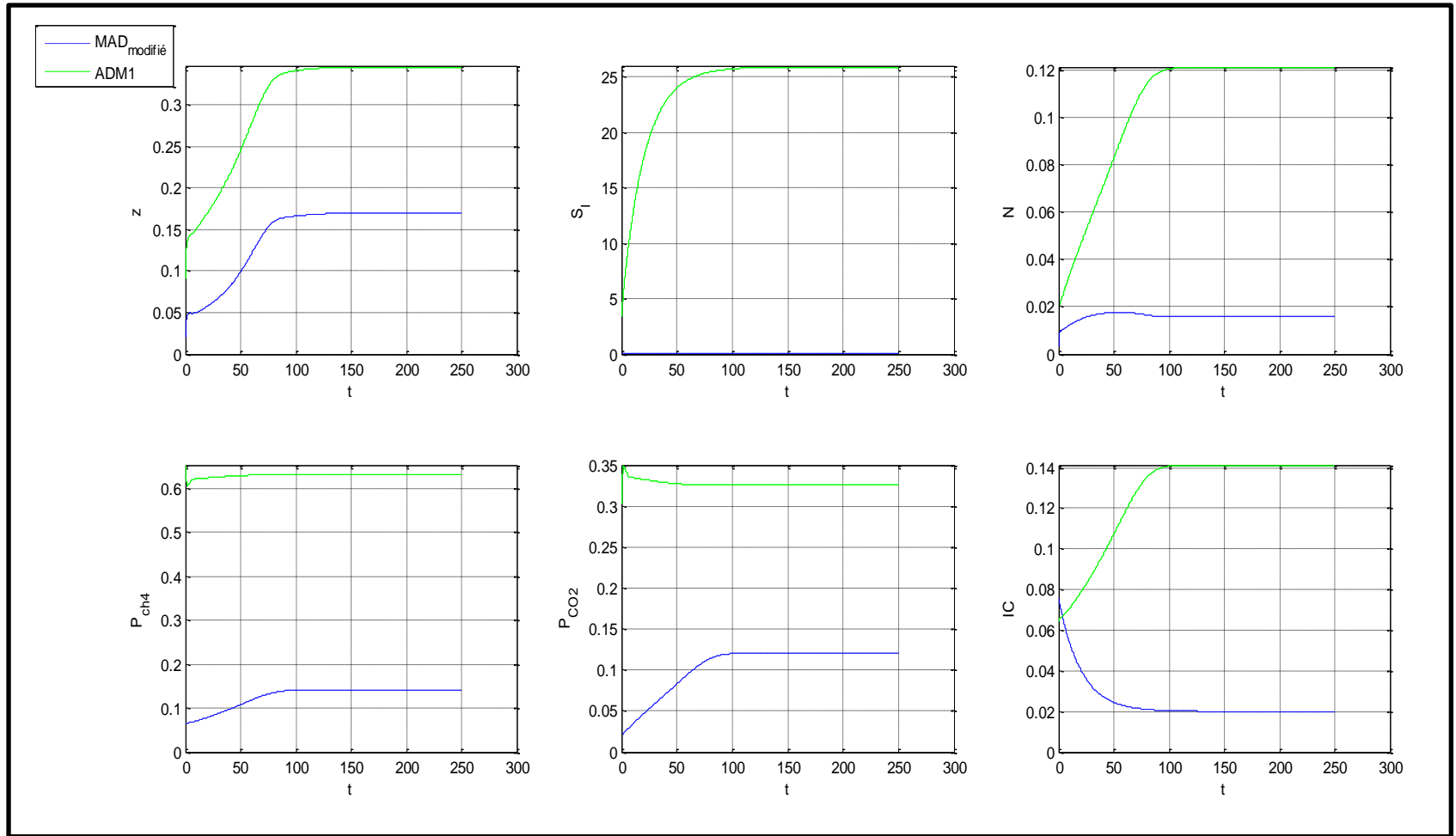
$$\begin{aligned}m_1 &= 0,0776 \\K_{S_1} &= 0,2377 \\m_2 &= 0,0466 \\K_{S_2} &= 0,4826\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}m_3 &= 4,9836, \\K_{S_3} &= 0,0016, \\K_{I_{NH_3}} &= 8,1675e - 5 \\K_{I_3} &= 0,0098 e + 03\end{aligned}$$

Simules ADM1 et MADmodifié



Simules ADM1 et MADmodifié



Conclusion et perspective

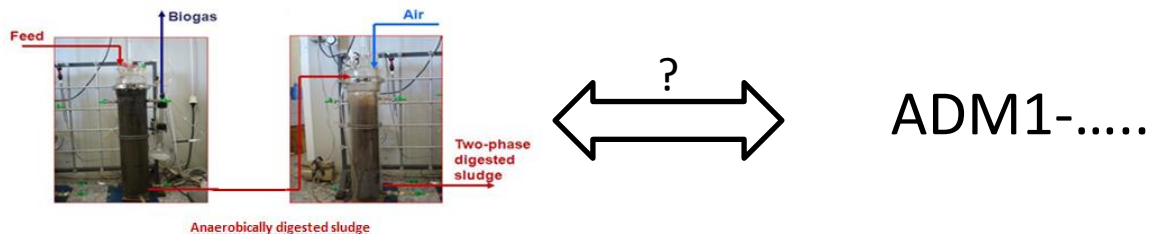
- L'azote joue un rôle important dans la DA → ne pas le sous estimer
- L'optimisation est un outil mathématique fort pour le calage
MAIS...
À priori il faut faire une bonne correspondance Données-modèle

Notre objectif

- Valider MAD modifié par ADM1*.
- Valider la méthode d'association des variables à travers un ADM1 calé.

Aller plus loin ...

Caler un modèle Aérobie sur les données expérimentales Aérobie → lier deux modèles Anaérobie-Aérobie pour avoir un modèle couplé.



Merci pour votre attention