



## Mélanges et Biodégradation

présenté par :

WALID BOUHAFS

Sous la direction de :

**Claude LOBRY**

et

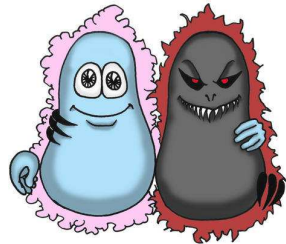
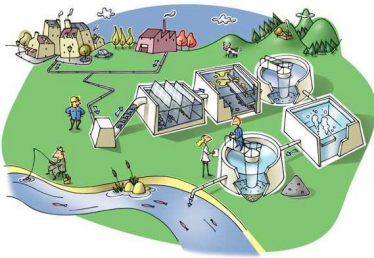
**Nahla ABDELLATIF**

Le 24 novembre 2010

- Introduction
- Modélisation des procédés biologiques
- Modélisation du réacteur piston pur
- Mélanges de deux pistons purs
- Cas de deux pistons purs en parallèle
- Cas de pistons parallèles multiples
- Conclusion et perspectives

# INTRODUCTION

- L'activité humaine conduit au rejet dans la nature de grandes quantités chimiques nuisibles, en général.
- Les éléments chimiques nuisibles présentent une nourriture pour les micro-organismes.
- On utilise ce principe pour la dépollution biologique de l'eau, mais de façon contrôlée.



# MODÉLISATION DES PROCÉDÉS BIOLOGIQUES DANS LES RACTEURS

## Le chémostat

- Employé dans le domaine de la dépollution biologique de l'eau.
- Le chémostat est caractérisé par un volume constant.
- Offre la possibilité pour appliquer les techniques de contrôle.

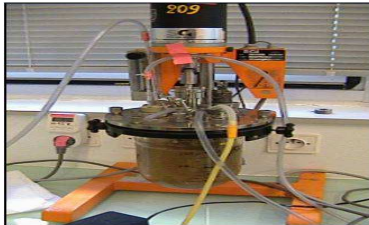


FIG.: Le chémostat

En présence d'un seul substrat, la croissance de la biomasse dans le chémostat est modélisée par le système :

$$(1) \begin{cases} \frac{dX}{dt} = \mu(S)X - DX, \\ \frac{dS}{dt} = -\mu(S)X + DS_{in} - DS. \end{cases}$$

où

$X$  désigne la concentration de la biomasse ( $gl^{-1}$ ).

$S$  désigne la concentration du substrat ( $gl^{-1}$ ).

$S_{in}$  est la concentration du substrat à l'entrée du chémostat.

$D$  est le débit d'alimentation ( $m^3h^{-1}$ ).

$\mu$  désigne le fonction de croissance.

# EXEMPLES DE CINÉTIQUES $\mu$

Linéaire

$$\mu(S) = aS$$

Monod

$$\mu(S) = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S}$$

Haldane

$$\mu(S) = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S + \frac{S^2}{K_c}}$$

Ce type de réacteurs est caractérisé par trois phénomènes :

- L'advection
- La diffusion
- La réaction biologique

# Le réacteur à gradient spatial de concentration

RGSC

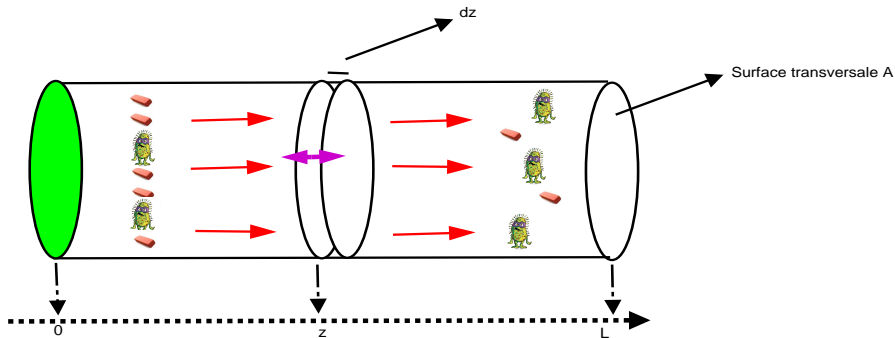


FIG.: Réacteur RGSC avec diffusion.



La croissance microbienne dans un RGSC est modélisée par le système d'EDP :

$$(2) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) + d \frac{\partial^2 S}{\partial z^2}(t, z) - \mu(S)X(t, z), \quad (t, z) \in R_+ \times [0, L], \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + d \frac{\partial^2 X}{\partial z^2}(t, z) + \mu(S)X(t, z), \quad (t, z) \in R_+ \times [0, L], \\ d \frac{\partial S}{\partial z}(t, 0) - VS(t, 0) = -VS_{in}, \quad t \in R_+, \\ \frac{\partial S}{\partial z}(t, L) = 0, \quad t \in R_+, \\ d \frac{\partial X}{\partial z}(t, 0) - VX(t, 0) = -VX_{in}, \quad t \in R_+, \\ \frac{\partial X}{\partial z}(t, L) = 0, \quad t \in R_+. \end{array} \right.$$

# Les états stationnaires dans un RGSC

Sous certaines conditions sur la fonction de croissance  $\mu$ ,

- 1 Il existe  $d^* > 0$  tel que tout  $d \geq d^*$ , on peut trouver deux valeurs critiques  $V_1$  et  $V_2$  dépendantes de  $d$  vérifiant  $V_1 < V_2$  et telles que le problème stationnaire admet :
  - au moins 3 solutions : si  $V_1 < V < V_2$ .
  - au moins 2 solutions : si  $V_1 = V$  ou  $V = V_2$ .
  - exactement une seule solution si  $V_1 > V$  ou  $V > V_2$ .
- 2 Dans le cas où les états stationnaires sont multiples, ils sont alternativement stables (1).

(1)Thèse de dramé.

# Le réacteur piston pur

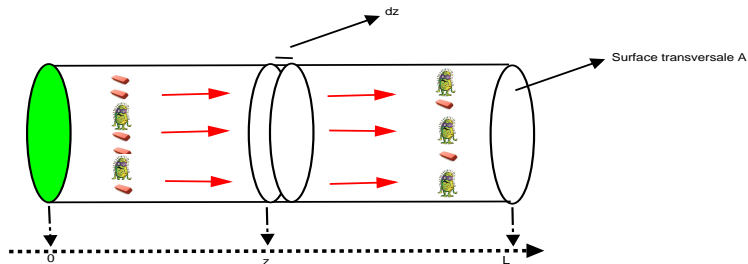


FIG.: Réacteur piston pur.

Ce type de réacteur se modélise comme le RGSC sauf qu'on n'a pas de phénomène de diffusion.

# Modélisation du réacteur piston pur

Modèle dans un réacteur piston pur :

$$(3) \begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) - \mu(S)X(t, z), & \text{pour } (t, z) \in R_+ \times [0, L], \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + \mu(S)X(t, z), & \text{pour } (t, z) \in R_+ \times [0, L], \end{cases}$$

Conditions aux limites :

$$S(t, 0) = S_{in}, \text{ et } X(t, 0) = X_{in}.$$

Conditions initiales :

$$S(0, z) = S_0(z) \text{ et } X(0, z) = X_0(z).$$

# Modélisation du réacteur piston pur

## Principe de conservation de la masse

Si on pose  $U(t, z) = X(t, z) + S(t, z)$  et  $M = X_{in} + S_{in}$ , donc :

$$(4) \begin{cases} \frac{\partial U}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial U}{\partial z}(t, z), & \text{pour } (t, z) \in \mathbb{R}_+ \times [0, L], \\ U(t, 0) = M. \end{cases}$$

- $M$  est l'unique solution de (4) sur  $[0, +\infty[ \times [0, L]$ .
- En remplaçant  $S$  par  $M - X$ , le système (3) est réduit à une seule équation.

Le système (3) possède un état stationnaire unique. C'est la solution de :

$$(5) \begin{cases} \frac{dS(z)}{dz} = \frac{1}{V} \mu(S)(M - S), \\ S(0) = S_{in}. \end{cases}$$

Cet état stationnaire est globalement asymptotiquement stable.

# Mélange de deux pistons purs

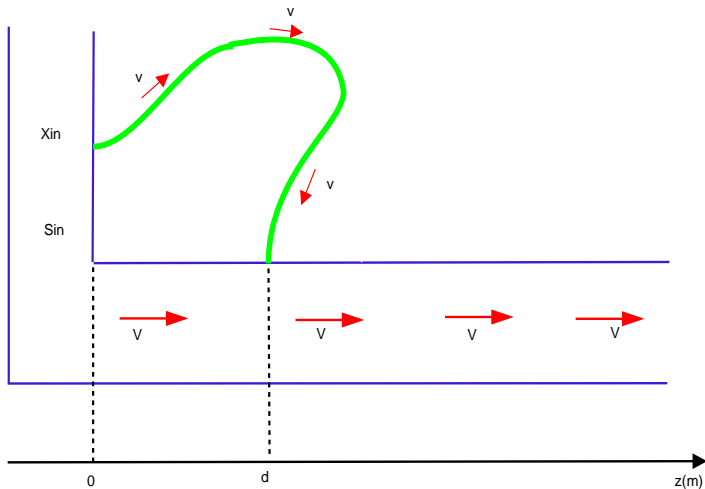


FIG.: Dispositif considéré

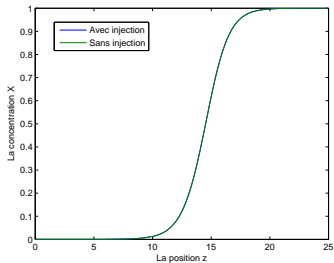
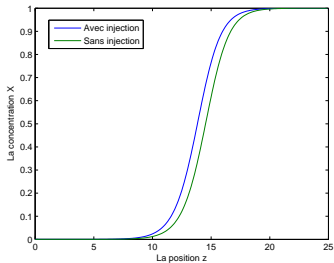
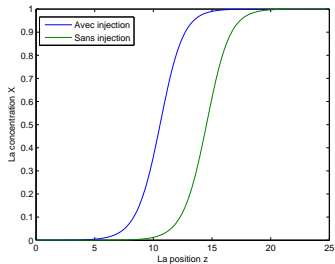
$$(6) \left\{ \begin{array}{ll} \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) - \mu(S)X(t, z), & (t, z) \in R_+ \times [0, d], \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + \mu(S)X(t, z), & (t, z) \in R_+ \times [0, d], \\ S(t, 0) = S_{in}, & t \in R_+, \\ X(t, 0) = X_{in} & t \in R_+, \\ \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) - \mu(S)X(t, z), & \text{pour } (t, z) \in R_+ \times [d, L], \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = -V \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + \mu(S)X(t, z), & \text{pour } (t, z) \in R_+ \times [d, L], \\ S(t, d) = S_d(t), & \text{pour } t \in R_+, \\ X(t, d) = X_d(t), & \text{pour } t \in R_+. \end{array} \right.$$

$$S_d(t) = S(t, d) + S'(t, l) \frac{a}{A} \frac{v}{V}, \text{ et } X_d(t) = X(t, d) + X'(t, l) \frac{a}{A} \frac{v}{V}.$$



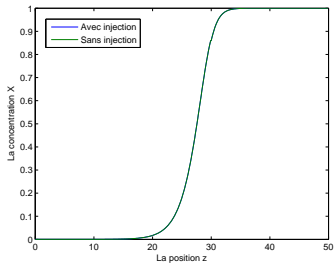
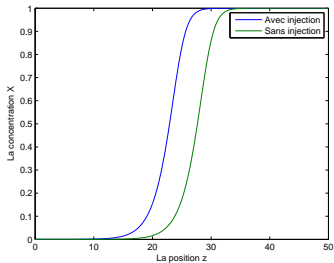
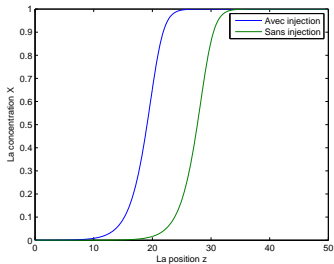
# Résultats numériques

Modèle linéaire avec  $r = 10^{-4}$ ;  $L=25$ ,  $d=1$ ,  $5$ ,  $10$



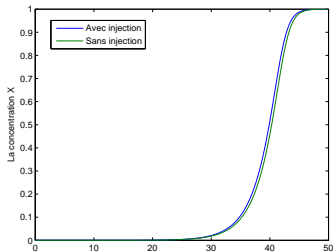
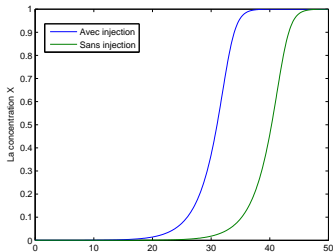
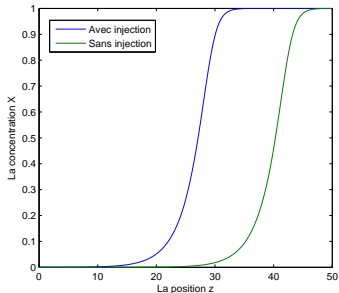
# Résultats numériques

Modèle de Monod avec  $r = 10^{-4}$ ;  $L=50$ ,  $d=1$ ,  $5$ ,  $10$



# Résultats numériques

Modèle de Haldane avec  $r = 10^{-4}$ ;  $L=50$ ,  $d=1$ ,  $5$ ,  $10$



- On voit le rôle de la position du point d'injection. Si  $d$  augmente, l'effet de l'injection diminue jusqu'à devenir presque inexistante.
- On obtient un effet maximal lorsque le liquide injecté par le petit conduit réside le plus longtemps dans le gros piston.

# Deux pistons placés en parallèle

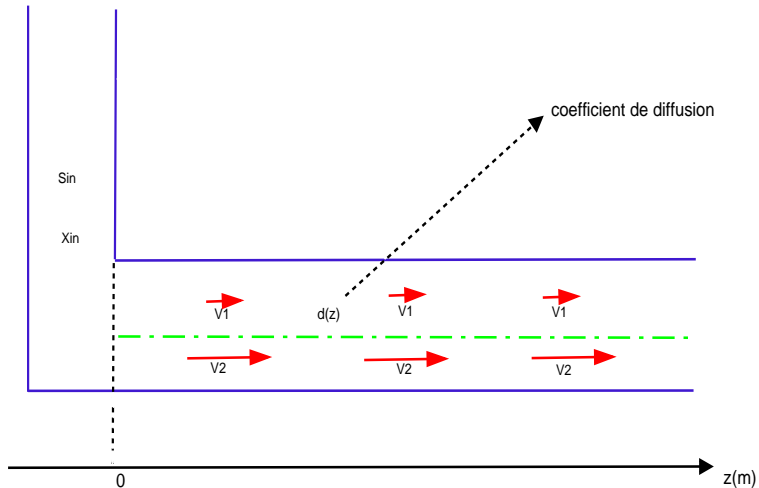
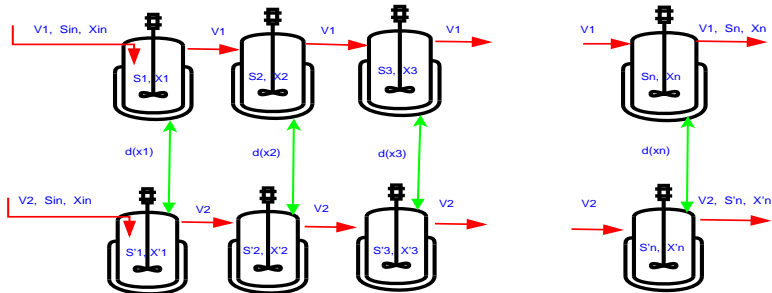


FIG.: Deux pistons en parallèle

On suppose que le réacteur piston est une interconnexion de  $n$  chémostats, donc on considère une interconnexion de  $2n$  chémostats :

- 1  $n$  chémostats pour le bioréacteur situé en haut.
- 2  $n$  chémostats pour le bioréacteur situé en bas.



Le bilan de matière pour le  $i^{eme}$  chémostat de la première ligne :

$$(7) \begin{cases} \frac{dX_1^i}{dt} = \frac{V_1}{dz}(X_1^{i-1} - X_1^i) + d(z)(X_2^i - X_1^i) + \mu(S_1^i)X_1^i, \\ \frac{dS_1^i}{dt} = \frac{V_1}{dz}(S_1^{i-1} - S_1^i) + d(z)(S_2^i - S_1^i) - \mu(S_1^i)X_1^i, \end{cases}$$

$dz$  est la longueur de chaque chémostat tel que  $n \times dz = L$  où  $L$  est la longueur du réacteur piston.

$V_1$  est la vitesse de l'écoulement dans le réacteur piston qui est situé en haut.

Le bilan de matière de la deuxième ligne s'écrit de la même manière.

Par passage à la limite quand  $dz$  tend vers 0 :

$$(8) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_1}{\partial t} = -V_1 \frac{\partial X_1}{\partial z} + d(X_2 - X_1) + \mu(S_1)X_1, \\ \frac{\partial S_1}{\partial t} = -V_1 \frac{\partial S_1}{\partial z} + d(S_2 - S_1) - \mu(S_1)X_1, \\ \frac{\partial X_2}{\partial t} = -V_2 \frac{\partial X_2}{\partial z} + d(X_1 - X_2) + \mu(S_2)X_2, \\ \frac{\partial S_2}{\partial t} = -V_2 \frac{\partial S_2}{\partial z} + d(S_1 - S_2) - \mu(S_2)X_2, \\ X_1(t, 0) = X_2(t, 0) = X_{in}, \\ S_1(t, 0) = S_2(t, 0) = S_{in}, \end{array} \right.$$

Les conditions initiales :

$$X_1(0, z) = X_2(0, z) = X_0(z), \quad \text{pour } z \in [0, L],$$

$$S_1(0, z) = S_2(0, z) = S_0(z), \quad \text{pour } z \in [0, L].$$



L'état stationnaire est donné par :  $\frac{\partial X_i}{\partial t} = 0$ ,  $\frac{\partial S_i}{\partial t} = 0$  pour  $i \in \{1, 2\}$ .

$$(9) \left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_1}{dz} = \frac{1}{V_1} \mu(M - X_1) X_1 + \frac{d(z)}{V_1} (X_2 - X_1), \\ \frac{dX_2}{dz} = \frac{1}{V_2} \mu(M - X_2) X_2 + \frac{d(z)}{V_2} (X_1 - X_2), \\ S_1 = M - X_1, \\ S_2 = M - X_2, \\ S_1(0) = S_2(0) = S_{in}, \\ X_1(0) = X_2(0) = X_{in}. \end{array} \right.$$

# Résultats numériques

Cas linéaire ( $\mu(S) = S$ )

$$X_{in} = 10^{-6}, M = 1, V_1 = V_2 = 10, L = 250,$$

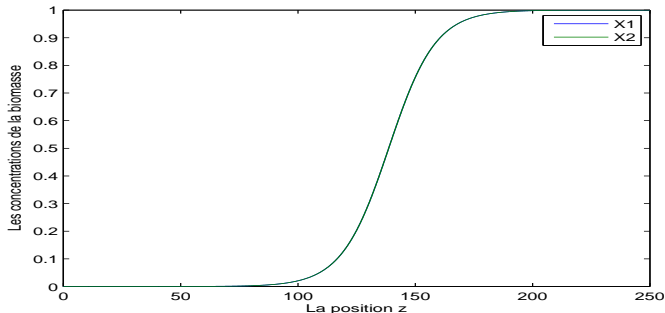


FIG.: Les deux réacteurs se comportent comme un seul réacteur

On prend  $V_1 = 1$  et  $V_2 = 10$  :

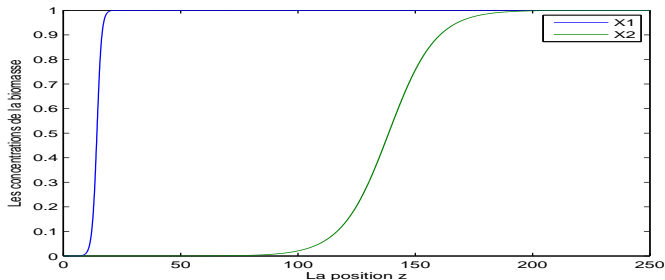


FIG.: Modèle linéaire avec  $V_1 < V_2$  et  $d = 0$ .

L'écart de la vitesse rend la concentration de la biomasse dans le premier réacteur plus élevée que celle du deuxième.

L'évolution de  $X_1$  et de  $X_2$  lorsque  $V_1 = 1$ ,  $V_2 = 10$  et avec diffusion ( $d = 0.1$ ) :

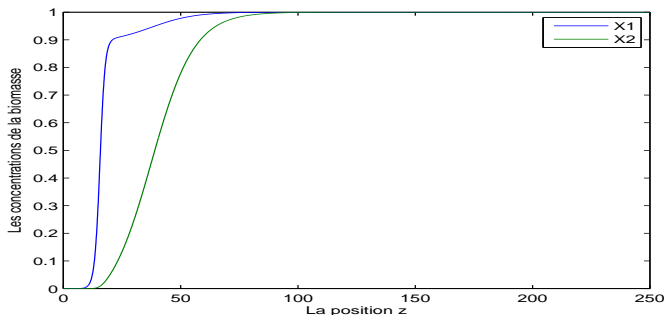
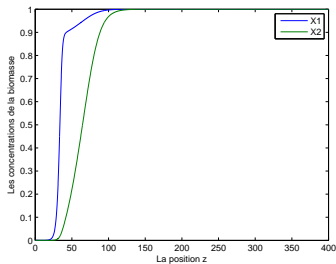
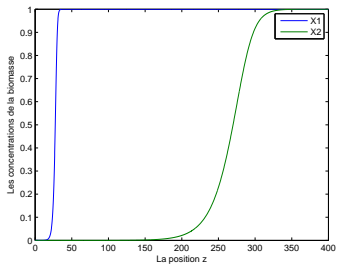
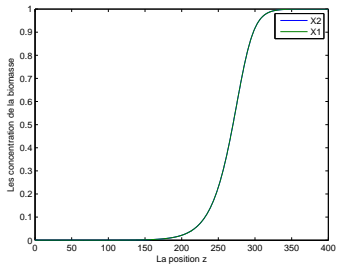


FIG.: Modèle linéaire avec  $V_1 = 1$  et  $d = 0.1$ .

Dans le deuxième réacteur, on voit l'effet du coefficient de diffusion sur l'évolution de la concentration de la biomasse  $X_2$ .

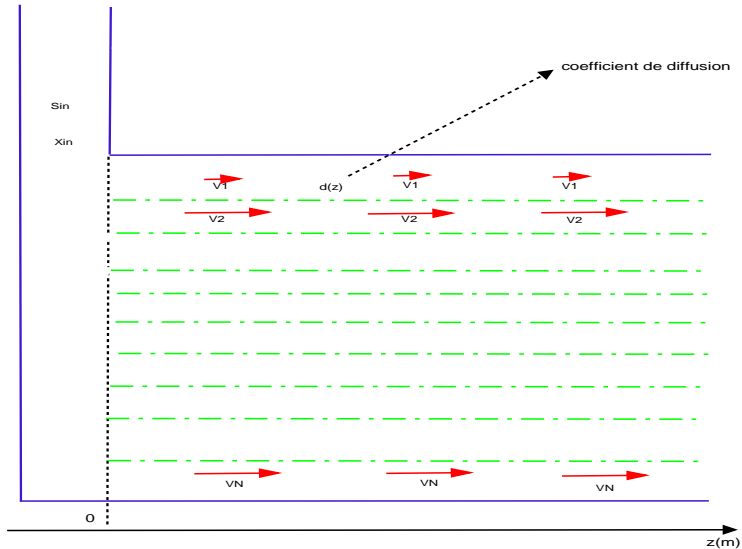
# Résultats numériques

Modèle de *Monod* avec  $(V_1 = 10, d = 0)$ ,  $(V_1 = 1, d = 0)$  et  $(V_1 = 10, d = 0.1)$ .



# CAS DE PISTONS PARALLÈLES MULTIPLES

## Dispositif



# MODÉLISATION

## Interconnexion des chémostats

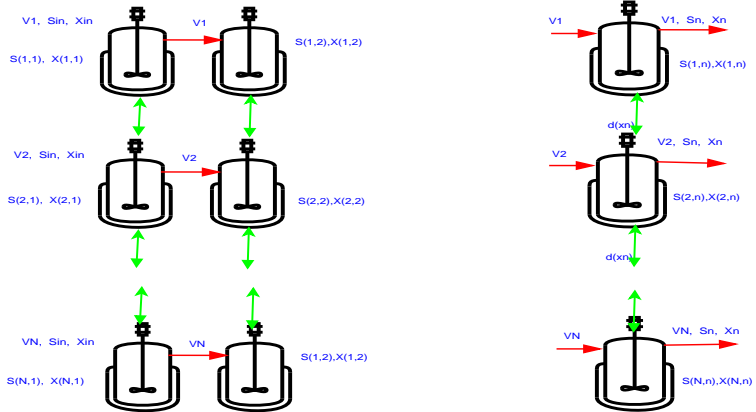


FIG.: Interconnexion de  $N \times n$  chémostats

$$(10) \left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_1^i}{dt} = \frac{V_1}{dz}(X_1^{i-1} - X_1^i) + d(z)(X_2^i - X_1^i) + \mu(S_1^i)X_1^i, \\ \frac{dS_1^i}{dt} = \frac{V_1}{dz}(S_1^{i-1} - S_1^i) + d(z)(S_2^i - S_1^i) - \mu(S_1^i)X_1^i, \\ X_1^0 = X_{in}, S_1^0 = S_{in} \\ i = 0, 1, \dots, n \end{array} \right.$$

Pour  $i = 1, 2, \dots, N$  :

$X_1^i$  : la concentration de la biomasse dans le  $i$  ème chémostat de la première ligne.

$S_1^i$  : la concentration du substrat dans le  $i$  ème chémostat de la première ligne.

$V_1$  : la vitesse de l'écoulement dans le premier réacteur.



$$(11) \left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_N^i}{dt} = \frac{V_N}{dz}(X_N^{i-1} - X_N^i) + d(z)(X_{N-1}^i - X_N^i) + \mu(S_N^i)X_N^i, \\ \frac{dS_N^i}{dt} = \frac{V_N}{dz}(S_N^{i-1} - S_N^i) + d(z)(S_{N-1}^i - S_N^i) - \mu(S_N^i)X_N^i, \\ X_N^0 = X_{in}, S_N^0 = S_{in} \\ i = 0, 1, \dots, n \end{array} \right.$$

Pour  $i = 1, 2, \dots, n$  :

$X_N^i$  : la concentration de la biomasse dans le  $i$  ème chémostat de la  $N^{eme}$  ligne.

$S_N^i$  : la concentration du substrat dans le  $i$  ème chémostat de la  $N^{eme}$  ligne.

$V_N$  : la vitesse de l'écoulement dans le  $N^{eme}$  réacteur.

$$(12) \left\{ \begin{array}{l} \frac{dX_j^i}{dt} = \frac{V_j}{dz} (X_j^{i-1} - X_j^i) + d(z)(X_{j-1}^i + X_{j+1}^i - 2X_j^i) + \mu(S_N^i)X_j^i, \\ \frac{dS_N^i}{dt} = \frac{V_j}{dz} (S_N^{i-1} - S_N^i) + d(z)(S_{j-1}^i + S_{j+1}^i - 2S_j^i) - \mu(S_N^i)X_j^i, \\ X_j^0 = X_{in}, S_j^0 = S_{in} \\ i = 0, 1, \dots, n \end{array} \right.$$

Pour  $i = 1, 2, \dots, n$  et pour  $j = 1, 2, \dots, N$  :

$X_j^i$  : la concentration de la biomasse dans le  $i$  ème chémostat de la  $j^{eme}$  ligne.

$S_j^i$  : la concentration du substrat dans le  $i$  ème chémostat de la  $j^{eme}$  ligne.

$V_j$  : la vitesse de l'écoulement dans le  $j^{eme}$  réacteur.

# Modèle correspondant

Dans le premier réacteur

En faisant tendre  $dz$  vers 0 :

$$(13) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_1}{\partial t} = -V_1 \frac{\partial X_1}{\partial z} + d(X_2 - X_1) + \mu(S_1)X_1, \\ \frac{\partial S_1}{\partial t} = -V_1 \frac{\partial S_1}{\partial z} + d(S_2 - S_1) - \mu(S_1)X_1, \\ X_1(t, 0) = X_{in}, \\ S_1(t, 0) = S_{in}, \\ X_1(0, z) = X_0(z), \\ S_1(0, z) = S_0(z), \end{array} \right.$$

# Modèle correspondant

Dans les réacteurs intermédiaires

$$(14) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_j}{\partial t} = -V_j \frac{\partial X_j}{\partial z} + d(X_{j-1} + X_{j+1} - 2X_j) + \mu(S_j)X_j, \\ \frac{\partial S_j}{\partial t} = -V_j \frac{\partial S_j}{\partial z} + d(S_{j-1} + S_{j+1} - 2S_j) - \mu(S_j)X_j, \\ X_j(t, 0) = X_{in}, \\ S_j(t, 0) = S_{in}, \\ X_j(0, z) = X_0(z), \\ S_j(0, z) = S_0(z), \\ j = 2, 3 \dots N - 1 \end{array} \right.$$

# Modèle correspondant

Dans le dernier réacteur

$$(15) \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial X_N}{\partial t} = -V_N \frac{\partial X_N}{\partial z} + d(X_{N-1} - X_N) + \mu(S_N)X_N, \\ \frac{\partial S_N}{\partial t} = -V_N \frac{\partial S_N}{\partial z} + d(S_{N-1} - S_N) - \mu(S_N)X_N, \\ X_N(t, 0) = X_{in}, \\ S_N(t, 0) = S_{in}, \\ X_N(0, z) = X_0(z), \\ S_N(0, z) = S_0(z), \end{array} \right.$$

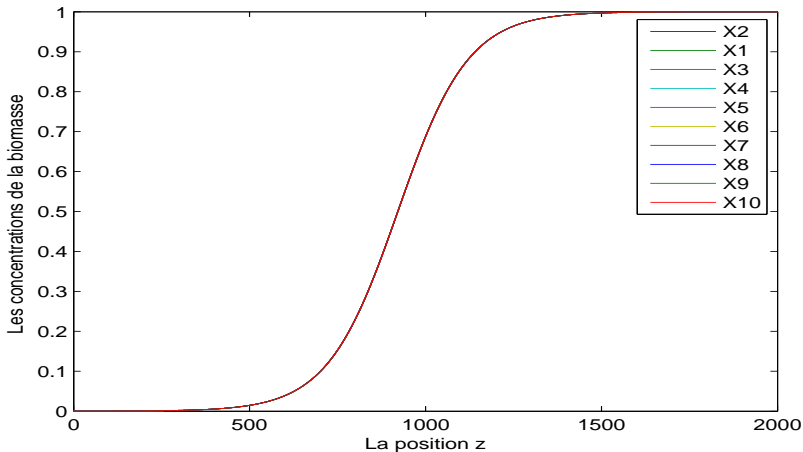


FIG.: Les réacteurs se comportent comme un seul réacteur

# Simulations numériques

## Cas linéaire

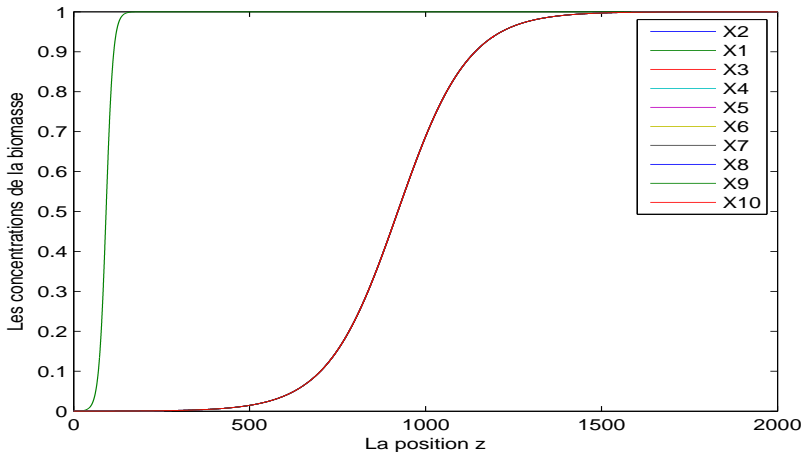


FIG.: Modèle linéaire avec  $V_1 = 10$ ,  $V_j=100$ , pour  $j = 2, \dots, 10$  et  $d = 0$ .

# Simulations numériques

## Cas linéaire

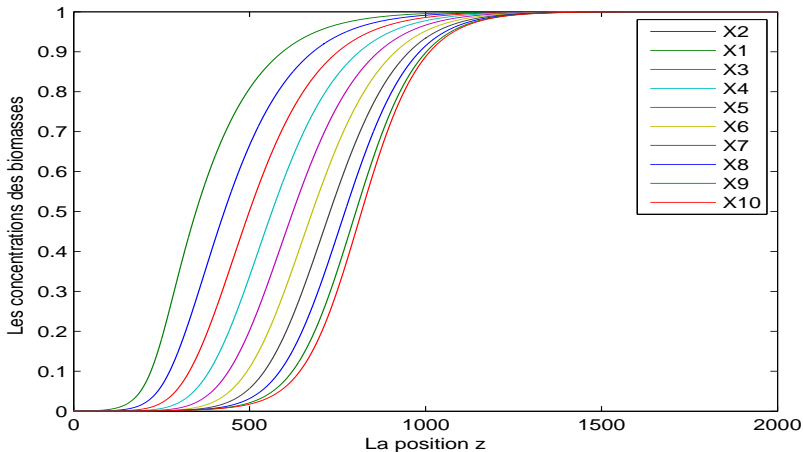
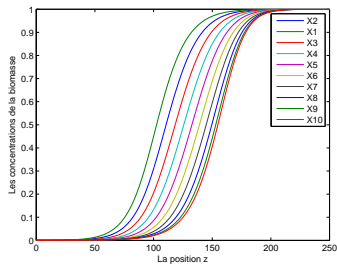
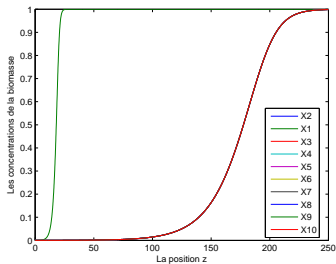
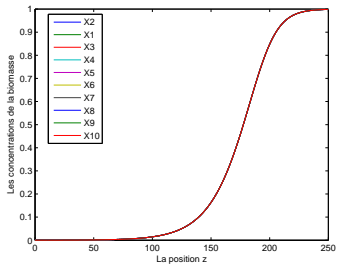


FIG.: Modèle linéaire avec  $V_1 = 10$ ,  $V_j=100$ , pour  $j = 2, \dots, 10$  et  $d = 1$ .



# Résultats numériques

## Cas de Monod



- La diminution de la vitesse de l'écoulement augmente la concentration de la biomasse dans le premier réacteur et produit de la biomasse dans les autres réacteurs.
- Le réacteur le plus proche du premier réacteur aura une production de biomasse plus importante.  
Ce phénomène (évident physiquement) peut être prouvé mathématiquement par le lemme de comparaison des équations différentielles.
- On a les mêmes phénomènes pour des fonctions linéaires, de type Monod ou Haldane.  
C'est la distance parcourue pour atteindre une certaine valeur de la concentration qui change.

- Ce mémoire de mastère présente des techniques originales pour améliorer la production de biomasse dans les bioréacteurs pistons purs. Ce travail peut être utilisé pour la modélisation dans les écoulements dans les milieux complexes fissurés.
- L'idée de considérer un réacteur RGSC sans phénomène de diffusion n'est pas très réaliste, on ne peut pas négliger la diffusion dans les écoulements.
- On peut déterminer des modèles stochastiques plus liés à la réalité si on applique les probabilités sur les comportements des particules (biomasse) et en utilisant l'idée des interconnexions des modèles du chapitre 3.