RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Aboubakr Belkaïd – Tlemcen –
Faculté de TECHNOLOGIE

MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du **diplôme de MASTER**

En : AUTOMATIQUE

Spécialité : Automatique et Informatique Industrielle

Par : Larbi Mohammed Ilyes

Sujet

Approche intégrée de modélisation et de contrôle du colmatage membranaire dans un bioréacteur à membrane anaérobie (BRM)

Soutenu publiquement, le 30 / 09 / 2026, devant le jury composé de :

Mr. Gourine Ali	Professeur	Université de Tlemcen	Président
Mme. Khedim Zeyneb	MCB	ESSAT, Tlemcen	Examinatrice
Mr. Benyahia Boumediene	Professeur	Université de Tlemcen	Encadrant

Année universitaire : 2025 / 2026

Dédicace

Je dédie ce modeste travail :

À mes chers parents, pour leur soutien indéfectible, leurs sacrifices et leurs encouragements qui m'ont accompagné à chaque étape de mon parcours, et sans qui rien de tout cela n'aurait été possible.

À ma sœur Chaimaa, pour son soutien et sa bienveillance tout au long de ces années. Et mon frère Issam, pour sa présence et ses encouragements constants.

À mon proche ami Anes, que je considère comme un membre à part entière de ma famille, pour son soutien fidèle et sa présence dans les moments importants.

À mes chers collègues Rayane, Aymen et Amira, pour leur amitié sincère, leur entraide et tous les bons moments partagés durant ce parcours universitaire.

À toutes les personnes qui ont cru en moi et qui m'ont soutenu, de près ou de loin, durant la réalisation de ce travail.

Remerciements

Je tiens en premier lieu à exprimer ma profonde gratitude à mon encadrant, Monsieur Benyahia Boumediene, pour sa disponibilité constante, ses conseils avisés et son accompagnement rigoureux tout au long de ce travail. Sa confiance et ses orientations méthodologiques ont été déterminantes dans l'aboutissement de ce mémoire.

Je remercie également les membres du jury pour l'honneur qu'ils me font en évaluant ce travail :

Monsieur Gourine Ali, pour avoir accepté de présider ce jury ;

Madame Khedim Zeyneb, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Leurs remarques et observations constructives contribueront sans nul doute à enrichir la portée de ce mémoire.

Je remercie l'ensemble du corps enseignant du département d'Automatique de l'Université de Tlemcen, pour la qualité de la formation dispensée tout au long de mon parcours de Master.

Enfin, je ne saurais conclure ces remerciements sans exprimer ma reconnaissance la plus sincère à ma famille et à mes proches, pour leur soutien indéfectible, leurs encouragements constants et leur patience tout au long de ce parcours.

À toutes celles et ceux qui, de près ou de loin, ont contribué à la réalisation de ce mémoire, j'adresse mes plus sincères remerciements.

Table des matières

Introduction générale **1**

1 État de l'art **4**

1.1 Introduction 5

1.2 Généralités sur la digestion anaérobie 5

1.2.1 Définition et principe général 5

1.2.2 Les étapes biologiques du processus 6

1.2.3 Facteurs influençant le procédé 7

1.2.4 Avantages et inconvénients de la digestion anaérobie 8

1.3 Le Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2) 8

1.4 Les bioréacteurs anaérobies 9

1.5 Aperçu des modèles biologiques utilisés dans la littérature 10

1.6 Les bioréacteurs à membranes (BRM) 11

1.6.1 Définition et principe 11

1.6.2 Intérêt par rapport aux procédés conventionnels 12

1.6.3 Types de bioréacteurs à membranes 12

1.7 Les membranes de filtration 13

1.7.1 Classification par seuil de coupure 13

1.7.2 Matériaux 13

1.7.3 Configurations de module 13

1.8 Le colmatage membranaire 14

1.9 Conclusion du chapitre 15

2 Modélisation biologique ADM1-SMP/EPS d'un bioréacteur anaérobie 17
2.1 Introduction . . . 18
2.2 Le modèle ADM1 . . . 19
2.2.1 Structure générale et hypothèses . . . 19
2.2.2 Variables d'état . . . 20
2.2.3 Les processus biochimiques . . . 22
2.2.4 La matrice stœchiométrique (matrice de Petersen) . . . 23
2.2.5 Équations de bilan de matière . . . 25
2.2.6 Équilibres physico-chimiques . . . 29
2.2.7 Simulation de l'ADM1 seul (sans couplage SMP/EPS) . . . 32
2.3 Les produits microbiens solubles (SMP) et les substances polymériques extracellulaires (EPS) . . . 37
2.3.1 Définitions et origine biologique . . . 37
2.3.2 Le modèle unifié de Laspidou et Rittmann . . . 38
2.3.3 Le modèle d'Aquino et Stuckey (2008) . . . 39
2.3.4 Paramétrisation du modèle d'Aquino et Stuckey (2008) – version synchronisée avec le code . . . 41
2.3.5 Portée et interprétation du sous-modèle . . . 42
2.4 Intégration des SMP et EPS dans le modèle ADM1 . . . 43
2.4.1 Principe du couplage . . . 43
2.4.2 Nouvelles variables d'état ajoutées . . . 44
2.4.3 Équations du sous-modèle couplé . . . 44
2.4.4 Système d'équations couplé (suite) . . . 45
2.4.5 Liaison avec le colmatage . . . 45
2.5 Résultats du couplage SMP/EPS (modèle d'Aquino et Stuckey intégré à l'ADM1) . . . 45
2.6 Conclusion du chapitre . . . 47

3 Modélisation du colmatage membranaire et couplage avec le modèle ADM1-SMP/EPS 49
3.1 Introduction . . . 50
3.2 Le modèle de colmatage membranaire de Benyahia et al. (2024) . . . 50
3.2.1 Hypothèses et mécanismes considérés . . . 50
3.2.2 Résistances en série et surface membranaire effective . . . 52
3.2.3 Dynamique en phase de filtration . . . 53
3.2.4 Dynamique en phase de relaxation . . . 54

3.3 Couplage avec le modèle biologique ADM1-SMP/EPS 54
3.3.1 Principe du couplage retenu 54
3.3.2 Correspondance des variables 55
3.3.3 Structure du vecteur d'état complet 56
3.3.4 Logique de bascule filtration/relaxation 57
3.4 Résultats de simulation du modèle couplé complet 58
3.4.1 Conditions de simulation 58
3.4.2 Évolution du flux et du débit de perméat 60
3.4.3 Évolution des masses de colmatage 61
3.4.4 Évolution des résistances membranaires 62
3.4.5 Bilan de la simulation de référence 63
3.5 Discussion : adaptation du modèle à la nouvelle configuration membranaire 63
3.6 Conclusion du chapitre 64

4 Commande du colmatage membranaire par bullage d'air : régulation PI et commande prédictive non linéaire (NMPC) du flux de perméat 65
4.1 Introduction 66
4.2 Principe de la commande par bullage d'air 66
4.2.1 Mécanisme physique et justification de $k_p = 0$ 66
4.2.2 Équations de colmatage étendues 66
4.2.3 L'actionneur $k_m(t)$ 67
4.2.4 Objectif de régulation 67
4.3 Commande proportionnelle-intégrale (PI) 67
4.3.1 Structure du régulateur 67
4.3.2 Résultats de simulation PI 68
4.4 Commande prédictive non linéaire (NMPC) 70
4.4.1 Principe 70
4.4.2 Formulation du problème d'optimisation 71
4.4.3 Implémentation numérique 73
4.4.4 Résultats de simulation NMPC 73
4.5 Comparaison PI vs NMPC 75
4.6 Conclusion du chapitre 76

Conclusion générale et perspectives 77
Synthèse du travail réalisé 78
Principaux résultats et contributions 78
Limites du travail 78

Perspectives 78

A Matrice de Petersen complète issue de l'implémentation MATLAB 80

A.1 Expressions des coefficients de bilan carbone s_1 à s_{13} 82

B Concentrations d'entrée, conditions initiales et points d'équilibre 83

Liste des figures

1.1 Exemple d'installation industrielle de digestion anaérobie. Source : adapté de van Lier (2008). 6
1.2 Les quatre étapes biologiques de la digestion anaérobie. 7
1.3 Représentation schématique du layout du Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2), intégrant la filière eau (boues activées) et la filière boue (digesteur anaérobie). 9
1.4 Schéma de principe d'un digesteur anaérobie 10
1.5 Configurations d'un bioréacteur à membrane : (a) configuration externe, (b) configuration immergée avec diffuseur de gaz, (c) configuration immergée déportée avec boucle de recirculation. Source : adapté de Le-Clech et al. (2006) ; Judd (2011). 13
1.6 Illustration simplifiée des mécanismes de colmatage : dépôt des particules en surface (formation d'un gâteau de filtration) et pénétration des particules fines à l'intérieur des pores de la membrane. Source : adapté de Le-Clech et al. (2006) ; Meng et al. (2009). 15

2.1 Schéma d'enveloppe de bilan du réacteur ADM1 : flux d'entrée et de sortie du liquide, transfert gaz-liquide vers la phase gazeuse et sortie du biogaz. Source : documentation WaterTAP, NAWI / U.S. Department of Energy (https ://watertap. readthedocs.io/en/latest/technical_reference/flowsheets/ADM1.html). 18
2.2 Schéma des voies de transformation anaérobie dans l'ADM1 étendu . . 20
2.3 Désintégration et hydrolyse : évolution des matières particulaires X_c, X_{ch}, X_{pr} et X_{li}. 32
2.4 Acidogenèse : évolution des substrats solubles et des matières inertes. . 33
2.5 Acétogenèse : évolution des acides gras volatils (AGV) valérate, butyrate, propionate et acétate. 33
2.6 Biomasse fermentative : évolution de X_{su}, X_{aa}, X_{fa} et X_{c4}. 34
2.7 Acétogenes et méthanogenes : évolution de X_{pro}, X_{ac}, X_{h2} et de la biomasse totale $X_T = X_a + X_m$. 35
2.8 Gaz dissous et nutriments : évolution de S_{ch4}, S_{h2}, S_{IC} et S_{IN}. 35
2.9 Physico-chimie et pH : évolution du pH, des ions et du CO_2 dissous. . . 36

2.10 Production de biogaz : débit total et pressions partielles de CH_4, CO_2 et H_2. 37
2.11 Répartition des composants (biomasse particulaire, EPS, BAP, Large BAP, UAP) au sein d'un floc de boues, à trois stades croissants d'accumulation (a, b, c). Source : adapté d'après Trends in Biotechnology ; Le-Clech et al. (2006) ; Meng et al. (2009). 38
2.12 Schéma bloc du modèle intégré d'Aquino et Stuckey (2008) pour la production des SMP et des EPS en conditions anaérobies. Source : adapté de Aquino and Stuckey (2008). 40
2.13 Évolution des produits liés à l'utilisation du substrat (UAP) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1. 46
2.14 Évolution des produits liés à la biomasse (BAP) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1. 46
2.15 Évolution des substances polymériques extracellulaires (EPS totales, et décomposition en EPS_{X_a} et EPS_{X_m}) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1. 47

3.1 Exemple de module membranaire immergé à fibres creuses de type PSH-330. Source : Kovalus (2020), fiche technique PURON® MBR PSH-330. 50
3.2 Représentation schématique de la surface membranaire totale $A(t)$, de la surface poreuse $\varepsilon A(t)$ et de l'épaisseur de la membrane e_m. Source : adapté de Benyahia et al. (2024). 52
3.3 Flux membranaire $J(t)$ dans le scénario de référence sans commande. . 60
3.4 Débit de perméat $Q_{out}(t)$ dans le scénario de référence sans commande. 60
3.5 Évolution de la masse de gâteau $m_c(t)$ en l'absence de commande. . . . 61
3.6 Évolution de la masse colmatant les pores $m_p(t)$ en l'absence de commande. 61
3.7 Résistance du gâteau $R_c(t)$ dans le scénario sans commande. 62
3.8 Résistance de colmatage des pores $R_p(t)$ dans le scénario sans commande. 62
3.9 Résistance totale $R_{tot}(t) = R_0 + R_c(t) + R_p(t)$ dans le scénario sans commande. 63

4.1 Résistance totale $R_{tot}(t)$: comparaison sans PI et avec PI. 68
4.2 Flux membranaire $J(t)$: comparaison sans PI, avec PI et consigne $J_{sp}(t)$ en escalier. 69
4.3 Débit de perméat $Q_{out}(t)$: comparaison sans PI et avec PI. 69
4.4 Surface membranaire effective $A(t)$: comparaison sans PI et avec PI. . 70
4.5 Masse de gâteau $m_c(t)$: comparaison sans PI et avec PI. 70

4.6 Principe de la fenêtre glissante de la commande NMPC : à chaque pas d'échantillonnage, la fenêtre de mesures disponibles est décalée et une nouvelle fenêtre de prédiction est utilisée pour réoptimiser la commande. 71
4.7 Flux membranaire $J(t)$: comparaison sans NMPC, avec NMPC et consigne $J_{sp}(t)$. 73
4.8 Débit de perméat $Q_{out}(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC. . . 74
4.9 Surface membranaire effective $A(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC. 74
4.10 Masse de gâteau $m_c(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC. . . . 75

Liste des tableaux

1.1 Comparaison entre la digestion anaérobie et le traitement aérobie. . . . 8

2.1 Variables d'état solubles et particulaires du modèle ADM1 (d'après Batstone et al. (2002)). 21
2.2 Processus biochimiques de l'ADM1 (d'après Batstone et al. (2002)). . . 22
2.3 Composants affectés par les 19 processus ADM1 (coefficients de l'implémentation). 23
2.4 Extrait illustratif de la matrice stœchiométrique de Petersen (processus d'acétogenèse et de méthanogenèse). 25
2.5 Rendements de biomasse et constante de demi-saturation de l'azote inorganique. 30
2.6 Paramètres de composition corrigés selon Rosen and Jeppsson (2006), retenus dans ce mémoire. 31
2.7 Paramètres du sous-modèle d'Aquino et Stuckey retenus dans l'implémentation. 42
2.8 Nouvelles variables d'état ajoutées au vecteur biologique. 44

3.1 Correspondance entre les entrées du modèle de colmatage et les variables du modèle biologique ADM1-SMP/EPS. 55
3.2 Structure du vecteur d'état global du modèle couplé (49 composantes). 57
3.3 Paramètres principaux de la simulation de référence du modèle couplé. 59

4.1 Paramètres de réglage de la NMPC dans la campagne finale. 72
4.2 Comparaison des performances de suivi du flux pour la simulation finale. 75
4.3 Comparaison des flux moyens sur 45 jours pour les trois scénarios. . . . 75

A.1 Matrice de Petersen complète : 19 processus et 24 composants. 81

B.1 Concentrations d'entrée, conditions initiales et points d'équilibre des composés. 83

Introduction générale

Le traitement des eaux usées est aujourd'hui l'un des défis environnementaux les plus pressants. La croissance démographique, l'industrialisation et l'intensification des usages de l'eau ont conduit à une production toujours croissante d'effluents qu'il faut traiter avant tout rejet ou réutilisation. Dans ce contexte, les technologies biologiques occupent une place centrale, car elles permettent d'éliminer la matière organique à un coût maîtrisé et avec un bilan énergétique acceptable.

Les procédés aérobies, longtemps dominants, se heurtent aujourd'hui à leurs propres limites : consommation énergétique élevée liée à l'aération mécanique, production importante de boues en excès, coûts d'exploitation croissants. La digestion anaérobie, qui dégrade la matière organique en l'absence d'oxygène et produit du biogaz valorisable, constitue une alternative sérieuse. Elle permet de réduire la production de boues, de récupérer de l'énergie et d'atteindre des performances épuratoires comparables, pour un coût d'exploitation inférieur (van Lier, 2008; Chen et al., 2008).

Le bioréacteur à membrane anaérobie (AnMBR) représente une évolution importante de cette technologie. En associant un digesteur anaérobie à une unité de filtration membranaire, il permet de découpler le temps de séjour hydraulique du temps de séjour des boues, de retenir intégralement la biomasse et de produire un effluent clarifié de qualité élevée. Ces avantages expliquent le développement rapide de cette technologie depuis les années 2000, aussi bien à l'échelle pilote qu'à l'échelle industrielle (Skouteris et al., 2012). Cependant, le colmatage membranaire reste le principal frein à son déploiement à grande échelle. Ce phénomène, causé par l'accumulation progressive de matière sur et dans la membrane, se traduit par une chute du flux de perméat et une hausse des coûts d'exploitation, en particulier lorsqu'il n'est pas correctement anticipé ni contrôlé.

La modélisation mathématique de l'AnMBR est un outil indispensable pour comprendre les interactions entre la biologie du réacteur, la production de composés colmatants et la dynamique membranaire. Plusieurs modèles ont été proposés dans la littérature, mais peu d'entre eux intègrent de façon cohérente la biologie anaérobie complète, la production de produits microbiens solubles (SMP) et de substances polymériques extracellulaires (EPS), et la dynamique du colmatage. C'est précisément l'ambition de ce mémoire : proposer une modélisation intégrée de l'AnMBR, allant de la digestion biologique au colmatage membranaire, et évaluer des stratégies de commande capables de maintenir les performances de filtration sur la durée.

Problématique. Comment modéliser de manière cohérente et couplée la biologie anaérobie, la production de SMP/EPS et le colmatage membranaire dans un AnMBR,

et quelles stratégies de commande permettent de limiter ce colmatage tout en maintenant un flux de perméat acceptable.

Objectifs du travail. Ce mémoire poursuit trois objectifs complémentaires :

— construire un modèle biologique complet de l'AnMBR en couplant l'ADM1 au sous-modèle SMP/EPS d'Aquino et Stuckey ;

— intégrer à ce modèle biologique un modèle de colmatage membranaire, en alimentant ses entrées par les variables d'état biologiques ;

— évaluer deux stratégies de commande du bullage d'air, un régulateur PI et une commande prédictive non linéaire (NMPC), pour le suivi d'une consigne de flux.

Organisation du mémoire. Le document est structuré en quatre chapitres. Le chapitre 1 présente l'état de l'art sur la digestion anaérobie, les AnMBR et le colmatage membranaire. Le chapitre 2 développe le modèle biologique ADM1-SMP/EPS retenu. Le chapitre 3 décrit le modèle de colmatage et son couplage avec le modèle biologique, et présente les résultats de référence sans commande. Le chapitre 4 compare les deux stratégies de commande par bullage, PI et NMPC. Une conclusion générale clôt le document.

Chapitre 1

État de l'art

1.1 Introduction

Ce chapitre présente la synthèse bibliographique sur laquelle s'appuie ce travail. Il couvre successivement les principes de la digestion anaérobie, la plateforme BSM2, les principales configurations de bioréacteurs anaérobies, les modèles biologiques disponibles dans la littérature, le principe des bioréacteurs à membranes et les technologies de filtration associées, ainsi que les mécanismes et facteurs d'influence du colmatage membranaire.

1.2 Généralités sur la digestion anaérobie

1.2.1 Définition et principe général

La digestion anaérobie est un processus biologique au cours duquel la matière organique est dégradée en absence d'oxygène par un ensemble de micro-organismes appelé consortium microbien. Cette dégradation aboutit à la formation de deux produits principaux : le biogaz, composé essentiellement de méthane (CH_4) et de dioxyde de carbone (CO_2), et le digestat, un résidu solide et liquide riche en matière organique partiellement stabilisée (Appels et al., 2008).

Ce procédé n'est pas récent. Il a d'abord été utilisé pour la stabilisation des boues issues des stations d'épuration urbaines, avant d'être appliqué au traitement des effluents industriels fortement chargés, puis progressivement étendu au traitement direct des eaux usées urbaines (Deublein and Steinhauser, 2008). Cette évolution a été rendue possible grâce aux progrès réalisés dans la conception des réacteurs et à une meilleure compréhension de la microbiologie du procédé.

Contrairement au traitement aérobie, la digestion anaérobie ne nécessite pas d'aération, ce qui réduit fortement la consommation énergétique. De plus, une partie de l'énergie contenue dans la matière organique est récupérée sous forme de biogaz valorisable, ce qui rend ce procédé particulièrement intéressant sur le plan économique et environnemental. La figure 1.1 montre un exemple d'installation industrielle de digestion anaérobie.



Figure 1.1 – Exemple d'installation industrielle de digestion anaérobie. Source : adapté de van Lier (2008).

1.2.2 Les étapes biologiques du processus

La digestion anaérobie se déroule en quatre étapes biologiques successives, réalisées par des groupes de micro-organismes différents. Ces étapes sont l'hydrolyse, l'acidogenèse, l'acétogenèse et la méthanogenèse (Appels et al., 2008; Deublein and Steinhauser, 2008; Kanafin et al., 2021).

La première étape, l'hydrolyse, consiste en la transformation des matières organiques complexes, telles que les glucides, les protéines et les lipides, en molécules plus simples comme les sucres, les acides aminés et les acides gras. Cette transformation est réalisée par des bactéries hydrolytiques qui sécrètent des enzymes extracellulaires.

La deuxième étape, l'acidogenèse, permet la conversion de ces molécules simples en acides gras volatils (AGV), tels que l'acétate, le propionate et le butyrate. Cette étape est assurée par des bactéries acidogènes.

La troisième étape, l'acétogenèse, transforme les acides gras volatils issus de l'étape précédente en acide acétique, ainsi qu'en hydrogène et en dioxyde de carbone. Cette conversion est réalisée par des bactéries acétogènes.

Enfin, la quatrième étape, la méthanogenèse, produit le méthane à partir de deux voies principales : la voie acétoclastique, dans laquelle l'acide acétique est directement transformé en méthane par des bactéries acétoclastes, et la voie hydrogénotrophe, dans laquelle l'hydrogène et le dioxyde de carbone sont convertis en méthane par des bactéries hydrogénophiles (Kanafin et al., 2021).

Ces quatre étapes sont interdépendantes et doivent rester en équilibre pour assurer

un fonctionnement stable du procédé. Un déséquilibre entre elles, par exemple une accumulation excessive d'acides gras volatils, peut entraîner une baisse du pH et une inhibition de la méthanogenèse.

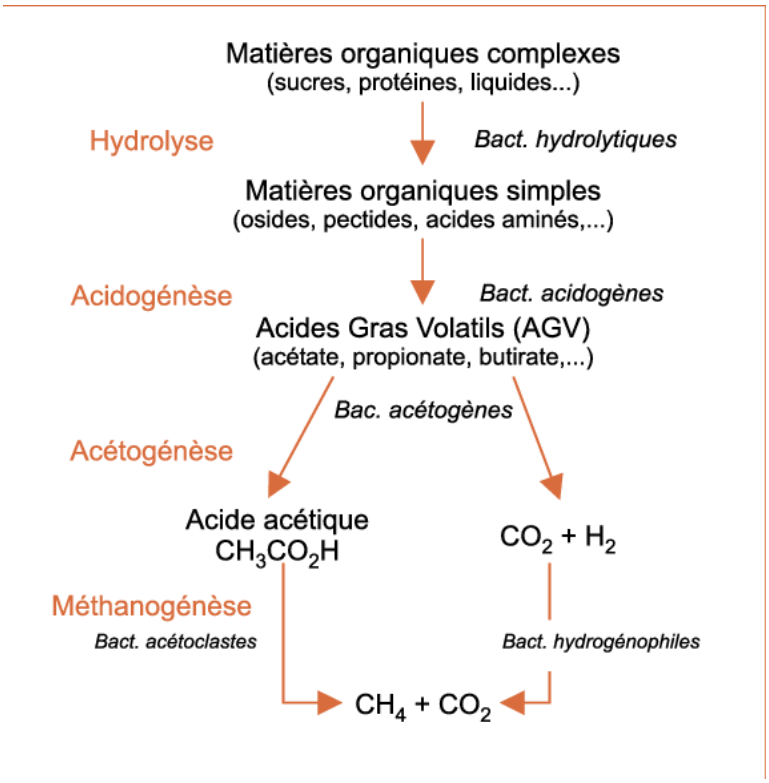


Figure 1.2 – Les quatre étapes biologiques de la digestion anaérobie.

1.2.3 Facteurs influençant le procédé

Le bon déroulement de la digestion anaérobie dépend de plusieurs facteurs physico-chimiques et opérationnels, dont les principaux sont la température, le pH, le rapport carbone/azote (C/N), le temps de séjour et la présence éventuelle d'inhibiteurs.

La température joue un rôle déterminant sur l'activité des micro-organismes. On distingue généralement trois gammes de température de fonctionnement : le domaine psychrophile (inférieur à 20 °C), le domaine mésophile (entre 30 et 40 °C environ) et le domaine thermophile (entre 50 et 60 °C environ). Chaque gamme favorise des populations microbiennes différentes, avec des vitesses de dégradation et des niveaux de stabilité variables (Chen et al., 2008).

Le pH est un autre paramètre essentiel. La méthanogenèse est particulièrement sensible aux variations de pH et fonctionne de façon optimale dans une gamme proche de la neutralité. Une accumulation d'acides gras volatils peut provoquer une chute du pH et inhiber fortement cette dernière étape.

Le rapport C/N influence l'équilibre nutritionnel des micro-organismes. Un rapport

trop faible ou trop élevé peut limiter la croissance microbienne ou favoriser l'accumulation de composés inhibiteurs, comme l'ammoniac.

Le temps de séjour hydraulique détermine la durée pendant laquelle le substrat reste en contact avec la biomasse. Il doit être suffisamment long pour permettre une dégradation complète, sans pour autant être excessif, ce qui augmenterait inutilement le volume des réacteurs.

Enfin, plusieurs composés peuvent inhiber le processus de digestion anaérobie, notamment l'ammoniac libre, les sulfures et certains métaux lourds. Ces inhibiteurs agissent principalement sur les populations méthanogènes, qui sont les plus sensibles aux variations du milieu (Appels et al., 2008; Kanafin et al., 2021).

1.2.4 Avantages et inconvénients de la digestion anaérobie

La digestion anaérobie présente plusieurs avantages par rapport à la voie aérobie. Elle nécessite une consommation énergétique nettement plus faible, puisqu'elle ne requiert pas d'aération. Elle produit également beaucoup moins de boues en excès, et permet en plus de valoriser une partie de l'énergie contenue dans les effluents sous forme de biogaz (van Lier, 2008).

Cependant, ce procédé présente aussi certains inconvénients. La cinétique de dégradation est généralement plus lente que celle du traitement aérobie, ce qui nécessite des réacteurs de plus grand volume ou des temps de séjour plus longs. Le procédé est également plus sensible aux variations de charge et aux substances inhibitrices. Enfin, l'effluent traité par voie anaérobie contient souvent encore une quantité significative d'azote et de phosphore, ce qui peut nécessiter un traitement complémentaire avant le rejet (Liao et al., 2006).

Le tableau 1.1 résume les principales différences entre les deux voies de traitement.

Tableau 1.1 – Comparaison entre la digestion anaérobie et le traitement aérobie.

Critère	**Voie anaérobie**	**Voie aérobie**
Consommation d'énergie	Faible (pas d'aération)	Élevée (aération continue)
Production de boues	Faible	Élevée
Valorisation énergétique	Oui, sous forme de biogaz	Non
Vitesse de dégradation	Plus lente	Plus rapide
Sensibilité aux perturbations	Plus élevée	Plus faible
Élimination de l'azote et du phosphore	Limitée	Meilleure

1.3 Le Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2)

Le Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2) est une plateforme de simulation standardisée, développée dans le cadre d'une collaboration entre l'International Water Association (IWA) et l'action COST. Cette plateforme a été conçue afin de permettre une comparaison objective et reproductible des différentes stratégies de contrôle et de conception appliquées aux stations d'épuration (Jeppsson et al., 2007).

Le BSM2 décrit l'ensemble d'une station d'épuration, en intégrant à la fois la filière de traitement de l'eau et la filière de traitement des boues. La filière eau repose sur un modèle de boues activées, tandis que la filière boue intègre un digesteur anaérobie modélisé à l'aide de l'ADM1, un modèle biologique détaillé plus loin dans ce chapitre (Nopens et al., 2010). Cette intégration des deux filières permet de simuler de manière réaliste les interactions entre le traitement de l'eau et le traitement des boues, ce qui constitue un atout majeur par rapport à des approches ne considérant qu'une seule de ces deux filières.

Grâce à cette structure standardisée, le BSM2 est aujourd'hui largement utilisé par la communauté scientifique comme référence pour l'évaluation de nouvelles stratégies de modélisation et de contrôle, notamment dans le contexte des procédés intégrant une étape de digestion anaérobie (Jeppsson et al., 2007; Nopens et al., 2010).

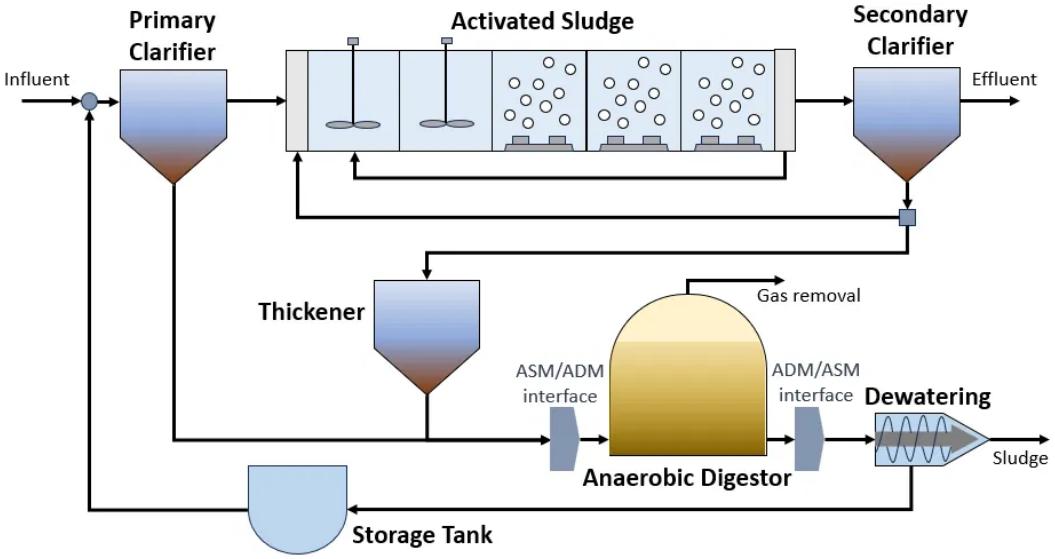


Figure 1.3 – Représentation schématique du layout du Benchmark Simulation Model No. 2 (BSM2), intégrant la filière eau (boues activées) et la filière boue (digesteur anaérobie).

1.4 Les bioréacteurs anaérobies

Plusieurs configurations de réacteurs ont été développées afin d'améliorer les performances de la digestion anaérobie. Le digesteur conventionnel, appelé réacteur par-

faitement agité (CSTR), constitue la configuration la plus simple. Il s'agit d'une cuve unique dans laquelle le substrat est en contact permanent avec la biomasse, grâce à un système d'agitation mécanique. Cette configuration reste toutefois limitée par le temps de séjour de la biomasse, qui est directement lié au temps de séjour hydraulique.

Afin de dissocier le temps de séjour de la biomasse de celui du liquide, le réacteur UASB (Upflow Anaerobic Sludge Blanket) a été développé au cours des années 1970 aux Pays-Bas, sous l'impulsion des travaux de Lettinga et de son équipe (Lettinga et al., 1980). Ce réacteur fonctionne selon un flux ascendant : l'effluent traverse un lit de boues granulaires denses, ce qui favorise un contact intime entre le substrat et la biomasse, tout en permettant une bonne rétention de cette dernière dans le réacteur.

D'autres configurations dérivées ont également été proposées dans la littérature, telles que le filtre anaérobie, dans lequel la biomasse se développe sous forme de biofilm fixé sur un support inerte, le réacteur EGSB (Expanded Granular Sludge Bed), qui améliore le contact entre le substrat et la biomasse grâce à une vitesse ascensionnelle plus élevée, ainsi que les réacteurs à lit fluidisé, dans lesquels la biomasse est fixée sur de petites particules maintenues en suspension par le flux liquide (van Lier, 2008; Kanafin et al., 2021).

Ces différentes configurations, dites à haute charge, ont permis d'augmenter considérablement les performances des procédés anaérobies, en réduisant le volume des réacteurs nécessaires et en améliorant leur stabilité. La figure 1.4 présente le principe de fonctionnement général d'un digesteur anaérobie.

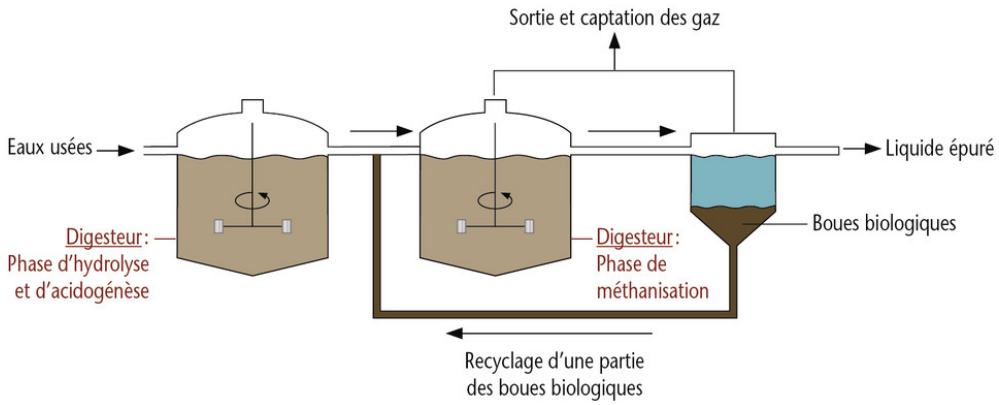


Figure 1.4 – Schéma de principe d'un digesteur anaérobie : entrée des eaux usées, étapes de digestion, sortie et captation des gaz, liquide épuré et recyclage partiel des boues biologiques. Source : illustration fournie par l'auteur ; référence en ligne fournie.

1.5 Aperçu des modèles biologiques utilisés dans la littérature

La modélisation mathématique de la digestion anaérobie constitue un outil précieux pour comprendre, prédire et optimiser le fonctionnement des réacteurs. Plusieurs modèles ont été développés dans la littérature, avec des niveaux de complexité variables.

Le modèle le plus complet et le plus largement utilisé est l'ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1), développé par un groupe de travail de l'International Water Association (IWA). Ce modèle décrit de façon détaillée les différentes étapes biologiques et physico-chimiques de la digestion anaérobie (Batstone et al., 2002). Il est aujourd'hui considéré comme une référence internationale pour la simulation des procédés anaérobies.

À côté de ce modèle complet, des modèles réduits ont également été proposés, dans le but de simplifier l'analyse et faciliter l'identification des paramètres. Le modèle AM2, par exemple, propose une représentation simplifiée du processus à travers seulement deux étapes principales, l'acidogenèse et la méthanogenèse (Bernard et al., 2001). Ce type de modèle réduit est particulièrement utile pour des applications nécessitant un temps de calcul limité, notamment dans le cadre du contrôle des procédés.

Un état de l'art plus récent souligne d'ailleurs que les travaux portant sur la modélisation et la commande des AnMBR restent peu nombreux comparés à ceux consacrés aux MBR aérobies (Robles et al., 2018), ce qui motive l'approche intégrée développée dans ce mémoire.

Par ailleurs, des travaux complémentaires se sont intéressés plus spécifiquement à l'étape d'hydrolyse, considérée dans plusieurs études comme l'étape limitante du processus global. On peut citer à ce titre des travaux menés dans le contexte francophone, qui ont étudié l'effet de l'hydrolyse sur la production de biogaz à travers des approches mathématiques dédiées (Daoud et al., 2019).

Ces différents modèles, qu'ils soient complets ou réduits, constituent aujourd'hui des outils indispensables parmi les bioréacteurs qui font l'objet de travaux de modélisation, tels que les bioréacteurs à membrane anaérobies.

1.6 Les bioréacteurs à membranes (BRM)

1.6.1 Définition et principe

Un bioréacteur à membrane (BRM) est un procédé qui associe un réacteur biologique à une unité de filtration membranaire. Cette combinaison remplace le décanteur secondaire habituellement utilisé dans les procédés conventionnels de traitement des eaux usées. La membrane assure une séparation physique très efficace entre le liquide traité et la biomasse, ce qui permet une rétention quasi totale de cette dernière dans le

réacteur (Judd, 2011).

Ce principe de fonctionnement représente une différence majeure par rapport aux procédés classiques, dans lesquels la séparation entre le liquide traité et la biomasse repose sur la décantation gravitaire. Cette dernière est souvent limitée par les propriétés de sédimentation des boues, alors que la filtration membranaire ne dépend pas de ces propriétés (Le-Clech et al., 2006).

1.6.2 Intérêt par rapport aux procédés conventionnels

L'utilisation d'une membrane à la place d'un décanteur présente plusieurs avantages. Tout d'abord, la qualité de l'effluent obtenu est nettement supérieure, puisque la membrane retient non seulement la biomasse, mais également une grande partie des particules en suspension et des micro-organismes pathogènes.

Ensuite, les installations de type BRM sont généralement plus compactes que les installations conventionnelles, car elles ne nécessitent pas de bassin de décantation de grande taille.

Enfin, l'un des principaux intérêts de cette technologie réside dans la possibilité de dissocier le temps de séjour hydraulique (HRT) du temps de séjour des boues (SRT). Cette dissociation permet de maintenir une concentration élevée de biomasse dans le réacteur, indépendamment du débit d'alimentation, ce qui améliore considérablement les performances épuratoires du procédé.

1.6.3 Types de bioréacteurs à membranes

Les bioréacteurs à membranes peuvent être classés selon deux critères principaux : la configuration du module membranaire et la nature du milieu biologique.

Concernant la configuration, on distingue deux grandes catégories. Dans la configuration immergée, le module membranaire est placé directement à l'intérieur du réacteur biologique, et la perméation est généralement assurée par une légère dépression appliquée du côté du perméat. Dans la configuration externe, le module membranaire est positionné à l'extérieur du réacteur, et la liqueur mixte est pompée à travers la membrane, puis recirculée vers le réacteur. Cette dernière configuration nécessite une pression transmembranaire plus élevée, mais facilite l'entretien et le remplacement des membranes (Judd, 2011).

Concernant la nature du milieu biologique, on distingue les bioréacteurs à membrane aérobies, largement utilisés à l'échelle industrielle pour le traitement des eaux usées urbaines, et les bioréacteurs à membrane anaérobies (AnMBR), qui combinent les avantages de la digestion anaérobie décrits précédemment avec ceux de la filtration membranaire (Liao et al., 2006; Kanafin et al., 2021). Les AnMBR représentent une

technologie particulièrement prometteuse, car ils permettent d'obtenir simultanément un effluent de haute qualité et une production de biogaz valorisable, tout en s'affranchissant des limites liées à la décantation des boues anaérobies, qui sédimentent souvent difficilement.

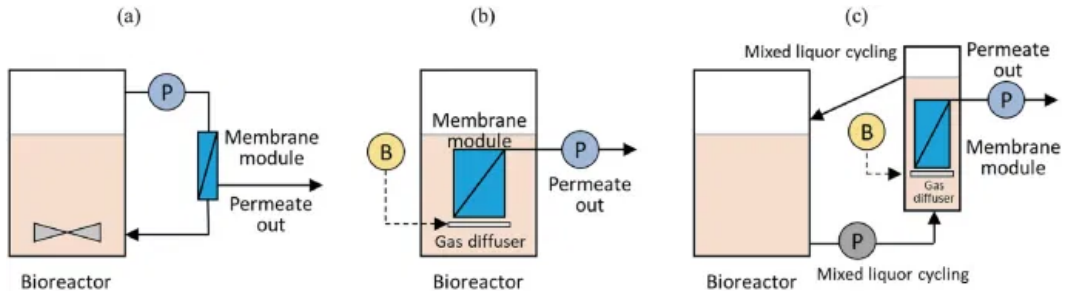


Figure 1.5 – Configurations d'un bioréacteur à membrane : (a) configuration externe, (b) configuration immergée avec diffuseur de gaz, (c) configuration immergée déportée avec boucle de recirculation. Source : adapté de Le-Clech et al. (2006) ; Judd (2011).

1.7 Les membranes de filtration

1.7.1 Classification par seuil de coupure

Les membranes utilisées dans les BRM sont classées selon leur seuil de coupure, c'est-à-dire selon la taille des particules qu'elles sont capables de retenir. On distingue principalement la microfiltration, qui retient les particules et les micro-organismes de taille relativement importante, l'ultrafiltration, qui permet de retenir des particules plus fines ainsi que certaines macromolécules, et la nanofiltration, capable de retenir des molécules de très petite taille, y compris certains ions multivalents (Judd, 2011). Dans le domaine des BRM, la microfiltration et l'ultrafiltration sont les technologies les plus couramment employées.

1.7.2 Matériaux

Les membranes peuvent être fabriquées à partir de deux grandes familles de matériaux. Les membranes organiques, réalisées en matériaux polymères, sont les plus répandues en raison de leur coût relativement faible et de leur facilité de mise en forme. Les membranes inorganiques, ou céramiques, présentent quant à elles une meilleure résistance mécanique, chimique et thermique, mais leur coût de fabrication est généralement plus élevé (Le-Clech et al., 2006).

1.7.3 Configurations de module

Plusieurs configurations de modules membranaires existent, chacune présentant des avantages et des limites spécifiques. Le module à fibres creuses regroupe un grand nombre de fibres fines, ce qui permet d'obtenir une surface de filtration importante dans

un volume réduit. Le module à plaques planes utilise des membranes disposées sous forme de feuilles planes, séparées par des espaceurs. Le module tubulaire est constitué de tubes de diamètre relativement important, ce qui facilite le nettoyage mais limite la densité de surface filtrante. Enfin, le module spiralé enroule la membrane autour d'un tube central collecteur, ce qui permet d'obtenir une surface de filtration élevée, bien que ce module soit plus sensible au colmatage (Judd, 2011; Le-Clech et al., 2006).

Le choix du type de membrane et de la configuration du module dépend des caractéristiques de l'effluent à traiter, ainsi que des contraintes économiques et opérationnelles propres à chaque installation.

1.8 Le colmatage membranaire

Le colmatage membranaire est l'un des principaux facteurs limitant le développement à grande échelle des bioréacteurs à membranes. Il se traduit par une accumulation progressive de matière à la surface ou à l'intérieur des pores de la membrane, ce qui entraîne une diminution du flux de perméat, à pression transmembranaire constante, ou une augmentation de la pression nécessaire pour maintenir un flux constant (Le-Clech et al., 2006).

On distingue généralement trois catégories de colmatage, selon la facilité avec laquelle il peut être éliminé. Le colmatage réversible peut être supprimé par un simple rinçage hydraulique ou par rétrolavage. Le colmatage irréversible nécessite un nettoyage chimique pour être éliminé. Enfin, le colmatage irrécupérable correspond à une perte définitive de perméabilité, qui ne peut être compensée par aucune méthode de nettoyage (Meng et al., 2009).

Ces différents mécanismes ont été formalisés historiquement par Hermia (1982), dont les lois de blocage de filtration à pression constante constituent encore aujourd'hui le cadre de référence pour distinguer les régimes de colmatage en fonction du mécanisme dominant (Hermia, 1982).

Plusieurs mécanismes contribuent au développement du colmatage. La formation d'un gâteau de filtration à la surface de la membrane, due au dépôt progressif de particules, en constitue le mécanisme le plus visible. Le blocage des pores, provoqué par la pénétration de particules fines à l'intérieur de la structure poreuse de la membrane, réduit directement la perméabilité de cette dernière. L'adsorption de composés dissous sur la surface ou dans les pores de la membrane contribue également au colmatage, tout comme le phénomène de polarisation de concentration, qui correspond à l'accumulation locale de solutés à proximité de la surface membranaire. La figure 1.6 illustre de façon simplifiée ces mécanismes : les particules de tailles différentes présentes dans l'eau brute

alimentée s'accumulent progressivement à la surface de la membrane, formant un gâteau de filtration, tandis qu'une partie d'entre elles pénètre à l'intérieur des pores, réduisant ainsi le passage de l'eau purifiée à travers la membrane.

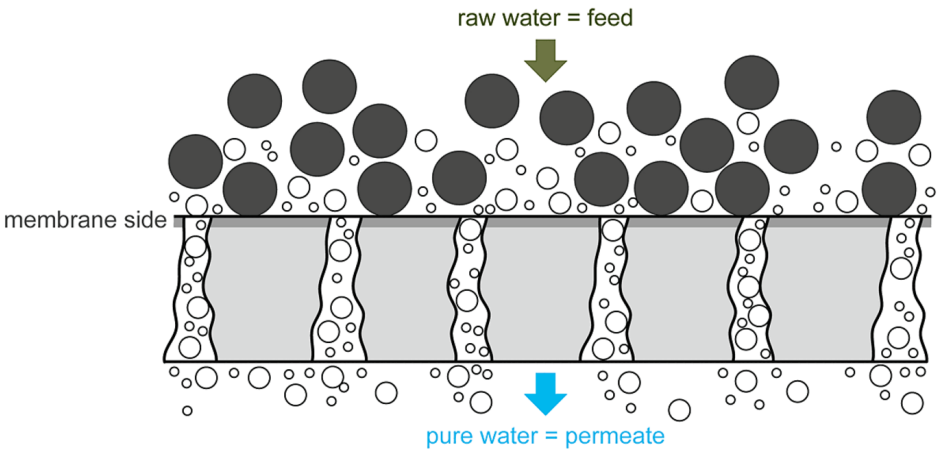


Figure 1.6 – Illustration simplifiée des mécanismes de colmatage : dépôt des particules en surface (formation d'un gâteau de filtration) et pénétration des particules fines à l'intérieur des pores de la membrane. Source : adapté de Le-Clech et al. (2006) ; Meng et al. (2009).

Parmi les composés responsables du colmatage, les substances polymériques extracellulaires (EPS) et les produits microbiens solubles (SMP) jouent un rôle particulièrement important. Ces composés, produits par les micro-organismes lors de leur métabolisme et de leur dégradation, contribuent de façon significative à la formation du gâteau de filtration et à l'obstruction des pores (Laspidou and Rittmann, 2002; Liao et al., 2006).

Enfin, le colmatage est influencé par plusieurs facteurs opérationnels, notamment le flux de perméat appliqué, la concentration en matières en suspension (MLSS), la concentration en EPS et en SMP, ainsi que les conditions hydrodynamiques au voisinage de la membrane, telles que l'aération ou l'agitation (Meng et al., 2009; Skouteris et al., 2012). La compréhension de ces différents mécanismes et facteurs constitue une étape indispensable avant d'envisager toute stratégie de modélisation du colmatage, qui sera développée dans les chapitres suivants de ce mémoire.

1.9 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a permis de dresser une synthèse bibliographique des connaissances nécessaires à la compréhension du sujet de ce mémoire. Les principes fondamentaux de la digestion anaérobie ont d'abord été rappelés, avant de présenter la plateforme BSM2, utilisée comme référence pour l'évaluation intégrée des procédés de traitement des eaux usées. Les différentes configurations de bioréacteurs anaérobies développées pour améliorer les performances de ce procédé ont ensuite été décrites, ainsi qu'un

aperçu des principaux modèles biologiques disponibles dans la littérature, sans entrer dans le détail mathématique de ces approches.

La deuxième partie du chapitre s'est concentrée sur les bioréacteurs à membranes, en présentant leur principe de fonctionnement, leur intérêt par rapport aux procédés conventionnels, ainsi que les différentes configurations et technologies de membranes existantes. Enfin, le phénomène de colmatage membranaire, qui constitue une limite majeure au développement de cette technologie, a été détaillé, à travers ses différents types, ses mécanismes et ses facteurs d'influence.

L'ensemble de ces éléments bibliographiques constitue le socle sur lequel s'appuiera la suite de ce mémoire. Le chapitre suivant sera consacré à la présentation détaillée du modèle retenu pour ce travail, ainsi qu'à la problématique spécifique du colmatage membranaire dans un bioréacteur à membrane anaérobie.

Chapitre 2

Modélisation biologique ADM1-SMP/EPS d'un bioréacteur anaérobie

2.1 Introduction

Le premier chapitre a présenté une synthèse bibliographique du contexte général de ce mémoire : la digestion anaérobie, les bioréacteurs anaérobies, les bioréacteurs à membranes et le phénomène de colmatage. Les modèles biologiques disponibles dans la littérature, en particulier l'ADM1 et l'AM2, n'y ont été que brièvement cités, sans détail mathématique, puisque ce niveau de détail était réservé au présent chapitre. Ce deuxième chapitre a pour objectif de présenter en détail le modèle biologique retenu pour ce travail. Il se compose de trois parties. La première décrit la structure complète du modèle ADM1 (Anaerobic Digestion Model No. 1) : ses hypothèses, ses variables d'état, ses processus biochimiques et ses équations de bilan. La deuxième partie définit les produits microbiens solubles (SMP), décomposés en UAP et BAP, ainsi que les substances polymériques extracellulaires (EPS), et présente le modèle intégré proposé par Aquino and Stuckey (2008), qui sert de base à la suite du travail. La troisième partie explique comment ces deux briques sont couplées pour former le modèle biologique complet utilisé dans la simulation de ce mémoire, et introduit la manière dont les sorties de ce modèle biologique (en particulier les UAP et les BAP) alimenteront le modèle de colmatage membranaire présenté au chapitre suivant, qui s'appuie sur les travaux de Benyahia et al. (2024).

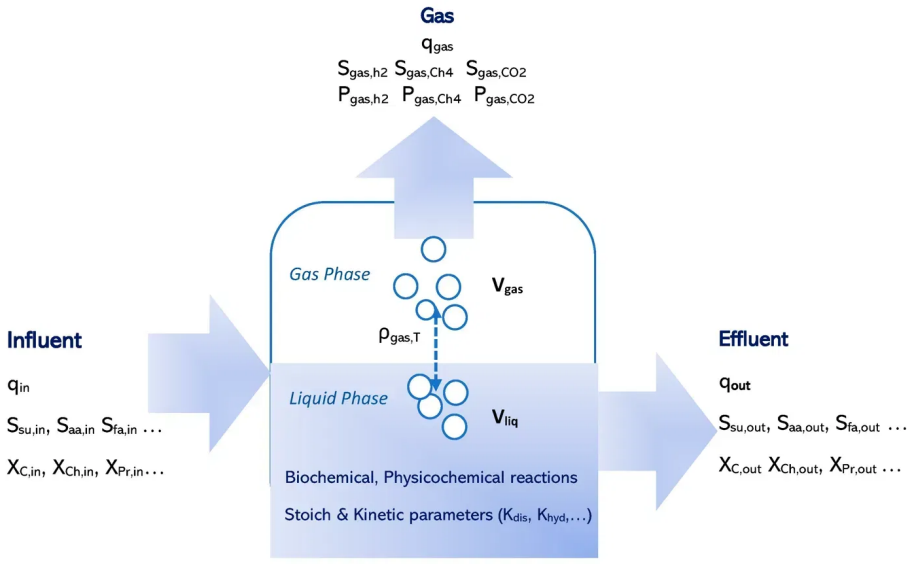


Figure 2.1 – Schéma d'enveloppe de bilan du réacteur ADM1 : flux d'entrée et de sortie du liquide, transfert gaz-liquide vers la phase gazeuse et sortie du biogaz. Source : documentation WaterTAP, NAWI / U.S. Department of Energy (https ://watertap. readthedocs.io/en/latest/technical_reference/flowsheets/ADM1.html).

2.2 Le modèle ADM1

2.2.1 Structure générale et hypothèses

L'ADM1 a été développé par un groupe de travail de l'International Water Association (IWA) dans le but de fournir un modèle structuré et consensuel de la digestion anaérobie, applicable à une large gamme de substrats (Batstone et al. (2002)). Le modèle décrit un réacteur parfaitement mélangé (CSTR), dans lequel la concentration de chaque composant est supposée uniforme en tout point du volume liquide. Deux phases sont représentées : une phase liquide, dans laquelle se déroulent les réactions biochimiques, et une phase gazeuse, qui reçoit les composés volatils produits (hydrogène, méthane, dioxyde de carbone) par transfert gaz-liquide (Rosen and Jeppsson (2006)). Le modèle combine deux catégories de processus. D'une part, des processus biochimiques intracellulaires et extracellulaires (désintégration, hydrolyse, absorption et croissance microbienne, décès) qui transforment la matière organique en biogaz. D'autre part, des processus physico-chimiques (équilibres acide-base, transfert gaz-liquide) qui ne font intervenir aucune réaction biologique mais qui déterminent des grandeurs essentielles au fonctionnement du modèle, en particulier le pH, dont dépendent plusieurs fonctions d'inhibition. La figure 2.1 représente ce principe sous la forme d'un schéma d'enveloppe de bilan : un flux d'affluent (débit qin , composés solubles Si,in et particulaires Xi,in) entre dans le réacteur, où il subit l'ensemble des réactions biochimiques et physico-chimiques dans la phase liquide de volume V_{liq} ; les composés volatils sont transférés vers la phase gazeuse de volume V_{gas} , d'où ils sont évacués sous forme de biogaz (débit qgas , concentrations Sgas,i et pressions partielles pgas,i), tandis que l'effluent liquide (débit qout , composés Si,out et Xi,out) quitte le réacteur.

Une représentation des principales voies de transformation des substrats organiques et des composés phénoliques dans le modèle ADM1 étendu est présentée à la figure 2.2.

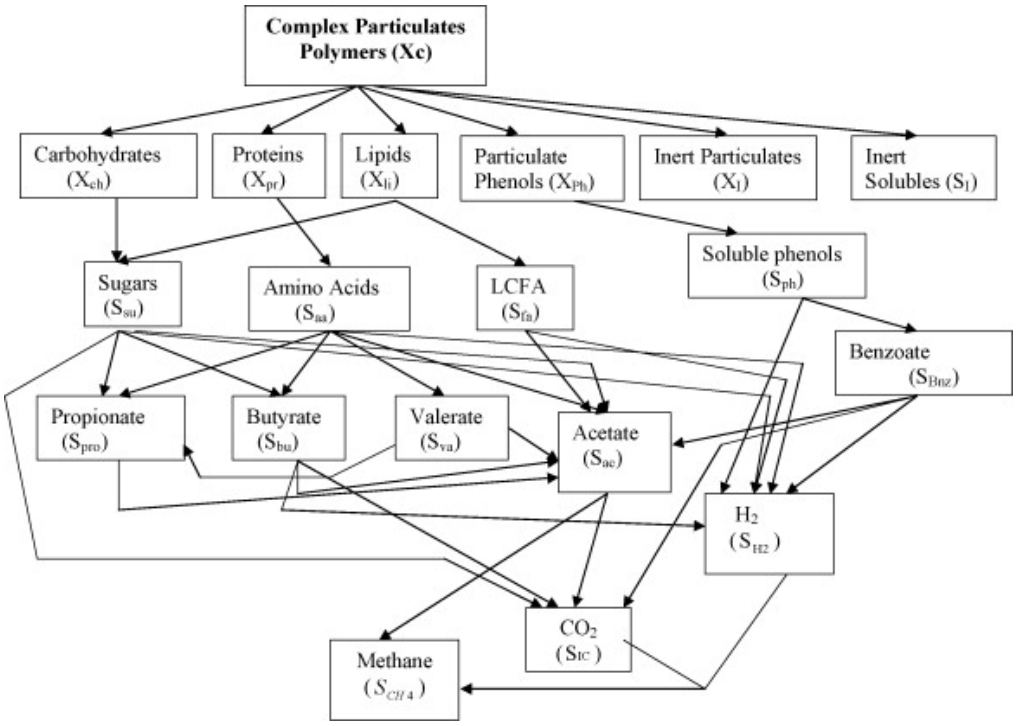


Figure 2.2 – Schéma des voies de transformation anaérobie des substrats organiques et des composés phénoliques. Source : adapté de l'article disponible sur ScienceDirect : https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0304389409012886.

2.2.2 Variables d'état

Le modèle ADM1 décrit l'évolution temporelle de 26 variables de concentration dans la phase liquide, regroupées en composés solubles et composés particulaires, auxquelles s'ajoutent des variables algébriques d'équilibre ionique et des variables de phase gazeuse. Le tableau 2.1 présente ces variables, avec la notation utilisée par Batstone et al. (2002) et reprise dans l'implémentation WaterTAP de l'ADM1.

Tableau 2.1 – Variables d'état solubles et particulaires du modèle ADM1 (d'après Batstone et al. (2002)).

Symbole	Description	Unité
Variables solubles (12)		
S_{su}	Monosaccharides	kgCOD/m^3
S_{aa}	Acides aminés	kgCOD/m^3
S_{fa}	Acides gras à longue chaîne (AGCL)	kgCOD/m^3
S_{va}	Valérate total	kgCOD/m^3
S_{bu}	Butyrate total	kgCOD/m^3
S_{pro}	Propionate total	kgCOD/m^3
S_{ac}	Acétate total	kgCOD/m^3
S_{h2}	Hydrogène dissous	kgCOD/m^3
S_{ch4}	Méthane dissous	kgCOD/m^3
S_{IC}	Carbone inorganique	kmolC/m^3
S_{IN}	Azote inorganique	kmolN/m^3
S_I	Solubles inertes	kgCOD/m^3
Variables particulaires (12)		
X_c (ou X_{xc})	Composites particulaires	kgCOD/m^3
X_{ch}	Glucides particulaires	kgCOD/m^3
X_{pr}	Protéines particulaires	kgCOD/m^3
X_{li}	Lipides particulaires	kgCOD/m^3
X_{su}	Biomasse dégradant les sucres	kgCOD/m^3
X_{aa}	Biomasse dégradant les acides aminés	kgCOD/m^3
X_{fa}	Biomasse dégradant les AGCL	kgCOD/m^3
X_{c4}	Biomasse dégradant valérate/butyrate	kgCOD/m^3
X_{pro}	Biomasse dégradant le propionate	kgCOD/m^3
X_{ac}	Biomasse acétoclaste	kgCOD/m^3
X_{h2}	Biomasse hydrogénotrophe	kgCOD/m^3
X_I	Particulaires inertes	kgCOD/m^3
Variables d'ions et de la phase gazeuse		
S_{cat}, S_{an}	Cations / anions totaux	kmol/m^3
$S_{hva}, S_{hbu}, S_{hpro}, S_{hac}, S_{hco3}, S_{nh3}$	Espèces ionisées des paires acide-base	kmol/m^3 ou kgCOD/m^3
$S_{gas,h2}, S_{gas,ch4}, S_{gas,co2}$	Concentrations dans la phase gazeuse	kgCOD/m^3 ou kmolC/m^3

Total ADM1 : 42 états.

Les 12 variables solubles et les 12 variables particulaires, complétées par S_{cat} et S_{an}, forment les 26 variables de concentration au sens strict du modèle. L'implémentation

MATLAB développée pour ce travail leur ajoute 6 variables algébriques (les paires acide-base S_{hva}, S_{hbu}, S_{hpro}, S_{hac}, S_{hco3}, S_{nh3}) et 3 variables de la phase gazeuse, soit 35 composantes actives au total (x_1 à x_{35}), suivies de 7 emplacements réservés mais inutilisés dans cette implémentation (x_{36} à x_{42}), pour un vecteur d'état ADM1 de 42 composantes au total.

Ce vecteur à 42 composantes, conforme dans son principe à la structure décrite par Rosen and Jeppsson (2006), constitue les 42 premières composantes du vecteur d'état global de ce mémoire (les composantes suivantes étant réservées aux variables SMP/EPS présentées en section 2.4).

2.2.3 Les processus biochimiques

L'ADM1 comporte 19 processus biochimiques ρ_1 à ρ_{19} : un processus de désintégration, trois processus d'hydrolyse, huit processus d'absorption (uptake) associés à la croissance de huit groupes microbiens, et sept processus de décès, un pour chaque groupe microbien. Le tableau 2.2 présente ces processus avec leur expression cinétique, telle qu'implémentée dans le code de simulation et conforme à Batstone et al. (2002).

Tableau 2.2 – Processus biochimiques de l'ADM1 (d'après Batstone et al. (2002)).

N°	Description	Expression
ρ_1	Désintégration	$k_{dis}X_c$
ρ_2	Hydrolyse des glucides	$k_{hyd,ch}X_{ch}$
ρ_3	Hydrolyse des protéines	$k_{hyd,pr}X_{pr}$
ρ_4	Hydrolyse des lipides	$k_{hyd,li}X_{li}$
ρ_5	Absorption des sucres	$k_{m,su}\frac{S_{su}}{K_{S,su}+S_{su}}X_{su}I_1$
ρ_6	Absorption des acides aminés	$k_{m,aa}\frac{S_{aa}}{K_{S,aa}+S_{aa}}X_{aa}I_1$
ρ_7	Absorption des AGCL	$k_{m,fa}\frac{S_{fa}}{K_{S,fa}+S_{fa}}X_{fa}I_1I_{h2,fa}$
ρ_8	Absorption du valérate	$k_{m,c4}\frac{S_{va}}{K_{S,c4}+S_{va}}X_{c4}\frac{S_{va}}{S_{va}+S_{bu}}I_1I_{h2,c4}$
ρ_9	Absorption du butyrate	$k_{m,c4}\frac{S_{bu}}{K_{S,c4}+S_{bu}}X_{c4}\frac{S_{bu}}{S_{va}+S_{bu}}I_1I_{h2,c4}$
ρ_{10}	Absorption du propionate	$k_{m,pro}\frac{S_{pro}}{K_{S,pro}+S_{pro}}X_{pro}I_1I_{h2,pro}$
ρ_{11}	Absorption de l'acétate	$k_{m,ac}\frac{S_{ac}}{K_{S,ac}+S_{ac}}X_{ac}I_1I_{nh3}$
ρ_{12}	Absorption de l'hydrogène	$k_{m,h2}\frac{S_{h2}}{K_{S,h2}+S_{h2}}X_{h2}I_1$
ρ_{13}–ρ_{19}	Décès de $X_{su}, X_{aa}, X_{fa}, X_{c4}, X_{pro}, X_{ac}, X_{h2}$	$k_{dec,X_i}X_i$

Les termes I_1 (limitation par l'azote inorganique et inhibition par le pH), $I_{h2,fa}$,

$I_{h2,c4}$, $I_{h2,pro}$ (inhibitions par l'hydrogène) et I_{nh3} (inhibition par l'ammoniac libre) sont détaillés en section 2.2.6.

2.2.4 La matrice stœchiométrique (matrice de Petersen)

L'ADM1 est formalisé selon le formalisme de Petersen, dans lequel chaque ligne représente un processus ρ_j et chaque colonne une variable d'état S_i ou X_i. Le coefficient $\nu_{i,j}$ situé à l'intersection indique la quantité de la variable i produite (coefficient positif) ou consommée (coefficient négatif) par unité d'avancement du processus j. Ce formalisme permet d'écrire l'ensemble des équations de bilan sous une forme compacte et systématique, où le taux de variation de chaque variable est la somme des contributions de tous les processus qui la concernent. Le tableau 2.4 présente un extrait illustratif de la matrice, limité aux trois derniers processus de la chaîne (absorption du propionate, de l'acétate et de l'hydrogène) et aux variables directement concernées. Cet extrait montre en particulier comment le propionate est converti en acétate et en hydrogène (processus ρ_{10}), qui sont ensuite consommés par les deux voies de la méthanogenèse (ρ_{11} et ρ_{12}). La publication originale de Batstone et al. (2002) (Tableau 6) sert de référence pour le formalisme général ; la matrice issue de l'implémentation MATLAB utilisée dans ce mémoire, avec les 19 processus et les 24 composants listés, est reproduite en Annexe A.

Tableau 2.3 – Composants affectés par les 19 processus ADM1 (coefficients de l'implémentation).

Processus	Intitulé	Composants affectés (coefficient, exactement comme dans le code)
p_1	Désintégration	$X_c : -1$; $S_I : +f_{sI}$; $X_{ch} : +f_{ch}$; $X_{pr} : +f_{pr}$; $X_{li} : +f_{li}$; $X_I : +f_{xI}$; $S_{IC} : -s_1$; $S_{IN} : +(N_{xc} - f_{xI}N_I - f_{sI}N_I - f_{pr}N_{aa})$
p_2	Hydrolyse (glucides)	$X_{ch} : -1$; $S_{su} : +1$; $S_{IC} : -s_2$
p_3	Hydrolyse (protéines)	$X_{pr} : -1$; $S_{aa} : +1$; $S_{IC} : -s_3$
p_4	Hydrolyse (lipides)	$X_{li} : -1$; $S_{su} : +(1 - f_{fa})$; $S_{fa} : +f_{fa}$; $S_{IC} : -s_4$
p_5	Acidogenèse (S_{su})	$S_{su} : -1$; $S_{bu} : +(1 - Y_{su})f_{bu,su}$; $S_{pro} : +(1 - Y_{su})f_{pro,su}$; $S_{ac} : +(1 - Y_{su})f_{ac,su}$; $S_{h2} : +(1 - Y_{su})f_{h2,su}$; $X_{su} : +Y_{su}$; $S_{IC} : -s_5$; $S_{IN} : -Y_{su}N_{bac}$

Suite à la page suivante

Tableau 2.3 – suite

Processus	**Intitulé**	**Composants affectés (coefficient, exactement comme dans le code)**
p_6	Acidogenèse (S_{aa})	$S_{aa} : -1;\ S_{va} : +(1 - Y_{aa}) f_{va,aa};$ $S_{bu} : +(1 - Y_{aa}) f_{bu,aa};\ S_{pro} : +(1 - Y_{aa}) f_{pro,aa};$ $S_{ac} : +(1 - Y_{aa}) f_{ac,aa};\ S_{h2} : +(1 - Y_{aa}) f_{h2,aa};$ $X_{aa} : +Y_{aa};\ S_{IC} : -s_6;\ S_{IN} : +(N_{aa} - Y_{aa} N_{bac})$
p_7	Acétogenèse (S_{fa})	$S_{fa} : -1;\ S_{ac} : +(1 - Y_{fa}) \cdot 0.7;$ $S_{h2} : +(1 - Y_{fa}) \cdot 0.3;\ X_{fa} : +Y_{fa};$ $S_{IC} : -s_7;\ S_{IN} : -Y_{fa} N_{bac}$
p_8	Acétogenèse (S_{va})	$S_{va} : -1$ (via le rapport $S_{va}/(S_{va} + S_{bu})$); $S_{pro} : +(1 - Y_{c4}) \cdot 0.54;\ S_{ac} : +(1 - Y_{c4}) \cdot 0.31;$ $S_{h2} : +(1 - Y_{c4}) \cdot 0.15;\ X_{c4} : +Y_{c4};$ $S_{IC} : -s_8;\ S_{IN} : -Y_{c4} N_{bac}$
p_9	Acétogenèse (S_{bu})	$S_{bu} : -1$ (via le rapport $S_{bu}/(S_{va} + S_{bu})$); $S_{ac} : +(1 - Y_{c4}) \cdot 0.8;\ S_{h2} : +(1 - Y_{c4}) \cdot 0.2;$ $X_{c4} : +Y_{c4}$ (partagé avec p_8); $S_{IC} : -s_9;\ S_{IN} : -Y_{c4} N_{bac}$
p_{10}	Acétogenèse (S_{pro})	$S_{pro} : -1;\ S_{ac} : +(1 - Y_{pro}) \cdot 0.57;$ $S_{h2} : +(1 - Y_{pro}) \cdot 0.43;\ X_{pro} : +Y_{pro};$ $S_{IC} : -s_{10};\ S_{IN} : -Y_{pro} N_{bac}$
p_{11}	Méthanogenèse acétoclaste	$S_{ac} : -1;\ S_{ch4} : +(1 - Y_{ac});$ $X_{ac} : +Y_{ac};\ S_{IC} : -s_{11};\ S_{IN} : -Y_{ac} N_{bac}$
p_{12}	Méthanogenèse hydrogénotrophe	$S_{h2} : -1;\ S_{ch4} : +(1 - Y_{h2});$ $X_{h2} : +Y_{h2};\ S_{IC} : -s_{12};\ S_{IN} : -Y_{h2} N_{bac}$
p_{13}	Décès X_{su}	$X_{su} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$
p_{14}	Décès X_{aa}	$X_{aa} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$
p_{15}	Décès X_{fa}	$X_{fa} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$
p_{16}	Décès X_{c4}	$X_{c4} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$

Suite à la page suivante

Tableau 2.3 – suite

Processus	Intitulé	Composants affectés (coefficient, exactement comme dans le code)
p_{17}	Décès X_{pro}	$X_{pro} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$
p_{18}	Décès X_{ac}	$X_{ac} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$
p_{19}	Décès X_{h2}	$X_{h2} : -1;\ X_c : +1;\ S_{IC} : -s_{13};$ $S_{IN} : +(N_{bac} - N_{xc})$

Tableau 2.4 – Extrait illustratif de la matrice stœchiométrique de Petersen (processus d'acétogenèse et de méthanogenèse).

Processus	S_{pro}	S_{ac}	S_{h2}	S_{ch4}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}
ρ_{10} (absorption propionate)	-1	$+0.57(1 - Y_{pro})$	$+0.43(1 - Y_{pro})$		$+Y_{pro}$		
ρ_{11} (absorption acétate)		-1		$+(1 - Y_{ac})$		$+Y_{ac}$	
ρ_{12} (absorption hydrogène)			-1	$+(1 - Y_{h2})$			$+Y_{h2}$

2.2.5 Équations de bilan de matière

Pour un réacteur parfaitement mélangé de volume liquide constant V_{liq}, alimenté à un débit volumique Q, l'équation générale de bilan de matière pour une variable soluble S_i s'écrit :

$$\frac{dS_i}{dt} = D\,(S_{i,\text{in}} - S_i) + \sum_{j=1}^{19} \nu_{i,j}\rho_j \tag{2.1}$$

pour $D = Q/V_{\text{liq}}$. Les variables particulaires suivent une équation de même forme. À titre d'exemple, pour la variable soluble S_{ac} (acétate), l'équation de bilan correctement pondérée par les rendements de biomasse s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{dS_{ac}}{dt} = {} & D(S_{ac,\text{in}} - S_{ac}) + (1 - Y_{su})f_{ac,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{ac,aa}\rho_6 + 0.7(1 - Y_{fa})\rho_7 \\ & + 0.31(1 - Y_{c4})\rho_8 + 0.8(1 - Y_{c4})\rho_9 + 0.57(1 - Y_{pro})\rho_{10} - \rho_{11}\end{aligned} \tag{2.2}$$

Le facteur $(1 - Y_i)$ traduit le fait que seule la fraction du substrat non convertie en biomasse (Y_i) est redistribuée vers les produits solubles, conformément au formalisme de Batstone et al. (2002) ; cette pondération s'applique de façon symétrique à l'ensemble des huit processus d'absorption (ρ_5 à ρ_{12}) dans la matrice de Petersen complète. Pour la variable particulaire X_{su} (biomasse dégradant les sucres), l'équation s'écrit plus

simplement, puisque cette biomasse n'est produite que par sa propre croissance (ρ_5) et consommée uniquement par son propre décès (ρ_{13}) :

$$\frac{dX_{su}}{dt} = D(X_{su,\text{in}} - X_{su}) + Y_{su}\rho_5 - \rho_{13} \tag{2.3}$$

Le système complet compte 42 composantes d'état (26 variables de concentration, 6 équilibres acide-base, 3 variables de phase gazeuse, et 7 emplacements réservés inutilisés). Ces équations sont détaillées intégralement ci-dessous, regroupées par catégorie de variables. Toutes suivent la forme générale de l'équation (2.1) ; $D = Q/V_{\text{liq}}$ désigne le taux de dilution. Les grandeurs notées "in" correspondent aux concentrations dans l'affluent. Les 19 processus ρ_1 à ρ_{19} sont ceux du tableau 2.2, et ρ_{T8}, ρ_{T9}, ρ_{T10} les trois vitesses de transfert gaz-liquide (hydrogène, méthane, dioxyde de carbone). On note $\rho_{dec} = \sum_{j=13}^{19} \rho_j$ la somme des sept processus de décès.

Variables solubles (12 équations).

$$\frac{dS_{su}}{dt} = D(S_{su,\text{in}} - S_{su}) + \rho_2 + (1 - f_{fa,li})\rho_4 - \rho_5 \tag{2.4}$$

$$\frac{dS_{aa}}{dt} = D(S_{aa,\text{in}} - S_{aa}) + \rho_3 - \rho_6 \tag{2.5}$$

$$\frac{dS_{fa}}{dt} = D(S_{fa,\text{in}} - S_{fa}) + f_{fa,li}\rho_4 - \rho_7 \tag{2.6}$$

$$\frac{dS_{va}}{dt} = D(S_{va,\text{in}} - S_{va}) + (1 - Y_{aa})f_{va,aa}\rho_6 - \rho_8 \tag{2.7}$$

$$\frac{dS_{bu}}{dt} = D(S_{bu,\text{in}} - S_{bu}) + (1 - Y_{su})f_{bu,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{bu,aa}\rho_6 - \rho_9 \tag{2.8}$$

$$\frac{dS_{pro}}{dt} = D(S_{pro,\text{in}} - S_{pro}) + (1 - Y_{su})f_{pro,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{pro,aa}\rho_6 + 0.54(1 - Y_{c4})\rho_8 - \rho_{10} \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned}\frac{dS_{ac}}{dt} &= D(S_{ac,\text{in}} - S_{ac}) + (1 - Y_{su})f_{ac,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{ac,aa}\rho_6 + 0.7(1 - Y_{fa})\rho_7 \\ &\quad + 0.31(1 - Y_{c4})\rho_8 + 0.8(1 - Y_{c4})\rho_9 + 0.57(1 - Y_{pro})\rho_{10} - \rho_{11}\end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned}\frac{dS_{h2}}{dt} &= D(S_{h2,\text{in}} - S_{h2}) + (1 - Y_{su})f_{h2,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{h2,aa}\rho_6 + 0.3(1 - Y_{fa})\rho_7 \\ &\quad + 0.15(1 - Y_{c4})\rho_8 + 0.2(1 - Y_{c4})\rho_9 + 0.43(1 - Y_{pro})\rho_{10} - \rho_{12} - \rho_{T8}\end{aligned} \tag{2.11}$$

$$\frac{dS_{ch4}}{dt} = D(S_{ch4,\text{in}} - S_{ch4}) + (1 - Y_{ac})\rho_{11} + (1 - Y_{h2})\rho_{12} - \rho_{T9} \tag{2.12}$$

$$\begin{aligned}\frac{dS_{IC}}{dt} &= D(S_{IC,\text{in}} - S_{IC}) - s_1\rho_1 - s_2\rho_2 - s_3\rho_3 - s_4\rho_4 - s_5\rho_5 - s_6\rho_6 - s_7\rho_7 \\ &\quad - s_8\rho_8 - s_9\rho_9 - s_{10}\rho_{10} - s_{11}\rho_{11} - s_{12}\rho_{12} - s_{13}\rho_{dec} - \rho_{T10}\end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned}\frac{dS_{IN}}{dt} &= D(S_{IN,\text{in}} - S_{IN}) + (N_{xc} - f_{xI,xc}N_I - f_{sI,xc}N_I - f_{pr,xc}N_{aa})\,\rho_1 \\ &\quad - Y_{su}N_{bac}\rho_5 + (N_{aa} - Y_{aa}N_{bac})\,\rho_6 - Y_{fa}N_{bac}\rho_7 \\ &\quad - Y_{c4}N_{bac}(\rho_8 + \rho_9) - Y_{pro}N_{bac}\rho_{10} - Y_{ac}N_{bac}\rho_{11} \\ &\quad - Y_{h2}N_{bac}\rho_{12} + (N_{bac} - N_{xc})\,\rho_{dec}\end{aligned} \tag{2.14}$$

$$\frac{dS_I}{dt} = D(S_{I,\text{in}} - S_I) + f_{sI,xc}\rho_1 \tag{2.15}$$

Les coefficients s_1 à s_{13} traduisent le bilan de carbone associé à chaque processus, à partir des teneurs en carbone C_i des différents composés :

$$s_1 = -C_{xc} + f_{sI,xc}C_{sI} + f_{ch,xc}C_{ch} + f_{pr,xc}C_{pr} + f_{li,xc}C_{li} + f_{xI,xc}C_{xI} \tag{2.16}$$

$$s_2 = -C_{ch} + C_{su} \tag{2.17}$$

$$s_3 = -C_{pr} + C_{aa} \tag{2.18}$$

$$s_4 = -C_{li} + (1 - f_{fa,li})C_{su} + f_{fa,li}C_{fa} \tag{2.19}$$

$$s_5 = -C_{su} + (1 - Y_{su})(f_{bu,su}C_{bu} + f_{pro,su}C_{pro} + f_{ac,su}C_{ac}) + Y_{su}C_{bac} \tag{2.20}$$

$$s_6 = -C_{aa} + (1 - Y_{aa})(f_{va,aa}C_{va} + f_{bu,aa}C_{bu} + f_{pro,aa}C_{pro} + f_{ac,aa}C_{ac}) + Y_{aa}C_{bac} \tag{2.21}$$

$$s_7 = -C_{fa} + 0.7(1 - Y_{fa})C_{ac} + Y_{fa}C_{bac} \tag{2.22}$$

$$s_8 = -C_{va} + (1 - Y_{c4})(0.54C_{pro} + 0.31C_{ac}) + Y_{c4}C_{bac} \tag{2.23}$$

$$s_9 = -C_{bu} + 0.8(1 - Y_{c4})C_{ac} + Y_{c4}C_{bac} \tag{2.24}$$

$$s_{10} = -C_{pro} + 0.57(1 - Y_{pro})C_{ac} + Y_{pro}C_{bac} \tag{2.25}$$

$$s_{11} = -C_{ac} + (1 - Y_{ac})C_{ch4} + Y_{ac}C_{bac} \tag{2.26}$$

$$s_{12} = -(1 - Y_{h2})C_{ch4} + Y_{h2}C_{bac} \tag{2.27}$$

$$s_{13} = C_{bac} - C_{xc} \tag{2.28}$$

Variables particulaires (12 équations).

$$\frac{dX_c}{dt} = D(X_{c,\text{in}} - X_c) - \rho_1 + \rho_{dec} \tag{2.29}$$
$$\frac{dX_{ch}}{dt} = D(X_{ch,\text{in}} - X_{ch}) + f_{ch,xc}\rho_1 - \rho_2 \tag{2.30}$$
$$\frac{dX_{pr}}{dt} = D(X_{pr,\text{in}} - X_{pr}) + f_{pr,xc}\rho_1 - \rho_3 \tag{2.31}$$
$$\frac{dX_{li}}{dt} = D(X_{li,\text{in}} - X_{li}) + f_{li,xc}\rho_1 - \rho_4 \tag{2.32}$$
$$\frac{dX_{su}}{dt} = D(X_{su,\text{in}} - X_{su}) + Y_{su}\rho_5 - \rho_{13} \tag{2.33}$$
$$\frac{dX_{aa}}{dt} = D(X_{aa,\text{in}} - X_{aa}) + Y_{aa}\rho_6 - \rho_{14} \tag{2.34}$$
$$\frac{dX_{fa}}{dt} = D(X_{fa,\text{in}} - X_{fa}) + Y_{fa}\rho_7 - \rho_{15} \tag{2.35}$$
$$\frac{dX_{c4}}{dt} = D(X_{c4,\text{in}} - X_{c4}) + Y_{c4}(\rho_8 + \rho_9) - \rho_{16} \tag{2.36}$$
$$\frac{dX_{pro}}{dt} = D(X_{pro,\text{in}} - X_{pro}) + Y_{pro}\rho_{10} - \rho_{17} \tag{2.37}$$
$$\frac{dX_{ac}}{dt} = D(X_{ac,\text{in}} - X_{ac}) + Y_{ac}\rho_{11} - \rho_{18} \tag{2.38}$$
$$\frac{dX_{h2}}{dt} = D(X_{h2,\text{in}} - X_{h2}) + Y_{h2}\rho_{12} - \rho_{19} \tag{2.39}$$
$$\frac{dX_I}{dt} = D(X_{I,\text{in}} - X_I) + f_{xI,xc}\rho_1 \tag{2.40}$$

Ions, équilibres acide-base et phase gazeuse (17 équations). Les cations et anions totaux ne sont affectés par aucun processus biochimique et suivent une simple dilution :

$$\frac{dS_{cat}}{dt} = D(S_{cat,\text{in}} - S_{cat}) \tag{2.41}$$
$$\frac{dS_{an}}{dt} = D(S_{an,\text{in}} - S_{an}) \tag{2.42}$$

Les six variables associées aux paires acide-base (S_{hva}, S_{hbu}, S_{hpro}, S_{hac}, S_{hco3}, S_{nh3}) sont, dans l'implémentation retenue, de véritables états différentiels : elles sont recalculées à chaque pas de temps par une cinétique de dissociation/association rapide, pilotée par des constantes $k_{A,B}$ élevées, qui les fait relaxer quasi instantanément vers l'équilibre de Henderson-Hasselbalch correspondant aux acides totaux courants (S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, S_{ac}, S_{IC}, S_{IN}), selon le principe décrit par Rosen and Jeppsson (2006).

Le ciel gazeux V_{gas} est soumis au transfert gaz-liquide et à l'évacuation du biogaz

au débit q_{gas} :

$$\frac{dS_{gas,h2}}{dt} = -\frac{S_{gas,h2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T8}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{2.43}$$

$$\frac{dS_{gas,ch4}}{dt} = -\frac{S_{gas,ch4}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T9}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{2.44}$$

$$\frac{dS_{gas,co2}}{dt} = -\frac{S_{gas,co2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T10}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{2.45}$$

avec

$$q_{gas} = \max\left(k_P\left(p_{gas,tot} - P_{atm}\right), 0\right),$$

où $p_{gas,tot}$ est la somme des pressions partielles de H_2, CH_4, CO_2 et de la pression de vapeur d'eau, et k_P un coefficient de résistance à l'écoulement du biogaz. Les sept dernières composantes du vecteur d'état ADM1 (x_{36} à x_{42}) sont des emplacements réservés, non utilisés par la version de l'ADM1 implémentée ici ($dx_i/dt = 0$ pour $i = 36, \ldots, 42$) ; ce sont les cinq composantes suivantes, x_{43} à x_{47}, qui portent les variables du sous-modèle SMP/EPS présentées en section 2.4 (tableau 2.8).

Note sur les variables réservées. Le vecteur d'état ADM1 comporte 42 emplacements : 35 composantes actives (x_1 à x_{35}) et 7 emplacements réservés (x_{36} à x_{42}). Les sept positions réservées sont conservées dans le code afin de préserver la structure modulaire et la compatibilité de l'interface numérique avec la formulation ADM1 retenue dans ce mémoire. Elles ne sont pas utilisées dans les calculs dynamiques de l'implémentation actuelle ($dx_i/dt = 0$ pour $i = 36, \ldots, 42$). Cette organisation facilite la réutilisation du code et le couplage ultérieur avec les sous-modèles SMP/EPS et membranaire.

Les équations (2.4)–(2.12) ci-dessus incluent correctement les facteurs $(1 - Y_i)$ dans les termes de production issus de l'absorption des sucres (ρ_5) et des acides aminés (ρ_6), conformément à la matrice de Petersen de Batstone et al. (2002). La fermeture du bilan DCO pour ces processus est ainsi assurée.

2.2.6 Équilibres physico-chimiques

Deux catégories de phénomènes physico-chimiques complètent le modèle biochimique : les équilibres acide-base, qui déterminent le pH du milieu, et le transfert gaz-liquide, qui régit le passage de l'hydrogène, du méthane et du dioxyde de carbone vers la phase gazeuse. Le pH est obtenu à partir d'un bilan de charge faisant intervenir les cations et anions totaux (S_{cat}, S_{an}), les espèces ionisées des acides gras volatils et du bicarbonate, ainsi que l'azote ammoniacal. La concentration en ions H^+ est la racine positive de l'équation de neutralité électrique, résolue algébriquement à chaque pas de temps, ce

qui donne le pH par :

$$pH = -\log_{10}(S_{H^+}).$$

Ce pH intervient dans trois fonctions d'inhibition non compétitive, de forme gaussienne tronquée, associées respectivement aux populations acidogènes/acétogènes ($I_{pH,aa}$), acétoclastes ($I_{pH,ac}$) et hydrogénotrophes ($I_{pH,h2}$) :

$$I_{pH,X} = \exp\left[-3\left(\frac{pH - pH_{UL,X}}{pH_{UL,X} - pH_{LL,X}}\right)^2\right], \qquad pH \leq pH_{UL,X} \tag{2.46}$$

où $pH_{UL,X}$ et $pH_{LL,X}$ sont les limites supérieure et inférieure de la gamme de pH tolérée par le groupe microbien X.

Trois autres inhibitions non compétitives interviennent : la limitation par l'azote inorganique disponible ($I_{IN} = S_{IN}/(S_{IN} + K_{S,IN})$), l'inhibition par l'hydrogène dissous des voies utilisant les AGCL, le valérate/butyrate et le propionate (de la forme $I_{h2} = K_{I,h2}/(K_{I,h2} + S_{h2})$), et l'inhibition de la méthanogenèse acétoclaste par l'ammoniac libre ($I_{nh3} = K_{I,nh3}/(K_{I,nh3} + S_{nh3})$).

Le transfert gaz-liquide de l'hydrogène, du méthane et du dioxyde de carbone est modélisé par une loi de type film, proportionnelle à l'écart à l'équilibre de Henry :

$$\rho_{T,i} = k_L a(S_i - K_{H,i} p_{gas,i}) \tag{2.47}$$

où $k_L a$ est le coefficient de transfert volumétrique et $K_{H,i}$ la constante de Henry du composé i, dépendante de la température. Le débit total de biogaz produit résulte de l'écart entre la pression totale de la phase gazeuse et la pression atmosphérique, $q_{gas} = \max(k_P(p_{gas,tot} - P_{atm}), 0)$, avec $k_P = 5 \times 10^4\,\mathrm{m^3/(j \cdot bar)}$, $k_L a = 200\,\mathrm{j^{-1}}$ et $P_{atm} = 1,013$ bar dans l'implémentation retenue ici.

Paramètres stœchiométriques et cinétiques retenus. Le tableau 2.5 rassemble les rendements de biomasse (Y_i) et la constante de demi-saturation de l'azote inorganique ($K_{S,IN}$) utilisés dans ce mémoire, absents des tableaux précédents. Ces valeurs sont celles par défaut de Batstone et al. (2002), reprises sans modification dans l'implémentation BSM2 de Rosen and Jeppsson (2006).

Tableau 2.5 – Rendements de biomasse et constante de demi-saturation de l'azote inorganique.

Y_{su}	Y_{aa}	Y_{fa}	Y_{c4}	Y_{pro}	Y_{ac}	Y_{h2}	$K_{S,IN}$
0,10	0,08	0,06	0,06	0,04	0,05	0,06	10^{-4} M

Rosen and Jeppsson (2006) montrent que plusieurs paramètres par défaut de Batstone

et al. (2002) ne referment pas correctement les bilans élémentaires de carbone et d'azote, et proposent des valeurs corrigées pour le cadre BSM2. Le tableau 2.6 confirme que l'implémentation retenue dans ce mémoire utilise déjà ces valeurs corrigées, et non les valeurs par défaut d'origine.

Tableau 2.6 – Paramètres de composition corrigés selon Rosen and Jeppsson (2006), retenus dans ce mémoire.

Paramètre	**Valeur par défaut (Batstone et al., 2002)**	**Valeur corrigée (Rosen and Jeppsson, 2006) – retenue ici**
$f_{xI,xc}$	0.20	0.20
$f_{li,xc}$	0.25	0.30
N_{xc}	0.0020 kmolN/kgCOD	0.00269 kmolN/kgCOD
N_I	0.0020 kmolN/kgCOD	0.00429 kmolN/kgCOD
N_{bac}	0.00625 kmolN/kgCOD	0.00571 kmolN/kgCOD

Limites du traitement des équilibres acide-base. L'implémentation retenue dans ce mémoire calcule le pH par résolution algébrique directe du bilan de charge :

$$\phi = S_{cat} + (S_{IN} - S_{nh3}) - S_{hco3} - \frac{S_{hac}}{64} - \frac{S_{hpro}}{112} - \frac{S_{hbu}}{160} - \frac{S_{hva}}{208} - S_{an}.$$

d'où

$$S_{H^+} = -\frac{\phi}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\phi^2 + 4K_w}, \qquad pH = -\log_{10}(S_{H^+}).$$

Les six espèces ionisées (S_{hva}, S_{hbu}, S_{hpro}, S_{hac}, S_{hco3}, S_{nh3}) ne sont pas résolues comme des variables algébriques implicites (schémas DAE1/DAE2 de Rosen and Jeppsson (2006)), mais intégrées dynamiquement selon une cinétique de dissociation/association rapide, pilotée par des constantes $k_{A,B} = 10^{10}\,\mathrm{j}^{-1}$ (10 milliards j^{-1}), communes aux six couples :

$$\begin{aligned}
\frac{dS_{hva}}{dt} &= -k_{A,B,va}\left[S_{hva}(K_{a,va} + S_{H^+}) - K_{a,va}S_{va}\right],\\
\frac{dS_{hbu}}{dt} &= -k_{A,B,bu}\left[S_{hbu}(K_{a,bu} + S_{H^+}) - K_{a,bu}S_{bu}\right],\\
\frac{dS_{hpro}}{dt} &= -k_{A,B,pro}\left[S_{hpro}(K_{a,pro} + S_{H^+}) - K_{a,pro}S_{pro}\right],\\
\frac{dS_{hac}}{dt} &= -k_{A,B,ac}\left[S_{hac}(K_{a,ac} + S_{H^+}) - K_{a,ac}S_{ac}\right],\\
\frac{dS_{hco3}}{dt} &= -k_{A,B,co2}\left[S_{hco3}(K_{a,co2} + S_{H^+}) - K_{a,co2}S_{IC}\right],\\
\frac{dS_{nh3}}{dt} &= -k_{A,B,IN}\left[S_{nh3}(K_{a,IN} + S_{H^+}) - K_{a,IN}S_{IN}\right].
\end{aligned}$$

Ces six variables sont donc de véritables états différentiels, qui relaxent quasi instantanément vers l'équilibre de Henderson-Hasselbalch correspondant aux acides totaux courants (S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, S_{ac}, S_{IC}, S_{IN}). Le bilan de charge utilisé pour le pH est ainsi pleinement couplé à la dynamique des acides gras volatils et du carbone/azote inorganiques, et non limité à l'évolution de S_{cat}, S_{an} et S_{IN} seules. Les fonctions d'inhibition gaussiennes tronquées présentées ci-dessus restent, quant à elles, celles de la formulation originale de Batstone et al. (2002).

2.2.7 Simulation de l'ADM1 seul (sans couplage SMP/EPS)

Avant d'introduire les produits microbiens solubles et les EPS, il est utile de vérifier le comportement de l'ADM1 pris isolément. Cette étape permet de s'assurer que la dynamique biologique reste cohérente avant le couplage avec le sous-modèle d'Aquino et Stuckey. Les simulations sont réalisées sur un réacteur de volume liquide $V_{\text{liq}} = 3400$ m^3, alimenté à $Q = 170$ m^3/j, soit un temps de séjour hydraulique de 20 jours, à 35 °C et sur un horizon de 300 jours. Les conditions initiales sont proches, sans être exactement confondues avec l'état stationnaire. Les huit figures suivantes regroupent les principales variables de l'ADM1 et permettent de suivre, étape par étape, la relaxation du système vers un régime stable.

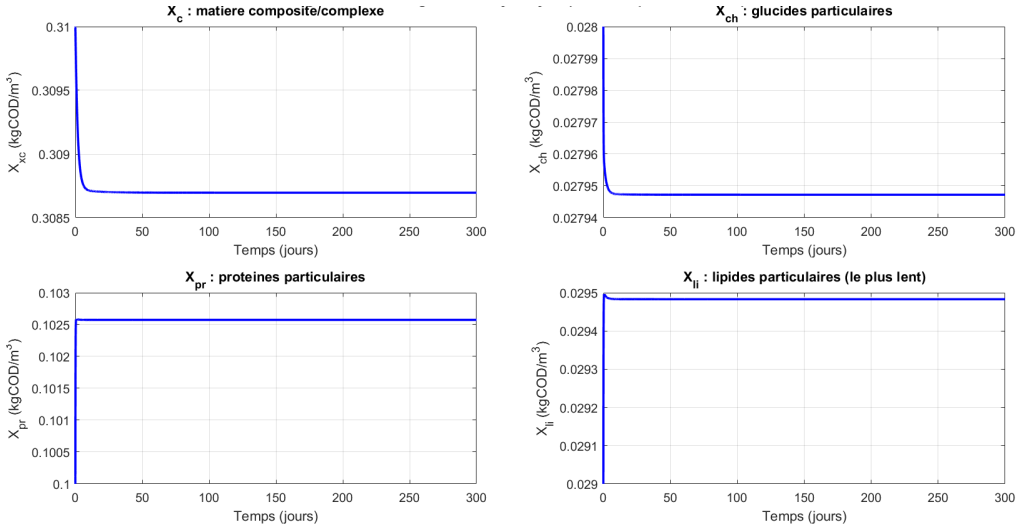


Figure 2.3 – Désintégration et hydrolyse : évolution des matières particulaires X_c, X_{ch}, X_{pr} et X_{li}.

La figure 2.2 montre que la désintégration et l'hydrolyse conduisent rapidement le système vers un nouvel équilibre. X_c et X_{ch} diminuent légèrement au début de la simulation, puis se stabilisent. Cette évolution traduit la consommation progressive de la matière composite et de la fraction glucidique. À l'inverse, X_{pr} et X_{li} présentent une variation initiale faible et atteignent rapidement un plateau. L'ensemble indique que les flux de désintégration et d'hydrolyse restent bien équilibrés après le transitoire initial,

sans évolution continue des fractions particulaires.

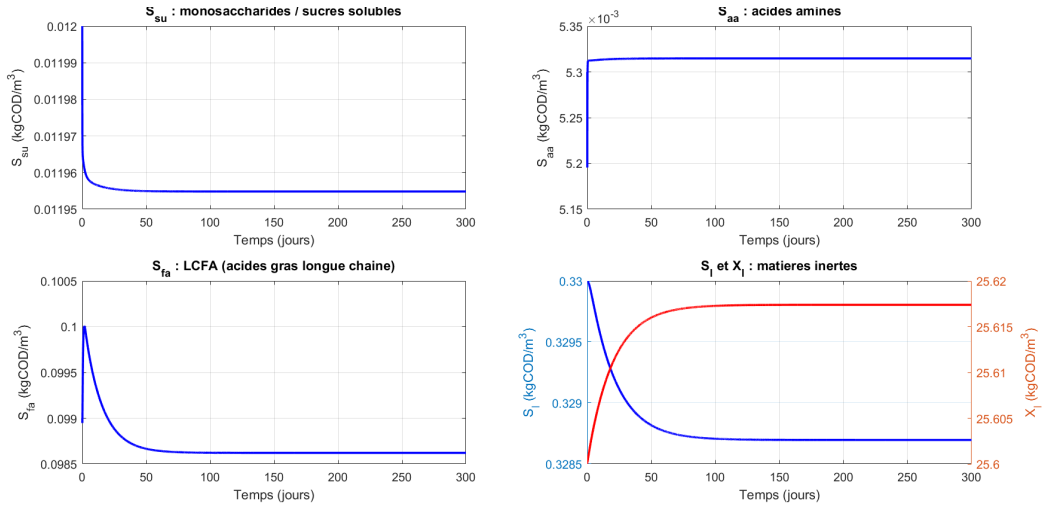


Figure 2.4 – Acidogenèse : évolution des substrats solubles et des matières inertes.

La figure 2.3 met en évidence une stabilisation rapide des composés associés à l'acidogenèse. Le sucre soluble S_{su} diminue légèrement avant d'atteindre un plateau, tandis que S_{aa} augmente très faiblement. La concentration en acides gras à longue chaîne S_{fa} diminue progressivement puis se stabilise, ce qui traduit leur consommation par les microorganismes correspondants. Sur le dernier sous-graphe, la matière soluble inerte S_I diminue légèrement alors que la matière particulaire inerte X_I augmente avant de se stabiliser. Cette évolution est cohérente avec la redistribution progressive de la matière organique vers des formes inertes et avec le renouvellement hydraulique du réacteur.

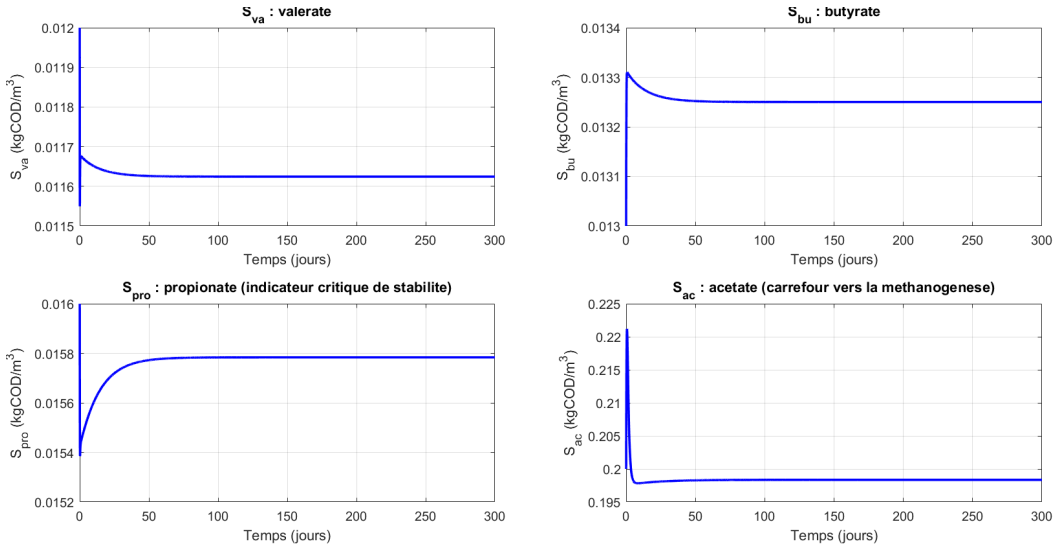


Figure 2.5 – Acétogenèse : évolution des acides gras volatils (AGV) valérate, butyrate, propionate et acétate.

La figure 2.4 montre une dynamique transitoire plus visible pour les AGV. Le valérate S_{va} diminue légèrement, tandis que le butyrate S_{bu} présente une petite élévation initiale avant de rejoindre un plateau. Le propionate S_{pro} augmente progressivement vers une valeur stable. L'acétate S_{ac} présente le transitoire le plus marqué : sa concentration diminue rapidement au début, puis se stabilise autour de $0,198$ kgCOD/m^3. Après cette phase initiale, les quatre AGV restent pratiquement constants, ce qui traduit l'établissement d'un équilibre entre leur production et leur consommation dans le réseau métabolique de l'ADM1.

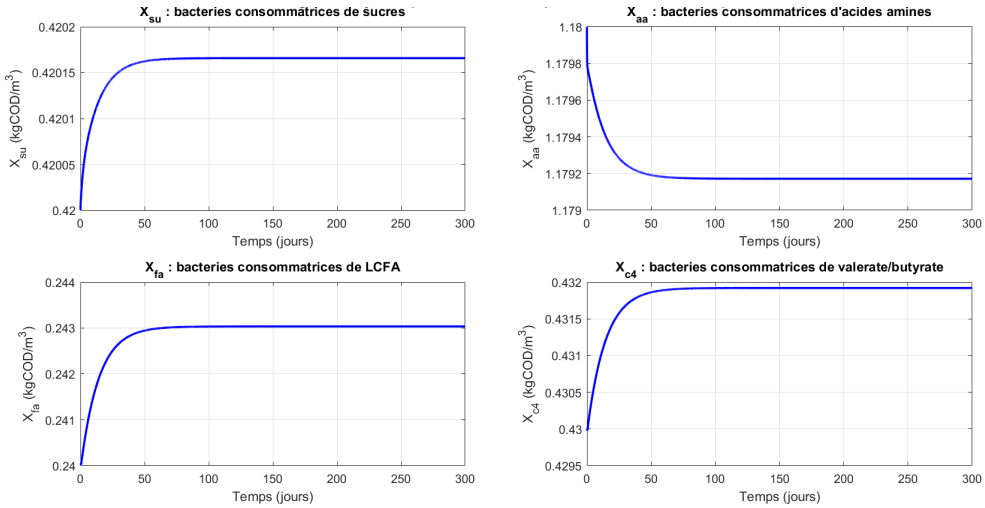


Figure 2.6 – Biomasse fermentative : évolution de X_{su}, X_{aa}, X_{fa} et X_{c4}.

Les biomasses fermentatives de la figure 2.5 convergent elles aussi vers des valeurs stationnaires. X_{su}, X_{fa} et X_{c4} augmentent depuis leurs conditions initiales et atteignent progressivement un plateau. À l'inverse, X_{aa} diminue légèrement avant de se stabiliser. Ces trajectoires montrent que les différents groupes microbiens s'ajustent aux concentrations de substrats disponibles. La stabilisation relativement rapide, en quelques dizaines de jours, indique que la dynamique de croissance et de consommation se compense ensuite de manière régulière.

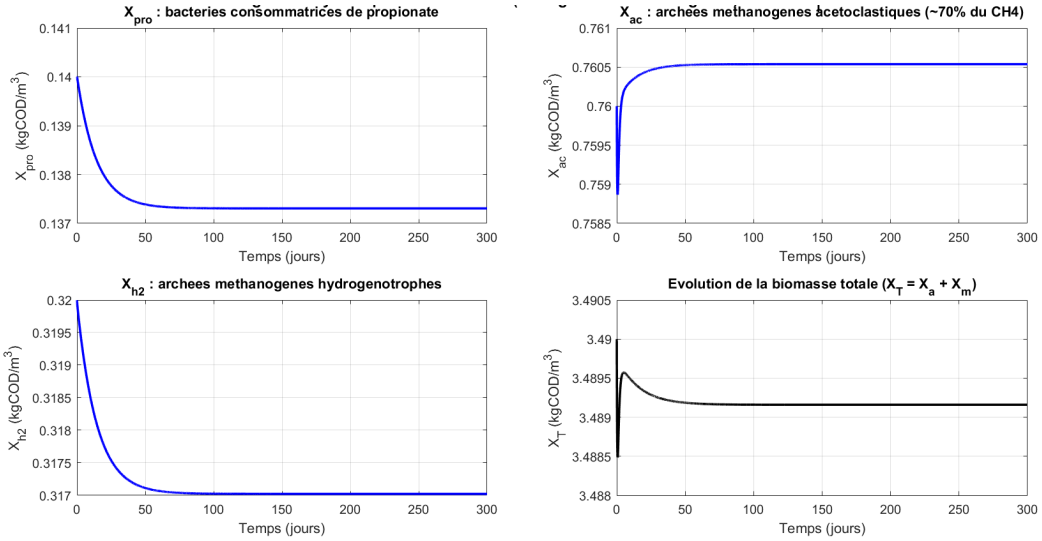


FIGURE 2.7 – Acétogenes et méthanogenes : évolution de X_{pro}, X_{ac}, X_{h2} et de la biomasse totale $X_T = X_a + X_m$.

La figure 2.6 met en évidence des comportements différenciés entre les populations microbiennes terminales. La biomasse consommatrice de propionate X_{pro} diminue progressivement vers un plateau, alors que la biomasse acétoclaste X_{ac} augmente légèrement avant de se stabiliser. La biomasse hydrogénotrophe X_{h2} diminue elle aussi pendant la phase initiale. La biomasse totale X_T présente un transitoire très faible et converge rapidement vers une valeur pratiquement constante. Il n'y a donc pas de dérive de la biomasse globale : les variations observées correspondent principalement à une réorganisation des populations entre elles.

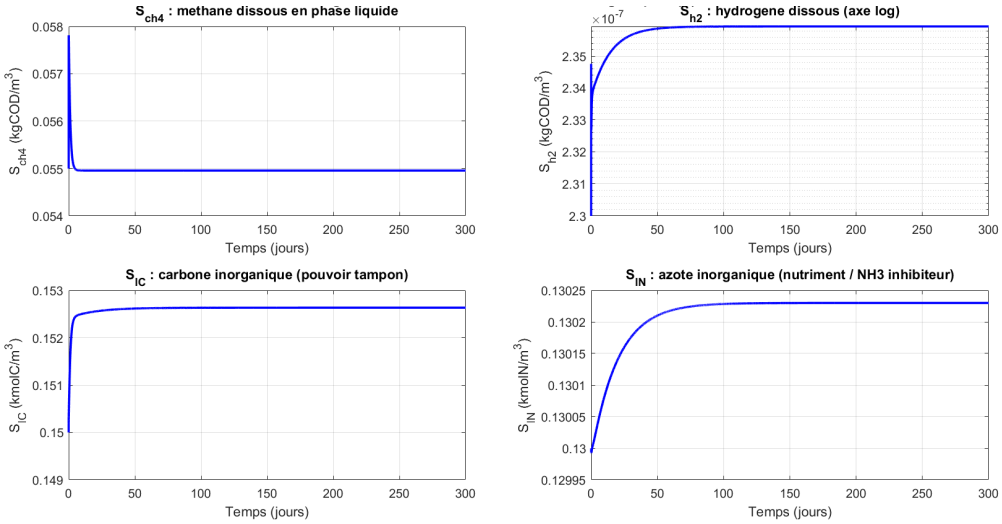


FIGURE 2.8 – Gaz dissous et nutriments : évolution de S_{ch4}, S_{h2}, S_{IC} et S_{IN}.

La figure 2.7 montre que les variables gazeuses dissoutes et les nutriments atteignent rapidement un régime stable. Le méthane dissous S_{ch4} diminue fortement au début

puis se stabilise autour de $0,055$ kgCOD/m^3. L'hydrogène dissous S_{h2} n'évolue que très faiblement et reste à un niveau très bas. Le carbone inorganique S_{IC} augmente rapidement vers un plateau, tandis que l'azote inorganique S_{IN} suit une évolution croissante plus progressive. L'absence de variations importantes après le transitoire indique que les échanges et les conversions biologiques conduisent à un équilibre stable entre gaz dissous et espèces minérales.

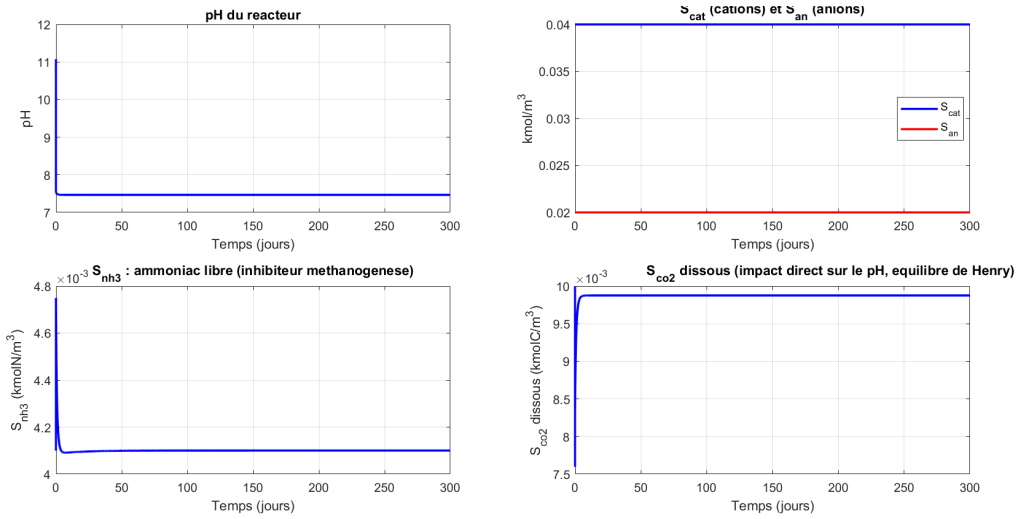


Figure 2.9 – Physico-chimie et pH : évolution du pH, des ions et du CO_2 dissous.

Le comportement physico-chimique présenté à la figure 2.8 est dominé par le transitoire du pH. La valeur initiale élevée, proche de 11, est rapidement corrigée et se stabilise autour de $7,4$, ce qui correspond à un milieu beaucoup plus représentatif d'un fonctionnement anaérobie stable. Les concentrations des cations et des anions restent pratiquement constantes. L'ammoniac libre S_{nh3} diminue rapidement avant d'atteindre un plateau, alors que le CO_2 dissous augmente puis se stabilise. La convergence simultanée de ces variables montre que l'équilibre acido-basique du réacteur est atteint très rapidement par rapport à l'horizon total de simulation.

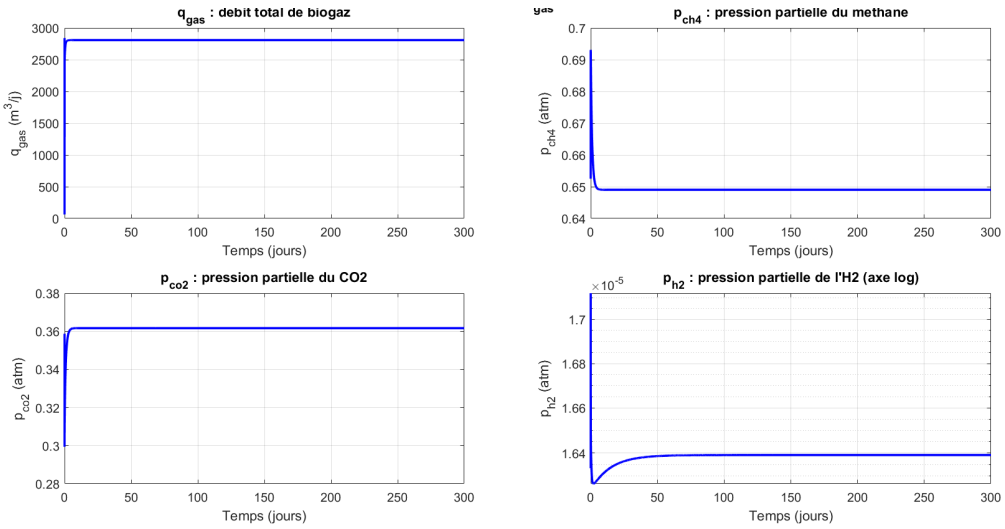


FIGURE 2.10 – Production de biogaz : débit total et pressions partielles de CH_4, CO_2 et H_2.

Enfin, la figure 2.9 confirme la stabilisation de la phase gazeuse. Le débit total de biogaz q_{gas} augmente très rapidement depuis sa condition initiale et atteint un plateau voisin de $2,8 \times 10^3$ m^3/j, qui reste ensuite pratiquement constant. La pression partielle du méthane p_{CH_4} diminue légèrement vers environ $0,65$ atm, tandis que p_{CO_2} augmente vers environ $0,36$ atm. La pression partielle de l'hydrogène reste très faible. Ces résultats sont cohérents avec un régime où la production de biogaz est principalement portée par le méthane et le dioxyde de carbone, tandis que l'hydrogène reste une espèce minoritaire.

Pris dans leur ensemble, les huit résultats montrent que l'ADM1 atteint un régime quasi stationnaire bien avant la fin des 300 jours. Les variations observées au début de la simulation correspondent donc à une phase de relaxation liée aux conditions initiales, et non à une instabilité persistante du modèle. Cette vérification est importante pour la suite du travail, car les sorties biologiques utilisées pour calculer les SMP et les EPS sont alors obtenues à partir d'un système ayant atteint un comportement stable.

2.3 Les produits microbiens solubles (SMP) et les substances polymériques extracellulaires (EPS)

2.3.1 Définitions et origine biologique

Au-delà du substrat non dégradé, l'effluent d'un réacteur anaérobie contient une fraction de matière organique soluble d'origine strictement microbienne, appelée produits microbiens solubles (Soluble Microbial Products, SMP). Cette fraction se décompose classiquement en deux catégories (Aquino and Stuckey (2008)) :

— les UAP (Utilization-Associated Products), des produits libérés lors de l'utilisation du substrat par les micro-organismes, dont la formation est donc directement

associée à la croissance ;

— les BAP (Biomass-Associated Products), des produits associés à la biomasse elle-même, libérés lors de la lyse cellulaire et de l'hydrolyse des substances polymériques extracellulaires (EPS) liées.

Les EPS sont des macromolécules (polysaccharides, protéines, acides nucléiques) sécrétées par les micro-organismes et formant une matrice autour des cellules. On distingue les EPS liées (bound EPS), qui restent attachées à la surface cellulaire, des EPS solubles, libérées dans le milieu par détachement ou hydrolyse des EPS liées. Dans le modèle retenu ici, les EPS liées sont suivies séparément pour la biomasse acidogène/acétogène (Xa) et pour la biomasse méthanogène (Xm), soit EPSXa et EPSXm . La figure 2.11 illustre de façon schématique la répartition physique de ces différents composants au sein et autour d'un floc de boues : la biomasse particulaire forme le cœur du floc, entourée d'une matrice d'EPS liées ; les BAP, dont les grosses molécules (Large BAP) issues de l'hydrolyse des EPS, se trouvent en périphérie du floc et dans le liquide interstitiel, tandis que les UAP, produits directement lors de l'utilisation du substrat, se retrouvent majoritairement dans la phase liquide externe.

Le rôle central des SMP et des EPS dans le colmatage membranaire a été récemment synthétisé dans une revue dédiée à la modélisation biologique des MBR (Mannina et al., 2023), ainsi que dans une analyse détaillée de leur contribution respective aux mécanismes de colmatage (Lee et al., 2020).

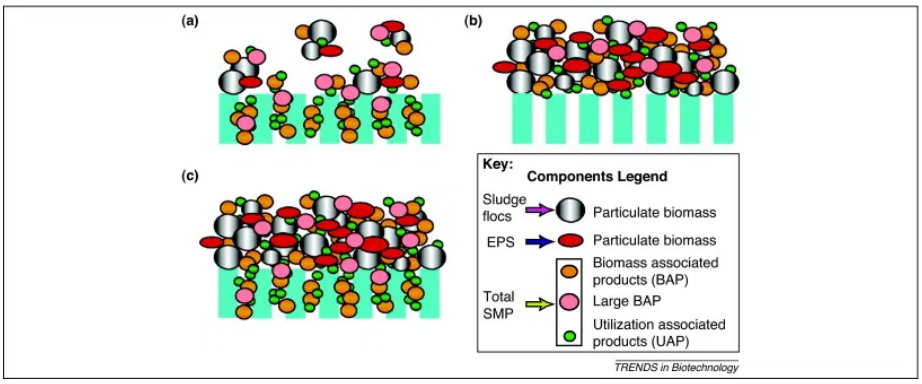


Figure 2.11 – Répartition des composants (biomasse particulaire, EPS, BAP, Large BAP, UAP) au sein d'un floc de boues, à trois stades croissants d'accumulation (a, b, c). Source : adapté d'après Trends in Biotechnology ; Le-Clech et al. (2006) ; Meng et al. (2009).

2.3.2 Le modèle unifié de Laspidou et Rittmann

Le modèle unifié de Laspidou and Rittmann (2002), déjà présenté au chapitre 1, est le premier à avoir relié dans un même cadre cohérent la production des SMP, celle des EPS et l'évolution de la biomasse active et inerte, initialement pour des systèmes aérobies. Avant ce travail, ces trois aspects étaient généralement étudiés séparément. Ce

modèle repose sur deux hypothèses centrales : d'une part, les EPS liées sont produites proportionnellement au taux d'utilisation du substrat, c'est-à-dire qu'elles apparaissent comme un sous-produit direct de la croissance bactérienne (on parle de produit « associé à la croissance ») ; d'autre part, l'hydrolyse de ces EPS liées constitue l'unique source de BAP, sans autre voie de formation possible dans ce modèle. C'est ce cadre conceptuel qui sert de point de départ au modèle présenté dans la section suivante, celui d'Aquino and Stuckey (2008), mais avec des hypothèses de formation adaptées aux systèmes anaérobies et sensiblement assouplies : contrairement au modèle de Laspidou et Rittmann, les EPS n'y sont plus considérées comme un produit associé à la croissance, et le BAP peut y provenir de deux sources distinctes → la mort cellulaire et l'hydrolyse des EPS → et non d'une seule.

2.3.3 Le modèle d'Aquino et Stuckey (2008)

Aquino and Stuckey (2008) ont proposé un modèle intégré de production des SMP et des EPS, spécifiquement développé et validé pour des chemostats anaérobies, en conditions stationnaires et transitoires. Ce modèle reprend et complète les travaux antérieurs de Barker and Stuckey (2001), en y intégrant la formation et l'hydrolyse des EPS selon le principe du modèle unifié, mais avec des hypothèses distinctes : les EPS y sont considérées comme un produit non associé à la croissance (contrairement à l'hypothèse de Laspidou and Rittmann (2002)), et la biomasse totale y est décomposée en biomasse acidogène/acétogène (X_a) et biomasse méthanogène (X_m), chacune productrice de SMP et d'EPS. Le modèle comporte huit équations différentielles couplées, portant sur le substrat (S), un produit intermédiaire assimilé à l'acétate (IP), les deux fractions de biomasse (X_a, X_m), les UAP, les BAP, et les EPS liées de chaque biomasse (EPS_{Xa}, EPS_{Xm}) :

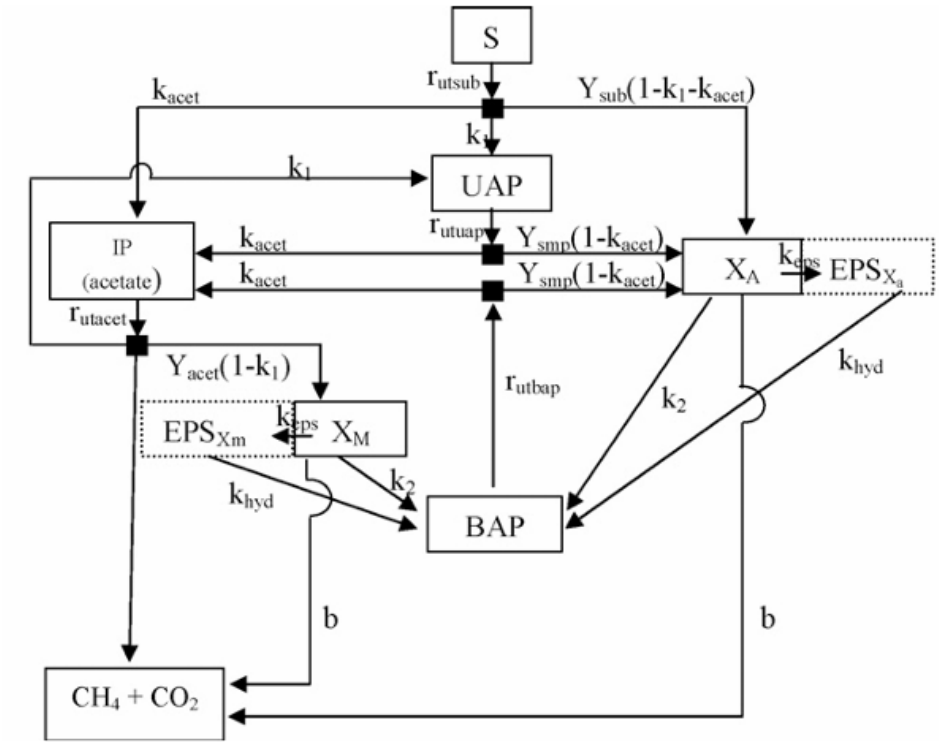


Figure 2.12 – Schéma bloc du modèle intégré d'Aquino et Stuckey (2008) pour la production des SMP et des EPS en conditions anaérobies. Source : adapté de Aquino and Stuckey (2008).

Le modèle d'Aquino et Stuckey (2008) constitue le modèle de référence théorique pour la production de SMP et d'EPS en chemostats anaérobies. Il introduit explicitement les rendements Y_{sub}, Y_{acet} et Y_{smp} ainsi que le coefficient de décès b pour représenter les flux de matière entre la biomasse, le substrat, les SMP et les EPS (Eqs. 2.48–2.55).

Dans ce mémoire, le modèle couplé implémenté simplifie cette formulation en fixant $Y_{sub} = Y_{acet} = Y_{smp} = 0$ et en négligeant le terme bX dans le système final (Eqs. 2.61–2.65). Cette simplification se justifie par : (i) redondance numérique, entre ces termes de rendement et les flux déjà capturés par la matrice stœchiométrique de l'ADM1 (cf. §2.2.4) ; (ii) stabilité numérique du schéma d'intégration sur les 45 jours de simulation ; et (iii) conservation de la structure modulaire, les Eqs. 2.61–2.65 préservant la signature du modèle de référence tout en ne retenant que les termes effectifs.

$$\frac{dS}{dt} = \frac{S_0 - S}{\theta} - r_{ut,sub} X_a \tag{2.48}$$

$$\frac{dIP}{dt} = k_{acet}(r_{ut,sub} + r_{ut,UAP} + r_{ut,BAP}) X_a - r_{ut,acet} X_m - \frac{IP}{\theta} \tag{2.49}$$

$$\begin{aligned}\frac{dX_a}{dt} = &[r_{ut,sub}Y_{sub}(1-k_1-k_{acet}) + r_{ut,UAP}Y_{smp}(1-k_{acet}) \\ &+ r_{ut,BAP}Y_{smp}(1-k_{acet})]\,X_a - \frac{X_a}{\theta} \\ &- bX_a - k_2X_a - k_{hyd}EPS_{Xa}\end{aligned} \tag{2.50}$$

$$\frac{dX_m}{dt} = r_{ut,acet}Y_{acet}(1-k_1)X_m - \frac{X_m}{\theta} - bX_m - k_2X_m - k_{hyd}EPS_{Xm} \tag{2.51}$$

$$\frac{dUAP}{dt} = k_1r_{ut,sub}X_a + k_1r_{ut,acet}X_m - \frac{UAP}{\theta} - r_{ut,UAP}X_a \tag{2.52}$$

$$\frac{dBAP}{dt} = k_2X_a + k_2X_m + k_{hyd}(EPS_{Xa} + EPS_{Xm}) - \frac{BAP}{\theta} - r_{ut,BAP}X_a \tag{2.53}$$

$$\frac{dEPS_{Xa}}{dt} = k_{EPS}X_a - \frac{EPS_{Xa}}{\theta} - k_{hyd}EPS_{Xa} \tag{2.54}$$

$$\frac{dEPS_{Xm}}{dt} = k_{EPS}X_m - \frac{EPS_{Xm}}{\theta} - k_{hyd}EPS_{Xm} \tag{2.55}$$

où θ est le temps de séjour (identique au temps de séjour hydraulique dans un chemostat sans recyclage), b le coefficient de décès endogène de la biomasse, k_1 et k_2 les constantes de formation respectivement des UAP et des BAP, k_{EPS} la constante de formation des EPS liées, et k_{hyd} la constante d'hydrolyse du premier ordre des EPS liées en BAP. Les quatre vitesses d'utilisation ($r_{ut,sub}$, $r_{ut,acet}$, $r_{ut,UAP}$, $r_{ut,BAP}$) suivent toutes une cinétique de type Monod :

$$r_{ut,sub} = \frac{q_sS}{K_s+S}, \quad r_{ut,acet} = \frac{q_{IP}IP}{K_{IP}+IP}, \quad r_{ut,UAP} = \frac{q_{uap}UAP}{K_{uap}+UAP}, \quad r_{ut,BAP} = \frac{q_{bap}BAP}{K_{bap}+BAP} \tag{2.56}$$

2.3.4 Paramétrisation du modèle d'Aquino et Stuckey (2008) – version synchronisée avec le code

Le sous-modèle utilisé est inspiré d'Aquino et Stuckey, mais il n'est pas reproduit à l'identique. Les concentrations d'entrée, les agrégations de biomasse et certains paramètres sont propres au scénario ADM1 étudié.

Les rendements Ysub , Yacet et Ysmp ainsi que b sont conservés pour traçabilité, mais ne sont pas utilisés dans la formulation couplée finalement résolue. La définition de qs = 2.9 correspond à un choix de stabilité de la formulation couplée ; elle doit donc être décrite comme un choix de paramétrisation du présent travail et non comme une valeur imposée par l'article original. Point de méthode : la valeur de 10 gCOD/L utilisée dans les expériences de référence d'Aquino et Stuckey n'est pas une condition à reproduire dans le présent modèle. Les concentrations d'entrée du réacteur considéré ici proviennent du scénario ADM1 retenu.

Tableau 2.7 – Paramètres du sous-modèle d'Aquino et Stuckey retenus dans l'implémentation.

Paramètre	Description	Valeur utilisée
q_s	Vitesse spécifique maximale d'utilisation du substrat	2,9 d^{-1}
K_s	Constante de demi-saturation du substrat	0,0225 kgCOD m^{-3}
q_{IP}	Vitesse spécifique maximale d'utilisation de l'IP	6 d^{-1}
K_{IP}	Constante de demi-saturation de l'IP	0,1 kgCOD m^{-3}
q_{uap}	Vitesse d'utilisation des UAP	1,27 d^{-1}
K_{uap}	Constante de demi-saturation des UAP	0,2 kgCOD m^{-3}
q_{bap}	Vitesse d'utilisation des BAP	0,03 d^{-1}
K_{bap}	Constante de demi-saturation des BAP	0,5 kgCOD m^{-3}
k_{hyd}	Constante d'hydrolyse des EPS	0,17 d^{-1}
k_{EPS}	Constante de formation des EPS	0,04 d^{-1}
k_1	Coefficient de formation des UAP	0.26 kgCOD m^{-3}
k_2	Constante de formation des BAP	0,0034 d^{-1}
k_{acet}	Coefficient de formation de l'IP	0.5 kgCOD m^{-3}
θ	Temps de séjour utilisé par le sous-modèle	20 d

2.3.5 Portée et interprétation du sous-modèle

Le présent couplage ne constitue pas une fusion complète des matrices stœchiométriques ADM1 et Aquino. L'ADM1 reste le modèle biologique principal ; le sous-modèle d'Aquino et Stuckey constitue une extension destinée à décrire la dynamique des UAP, des BAP, des EPS et de l'intermédiaire IP . Cette précision est importante pour l'interprétation des variables. Les variables X_a, X_m et S_v utilisées par le sous-modèle sont des grandeurs d'interface construites à partir de l'ADM1 et non des états biologiques supplémentaires de type Aquino.

$$X_a = X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{c4} + X_{pro} \tag{2.57}$$

Pour la branche méthanogène utilisée par le sous-modèle, la biomasse méthanogène d'interface regroupe les deux populations méthanogènes de l'ADM1, acétoclastique et hydrogénotrophe :

$$X_m = X_{ac} + X_{h2} \tag{2.58}$$

Cette définition permet de prendre en compte l'ensemble de la biomasse méthanogène dans les termes du sous-modèle SMP/EPS. Substrat soluble équivalent Le substrat utilisé dans le terme cinétique d'Aquino est une agrégation des principales espèces

organiques solubles de l'ADM1 :

$$S_v = S_{su} + S_{aa} + S_{fa} \tag{2.59a}$$

$$IP = S_{va} + S_{bu} + S_{pro} + S_{ac} \tag{2.59b}$$

Sv est le substrat d'entrée du sous-modèle SMP/EPS, agrégé à partir des substrats solubles de l'ADM1 qui n'ont pas encore subi d'acidogenèse (sucres, acides aminés, acides gras à longue chaîne). Il est consommé par la biomasse acidogène X_a selon la cinétique $r_{ut,sub}$ (Eq. 2.60a).

IP est le produit intermédiaire du sous-modèle, défini comme la somme des quatre acides gras volatils (AGV) issus de l'acidogenèse : valérate (S_{va}), butyrate (S_{bu}), propionate (S_{pro}) et acétate (S_{ac}). Il est consommé par la biomasse méthanogène X_m selon la cinétique $r_{ut,acet}$ (Eq. 2.60b).

Cette partition reflète la structure métabolique du modèle d'Aquino et Stuckey (2008), dans lequel l'intermédiaire réactionnel entre les deux biomasses joue le rôle d'un AGV agrégé.

2.4 Intégration des SMP et EPS dans le modèle ADM1

2.4.1 Principe du couplage

Deux modèles indépendants doivent être raccordés : l'ADM1, qui décrit la digestion anaérobie, et le sous-modèle d'Aquino et Stuckey, qui décrit la dynamique des SMP/EPS. Le choix retenu est un couplage à sens unique, de type aval : l'ADM1 fournit au sous-modèle des grandeurs d'interface recalculées à chaque pas de temps.

Le vecteur biologique couplé comporte donc $(42 + 5) = 47$ composantes dans l'implémentation MATLAB actuelle : les 42 premières correspondent au vecteur ADM1 utilisé par le programme, et les 5 dernières aux variables UAP , BAP, EPSXa , EPSXm et IP . Le sous-modèle ne possède pas de deuxième dynamique indépendante des biomasses ADM1. Cette décision évite de faire coexister deux dynamiques concurrentes de biomasse.

2.4.2 Nouvelles variables d'état ajoutées

Tableau 2.8 – Nouvelles variables d'état ajoutées au vecteur biologique.

Indice	Variable	Description
x_{43}	UAP	Produits liés à l'utilisation du substrat.
x_{44}	BAP	Produits associés à la biomasse et issus notamment du décès et de l'hydrolyse des EPS.
x_{45}	EPS_{Xa}	EPS liées à la biomasse acidogène/acétogène équivalente.
x_{46}	EPS_{Xm}	EPS liées à la biomasse méthanogène acétoclastique.
x_{47}	IP	Intermédiaire propre au sous-modèle Aquino et Stuckey.

Les grandeurs X_a, X_m et S_v ne sont pas des composantes du vecteur d'état ; elles sont recalculées à chaque évaluation à partir des composantes ADM1.

Relation entre IP et S_{ac} :

Avec la définition adoptée à l'équation (2.59b), l'acétate S_{ac} est désormais explicitement inclus dans la grandeur IP. Cette inclusion est cohérente puisque l'acétate est l'un des quatre AGV produits par l'acidogenèse.

Toutefois, S_{ac} et IP obéissent à deux dynamiques distinctes : S_{ac} est une variable de l'ADM1 dont l'évolution est régie par la matrice stœchiométrique de Petersen et les 19 processus biochimiques du modèle ADM1 (cf. §2.2.4). IP est une variable du sous-modèle Aquino et Stuckey dont l'évolution est régie par l'équation (2.49) et par les vitesses spécifiques $r_{ut,sub}$, $r_{ut,UAP}$, $r_{ut,BAP}$ et $r_{ut,acet}$ (Eqs. 2.60a-d).

En ce sens, IP n'est pas une variable redondante avec S_{ac} mais une représentation complémentaire, à un niveau d'agrégation différent, du même pool d'AGV : S_{ac} suit l'acétate individuellement dans la matrice ADM1, tandis que IP agrège les quatre AGV dans l'architecture du sous-modèle SMP/EPS.

2.4.3 Équations du sous-modèle couplé

Les vitesses utilisées dans l'implémentation sont :

$$r_{ut,sub} = \frac{q_s S_v}{K_s + S_v} \tag{2.60a}$$

$$r_{ut,acet} = \frac{q_{IP} IP}{K_{IP} + IP} \tag{2.60b}$$

$$r_{ut,UAP} = \frac{q_{uap} UAP}{K_{uap} + UAP} \tag{2.60c}$$

$$r_{ut,BAP} = \frac{q_{bap} BAP}{K_{bap} + BAP} \tag{2.60d}$$

2.4.4 Système d'équations couplé (suite)

Le système de cinq équations effectivement résolu est :

$$\frac{dUAP}{dt} = k_1(r_{ut,sub}X_a + r_{ut,acet}X_m) - \frac{UAP}{\theta} - r_{ut,UAP}X_a \tag{2.61}$$

$$\frac{dBAP}{dt} = k_2(X_a + X_m) + k_{hyd}(EPS_{Xa} + EPS_{Xm}) - \frac{BAP}{\theta} - r_{ut,BAP}X_a \tag{2.62}$$

$$\frac{dEPS_{Xa}}{dt} = k_{EPS}X_a - \frac{EPS_{Xa}}{\theta} - k_{hyd}EPS_{Xa} \tag{2.63}$$

$$\frac{dEPS_{Xm}}{dt} = k_{EPS}X_m - \frac{EPS_{Xm}}{\theta} - k_{hyd}EPS_{Xm} \tag{2.64}$$

$$\frac{dIP}{dt} = k_{acet}(r_{ut,sub} + r_{ut,UAP} + r_{ut,BAP})X_a - r_{ut,acet}X_m - \frac{IP}{\theta} \tag{2.65}$$

2.4.5 Liaison avec le colmatage

Les deux SMP sont ensuite regroupés par :

$$SMP = UAP + BAP.$$

Les EPS liées sont regroupées par :

$$EPS = EPS_{Xa} + EPS_{Xm}.$$

Ces variables constituent les sorties biologiques utilisées dans le chapitre suivant pour alimenter le modèle de colmatage membranaire.

2.5 Résultats du couplage SMP/EPS (modèle d'Aquino et Stuckey intégré à l'ADM1)

Après avoir vérifié en section 2.2.7 la cohérence de l'ADM1 seul, les figures 2.13 à 2.15 présentent, sur les mêmes conditions de simulation et sur un horizon de 90 jours, l'évolution des trois sorties principales du sous-modèle SMP/EPS une fois celui-ci couplé à l'ADM1 selon le principe décrit en section 2.4.1 : les UAP, les BAP et les EPS (détaillées en EPS liées à la biomasse acidogène EPS_{X_a} et méthanogène EPS_{X_m}).

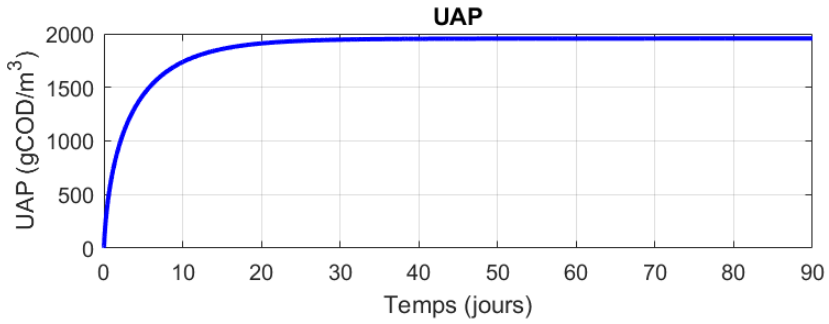


Figure 2.13 – Évolution des produits liés à l'utilisation du substrat (UAP) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1.

Les UAP (figure 2.13) présentent une montée rapide dès les premiers jours de simulation, avec un net dépassement transitoire : la concentration atteint un pic d'environ 2,3 kgCOD/m^3 vers le jour 5, avant de redescendre et de se stabiliser à un plateau d'environ 1,35 kgCOD/m^3 à partir du jour 30 environ. Ce dépassement initial est cohérent avec la structure de l'équation des UAP (section 2.3.3) : leur production est directement proportionnelle au taux d'utilisation du substrat r_{utsub}, qui est maximal en tout début de simulation lorsque le substrat S_{sub} est abondant et la biomasse X_a encore peu développée, avant que la consommation des UAP eux-mêmes ($r_{utuap}X_a$) ne rattrape leur production et ne stabilise le système à un niveau plus bas.

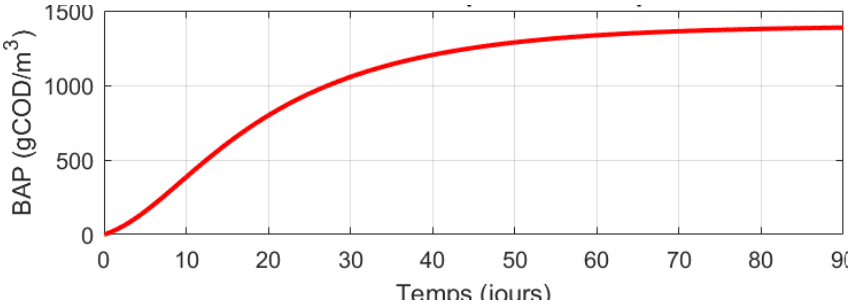


Figure 2.14 – Évolution des produits liés à la biomasse (BAP) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1.

Les BAP (figure 2.14) présentent une croissance progressive et régulière, sans dépassement transitoire. La concentration augmente rapidement pendant les premières dizaines de jours, puis sa pente diminue progressivement jusqu'à atteindre un plateau proche de 1,40 kgCOD/m^3 vers 60–70 jours. Cette évolution traduit l'établissement progressif d'un équilibre entre les mécanismes de production des BAP – notamment la lyse cellulaire et l'hydrolyse des EPS liées – et leur consommation ou leur élimination du système. La forme de la courbe est ainsi compatible avec une formation cumulative et relativement lente des BAP, telle qu'attendue pour des produits associés à la biomasse (Aquino and Stuckey (2008)).

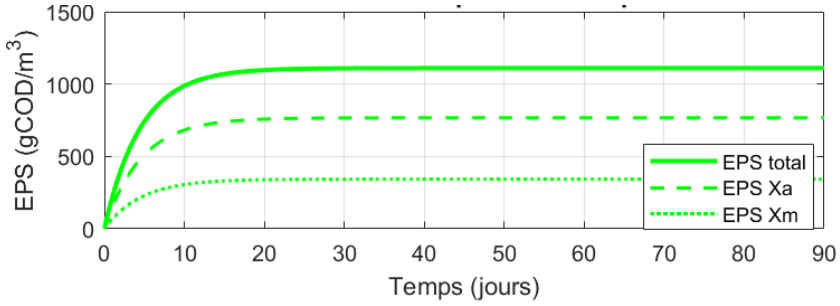


Figure 2.15 – Évolution des substances polymériques extracellulaires (EPS totales, et décomposition en EPS_{X_a} et EPS_{X_m}) après couplage du sous-modèle d'Aquino et Stuckey à l'ADM1.

Les EPS totales (figure 2.15) augmentent rapidement au début de la simulation puis atteignent un plateau d'environ 1,10 kgCOD/m^3 à partir de 30–40 jours. La décomposition met en évidence deux contributions : EPS_{X_a} atteint environ 0,76 kgCOD/m^3, tandis que EPS_{X_m} se stabilise autour de 0,34 kgCOD/m^3. La contribution de la fraction liée à la biomasse acidogène/acétogène reste donc la plus importante, mais la fraction méthanogène n'est plus négligeable. L'allure asymptotique des trois courbes traduit une stabilisation progressive des taux de production et d'hydrolyse des EPS dans le système couplé.

En fin de simulation, le plateau des UAP présenté à la figure 2.13 est d'environ 1,95 kgCOD/m^3 et celui des BAP d'environ 1,40 kgCOD/m^3. La répartition des SMP est ainsi proche de 58 % d'UAP et 42 % de BAP, pour un total d'environ 3,35 kgCOD/m^3. Cette répartition est en excellent accord avec la répartition typique de 58 % UAP / 42 % BAP rapportée par Aquino and Stuckey (2008) (voir section 2.3.3).

2.6 Conclusion du chapitre

Le modèle biologique développé dans ce chapitre repose sur l'ADM1 complété par le sous-modèle d'Aquino et Stuckey (2008). La définition retenue pour les variables d'interface est la suivante :

— $S_v = S_{su} + S_{aa} + S_{fa}$: substrat organique soluble primaire, restreint aux trois monomères directement assimilés par la biomasse acidogène/acétogène (sucres, acides aminés, acides gras à longue chaîne). C'est cette variable qui pilote le terme $r_{ut,sub}$ (Eq. 12 du papier).

— $IP = S_{va} + S_{bu} + S_{pro} + S_{ac}$: produit intermédiaire, défini algébriquement comme la somme des acides gras volatils de l'ADM1 (valérate, butyrate, propionate, acétate). C'est cette variable qui pilote le terme $r_{ut,acet}$ (Eq. 13 du papier), et non plus l'état ODE dédié.

— $X_a = X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{c4} + X_{pro}$: biomasse acidogène/acétogène totale.

— $X_m = X_{ac} + X_{h2}$: biomasse méthanogène totale.

Cette redéfinition change la nature du couplage : dans la version précédente, IP était un cinquième état différentiel autonome (Eq. 2 du papier, $x(47)$), découplé des variables natives de l'ADM1. Dans la version corrigée, IP est une variable d'interface calculée directement à partir de l'état ADM1 à chaque pas de temps, ce qui relie explicitement l'accumulation des AGV (VFA) de l'ADM1 à la cinétique de formation des UAP et de l'intermédiaire acétate du modèle Aquino. L'état ODE IP ($x(47)$) reste intégré dans le vecteur d'état pour la traçabilité de l'Eq. 2, mais n'intervient plus dans le calcul de $r_{ut,acet}$.

Le vecteur d'état biologique conserve 47 composantes : 42 pour l'ADM1 et 5 pour le sous-modèle SMP/EPS/IP (UAP, BAP, EPS_{X_a}, EPS_{X_m}, IP). Ce couplage demeure un couplage aval par variables d'interface – S_v, IP, X_a et X_m étant recalculées à partir de l'état ADM1 à chaque évaluation de la fonction dérivée – et non une fusion stœchiométrique unifiée des deux modèles.

Pour la suite du mémoire, toute grandeur dérivée de S (résidu de substrat, S_t en particulier) doit être calculée avec la même convention que S_v, c'est-à-dire restreinte à $S_{su} + S_{aa} + S_{fa}$, afin d'assurer la cohérence entre les diagnostics de sortie et les équations effectivement intégrées.

Chapitre 3

Modélisation du colmatage membranaire et couplage avec le modèle ADM1-SMP/EPS

3.1 Introduction

Le chapitre 2 a établi le modèle biologique ADM1 étendu par le sous-modèle d'Aquino et Stuckey pour représenter séparément les UAP, les BAP et les EPS. Le présent chapitre complète cette description en y associant la dynamique du colmatage membranaire de Benyahia et al. (2024). L'objectif est d'obtenir une représentation cohérente du fonctionnement d'un AnMBR dans laquelle la production de matière colmatante issue du modèle biologique se traduit directement par une évolution de la résistance membranaire, de la surface disponible et, finalement, du flux et du débit de perméat.

Ce choix rejoint les conclusions d'une étude comparative de plusieurs modèles de colmatage, qui souligne l'intérêt de modèles génériques et paramétrables pour des applications d'optimisation et de commande (Kalboussi et al., 2016).

Le chapitre est organisé autour de trois étapes : rappel du modèle de colmatage et de ses équations, mise en œuvre du couplage avec ADM1-SMP/EPS, puis analyse du comportement du système en l'absence de commande. Les résultats de cette dernière étape constituent la référence utilisée ensuite pour juger l'apport des commandes de bullage.



Figure 3.1 – Exemple de module membranaire immergé à fibres creuses de type PSH-330. Source : Kovalus (2020), fiche technique PURON® MBR PSH-330.

3.2 Le modèle de colmatage membranaire de Benyahia et al. (2024)

3.2.1 Hypothèses et mécanismes considérés

Le modèle de Benyahia et al. (2024) repose sur les deux mécanismes de colmatage déjà présentés au chapitre 1 (section 1.8) : la formation d'un gâteau de filtration par

les particules et macromolécules qui se déposent à la surface de la membrane, et le colmatage des pores par les composés solubles et les SMP qui pénètrent à l'intérieur de la structure poreuse. Les auteurs formulent quatre hypothèses principales, reprises intégralement dans ce travail :

— la liqueur mixte est homogène, si bien que l'ensemble des composés solubles totaux (ST), des composés particulaires totaux (XT) et des SMP contribuent, chacun avec un poids propre, au dépôt de matière ;

— la surface membranaire utile A(t) n'est pas constante : elle diminue avec l'accumulation de matière colmatante, à la fois pendant une période de filtration et de façon cumulative après plusieurs cycles de filtration/nettoyage, ce qui traduit un colmatage partiellement irréversible ;

— la croissance biologique sur la membrane elle-même (biofilm) est négligée, ainsi que le retour en solution de la matière détachée lors des phases de relaxation ou de rétrolavage ;

— les deux mécanismes de colmatage sont partiellement irréversibles, mais à des degrés différents, le colmatage des pores étant généralement considéré comme plus difficilement réversible que le colmatage de surface.

Ce formalisme générique, exprimé en termes de résistances et de pression transmembranaire, s'applique quelle que soit la configuration physique retenue pour le module membranaire. Dans la pratique industrielle des BRM, on distingue en effet deux grandes familles de configurations : les membranes externes (side-stream), entraînées par une pression positive appliquée par une pompe de circulation, plutôt réservées aux installations de petite taille et aux eaux usées industrielles difficiles à traiter, et les membranes immergées, plongées directement dans la liqueur mixte et entraînées par une dépression (vide) appliquée côté perméat, généralement préférées pour les installations de moyenne et grande taille (PCI Membranes, 2024). Dans les deux cas, la force motrice du transfert peut être ramenée à une pression transmembranaire ΔP équivalente, ce qui justifie l'emploi d'un formalisme unique de type Darcy tel que celui de l'équation (3.1), indépendamment du mode de mise en dépression ou en pression du système réel. Trois géométries de membrane coexistent par ailleurs sur le marché pour les applications BRM : les fibres creuses, les membranes planes et les membranes tubulaires (ou multi-tubulaires) ; les membranes spiralées, plus sensibles aux matières en suspension, ne conviennent en revanche pas à ce type d'application (PCI Membranes, 2024). Enfin, les membranes d'ultrafiltration (UF) sont généralement préférées aux membranes de microfiltration (MF) pour les BRM, en raison à la fois de meilleures performances de séparation (rétention de certains colloïdes et virus) et d'une tendance au colmatage

plus faible, la taille de pores plus restreinte de l'UF réduisant le risque de colmatage interne des pores (PCI Membranes, 2024) → une observation directement en cohérence avec le rôle prépondérant attribué au colmatage des pores par les macromolécules de SMP dans le modèle de Benyahia et al. (2024) présenté ci-après.

3.2.2 Résistances en série et surface membranaire effective

Le modèle s'appuie sur la loi de Darcy et un formalisme de résistances en série, à pression transmembranaire (TMP) constante. Le flux de perméat J(t) s'écrit :

$$J(t) = \frac{Q_{out}(t)}{A(t)} = \frac{\Delta P}{\mu_m \left(R_0 + R(t)\right)} \tag{3.1}$$

où Q_{out} (t) est le débit de perméat, A(t) la surface membranaire effective, ΔP la pression transmembranaire (supposée constante), μ_m la viscosité du perméat, R0 la résistance intrinsèque de la membrane, et R(t) la résistance de colmatage, décomposée en résistance de gâteau et résistance de colmatage des pores :

$$R(t) = R_c(t) + R_p(t) \tag{3.2}$$

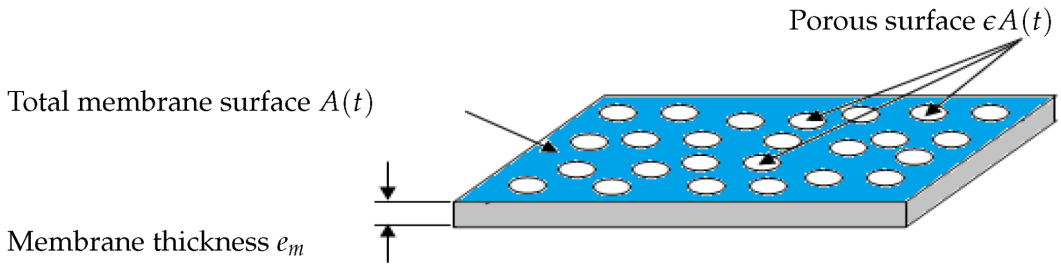


Figure 3.2 – Représentation schématique de la surface membranaire totale $A(t)$, de la surface poreuse $\varepsilon A(t)$ et de l'épaisseur de la membrane e_m. Source : adapté de Benyahia et al. (2024).

Ce formalisme en résistances en série fait l'objet d'une revue dédiée (Di Bella and Di Trapani, 2019), qui souligne sa robustesse pour décrire séparément les contributions du gâteau et du colmatage interne, tout en soulignant la nécessité de le confronter à des mesures expérimentales pour chaque configuration étudiée. Ces deux résistances dépendent respectivement de la masse de gâteau mc (t) et de la masse colmatant les pores mp (t) :

$$R_c(t) = \alpha_c \frac{m_c(t)}{A(t)}, \qquad R_p(t) = \alpha_p \frac{m_p(t)}{\varepsilon A(t)} \tag{3.3}$$

où α_c et α_p sont les résistances spécifiques du gâteau et des pores, et εA $(0 < \varepsilon < 1)$ la surface poreuse, fraction ε de la surface membranaire utile totale A. Contrairement à de nombreux modèles de la littérature qui considèrent la surface membranaire comme

constante, Benyahia et al. (2024) la définissent comme une fonction décroissante de mc (t) et mp (t) :

$$A(t) = \frac{A_0}{1 + \frac{m_c(t)}{\sigma_c} + \frac{m_p(t)}{\sigma_p}} \tag{3.4}$$

où A0 est la surface membranaire initiale, et σ_c et σ_p des paramètres de normalisation qui modulent la contribution respective de mc et mp à la perte de surface utile. Cette formulation traduit deux idées physiques complémentaires : d'une part, une accumulation de gâteau peut empêcher localement le perméat de circuler même si le colmatage des pores n'est pas encore significatif ; d'autre part, un colmatage des pores réduit la surface poreuse effective même en l'absence de gâteau épais. Elle permet également de représenter le fait que la surface initiale A0 n'est jamais totalement recouvrée après un nettoyage, puisqu'une fraction non nulle de mc et mp subsiste en général après chaque cycle. Les mêmes masses mc et mp interviennent ainsi à la fois dans la résistance R(t) (équation (3.3)) et dans la surface effective A(t) (équation (3.4)), ce qui pénalise deux fois le débit de perméat $Q_{\text{out}} = \text{J} \cdot \text{A}$ pour un même dépôt de matière. Ce double effet n'est pas redondant mais traduit deux phénomènes physiques distincts : la résistance R(t) rend compte de la perte de charge à travers l'épaisseur du dépôt (loi de Darcy, à surface filtrante donnée), tandis que A(t) rend compte de la fraction de la surface totale du module qui n'est plus du tout traversée par le perméat, le dépôt y étant devenu localement imperméable. C'est la formulation retenue par Benyahia et al. (2024) eux-mêmes dans leur modèle original ; elle n'a pas fait l'objet, dans ce mémoire, d'une comparaison quantitative avec une variante à surface constante (A(t) = A0) qui permettrait d'isoler la sensibilité du modèle à ce choix, ce qui constitue une limite à noter.

3.2.3 Dynamique en phase de filtration

Pendant la phase de filtration ($\Delta\text{P} > 0$), la dynamique des masses colmatantes est donnée par :

$$\dot{m}_c = Q_{out}\left(C_{s,m}S_T + C_{x,m}X_T + C_{smp,m}SMP + C_{eps,m}EPS\right) \tag{3.5}$$

$$\dot{m}_p = Q_{out}\left(\beta_{1,m}SMP + \beta_{2,m}S_T\right) \tag{3.6}$$

où $C_{s,m}$, $C_{x,m}$, $C_{smp,m}$ et $C_{eps,m}$ sont les coefficients de pondération des composés solubles, particulaires, des SMP et des EPS dans la formation du gâteau, et où $\beta_{1,m}$ et $\beta_{2,m}$ pondèrent la contribution des SMP et des composés solubles totaux au colmatage des pores, avec $\beta_{2,m} \ll \beta_{1,m}$ puisque les macromolécules de SMP sont considérées comme

les principales responsables du colmatage interne des pores. La résistance totale et la surface effective à chaque instant s'obtiennent en réinjectant mc (t) et mp (t) dans les équations (3.3) et (3.4), puis Q_{out} s'obtient à partir de l'équation (3.1) :

$$Q_{out} = J\,A = \frac{\Delta P\,A}{\mu_m(R_0 + R)} \tag{3.7}$$

3.2.4 Dynamique en phase de relaxation

Pendant une phase de relaxation ou de rétrolavage (ΔP $\leq$ 0), l'alimentation est interrompue et une partie de la matière déposée se détache sous l'effet des forces de cisaillement ou de l'inversion du flux. Benyahia et al. (2024) modélisent cette phase par une relaxation exponentielle vers une valeur résiduelle irréversible :

$$\dot{m}_c = -\omega m_c + m_{c,irr} \tag{3.8}$$

$$\dot{m}_p = -\omega' m_p + m_{p,irr} \tag{3.9}$$

où ω , ω' sont des constantes de détachement et mc,irr , mp,irr des quantités positives représentant la fraction irréversible de mc et mp qui subsiste après nettoyage. Le temps de relaxation ou de rétrolavage étant généralement négligeable devant le temps de filtration, cette phase peut, en pratique, être approximée par une réduction instantanée des masses colmatantes vers une fraction résiduelle donnée → c'est cette approximation discrète qui a été retenue dans l'implémentation de ce mémoire, comme détaillé en section 3.3.4.

3.3 Couplage avec le modèle biologique ADM1-SMP/EPS

3.3.1 Principe du couplage retenu

Le couplage proposé par Benyahia et al. (2024) entre leur modèle de colmatage et un modèle biologique repose sur trois grandeurs d'entrée génériques : les composés solubles totaux ST , les composés particulaires totaux XT , et les SMP totaux. Dans l'article original, ces trois grandeurs sont calculées à partir des deux substrats et des deux populations bactériennes du modèle réduit AM2b (Benyahia et al., 2013). Le modèle biologique retenu dans ce mémoire étant nettement plus détaillé (chapitre 2), le même principe de couplage « en aval » est conservé, mais les entrées ST , XT et SMP du modèle de colmatage sont désormais calculées à partir des variables d'état de l'ADM1 et du sous-modèle d'Aquino et Stuckey, comme précisé ci-après.

3.3.2 Correspondance des variables

Le tableau 3.1 détaille la correspondance retenue entre les grandeurs génériques du modèle de Benyahia et al. (2024) et les variables d'état du modèle biologique du chapitre 2.

Tableau 3.1 – Correspondance entre les entrées du modèle de colmatage et les variables du modèle biologique ADM1-SMP/EPS.

Grandeur	Définition originale (Benyahia)	Définition retenue dans ce mémoire (ADM1-SMP/EPS)
S_T	$S_1 + S_2$ (substrat + AGV)	$S_v + IP$ (substrat primaire + produits intermédiaires)
S_v	—	$S_{su} + S_{aa} + S_{fa}$ (équation (2.59a))
IP	—	$S_{va}+S_{bu}+S_{pro}+S_{ac}$ (équation (2.59b))
X_T	$X_1 + X_2$ (biomasses acidogène et méthanogène)	$X_a + X_m$, avec $X_a = X_{su} + X_{aa} + X_{fa} + X_{c4} + X_{pro}$ et $X_m = X_{ac} + X_{h2}$ (chapitre 2, section 2.4)
SMP	Variable globale unique	$UAP + BAP$ (sous-modèle d'Aquino et Stuckey)

Ces définitions appellent une précision importante par rapport à une lecture trop littérale de l'intitulé « composés solubles/particulaires totaux ». ST ne reprend pas l'intégralité des 12 variables solubles de l'ADM1 : les gaz dissous (Sh2 , Sch4) en sont exclus, puisqu'ils quittent le réacteur par le biogaz plutôt que de participer au dépôt de matière sur la membrane, de même que le carbone et l'azote inorganiques (SIC , SIN) et les inertes solubles (SI), qui ne sont pas des composés organiques colmatants au sens du modèle de Benyahia et al. (2024). S_T est ainsi représenté par la somme des deux grandeurs d'interface définies au chapitre 2 : le substrat soluble primaire S_v (monomères) et l'intermédiaire IP (AGV). De même, XT ne reprend pas les 12 variables particulaires de l'ADM1 : le substrat composite Xc , les

$$\dot{m}_c = Q_{out}\left(C_{s,m}S_T + C_{x,m}X_T + C_{smp,m}SMP + C_{eps,m}EPS\right) \tag{3.10}$$

particulaires non hydrolysés (Xch , Xpr , Xli) et les inertes particulaires XI en sont exclus, car il s'agit de matière organique non biologique (substrat en cours de dégradation ou résidu inerte), et non de biomasse – XT désigne, conformément à sa définition originale dans le modèle AM2b (biomasses acidogène et méthanogène), la seule biomasse active de l'ADM1, Xa +Xm , déjà utilisée à ce titre tout au long du chapitre

2. Cette correspondance stricte entre les grandeurs de colmatage et les seules variables biologiquement pertinentes du modèle est celle effectivement implémentée dans le code de simulation. Le passage à un modèle biologique plus détaillé permet d'introduire une quatrième grandeur d'entrée, absente du modèle original de Benyahia et al. (2024) : les EPS totales, EPS = EPSXa + EPSXm . Cette extension se justifie par une distinction que le modèle AM2b, faute de variable d'EPS propre, ne pouvait pas représenter : les EPS liées (fraction insoluble, attachée à la surface cellulaire) et les SMP (fraction soluble, UAP et BAP) jouent des rôles physiquement différents dans le colmatage. Les EPS liées forment la matrice structurelle du gâteau – le réseau de polymères qui agrège les cellules et les particules entre elles à la surface de la membrane, mécaniquement responsable de la cohésion et de la compressibilité du dépôt – alors que les SMP, composés solubles de plus petite taille, sont surtout associés au colmatage interne des pores par adsorption, ce qui justifie qu'ils interviennent dans les deux équations (3.5) et (3.6) tandis que les EPS n'interviennent que dans la première. Cette distinction est largement documentée dans la littérature sur le colmatage des BRM (Le-Clech et al. (2006) ; Meng et al. (2009)) et a déjà été présentée au chapitre 1 (section 1.8). L'équation de formation du gâteau (3.5) est donc étendue, dans ce mémoire, par un quatrième terme pondéré par un coefficient Ceps : (3.10) tandis que l'équation de colmatage des pores (3.6) est conservée sans modification, les macromolécules de SMP restant considérées comme les principales responsables du colmatage interne des pores. Il est important de souligner que cette extension par le terme Ceps EPS est un ajout propre à ce mémoire, rendu possible par la disponibilité des variables d'EPS issues du sous-modèle d'Aquino et Stuckey ; elle ne figure pas dans la formulation originale de Benyahia et al. (2024), qui ne disposait pas d'une variable d'EPS distincte des SMP dans son modèle biologique AM2b. Cette justification reste toutefois qualitative : comme souligné en section 3.5, la valeur numérique retenue pour Ceps (tableau 3.3) n'a pu être calibrée que par analogie avec les autres coefficients de dépôt, faute de données expérimentales spécifiques aux EPS pour ce système ; seule la structure de l'extension – l'existence d'un terme EPS distinct des SMP dans l'équation du gâteau – est directement appuyée par la littérature citée ci-dessus, pas la valeur précise du coefficient qui lui est associée.

3.3.3 Structure du vecteur d'état complet

Le couplage se traduit, dans l'implémentation numérique, par l'ajout de deux variables d'état supplémentaires (mc, mp) au vecteur d'état biologique à 47 composantes du chapitre 2, formant un vecteur d'état global à 49 composantes : les 42 états de l'ADM1 classique, les 5 états du sous-modèle SMP/EPS/IP, et les 2 états du modèle

de colmatage. Le tableau 3.2 résume cette structure complète.

Tableau 3.2 – Structure du vecteur d'état global du modèle couplé (49 composantes).

Indices	Contenu	Nombre d'états
x_1 à x_{42}	ADM1 classique (variables solubles, particulaires, ions, gaz)	42
x_{43} à x_{47}	Sous-modèle SMP/EPS/IP (UAP, BAP, EPS_{Xa}, EPS_{Xm}, IP)	5
x_{48}	Masse de gâteau de filtration m_c	1
x_{49}	Masse colmatant les pores m_p	1
Total		49

Une simplification du modèle couplé, retenue pour l'ensemble des simulations de ce chapitre, mérite d'être signalée explicitement. Le couplage biologie-colmatage tel qu'implémenté ici reste unidirectionnel : le débit d'alimentation Q_{in} de l'ADM1 est maintenu à sa valeur constante $Q_{\text{in}} = 170$ m^3/j, indépendamment de l'évolution du débit de perméat Q_{out} (t) effectivement soutiré par la membrane à mesure que celle-ci se colmate. Autrement dit, la biologie pilote le colmatage à travers ST , XT , SMP et EPS (section précédente), mais le colmatage n'influence pas en retour le taux de dilution de l'ADM1 dans cette version du modèle. Un couplage réellement bidirectionnel, dans lequel Q_{in} (t) constituerait une extension naturelle mais non triviale de ce travail : il supposerait de vérifier, sur toute la durée de la simulation, que le réacteur biologique reste stable sous un temps de séjour hydraulique croissant plutôt que fixe → ce qui n'a pas été implémenté ni vérifié ici, et constitue une limite explicite du modèle présenté dans ce chapitre.

3.3.4 Logique de bascule filtration/relaxation

L'implémentation numérique retenue pour ce mémoire simplifie la phase de relaxation continue décrite par les équations (13)-(14) de Benyahia et al. (2024) : plutôt que d'intégrer une dynamique de détachement exponentiel, la simulation découpe l'horizon total en cycles de durée fixe Tcycle (ici 9 jours), intégrés en continu par le solveur ode15s sur l'ensemble des 49 équations du modèle couplé (équation (3.5) et sa version étendue (3.10), équation (3.6), et les 47 équations biologiques du chapitre 2, toutes actives pendant la filtration). À la fin de chaque cycle, à l'exception du dernier, un rétrolavage instantané

$$m_c \leftarrow (1 - f_c)m_c, \qquad m_p \leftarrow (1 - f_p)m_p \tag{3.11}$$

est appliqué : les masses colmatantes sont réduites à une fraction fixe de leur valeur

en fin de cycle, avec des fractions éliminées par rétrolavage fc = 0,75 et fp = 0,35 retenues dans ce mémoire, c'est-à-dire qu'un rétrolavage élimine 75 % de la masse de gâteau mais seulement 35 % de la masse colmatant les pores, le solde constituant la fraction irréversible qui subsiste d'un cycle à l'autre. Cette asymétrie n'est pas un choix arbitraire : elle traduit le fait, déjà signalé au chapitre 1, que le colmatage des pores est physiquement plus difficile à éliminer par une action hydraulique externe (rétrolavage) que le gâteau déposé en surface, ce dernier étant par nature plus facilement détaché par l'inversion du flux. Cette approche constitue une approximation discrète, mais fonctionnellement équivalente pour un temps de relaxation négligeable devant le temps de filtration, du mécanisme continu décrit par Benyahia et al. (2024) ; ses implications sont discutées en section 3.5.

3.4 Résultats de simulation du modèle couplé complet

3.4.1 Conditions de simulation

Les résultats de cette section correspondent au scénario de référence sans commande de bullage, avec $k_m = 0$ sur l'ensemble de la simulation. Le réacteur est alimenté en permanence à $Q_{in} = 170$ m^3/j et la simulation couvre 45 jours, soit cinq cycles de filtration de neuf jours. Les rétrolavages sont appliqués aux jours 9, 18, 27 et 36.

Le dimensionnement membranaire est celui de la nouvelle configuration : $SRT = 300$ jours et $Q_w = 11,3$ m^3/j. Le débit de perméat de référence vaut ainsi $Q_{perm,0} = 158,7$ m^3/j et, pour $J_0 = 20$ LMH, la surface initiale est calculée par l'équation (3.12) et vaut $A_0 = 330,56$ m^2. La résistance intrinsèque reste $R_0 = 1,250 \times 10^{13}$ m^{-1} et la pression transmembranaire est fixée à $TMP = 5,0 \times 10^4$ Pa.

La surface $A_0 = 330,56$ m^2 correspond, à titre indicatif, à l'ordre de grandeur d'un module immergé à fibres creuses de type PSH-330 (Kovalus/PURON), dont la fiche technique constructeur indique une surface de 330 m^2, répartie sur 8 rangées de fibres par module (“Rows per Module”), et une pression transmembranaire maximale de 0,6 bar en filtration — cohérente avec la valeur $TMP = 0,5$ bar retenue dans ce travail, restant ainsi prudemment en deçà du maximum constructeur.

Les fractions de matière éliminées par rétrolavage sont conservées à $f_c = 0,75$ pour le gâteau et $f_p = 0,35$ pour les pores.

La simulation de référence utilise également les coefficients de colmatage des pores associés à cette configuration, soit $\beta_{1,m} = 8,34 \times 10^{-5}$ et $\beta_{2,m} = 8,35 \times 10^{-6}$. L'ensemble des autres paramètres biologiques provient directement du chapitre 2. Le tableau 3.3 synthétise les valeurs retenues pour le sous-modèle membranaire, notamment la viscosité μ_m, les résistances spécifiques α_c et α_p, les coefficients de dépôt $C_{s,m}$, $C_{x,m}$, $C_{smp,m}$ et

$C_{eps,m}$, les coefficients de colmatage des pores $\beta_{1,m}$ et $\beta_{2,m}$, ainsi que les paramètres de surface σ_c et σ_p.

Tableau 3.3 – Paramètres principaux de la simulation de référence du modèle couplé.

Paramètre	Symbole	Valeur
Surface membranaire initiale	A_0	$330,56$ m^2
Débit d'alimentation	Q_{in}	170 m^3/j
Temps de séjour des boues	SRT	300 j
Débit de purge	Q_w	$11,3$ m^3/j
Débit de perméat de conception	$Q_{perm,0}$	$158,7$ m^3/j
Flux propre de référence	J_0	$20,0$ LMH
Pression transmembranaire	TMP	$5,0 \times 10^4$ Pa
Viscosité du perméat	μ_m	$7,2 \times 10^{-4}$ Pa $\cdot$ s
Résistance intrinsèque	R_0	$1,250 \times 10^{13}$ m^{-1}
Résistance spécifique du gâteau	α_c	$1,395 \times 10^{16}$ m/kg
Résistance spécifique des pores	α_p	$1,667 \times 10^{14}$ m/kg
Coefficient soluble – gâteau	$C_{s,m}$	$8,18 \times 10^{-5}$
Coefficient particulaire – gâteau	$C_{x,m}$	$5,2 \times 10^{-5}$
Coefficient SMP – gâteau	$C_{smp,m}$	$2,47 \times 10^{-4}$
Coefficient EPS – gâteau	$C_{eps,m}$	$1,2 \times 10^{-4}$
Coefficient SMP – pores	$\beta_{1,m}$	$8,34 \times 10^{-5}$
Coefficient soluble – pores	$\beta_{2,m}$	$8,35 \times 10^{-6}$
Paramètre de surface du gâteau	σ_c	$3,65$
Paramètre de surface des pores	σ_p	$3,73$
Durée d'un cycle	T_{cycle}	9 j
Nombre de cycles	n_{cycles}	5
Fraction de gâteau éliminée	f_c	$0,75$
Fraction de pores éliminée	f_p	$0,35$

3.4.2 Évolution du flux et du débit de perméat

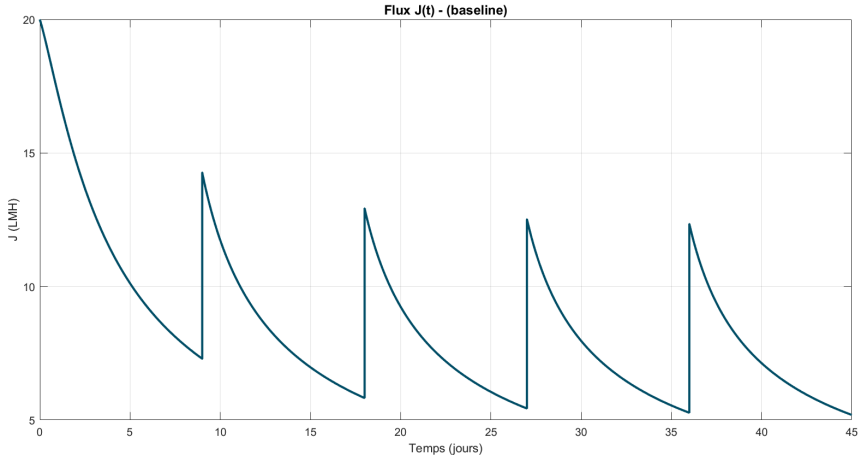


Figure 3.3 – Flux membranaire $J(t)$ dans le scénario de référence sans commande.

La figure 3.3 montre une diminution continue du flux au cours de chaque cycle. La membrane démarre à $20,00$ LMH, puis le flux décroît sous l'effet de l'accumulation du colmatage. Les fins de cycle sont respectivement d'environ $7,30$, $5,82$, $5,43$, $5,27$ et $5,19$ LMH. Après chaque rétrolavage, le flux remonte brusquement, mais la valeur de récupération diminue d'un cycle au suivant. Cette évolution est la conséquence directe du caractère partiellement irréversible du colmatage : le nettoyage élimine une partie du gâteau et des dépôts internes, sans restaurer complètement l'état initial de la membrane.

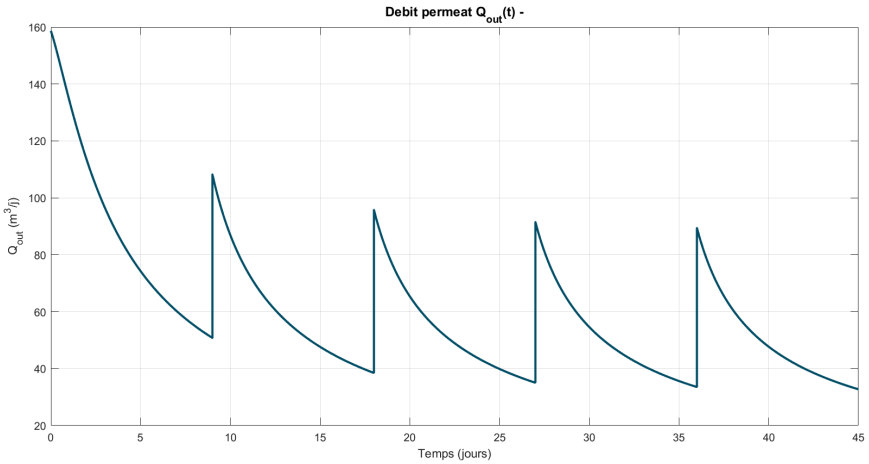


Figure 3.4 – Débit de perméat $Q_{out}(t)$ dans le scénario de référence sans commande.

Le débit de perméat suit la même tendance que le flux, mais son évolution traduit simultanément la baisse de la surface effective. Il décroît à partir d'environ $158,7$ m^3/j pour une membrane propre et reste de plus en plus faible au fur et à mesure que les cycles s'enchaînent. En fin de simulation, le débit est de l'ordre de 33 m^3/j, ce qui confirme la perte importante de capacité de production induite par le colmatage.

3.4.3 Évolution des masses de colmatage

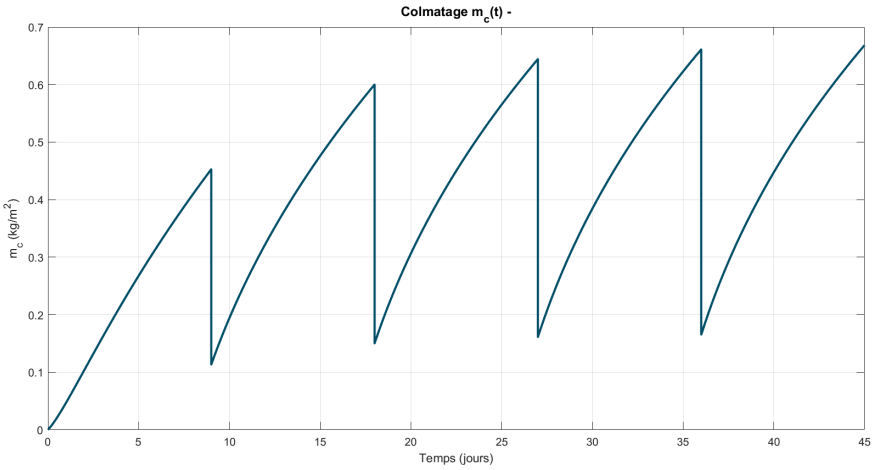


Figure 3.5 – Évolution de la masse de gâteau $m_c(t)$ en l'absence de commande.

La figure 3.5 met en évidence une accumulation rapide de gâteau pendant chaque cycle. m_c augmente progressivement jusqu'à une valeur de $0,6685$ kg/m^2 au terme des 45 jours. Les chutes verticales observées aux jours 9, 18, 27 et 36 correspondent aux rétrolavages : environ 75 % de la masse superficielle est alors retirée. La présence d'une masse résiduelle après chaque nettoyage explique l'augmentation progressive du niveau atteint au fil des cycles.

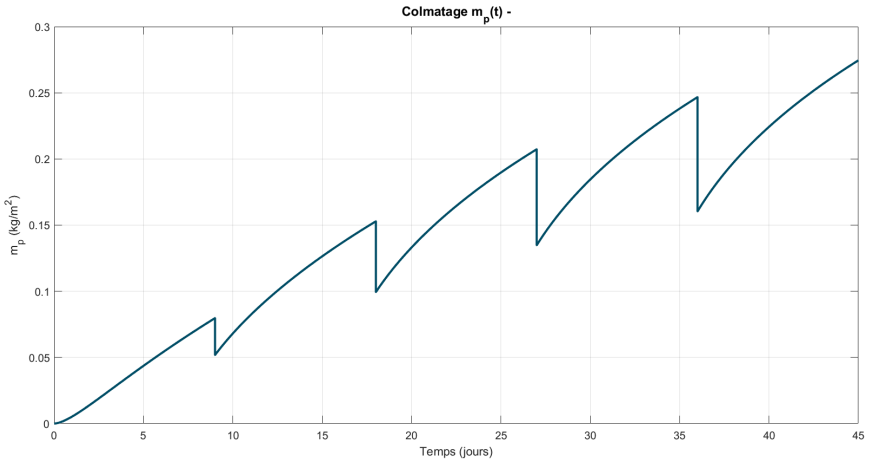


Figure 3.6 – Évolution de la masse colmatant les pores $m_p(t)$ en l'absence de commande.

La masse m_p présente une croissance plus lente mais cumulative. Elle atteint $0,2745$ kg/m^2 à la fin des 45 jours. Les rétrolavages provoquent seulement une réduction partielle, cohérente avec la fraction $f_p = 0,35$. Ainsi, le niveau de colmatage interne augmente d'un cycle à l'autre, même après nettoyage, et contribue à limiter la récupération du flux.

3.4.4 Évolution des résistances membranaires

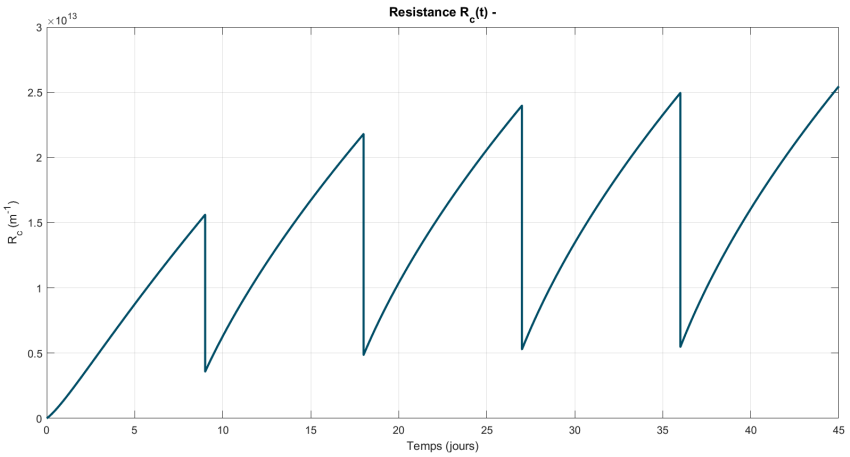


Figure 3.7 – Résistance du gâteau $R_c(t)$ dans le scénario sans commande.

La résistance du gâteau suit directement l'évolution de m_c. Elle croît fortement pendant chaque phase de filtration, puis chute au moment du rétrolavage. L'augmentation des maxima d'un cycle au suivant montre que la fraction résiduelle de gâteau devient progressivement plus importante et constitue une composante croissante de la résistance totale.

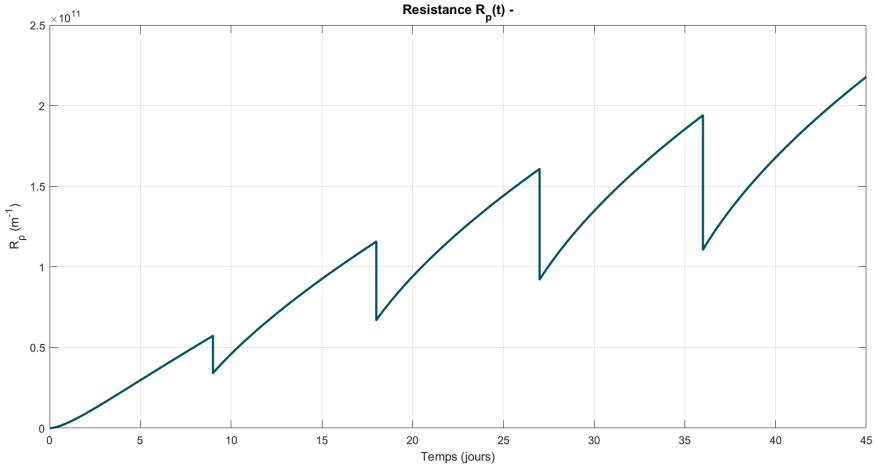


Figure 3.8 – Résistance de colmatage des pores $R_p(t)$ dans le scénario sans commande.

La résistance des pores augmente elle aussi de manière cumulative, mais sans revenir à un niveau proche de zéro après les rétrolavages. La figure 3.8 confirme donc le caractère plus difficilement réversible du colmatage interne. Sa contribution devient d'autant plus importante que les cycles se succèdent et que m_p conserve une fraction résiduelle.

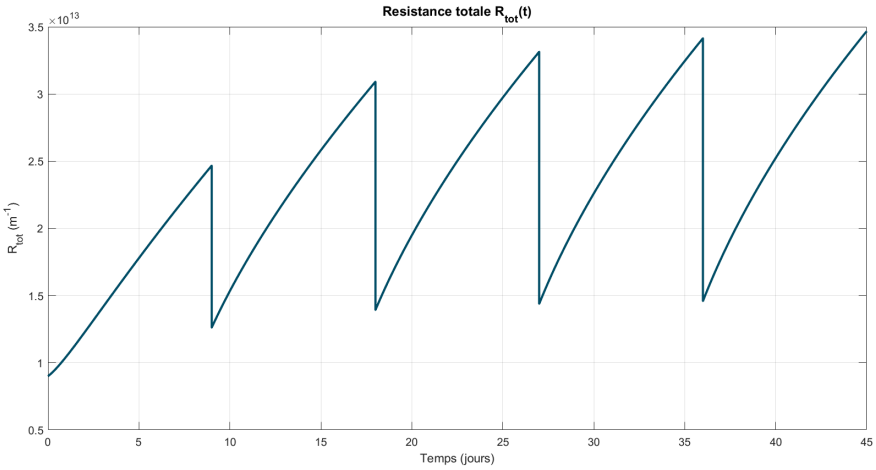


Figure 3.9 – Résistance totale $R_{tot}(t) = R_0 + R_c(t) + R_p(t)$ dans le scénario sans commande.

La résistance totale augmente d'un cycle au suivant et atteint environ $3,45 \times 10^{13}$ m^{-1} à la fin de la simulation. Toutefois, la valeur minimale atteinte après chaque nettoyage reste supérieure à celle du cycle précédent, ce qui traduit l'effet du colmatage irréversible accumulé. Cette croissance de R_{tot} explique directement la chute du flux observée à la figure 3.3 par l'intermédiaire de la loi de Darcy.

3.4.5 Bilan de la simulation de référence

La simulation de référence met ainsi en évidence un enchaînement physique cohérent : l'absence de bullage entraîne une accumulation progressive du gâteau et du colmatage des pores ; cette accumulation augmente les résistances membranaires et réduit parallèlement la surface utile, ce qui provoque la diminution du flux et du débit de perméat. Après 45 jours, le flux vaut 5,19 LMH, $m_c = 0,6685$ kg/m^2 et $m_p = 0,2745$ kg/m^2. La surface effective minimale rapportée par la simulation est $A_{min} = 262,63$ m^2, soit une diminution substantielle par rapport à la surface initiale de $330,56$ m^2.

3.5 Discussion : adaptation du modèle à la nouvelle configuration membranaire

La nouvelle configuration de simulation modifie fortement l'échelle de fonctionnement de la membrane par rapport à la configuration utilisée précédemment. Le passage à $SRT = 300$ jours réduit le débit de purge à $11,3$ m^3/j et augmente le débit de perméat de conception à $158,7$ m^3/j, ce qui conduit à une surface initiale de $330,56$ m^2. Malgré cette capacité initiale plus élevée, le comportement de la référence confirme que le colmatage reste le mécanisme déterminant à long terme.

Les résultats montrent également que le rétrolavage, à lui seul, ne suffit pas à restaurer la performance initiale. La différence entre $f_c = 0,75$ et $f_p = 0,35$ se lit directement

dans les courbes : le gâteau subit des chutes beaucoup plus prononcées, alors que la masse colmatant les pores augmente de façon plus cumulative. Cette dissymétrie justifie l'introduction d'une action de bullage dans le chapitre suivant, capable de modifier en ligne la dynamique du gâteau entre deux rétrolavages.

3.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a permis de compléter le modèle biologique ADM1-SMP/EPS par le sous-modèle de colmatage membranaire et d'obtenir un modèle couplé de 49 états. La nouvelle configuration membranaire est caractérisée par $A_0 = 330,56$ m^2, $SRT = 300$ jours et $Q_{perm,0} = 158,7$ m^3/j. La simulation de référence, conduite sans bullage pendant 45 jours, montre une diminution du flux de $20,00$ à $5,19$ LMH.

Les courbes des masses m_c et m_p, des résistances R_c, R_p et R_{tot} et du débit de perméat mettent en évidence le rôle dominant de l'accumulation du colmatage sur la dégradation des performances. Les rétrolavages restaurent partiellement la membrane, mais une fraction résiduelle du dépôt subsiste et se cumule d'un cycle au suivant. Cette référence constitue donc le point de départ pour l'étude des stratégies de commande PI et NMPC par bullage d'air développée au chapitre suivant.

Chapitre 4

Commande du colmatage membranaire par bullage d'air : régulation PI et commande prédictive non linéaire (NMPC) du flux de perméat

4.1 Introduction

À partir du modèle couplé établi au chapitre 3, ce chapitre étudie l'effet d'une action de bullage sur le colmatage membranaire et sur le suivi du flux de perméat. Deux stratégies sont comparées : un régulateur proportionnel-intégral (PI), fondé sur la correction de l'écart de flux, et une commande prédictive non linéaire (NMPC), qui exploite une anticipation de l'évolution du colmatage.

Les deux stratégies utilisent exactement le même actionneur $k_m(t)$ et la même borne maximale $k_{m,\max} = 5,0\ \mathrm{j}^{-1}$. La comparaison est menée sur 45 jours, avec cinq cycles de neuf jours et une consigne en escalier décroissant $[14, 13, 12, 11, 10]$ LMH. Cette nouvelle campagne utilise la même configuration membranaire que le chapitre 3 : $A_0 = 330,56\ \mathrm{m}^2$, $SRT = 300$ jours, $Q_w = 11,3\ \mathrm{m}^3/\mathrm{j}$ et $Q_{perm,0} = 158,7\ \mathrm{m}^3/\mathrm{j}$.

L'objectif est double : maintenir le flux autour du palier imposé et limiter, autant que possible, l'accumulation du gâteau pilotable par le bullage. Le colmatage des pores reste non directement commandé puisque l'hypothèse $k_p = 0$ est conservée.

4.2 Principe de la commande par bullage d'air

4.2.1 Mécanisme physique et justification de $k_p = 0$

Le bullage agit principalement sur le gâteau déposé à la surface de la membrane. Dans le modèle retenu, l'intensité $k_m(t)$ est donc introduite comme un terme de détachement directement proportionnel à la masse de gâteau. Le colmatage des pores n'est pas soumis à cette action, ce qui conduit à fixer $k_p = 0$. Les deux stratégies étudiées se différencient ainsi uniquement par la manière dont elles calculent $k_m(t)$ à partir de l'état du procédé et de la consigne de flux.

L'effet du bullage sur la réduction du colmatage en conditions anaérobies a été quantifié expérimentalement par Cerón-Vivas et al. (2012) et Liu et al. (2020), qui établissent des relations quantitatives entre les conditions d'injection de gaz et l'atténuation du colmatage — cohérentes avec le mécanisme physique retenu dans ce mémoire pour justifier l'action de $k_m(t)$ sur le seul gâteau de filtration (Cerón-Vivas et al., 2012; Liu et al., 2020).

4.2.2 Équations de colmatage étendues

Les équations utilisées pour la commande restent strictement celles du modèle couplé retenu :

$$\dot{m}_c = Q_{out}\left(C_{s,m}S_T + C_{x,m}X_T + C_{smp,m}SMP + C_{eps,m}EPS\right) - k_m(t)m_c \tag{4.1}$$

$$\dot{m}_p = Q_{out}\,(\beta_{1,m} SMP + \beta_{2,m} S_T) - k_p m_p, \qquad k_p = 0 \tag{4.2}$$

Les autres équations du modèle, notamment celles de la membrane et de la biologie, restent inchangées.

4.2.3 L'actionneur $k_m(t)$

L'intensité de bullage $k_m(t)$ est bornée entre 0 et $5,0$ j^{-1}. Dans les deux campagnes de commande, l'action porte uniquement sur m_c. Le maintien d'un même plafond d'actionneur rend la comparaison PI/NMPC directement lisible en termes de stratégie de commande.

4.2.4 Objectif de régulation

L'objectif est de suivre une consigne de flux variable dans le temps :

$$J_{sp}(t) = [14, 13, 12, 11, 10] \text{ LMH}, \qquad \text{un palier par cycle de 9 jours} \tag{4.3}$$

L'erreur de suivi est définie par :

$$e(t) = J_{sp}(t) - J(t) \tag{4.4}$$

Cette consigne décroissante par paliers successifs ($J_{sp} = 14 \to 13 \to 12 \to 11 \to 10$ LMH sur cinq cycles de neuf jours) est volontairement choisie pour **évaluer le comportement des régulateurs face à une dégradation progressive de la membrane**. À mesure que le colmatage résiduel s'accumule entre les rétrolavages, la capacité maximale de la membrane diminue (cf. §3.4). Les paliers reproduisent ainsi un **protocole opérationnel réaliste** dans lequel l'opérateur réduit graduellement la consigne de flux pour maintenir le système dans sa zone de fonctionnement optimal, tout en testant la **robustesse** des régulateurs sur l'ensemble de la plage de fonctionnement (de 70 % à 50 % du flux initial de 20 LMH).

4.3 Commande proportionnelle-intégrale (PI)

4.3.1 Structure du régulateur

Le régulateur PI utilisé est défini par :

$$k_{m,PI}(t) = \text{sat}\left[K_p e(t) + K_i \int_0^t e(\tau)\,d\tau,\ 0,\ k_{m,\max}\right] \tag{4.5}$$

Les gains du régulateur PI ($K_p = 0,45$ j^{-1} LMH^{-1} et $K_i = 0,12$ j^{-2} LMH^{-1}) ont été réglés par **ajustement itératif (essais-erreurs) en simulation**, en privilégiant un

compromis entre rapidité de réponse et limitation du dépassement, tout en respectant la saturation physique $k_{m,\max} = 5\ \mathrm{j}^{-1}$.

La cohérence dimensionnelle est obtenue en exprimant :

— l'erreur $e(t) = J_{sp}(t) - J(t)$ en LMH ;

— la commande $k_{m,PI}(t)$ en j^{-1}.

ce qui donne :

— K_p en $\mathrm{j}^{-1}\,\mathrm{LMH}^{-1}$ (gain proportionnel) ;

— K_i en $\mathrm{j}^{-2}\,\mathrm{LMH}^{-1}$ (gain intégral).

La saturation garantit que le signal reste physiquement admissible, tandis que l'anti-windup est représenté par :

$$\dot{\xi} = e(t) + K_i\,(k_{m,PI}(t) - k_{m,non\,sat}(t)) \tag{4.6}$$

4.3.2 Résultats de simulation PI

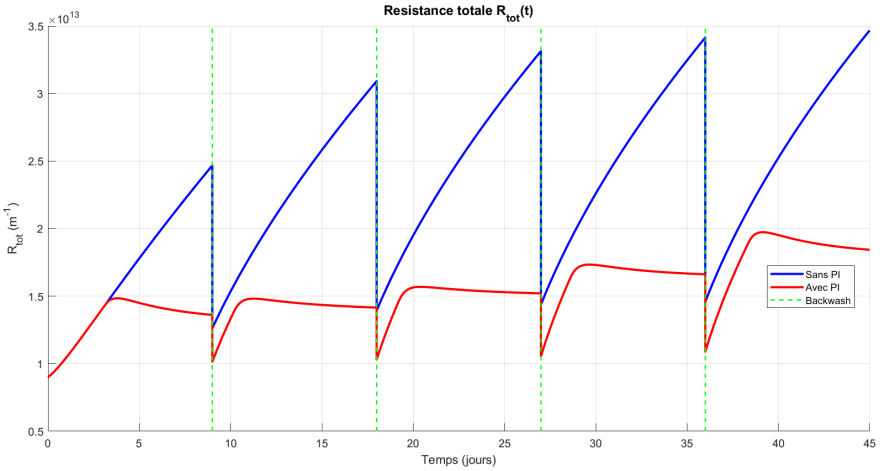


Figure 4.1 – Résistance totale $R_{tot}(t)$: comparaison sans PI et avec PI.

La figure 4.1 montre que l'introduction du bullage limite fortement la croissance de la résistance totale entre deux rétrolavages. La courbe commandée reste nettement en dessous de la référence, notamment à partir du deuxième cycle. La réduction de la résistance est principalement liée à la limitation de la masse de gâteau, tandis que la composante liée aux pores conserve une évolution cumulative.

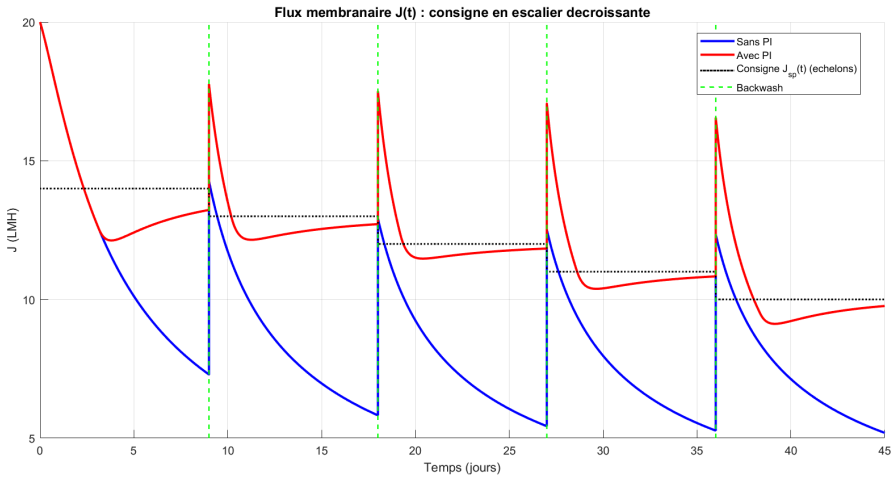


FIGURE 4.2 – Flux membranaire $J(t)$: comparaison sans PI, avec PI et consigne $J_{sp}(t)$ en escalier.

La figure 4.2 met en évidence l'effet principal du régulateur. Sans commande, le flux suit la tendance de référence et finit à $5,19$ LMH. Avec PI, la trajectoire reste au voisinage des paliers de consigne et atteint $9,76$ LMH à la fin du cinquième cycle pour une consigne de 10 LMH. L'écart final est donc de $0,24$ LMH. Les dépassements visibles immédiatement après les rétrolavages proviennent de la régénération instantanée de la membrane ; le régulateur ne peut pas imposer une action négative sur k_m pour réduire instantanément un flux supérieur à la consigne.

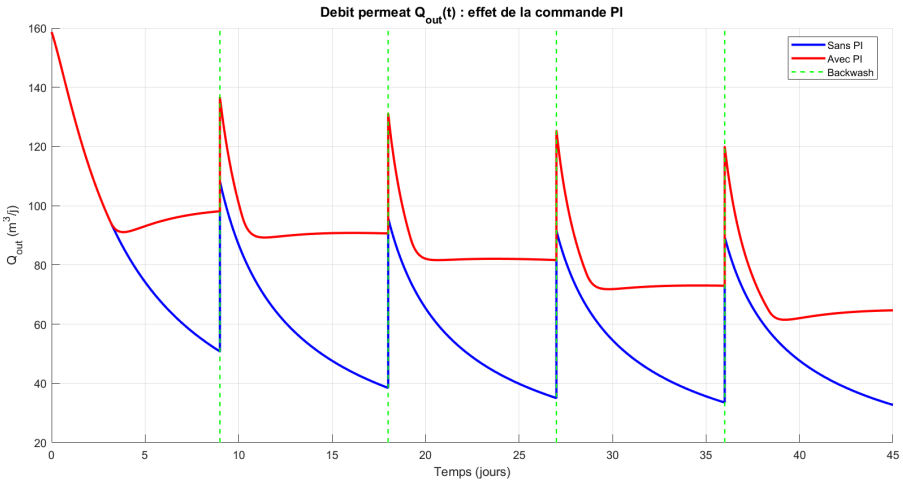


FIGURE 4.3 – Débit de perméat $Q_{out}(t)$: comparaison sans PI et avec PI.

Le débit de perméat suit la même hiérarchie que le flux. L'action du PI permet de maintenir une capacité de production nettement supérieure à celle du fonctionnement sans commande sur la majeure partie de la simulation. En fin de période, le débit commandé est de l'ordre de $64,6$ m^3/j, contre environ $32,8$ m^3/j pour la référence sans bullage.

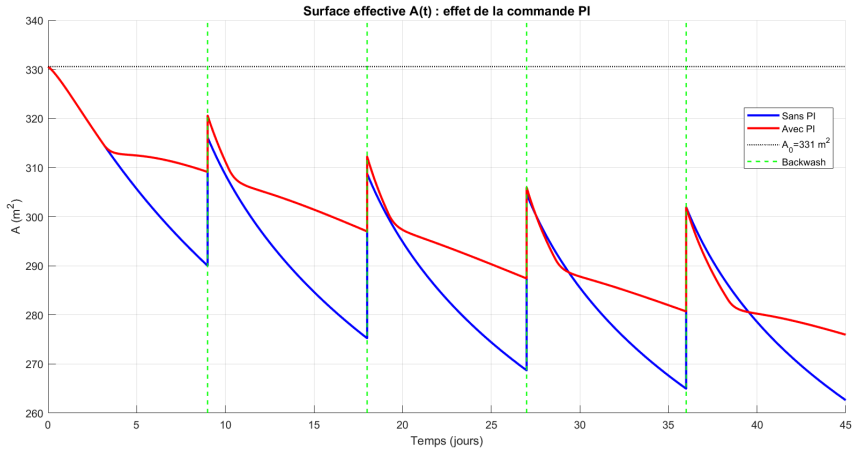


FIGURE 4.4 – Surface membranaire effective $A(t)$: comparaison sans PI et avec PI.

La surface effective est mieux préservée sous PI. La réduction de l'accumulation du gâteau retarde en particulier la perte de surface utile pendant les cycles intermédiaires. Cependant, la courbe reste en dessous de la valeur initiale $A_0 = 330,56$ m^2, ce qui montre que le bullage ne supprime pas l'ensemble des mécanismes de dégradation.

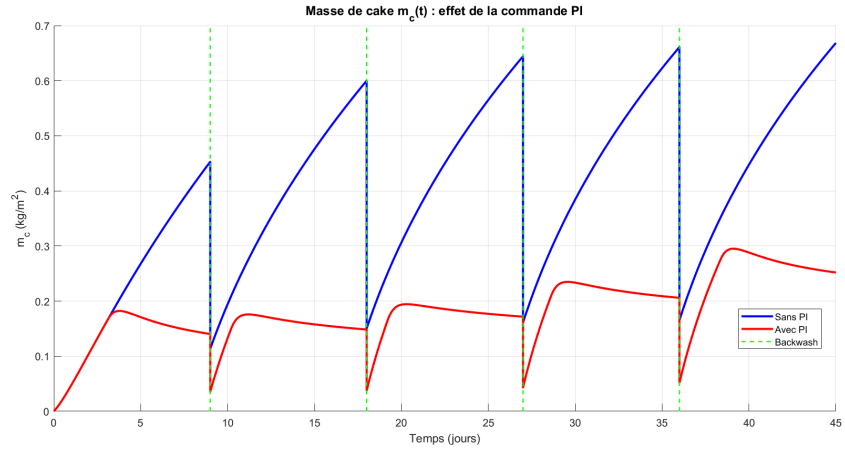


FIGURE 4.5 – Masse de gâteau $m_c(t)$: comparaison sans PI et avec PI.

La différence entre les deux scénarios apparaît très nettement sur la figure 4.5. Sans PI, la masse de gâteau augmente jusqu'à $0,6685$ kg/m^2. Avec PI, elle reste beaucoup plus faible et se situe à environ $0,25$ kg/m^2 à la fin des 45 jours, malgré les phases de croissance entre deux rétrolavages. Le régulateur agit donc bien sur la variable colmatante directement accessible à l'actionneur.

4.4 Commande prédictive non linéaire (NMPC)

4.4.1 Principe

La commande prédictive non linéaire (Nonlinear Model Predictive Control, NMPC) repose sur la résolution, à chaque instant d'échantillonnage, d'un problème d'optimisation

en boucle ouverte sur un horizon fini, en utilisant l'état courant du procédé comme condition initiale. L'optimisation produit une séquence de commandes optimales, dont seule la première est appliquée au procédé réel, puis l'horizon est décalé d'un pas et le calcul est réitéré — principe qualifié de *receding horizon* (Camacho and Bordons, 2007; Dai et al., 2012). Cette stratégie confère à la NMPC une robustesse inhérente vis-à-vis des incertitudes et des perturbations, sans qu'il soit nécessaire de les modéliser explicitement (Allgöwer et al., 2004).

Dans cette étude, la NMPC détermine la commande de bullage $k_m(t)$ en tenant compte de l'évolution future prédite du colmatage membranaire sur un horizon glissant de N_p pas. Le modèle de prédiction conserve les mêmes équations du procédé mais utilise, pour l'optimisation, la dynamique réduite des états membranaires commandés, avec gel des termes de dépôt issus de la biologie sur l'horizon considéré (Seborg et al., 2010).

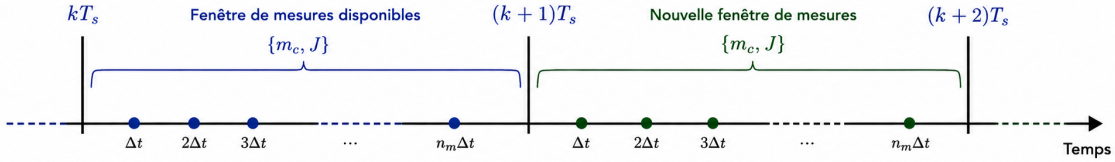


Figure 4.6 – Principe de la fenêtre glissante de la commande NMPC : à chaque pas d'échantillonnage, la fenêtre de mesures disponibles est décalée et une nouvelle fenêtre de prédiction est utilisée pour réoptimiser la commande.

4.4.2 Formulation du problème d'optimisation

Le critère de la NMPC est conservé sous la forme :

$$\min_{k_{m,1},\ldots,k_{m,N_c}} \sum_{k=1}^{N_p} \left[q_1 \left(J_k - J_{sp} \right)^2 + q_2 \left(J_k - J_{k-1} \right)^2 \right] + \sum_{k=1}^{N_c} w_{k_m} k_{m,k}^2 \tag{4.8}$$

Définition des paramètres de la NMPC. Les paramètres de réglage de la commande sont les suivants :

Tableau 4.1 – Paramètres de réglage de la NMPC dans la campagne finale.

Paramètre	**Symbole**	**Valeur**	**Unité**	**Rôle**
Pas d'échantillonnage	T_s	0,25	j (6 h)	Période entre deux résolutions du problème d'optimisation.
Horizon de prédiction	N_p	8	—	Nombre de pas prédits ($N_p T_s = 2$ jours).
Horizon de commande	N_c	8	—	Nombre de décisions optimisées, égal à N_p.
Poids de poursuite	q_1	10	LMH^{-2}	Pondération de l'erreur de flux $(J_k - J_{sp,k})^2$.
Poids de lissage	q_2	0,5	LMH^{-2}	Pondération des variations de flux $(J_k - J_{k-1})^2$.
Poids d'effort	w_{k_m}	0,01	j^2	Régularisation de l'effort de commande $k_{m,k}^2$.
Borne physique	$k_{m,\max}$	5,0	j^{-1}	Maximum admissible du bullage.
Flux minimal	$J_{\min}$	5,0	LMH	Protection de la membrane (Eq. 4.11).

Le rapport $q_1/w_{k_m} = 1000$ indique que, dans le critère retenu, la poursuite de la consigne est fortement pondérée par rapport à la seule régularisation de l'effort de bullage, dans la limite de la saturation $k_{m,\max} = 5,0\ \mathrm{j}^{-1}$.

Le critère combine ainsi trois termes :

1. **Terme de poursuite** (poids q_1, dominant) : pénalise l'écart entre le flux prédit J_k et la consigne $J_{sp,k}$;
2. **Terme de lissage** (poids q_2) : pénalise les variations de flux d'un pas à l'autre ;
3. **Terme de régularisation** (poids w_{k_m}, volontairement faible) : pénalise l'effort de bullage.

Justification du choix $N_c = N_p = 8$. Ce choix repose sur l'hypothèse standard de la commande prédictive, qui consiste à identifier l'horizon de prédiction à l'horizon de commande (Dai et al., 2012). Pour un horizon court tel que celui retenu dans cette étude ($N_p = 8$ pas, soit 48 heures), cette simplification est justifiée à la fois par la littérature (Dai et al., 2012) et par la faisabilité computationnelle observée.

(i) **Faisabilité computationnelle.** Dans le cas spécifique du bioréacteur à membrane étudié, le temps de calcul moyen par problème d'optimisation est de $0,0201$ s (cf. §4.4.3), très inférieur au pas d'échantillonnage $T_s = 6$ h. Ce coût de calcul réduit rend l'utilisation de l'horizon complet compatible avec la faisabilité temps

réel dans la campagne étudiée.

Les contraintes restent :

$$m_{c,k+1} = m_{c,k} + \frac{T_s}{6}\left(\kappa_{1,k} + 2\kappa_{2,k} + 2\kappa_{3,k} + \kappa_{4,k}\right), \qquad k = 0, \ldots, N_p - 1 \tag{4.9}$$

$$0 \leq k_{m,k} \leq k_{m,\max} = 5.0 \text{ j}^{-1}, \qquad k = 1, \ldots, N_c \tag{4.10}$$

$$J_k \geq J_{min} = 5.0 \text{ LMH}, \qquad k = 1, \ldots, N_p \tag{4.11}$$

Le choix de pondération donne la priorité au suivi de la consigne, tout en conservant une pénalisation modérée des variations de flux et de l'effort de bullage.

4.4.3 Implémentation numérique

La NMPC est mise en œuvre avec CasADi et IPOPT, selon une formulation à tirs multiples. Sur la campagne finale, 180 problèmes d'optimisation sont résolus. Le temps moyen d'une résolution est de $0,0201$ s, le maximum de $0,2121$ s et le temps total cumulé de $3,62$ s. Ces temps restent très inférieurs au pas d'échantillonnage de six heures retenu pour la simulation.

4.4.4 Résultats de simulation NMPC

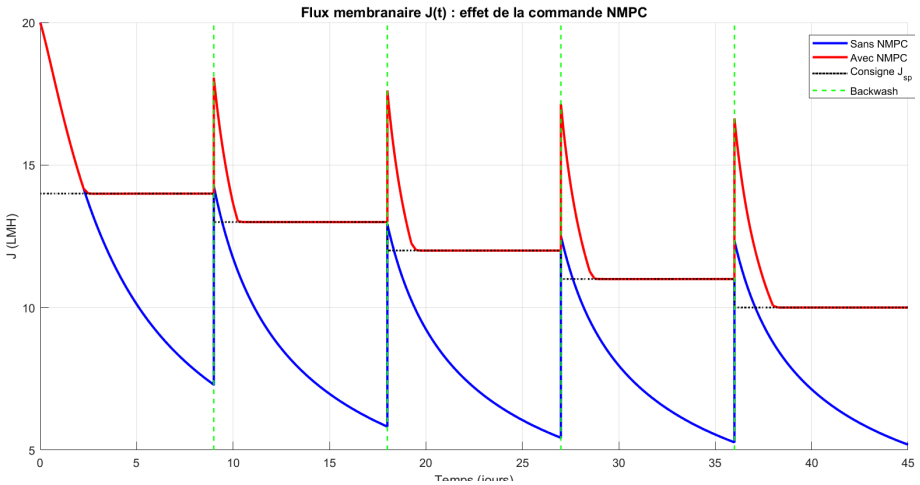


Figure 4.7 – Flux membranaire $J(t)$: comparaison sans NMPC, avec NMPC et consigne $J_{sp}(t)$.

La figure 4.7 montre le résultat le plus proche de la consigne parmi les deux stratégies. Sur les cinq cycles, le flux commandé rejoint les paliers 14, 13, 12, 11 et 10 LMH. En fin de simulation, la valeur mesurée est exactement $10,00$ LMH pour une consigne de $10,00$ LMH, soit une erreur finale nulle. L'effet anticipatif de la NMPC permet de compenser progressivement la dégradation de la membrane sans attendre que le flux s'éloigne fortement de la consigne.

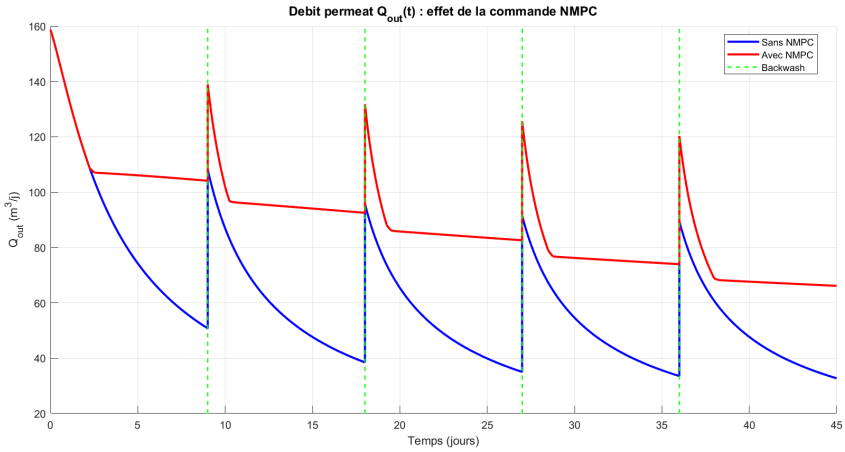


FIGURE 4.8 – Débit de perméat $Q_{out}(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC.

Le maintien du flux se traduit directement par une production de perméat plus élevée. Le débit commandé demeure au-dessus de la référence pendant l'ensemble des cycles et atteint environ $66,2$ m^3/j à la fin de la simulation.

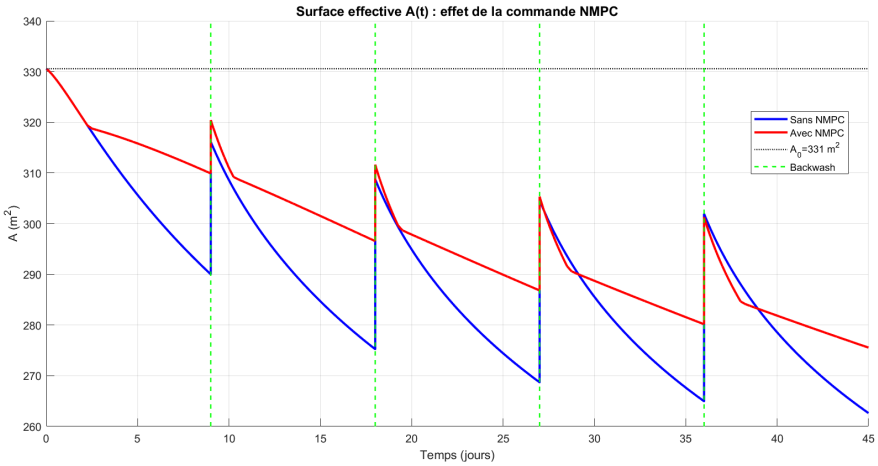


FIGURE 4.9 – Surface membranaire effective $A(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC.

La surface effective reste mieux conservée sous NMPC que sans commande. La réduction de l'accumulation du gâteau limite la perte de surface utile, même si la valeur finale demeure inférieure à A_0. L'écart entre les courbes confirme que la commande agit sur la trajectoire de colmatage, et pas uniquement sur la variable de flux.

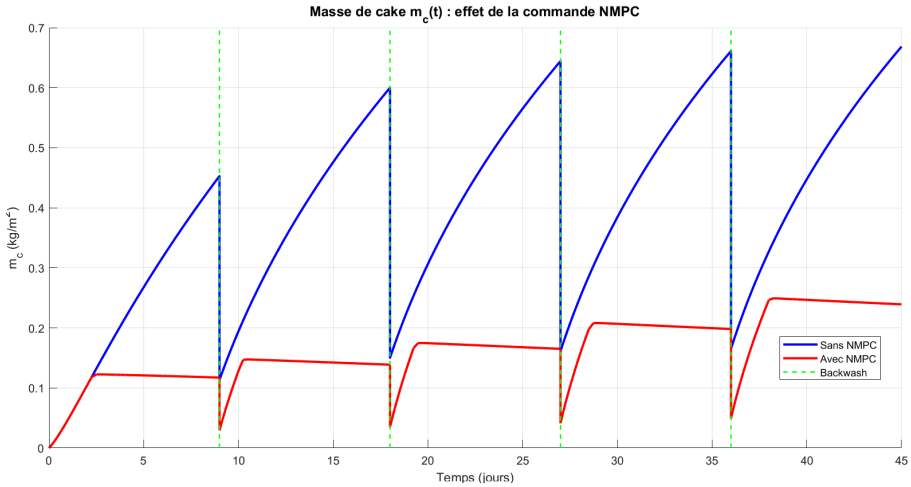


FIGURE 4.10 – Masse de gâteau $m_c(t)$: comparaison sans NMPC et avec NMPC.

La masse de gâteau reste nettement plus faible sous NMPC que dans le scénario sans commande. Elle demeure autour de $0,24$ kg/m^2 à la fin des 45 jours, avec des variations entre deux rétrolavages. La trajectoire obtenue montre que la NMPC utilise activement le bullage pour maintenir le flux, sans rester continuellement bloquée sur le plancher numérique de m_c : le temps passé avec $m_c < 10^{-5}$ kg/m^2 représente environ 3,7 % de la durée de simulation.

4.5 Comparaison PI vs NMPC

Le tableau 4.1 rassemble les principaux résultats de la nouvelle campagne de simulation. Les trois scénarios utilisent la même configuration membranaire, la même séquence de consigne et la même borne d'actionneur.

TABLEAU 4.2 – Comparaison des performances de suivi du flux pour la simulation finale.

Indicateur	Sans commande	PI	NMPC
Flux final $J(45)$ (LMH)	5,19	9,76	10,00
Consigne finale $J_{sp}(45)$ (LMH)	10,00	10,00	10,00
Erreur finale $\lvert J_{sp}(45) - J(45)\rvert$ (LMH)	4,81	0,24	0,00
Débit final $Q_{out}(45)$ (m^3/j)	$\approx 32,8$	$\approx 64,6$	$\approx 66,2$

TABLEAU 4.3 – Comparaison des flux moyens sur 45 jours pour les trois scénarios.

Indicateur	**Sans commande**	**PI**	**NMPC**
Flux final $J(45)$ (LMH)	5,19	9,76	10,00
Flux moyen $\bar{J}$ (LMH)	$\approx 6,8$	$\approx 11,5$	$\approx 13,5$
Gain vs sans commande (%)	—	+69 %	+98 %
Gain vs PI (%)	—	référence	**+17 %**

La comparaison met en évidence un premier résultat essentiel : le simple maintien du bullage à zéro conduit à une perte de flux importante, tandis que le PI et surtout la NMPC maintiennent le flux autour de la consigne finale. Le PI réduit l'écart final à $0,24$ LMH ; la NMPC atteint exactement $10,00$ LMH.

La différence entre les deux stratégies apparaît surtout dans la qualité du suivi au cours des changements de palier. La PI réagit à l'erreur observée et ramène progressivement le flux vers la consigne. La NMPC, en revanche, tient compte de l'évolution prédite du gâteau et ajuste le bullage de manière anticipative. Cette propriété explique la trajectoire plus régulière observée sur la figure 4.7, notamment lorsque la consigne passe successivement de 14 à 13, 12, 11 puis 10 LMH.

Les résultats montrent cependant une limite commune : le bullage agit directement sur m_c mais pas sur m_p, puisque $k_p = 0$. Il est donc possible de maintenir le flux tout en laissant progresser une composante de colmatage interne qui n'est pas directement pilotée. Cette observation est importante pour l'interprétation à long terme : la meilleure qualité de suivi de la NMPC ne signifie pas que l'ensemble du colmatage est supprimé, mais que l'actionneur disponible est utilisé plus efficacement pour compenser ses effets sur le flux. Numériquement, la masse m_p finale sous NMPC est de l'ordre de 3 fois supérieure à la valeur de référence sans commande, contre seulement 1,4 fois sous PI. Ce facteur 3, comparé au gain de +17% sur le flux moyen, illustre le compromis structurel entre performance de suivi et dégradation à long terme de la membrane : l'action sur m_c ne réduit pas m_p, mais elle permet de maintenir un flux de perméat plus élevé que sans commande, ce qui correspond à l'objectif opérationnel du procédé.

4.6 Conclusion du chapitre

Ce chapitre a évalué deux stratégies de commande du bullage appliquées au modèle couplé ADM1-SMP/EPS–membrane : un régulateur PI et une NMPC. Dans la nouvelle configuration, la membrane dispose initialement d'une surface de $330,56$ m^2 et d'un débit de perméat de conception de $158,7$ m^3/j. Les deux stratégies partagent la même borne $k_{m,\max} = 5,0$ j^{-1} et la même consigne en escalier décroissant.

Le scénario sans commande conduit à un flux final de $5,19$ LMH. Le PI porte cette valeur à $9,76$ LMH, tandis que la NMPC atteint exactement $10,00$ LMH. La NMPC offre ainsi le meilleur suivi de la consigne dans la campagne étudiée. Les résultats montrent également que cette amélioration repose sur une action ciblée sur le gâteau, alors que le colmatage des pores reste non directement commandé.

Conclusion générale et perspectives

Synthèse du travail réalisé

Ce mémoire avait pour ambition de construire un modèle numérique complet d'un bioréacteur à membrane anaérobie, couvrant l'ensemble de la chaîne allant de la digestion biologique au colmatage membranaire et à sa commande. Le chapitre 1 a fourni le socle bibliographique, le chapitre 2 a développé le modèle biologique ADM1-SMP/EPS, et les chapitres 3 et 4 ont successivement couplé ce modèle au colmatage membranaire puis évalué deux stratégies de commande par bullage d'air. Le modèle couplé final comporte 49 états, auxquels s'ajoute un état intégral pour la régulation PI, avec une configuration membranaire à SRT = 300 j, $Q_w = 11{,}3$ m^3/j et $A_0 = 330{,}56$ m^2.

Principaux résultats et contributions

La simulation sans commande a permis d'établir la référence physique du colmatage : sur 45 jours, le flux passe de 20,00 à 5,19 LMH, avec des masses finales de 0,6685 kg/m^2 pour le gâteau et 0,2745 kg/m^2 pour le colmatage des pores. Les rétrolavages restaurent une partie de la membrane, mais une fraction du dépôt reste et s'accumule d'un cycle à l'autre. Avec la commande PI, le flux se stabilise à 9,76 LMH en fin de simulation pour une consigne de 10 LMH, tandis que la NMPC atteint exactement cette valeur sur le dernier palier. Les 180 résolutions du problème d'optimisation ont pris en moyenne 0,0201 s (3,62 s au total), ce qui reste très raisonnable au regard du pas de commande utilisé. La NMPC suit donc mieux la consigne que le PI, mais les deux stratégies se heurtent à la même limite : le bullage agit sur le gâteau de filtration, pas sur le colmatage interne des pores. C'est justement l'intérêt du modèle couplé développé dans ce mémoire que de rendre cette limite visible.

Limites du travail

Ce travail reste une validation numérique, basée sur des simulations. Les coefficients du modèle de colmatage n'ont pas pu être confrontés à des données expérimentales propres à la configuration étudiée, et le choix kp = 0 limite l'action des deux régulateurs au seul gâteau de filtration, sans agir directement sur la composante poreuse du colmatage.

Perspectives

Plusieurs prolongements seraient intéressants à explorer. On pourrait notamment étendre la commande à plusieurs actionneurs afin d'agir à la fois sur le gâteau et sur le colmatage interne, ou encore intégrer dans le critère de la NMPC des objectifs supplémentaires comme la consommation énergétique du bullage ou la préservation

de la membrane sur le long terme. Une validation expérimentale de la configuration à SRT = 300 jours permettrait enfin de confirmer les tendances obtenues par simulation. Sur le plan méthodologique, des approches de commande data-driven (Santos et al., 2021) ou fondées sur l'apprentissage automatique (Frontistis et al., 2023) constituent également des pistes complémentaires à la NMPC développée ici, en particulier pour anticiper le colmatage sans reposer entièrement sur un modèle physique explicite.

Annexe A

Matrice de Petersen complète issue de l'implémentation MATLAB

La matrice ci-dessous reprend les 19 processus et les 24 composants dans l'ordre demandé. Les coefficients et les cases laissées vides suivent la liste fournie à partir du code MATLAB ; aucun coefficient supplémentaire n'a été ajouté.

Tableau A.1 – Matrice de Petersen complète : 19 processus et 24 composants.

Processus	S_{su}	S_{aa}	S_{fa}	S_{va}	S_{bu}	S_{pro}	S_{ac}	S_{h2}	S_{ch4}	S_{IC}	S_{IN}	S_I	X_c	X_{ch}	X_{pr}	X_{li}	X_{su}	X_{aa}	X_{fa}	X_{c4}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}	X_I
p_1 Désintégration										$-s_1$	$+(N_{xc} - f_{xI}N_I - f_{sI}N_I - f_{pr}N_{aa})$	$+f_{sI}$	-1	$+f_{ch}$	$+f_{pr}$	$+f_{li}$								$+f_{xI}$
p_2 Hydrolyse (glucides)	$+1$									$-s_2$				-1										
p_3 Hydrolyse (protéines)		$+1$								$-s_3$					-1									
p_4 Hydrolyse (lipides)	$+(1-f_{fa})$		$+f_{fa}$							$-s_4$						-1								
p_5 Acidogenèse (S_{su})	-1				$+(1-Y_{su})\cdot f_{bu,su}$	$+(1-Y_{su})\cdot f_{pro,su}$	$+(1-Y_{su})\cdot f_{ac,su}$	$+(1-Y_{su})\cdot f_{h2,su}$		$-s_5$	$-Y_{su}N_{bac}$						$+Y_{su}$								
p_6 Acidogenèse (S_{aa})		-1		$+(1-Y_{aa})\cdot f_{va,aa}$	$+(1-Y_{aa})\cdot f_{bu,aa}$	$+(1-Y_{aa})\cdot f_{pro,aa}$	$+(1-Y_{aa})\cdot f_{ac,aa}$	$+(1-Y_{aa})\cdot f_{h2,aa}$		$-s_6$	$+(N_{aa} - Y_{aa}N_{bac})$							$+Y_{aa}$							
p_7 Acétogenèse (S_{fa})			-1				$+(1-Y_{fa})\cdot 0.7$	$+(1-Y_{fa})\cdot 0.3$		$-s_7$	$-Y_{fa}N_{bac}$								$+Y_{fa}$					
p_8 Acétogenèse (S_{va})				$-1^{\dagger}$		$+(1-Y_{c4})\cdot 0.54$	$+(1-Y_{c4})\cdot 0.31$	$+(1-Y_{c4})\cdot 0.15$		$-s_8$	$-Y_{c4}N_{bac}$									$+Y_{c4}$				
p_9 Acétogenèse (S_{bu})					$-1^{\dagger}$		$+(1-Y_{c4})\cdot 0.8$	$+(1-Y_{c4})\cdot 0.2$		$-s_9$	$-Y_{c4}N_{bac}$									$+Y_{c4}$				
p_{10} Acétogenèse (S_{pro})						-1	$+(1-Y_{pro})\cdot 0.57$	$+(1-Y_{pro})\cdot 0.43$		$-s_{10}$	$-Y_{pro}N_{bac}$										$+Y_{pro}$			
p_{11} Méthanogenèse acétoclaste							-1		$+(1-Y_{ac})$	$-s_{11}$	$-Y_{ac}N_{bac}$											$+Y_{ac}$		
p_{12} Méthanogenèse hydrogénotrophe								-1	$+(1-Y_{h2})$	$-s_{12}$	$-Y_{h2}N_{bac}$												$+Y_{h2}$	
p_{13} Décès X_{su}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$				-1							
p_{14} Décès X_{aa}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$					-1						
p_{15} Décès X_{fa}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$						-1					
p_{16} Décès X_{c4}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$							-1				
p_{17} Décès X_{pro}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$								-1			
p_{18} Décès X_{ac}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$									-1		
p_{19} Décès X_{h2}										$-s_{13}$	$+(N_{bac} - N_{xc})$		$+1$										-1	

Note : pour p_8 et p_9, la consommation de S_{va} et de S_{bu} est associée respectivement aux rapports $S_{va}/(S_{va}+S_{bu})$ et $S_{bu}/(S_{va}+S_{bu})$, comme indiqué dans la définition des processus. La production de X_{c4} est indiquée dans les deux lignes selon la liste fournie.

A.1 Expressions des coefficients de bilan carbone s_1 à s_{13}

Les expressions suivantes sont retranscrites à partir des formules fournies avec le tableau, sans ajout de termes.

$$
\begin{aligned}
s_1 &= -C_{xc} + f_{sI}C_{sI} + f_{ch}C_{ch} + f_{pr}C_{pr} + f_{li}C_{li} + f_{xI}C_{xI} \\
s_2 &= -C_{ch} + C_{su} \\
s_3 &= -C_{pr} + C_{aa} \\
s_4 &= -C_{li} + (1-f_{fa})C_{su} + f_{fa}C_{fa} \\
s_5 &= -C_{su} + (1-Y_{su})(f_{bu,su}C_{bu} + f_{pro,su}C_{pro} \\
&\quad + f_{ac,su}C_{ac}) + Y_{su}C_{bac} \\
s_6 &= -C_{aa} + (1-Y_{aa})(f_{va,aa}C_{va} + f_{bu,aa}C_{bu} \\
&\quad + f_{pro,aa}C_{pro} + f_{ac,aa}C_{ac}) + Y_{aa}C_{bac} \\
s_7 &= -C_{fa} + (1-Y_{fa})\cdot 0.7C_{ac} + Y_{fa}C_{bac} \\
s_8 &= -C_{va} + (1-Y_{c4})\cdot 0.54C_{pro} + (1-Y_{c4})\cdot 0.31C_{ac} \\
&\quad + Y_{c4}C_{bac} \\
s_9 &= -C_{bu} + (1-Y_{c4})\cdot 0.8C_{ac} + Y_{c4}C_{bac} \\
s_{10} &= -C_{pro} + (1-Y_{pro})\cdot 0.57C_{ac} + Y_{pro}C_{bac} \\
s_{11} &= -C_{ac} + (1-Y_{ac})C_{ch4} + Y_{ac}C_{bac} \\
s_{12} &= (1-Y_{h2})C_{ch4} + Y_{h2}C_{bac} \\
s_{13} &= -C_{bac} + C_{xc}
\end{aligned}
$$

Annexe B

Concentrations d'entrée, conditions initiales et points d'équilibre

Cette annexe regroupe les concentrations d'entrée, les conditions initiales et les points d'équilibre communiqués pour les composés du modèle. Les valeurs et les unités sont retranscrites telles que fournies.

Tableau B.1 – Concentrations d'entrée, conditions initiales et points d'équilibre des composés.

Composés	**Concentrations d'entrée**	**Conditions initiales**	**Point d'équilibre**
S_{su}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.012 kgCOD m^{-3}	0.01195
S_{aa}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.0053 kgCOD m^{-3}	0.0053
S_{fa}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.099 kgCOD m^{-3}	0.0986
S_{va}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.012 kgCOD m^{-3}	0.0116
S_{bu}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.013 kgCOD m^{-3}	0.0132
S_{pro}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.016 kgCOD m^{-3}	0.01578
S_{ac}	0.001 kgCOD m^{-3}	0.20 kgCOD m^{-3}	0.2914
S_{h2}	`1.0E-8` kgCOD m^{-3}	`2.3E-07` kgCOD m^{-3}	`2.359E-07`
S_{ch4}	`1.0E-5` kgCOD m^{-3}	0.055 kgCOD m^{-3}	0.0557
S_{ic}	0.04 kmol m^{-3}	0.15 kmol m^{-3}	0.1636
S_{in}	0.01 kmol m^{-3}	0.13 kmol m^{-3}	0.1440
S_i	0.02 kgCOD m^{-3}	0.33 kgCOD m^{-3}	0.3250
X_c	2 kgCOD m^{-3}	0.31 kgCOD m^{-3}	0.3085
X_{ch}	5 kgCOD m^{-3}	0.028 kgCOD m^{-3}	0.0279
X_{pr}	20 kgCOD m^{-3}	0.10 kgCOD m^{-3}	0.10257
X_{li}	5 kgCOD m^{-3}	0.029 kgCOD m^{-3}	0.02948
X_{su}	0 kgCOD m^{-3}	0.42 kgCOD m^{-3}	0.4201
X_{aa}	0.01 kgCOD m^{-3}	1.18 kgCOD m^{-3}	1.1791
X_{fa}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.24 kgCOD m^{-3}	0.2430

Suite à la page suivante

Tableau B.1 – suite

Composés	**Concentrations d'entrée**	**Conditions initiales**	**Point d'équilibre**
X_{c4}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.43 kgCOD m^{-3}	0.4319
X_{pro}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.14 kgCOD m^{-3}	0.1373
X_{ac}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.76 kgCOD m^{-3}	0.75727
X_{h2}	0.01 kgCOD m^{-3}	0.32 kgCOD m^{-3}	0.3170
X_i	25 kgCOD m^{-3}	25.6 kgCOD m^{-3}	25.6170
S_{cat}	0.04 kmol m^{-3}	0.04 kmol m^{-3}	0.04
S_{an}	0.02 kmol m^{-3}	0.02 kmol m^{-3}	0.02
$S_{va,m}$	—	0.011 kgCOD m^{-3}	0.01159
$S_{bu,m}$	—	0.013 kgCOD m^{-3}	0.0132
$S_{pro,m}$	—	0.016 kgCOD m^{-3}	0.0157
$S_{ac,m}$	—	0.2 kgCOD m^{-3}	0.2909
S_{hco3}	—	0.14 kgCOD m^{-3}	0.1541
S_{nh3}	—	0.0041 kgCOD m^{-3}	0.0050
$S_{gas,h2}$	—	`1.02E-05` kmol m^{-3}	`1.0273E-05`
$S_{gas,ch4}$	—	1.63 kmol m^{-3}	1.6495
$S_{gas,co2}$	—	0.014 kgCOD m^{-3}	0.0136

Bibliographie

[1] F. Allgöwer, R. Findeisen, and L. T. Biegler. Nonlinear model predictive control : From theory to application. *Journal of the Chinese Institute of Chemical Engineers*, 35(3) :299–316, 2004.

[2] L. Appels, J. Baeyens, J. Degrève, and R. Dewil. Principles and potential of the anaerobic digestion of waste-activated sludge. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(6) :755–781, 2008.

[3] S. F. Aquino and D. C. Stuckey. Integrated model of the production of soluble microbial products (smp) and extracellular polymeric substances (eps) in anaerobic chemostats during transient conditions. *Biochemical Engineering Journal*, 38 : 138–146, 2008.

[4] D. J. Barker and D. C. Stuckey. Modeling of soluble microbial products in anaerobic digestion : The effect of feed strength and composition. *Water Environment Research*, 73(2) :173–184, 2001. doi : 10.2175/106143001X138831. URL https://doi.org/10.2175/106143001X138831.

[5] D. J. Batstone, J. Keller, I. Angelidaki, S. V. Kalyuzhnyi, S. G. Pavlostathis, A. Rozzi, W. T. M. Sanders, H. Siegrist, and V. A. Vavilin. The iwa anaerobic digestion model no. 1 (adm1). *Water Science and Technology*, 45(10) :65–73, 2002.

[6] B. Benyahia, A. Charfi, G. Lesage, M. Heran, B. Cherki, and J. Harmand. Coupling a simple and generic membrane fouling model with biological dynamics : Application to the modeling of an anaerobic membrane bioreactor (anmbr). *Membranes*, 14 (3) :69, 2024.

[7] O. Bernard, Z. Hadj-Sadok, D. Dochain, A. Genovesi, and J.-P. Steyer. Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process. *Biotechnology and Bioengineering*, 75(4) :424–438, 2001.

[8] Eduardo F. Camacho and Carlos Bordons. *Model Predictive Control*. Springer, London, 2nd edition, 2007.

[9] A. Cerón-Vivas, J. M. Morgan-Sagastume, and A. Noyola. Intermittent filtration and gas bubbling for fouling reduction in anaerobic membrane bioreactors. *Journal of Membrane Science*, 423–424 :136–142, 2012. doi : 10.1016/j.memsci.2012.08.008. URL https://doi.org/10.1016/j.memsci.2012.08.008.

[10] Y. Chen, J. J. Cheng, and K. S. Creamer. Inhibition of anaerobic digestion process : A review. *Bioresource Technology*, 99(10) :4044–4064, 2008.

[11] L. Dai, Y. Xia, M. Fu, and M. S. Mahmoud. Discrete-time model predictive control. In M. S. Mahmoud, editor, *Advances in Discrete Time Systems*, chapter 4, pages 77–116. InTech, Rijeka, Croatia, 2012. doi : 10.5772/3578. URL https://doi.org/10.5772/3578.

[12] Y. Daoud, N. Abdellatif, and J. Harmand. Modèles mathématiques de digestion anaérobie : effet de l'hydrolyse sur la production du biogaz. *Revue Africaine de Recherche en Informatique et Mathématiques Appliquées (ARIMA)*, 28, 2019.

[13] D. Deublein and A. Steinhauser. *Biogas from Waste and Renewable Resources : An Introduction*. Wiley-VCH, Weinheim, 2008.

[14] G. Di Bella and D. Di Trapani. A brief review on the resistance-in-series model in membrane bioreactors (mbrs). *Membranes*, 9(2) :24, 2019. doi : 10.3390/membranes9020024. URL https://doi.org/10.3390/membranes9020024.

[15] Z. Frontistis, G. Lykogiannis, and A. Sarmpanis. Machine learning implementation in membrane bioreactor systems : Progress, challenges, and future perspectives : A review. *Environments*, 10(7) :127, 2023. doi : 10.3390/environments10070127. URL https://doi.org/10.3390/environments10070127.

[16] J. Hermia. Constant pressure blocking filtration laws – application to power-law non-newtonian fluids. *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 60 (3) :183–187, 1982.

[17] U. Jeppsson, M.-N. Pons, I. Nopens, J. Alex, J. B. Copp, K. V. Gernaey, C. Rosen, J.-P. Steyer, and P. A. Vanrolleghem. Benchmark simulation model no. 2 : General protocol and exploratory case studies. *Water Science and Technology*, 56(8) :67–78, 2007.

[18] S. Judd. *The MBR Book : Principles and Applications of Membrane Bioreactors for Water and Wastewater Treatment*. Butterworth-Heinemann, Oxford, 2 edition, 2011.

[19] N. Kalboussi, J. Harmand, N. Ben Amar, and F. Ellouze. A comparative study of three membrane fouling models : Towards a generic model for optimization purposes. In *Proceedings of CARI'2016*, pages 16–26, Tunis, Tunisia, 2016.

[20] Y. N. Kanafin, D. Kanafina, S. Malamis, E. Katsou, V. J. Inglezakis, S. G. Poulopoulos, and E. Arkhangelsky. Anaerobic membrane bioreactors for municipal wastewater treatment : A literature review. *Membranes*, 11(12) :967, 2021.

[21] Kovalus. Puron hollow fiber modules : Technical datasheet. Technical report, Kovalus Separation Solutions, 2020. URL https://www.kovalus.com/wp-content/uploads/2020/10/puron-mbr-psh-modules.pdf. PSH 330/660/1800 submerged hollow fiber modules.

[22] C. S. Laspidou and B. E. Rittmann. A unified theory for extracellular polymeric substances, soluble microbial products, and active and inert biomass. *Water Research*, 36(11) :2711–2720, 2002.

[23] P. Le-Clech, V. Chen, and T. A. G. Fane. Fouling in membrane bioreactors used in wastewater treatment. *Journal of Membrane Science*, 284(1–2) :17–53, 2006.

[24] Kibaek Lee, Seonki Lee, Jaewoo Lee, and Xiaolei Zhang. Roles of soluble microbial products and extracellular polymeric substances in membrane fouling. In *Current Developments in Biotechnology and Bioengineering*, pages 45–79. Elsevier, 2020. doi : 10.1016/B978-0-12-819809-4.00003-6. URL https://doi.org/10.1016/B978-0-12-819809-4.00003-6.

[25] G. Lettinga, A. F. M. van Velsen, S. W. Hobma, W. de Zeeuw, and A. Klapwijk. Use of the upflow anaerobic sludge blanket (uasb) reactor concept for biological wastewater treatment, especially for anaerobic treatment. *Biotechnology and Bioengineering*, 22(4) :699–734, 1980.

[26] B. Q. Liao, J. T. Kraemer, and D. M. Bagley. Anaerobic membrane bioreactors : Applications and research directions. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, 36(6) :489–530, 2006.

[27] Z. Liu, J. Yu, K. Xiao, C. Chen, H. Ma, P. Liang, X. Zhang, and X. Huang. Quantitative relationships for the impact of gas sparging conditions on membrane fouling in anaerobic membrane bioreactor. *Journal of Cleaner Production*, 276 : 123139, 2020. doi : 10.1016/j.jclepro.2020.123139. URL https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123139.

[28] G. Mannina, B.-J. Ni, J. Makinia, J. Harmand, M. Alliet, C. Brepols, M. V. Ruano, A. Robles, M. Heran, H. Gulhan, I. Rodriguez-Roda, and J. Comas. Biological processes modelling for mbr systems : A review of the state-of-the-art focusing on smp and eps. *Water Research*, 242 :120275, 2023. doi : 10.1016/j.watres.2023.120275. URL https://doi.org/10.1016/j.watres.2023.120275.

[29] F. Meng, S.-R. Chae, A. Drews, M. Kraume, H.-S. Shin, and F. Yang. Recent advances in membrane bioreactors (mbrs) : Membrane fouling and membrane material. *Water Research*, 43(6) :1489–1512, 2009.

[30] I. Nopens, L. Benedetti, U. Jeppsson, M.-N. Pons, J. Alex, J. B. Copp, K. V. Gernaey, C. Rosen, J.-P. Steyer, and P. A. Vanrolleghem. Benchmark simulation model no 2 : Finalisation of plant layout and default control strategy. *Water Science and Technology*, 62(9) :1967–1974, 2010.

[31] PCI Membranes. Membrane bioreactors (mbr) systems, 2024. URL https://www.pcimembranes.com/industries/membrane-bio-reactors/. Consulté le 13 octobre 2026.

[32] A. Robles, M. V. Ruano, A. Charfi, G. Lesage, M. Heran, J. Harmand, A. Seco, J.-P. Steyer, D. J. Batstone, J. Kim, and J. Ferrer. A review on anaerobic membrane bioreactors (anmbrs) focused on modelling and control aspects. *Bioresource Technology*, 270 :612–626, 2018. doi : 10.1016/j.biortech.2018.09.049. URL https://doi.org/10.1016/j.biortech.2018.09.049.

[33] C. Rosen and U. Jeppsson. Aspects on adm1 implementation within the bsm2 framework. Technical report, Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University, Lund, Sweden, 2006.

[34] A. V. Santos, A. R. Alkmim Lin, M. C. Santos Amaral, and S. M. Alves Correa Oliveira. Improving control of membrane fouling on membrane bioreactors : A data-driven approach. *Chemical Engineering Journal*, 426 :131291, 2021. doi : 10.1016/j.cej.2021.131291. URL https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.131291.

[35] Dale E. Seborg, Thomas F. Edgar, Duncan A. Mellichamp, and Francis J. Doyle. *Process Dynamics and Control*. Wiley, New York, 3rd edition, 2010. ISBN 978-0-470-12867-1.

[36] G. Skouteris, D. Hermosilla, P. López, C. Negro, and Á. Blanco. Anaerobic membrane bioreactors for wastewater treatment : A review. *Chemical Engineering Journal*, 198–199 :138–148, 2012.

[37] J. B. van Lier. High-rate anaerobic wastewater treatment : Diversifying from end-of-the-pipe treatment to resource-oriented conversion techniques. *Water Science and Technology*, 57(8) :1137–1148, 2008.

Résumé – Abstract – الملخص

Résumé

Face à la pression croissante sur les ressources hydriques, le traitement anaérobie des eaux usées couplé à une filtration membranaire constitue une voie prometteuse, combinant valorisation énergétique et qualité élevée du perméat. Le colmatage membranaire demeure toutefois le principal frein à l'exploitation durable de cette technologie. Ce travail propose une approche intégrée de modélisation et de commande du colmatage dans un bioréacteur à membrane anaérobie. Un modèle biologique couplé est développé, intégrant un modèle standard de digestion anaérobie à un module additionnel décrivant la production de produits microbiens solubles et de substances polymériques extracellulaires, responsables du colmatage. Ces sorties biologiques alimentent un modèle physique de colmatage membranaire, incluant la formation d'un dépôt de surface et un blocage interne des pores, calibré pour une échelle industrielle. Deux stratégies de régulation du flux de perméat par aération sont ensuite conçues et comparées, l'une classique et l'autre prédictive avancée, afin d'assurer un suivi précis de la consigne tout en respectant les contraintes physiques du système. Les résultats de simulation montrent que l'approche prédictive assure un comportement plus stable et un suivi plus fin de la consigne, notamment après les cycles de nettoyage, comparativement à la régulation classique. Ce travail contribue ainsi à une meilleure compréhension et à une gestion optimisée du colmatage dans les bioréacteurs à membrane anaérobies.

Mots clés : Bioréacteur à membrane anaérobie, Modélisation couplée, Colmatage membranaire, Commande du procédé, Digestion anaérobie, Produits microbiens solubles.

Abstract

Faced with growing pressure on water resources, anaerobic wastewater treatment combined with membrane filtration offers a promising pathway, combining energy recovery with high permeate quality. Membrane fouling, however, remains the main obstacle to the sustainable operation of this technology. This work proposes an integrated modeling and control approach for fouling in an anaerobic membrane bioreactor. A coupled biological model is developed by integrating a standard anaerobic digestion model with an additional module describing the production of soluble microbial products and extracellular polymeric substances, responsible for fouling. These biological outputs feed a physical membrane fouling model, including surface cake formation and internal pore blocking, calibrated for an industrial scale. Two permeate flux control strategies based on aeration are then designed and compared, one classical and one advanced predictive, in order to ensure accurate setpoint tracking while respecting the physical constraints of the system. Simulation results show that the predictive approach provides more stable behavior and finer setpoint tracking, particularly after cleaning cycles, compared to the classical regulator. This work thus contributes to a better understanding and an optimized management of fouling in anaerobic membrane bioreactors.

Keywords : Anaerobic membrane bioreactor, Coupled modeling, Membrane fouling, Process control, Anaerobic digestion, Soluble microbial products.

الملخص

أمام الضغط المتزايد على الموارد المائية، تشكل المعالجة اللاهوائية للمياه العادمة المقرونة بالترشيح الغشائي مسارا واعدا، يجمع بين الاستفادة الطاقوية وجودة عالية للماء المُرشَّح. يبقى الانسداد الغشائي مع ذلك العائق الرئيسي أمام الاستغلال المستدام لهذه التقنية. يقترح هذا العمل مقاربة متكاملة لنمذجة والتحكم في الانسداد داخل مفاعل غشائي لاهوائي. طُوِّر نموذج بيولوجي مُركَّب، يدمج نموذجا معياريا للهضم اللاهوائي مع وحدة إضافية تصف إنتاج المنتجات الميكروبية الذائبة والمواد البوليمرية خارج الخلوية، المسؤولة عن الانسداد. تُغذي هذه المخرجات البيولوجية نموذجا فيزيائيا للانسداد الغشائي، يشمل تكون طبقة سطحية وانسدادا داخليا للمسام، مُعايَرا على المقياس الصناعي. صُمِّمت بعد ذلك استراتيجيتا تنظيم لتدفق المرشح عبر التهوية وقورنتا، واحدة تقليدية وأخرى تنبؤية متقدمة، بغرض ضمان تتبع دقيق للمرجع المستهدف مع احترام القيود الفيزيائية للنظام. أظهرت نتائج المحاكاة أن المقاربة التنبؤية تضمن سلوكا أكثر استقرارا وتتبعا أدق للمرجع، خصوصا بعد دورات التنظيف، مقارنة بالمنظم التقليدي. يساهم هذا العمل بالتالي في تحسين فهم وإدارة الانسداد داخل المفاعلات الغشائية اللاهوائية.

الكلمات المفتاحية: مفاعل غشائي لاهوائي، النمذجة المُركَّبة، الانسداد الغشائي، التحكم في المسار، الهضم اللاهوائي، المنتجات الميكروبية الذائبة.