



Relations ressources-consommateurs
Contexte et problématique

Partie 1. Modélisation

J. Harmand, SAMI, LBE-INRAE, Narbonne, France

_01

Avant-propos – Quelques mots sur le LBE



Le LBE



**Le site du Quatourze
à Narbonne**



**Parc Méditerranéen de
l'Innovation à Narbonne**

WEB OF SCIENCE™

Search

Results: ...
(from Web of Science Core Collection)

You searched for: TOPIC: (anaerobic digestion) ...More

Create Alert

Organizations-Enhanced **Refine** **Exclude** **Cancel** Sort these by: **Re**

The first 100 Organizations-Enhanced (by record count) are shown. For advanced refine options, u

<input type="checkbox"/> INSTITUT NATIONAL DE LA RECHERCHE AGRONOMIQUE INRA (313)	<input type="checkbox"/> UNIVERSITY OF JYVASKYLA (65)
<input type="checkbox"/> WAGENINGEN UNIVERSITY RESEARCH CENTER (215)	<input type="checkbox"/> UNIVERSITY OF SOUTHAMPTON (63)

1^{er} laboratoire au monde publiant sur la méthanisation

Services communs (ITA *)

Isabelle BERGER, Sylvie FARINE, Pascal GRAS, Guillaume GUIZARD, Marjolaine HAMELIN (DipSO), Stéphanie HARMAND, Nori HENNAOUI-ROSAY, Nadine LE THINH, Alexandra MESEGUER CDD Jérôme MAO

Diversité, Interactions et Ingénierie des Ecosystèmes Microbiens (DIEM)

Animateur Kim MILFERSTEDT

Chercheur(e)s Nicolas BERNET, Jean-Jacques GODON, Jérôme HAMELIN, Élie LE QUÉMÈNER (50%), Eric TRABLY, Robert VAN LIS, Nathalie WERY (50%)

ITA * Anaïs BONNAFOUS, Valérie BRU-ADAN, Gaëlle SANTA-CATALINA

Doctorants Roland BERTHOMIEU, Julien LACROUX, Axel ROUS

Post-doc Mercedes LLAMAS-REDONDO, Maria-Fernanda PEREZ-BERNAL

Ingénierie et Couplage de Procédés (ICoP)

Animateur Renaud ESCUDIÉ

Chercheur(e)s Hélène CARRÈRE, Jean-Philippe DELGENÈS, Jean-Philippe STEYER (50%)

ITA * Denis LOISEL, Maud TREMBLAY

CDD Soline LÈBRE

Doctorant(e)s Kévin DAUPTAIN, Noémie FIGEAC, Marie NOGUER, Clément VAN VLIERBERGHE

Qualité des produits et Impacts sur les milieux récepteurs (Qual-I)

Animatrice Dominique PATUREAU

Chercheur(e)s Jérôme HARMAND (50%), Julie JIMENEZ, Rémi SERVIEN (50%), Nathalie WERY (50%)

ITA * Éric LATRILLE (50%), Virginie ROSSARD (50%)

CDD Anne LAHEURTE

Doctorants Kévin BONNOT, David FERNANDEZ-DOMINGUEZ

Post-doc Marillia CAMOTTI-BASTOS

Systèmes, Analyse, Modélisation
et Informatique (SAMI)

Animateur Jérôme HARMAND (50%)

Chercheurs Élie LE QUÉMÈNER (50%)
Rémi SERVIEN (50%)
Jean-Philippe STEYER (50%)

ITA * Jean-Claude BOULET (SPO)
Éric LATRILLE (50%)
Virginie ROSSARD (50%)

Doctorant(e)s Alexandre MALLET,
Margaud PÉRÉMÉ

Post-doc Antoine HADDON

Développement Technologique
et Innovation (DTI)

Animatrice Diana GARCIA-BERNET

ITA * Audrey BATTIMELLI
Philippe SOUSBIE

CDD Ouasila BOUSSIHMED
Émilie FERNANDEZ
Léa GARCIA
Néméhie LAWSON
Malo SANGIER
Lucie SAUVADET

Post-doc Lorraine AWHANGBO

Business Unit
INRAE TRANSFERT

Directeur
Romain CRESSON

Chargé(e)s de projets

Olivier AZAM
Doris BROCKMANN
Antoine ESNOUF
Marina MOLETTA-DENAT
Bastien ZENNARO

Technicien(ne)s

Bruno MARTY
Stéphanie DEVILLE
Clémence PAGES
Zoé HOHMANN

Administration

Sandrine MARAVAL

Partenaires hébergés :

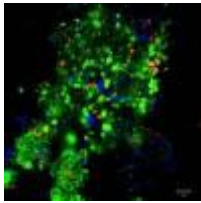
BioEnTech :
SYCOMORE :

Morand SEVERAC
Emilie PICON-HULINE, Pauline RAGNI

* ITA : ingénieurs,
techniciens, administratifs

Objets d'étude et compétences du LBE

► Deux échelles d'étude



Ecosystèmes ↔ *Bioprocédés*



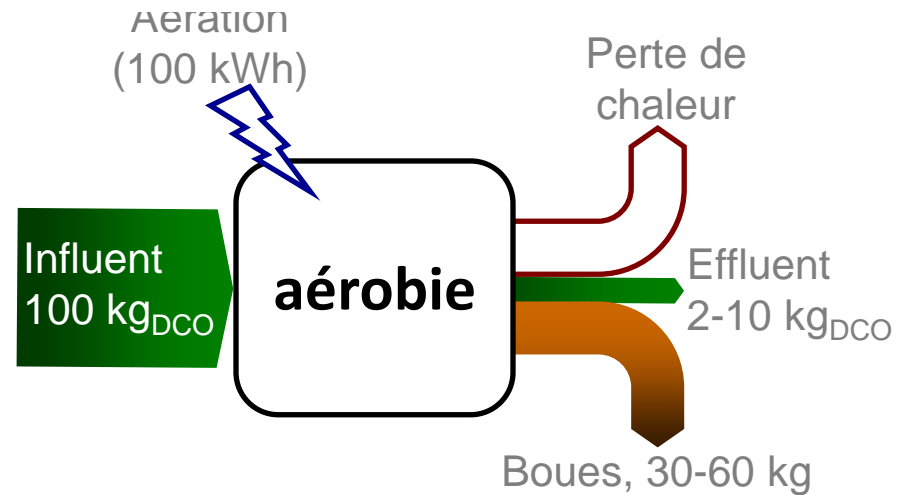
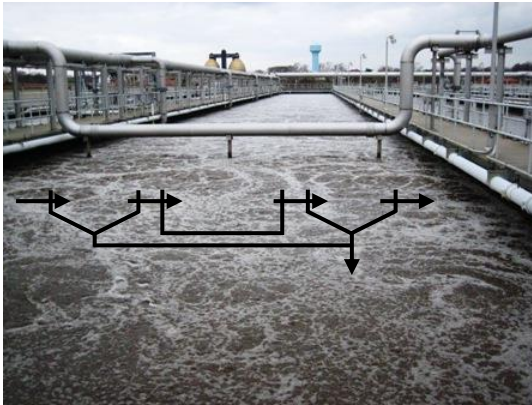
► Approche interdisciplinaire



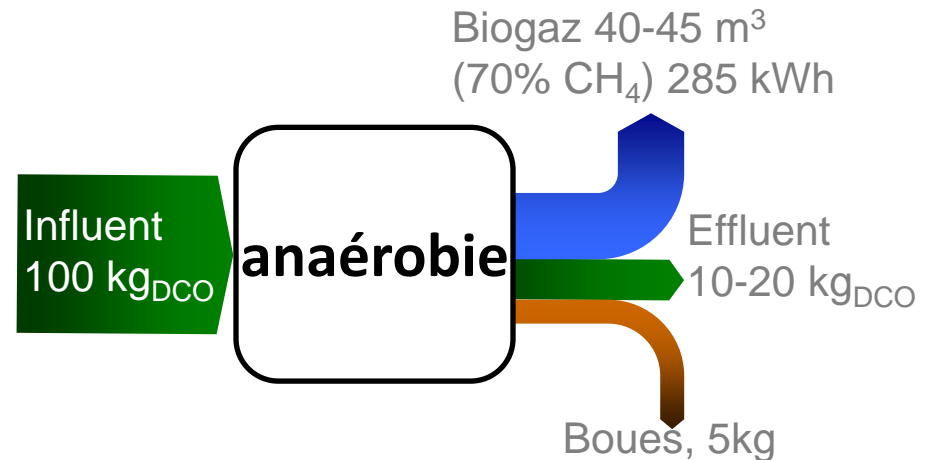
Le traitement des eaux et des déchets

Hier et aujourd'hui

Traitement aérobie

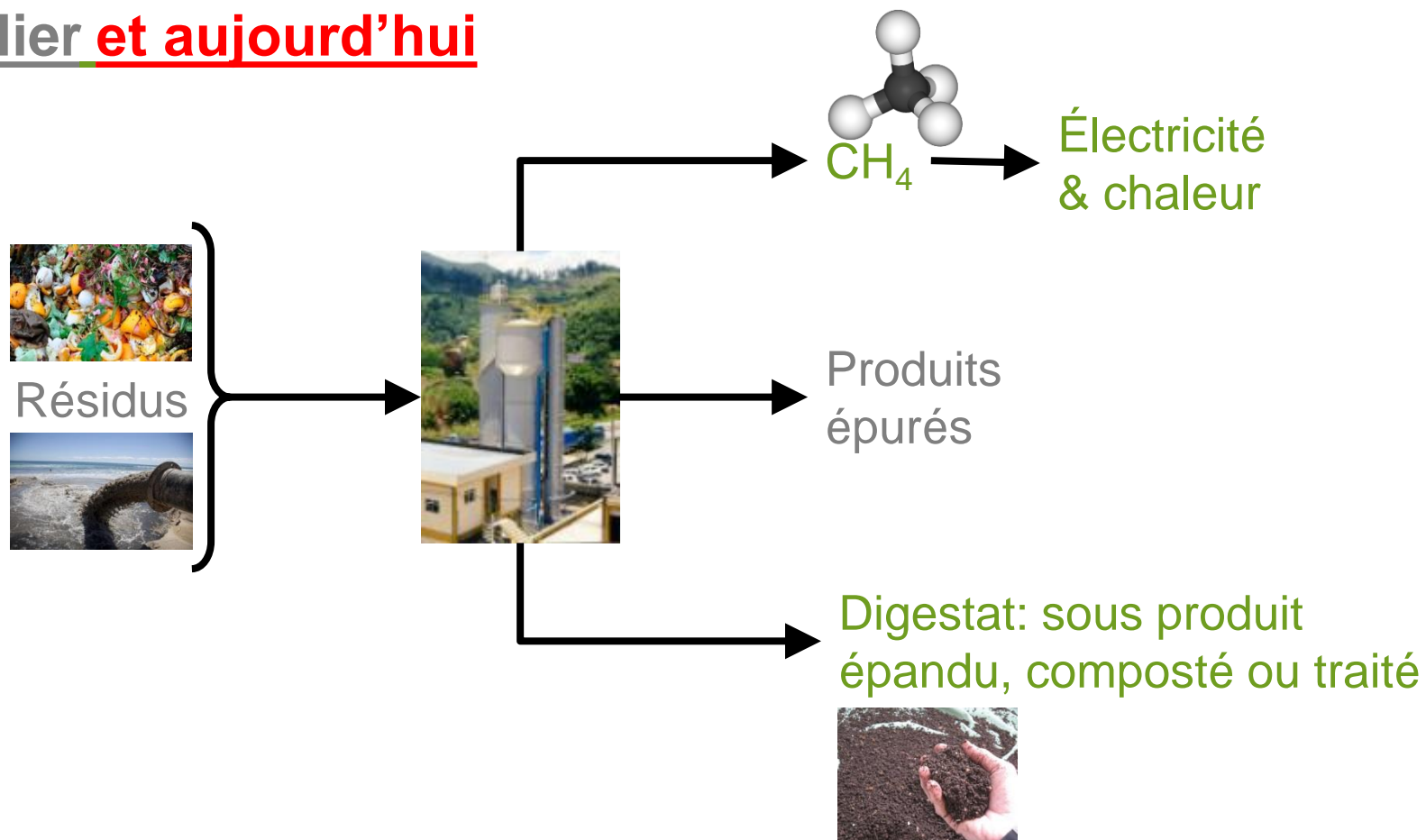


Traitement anaérobie



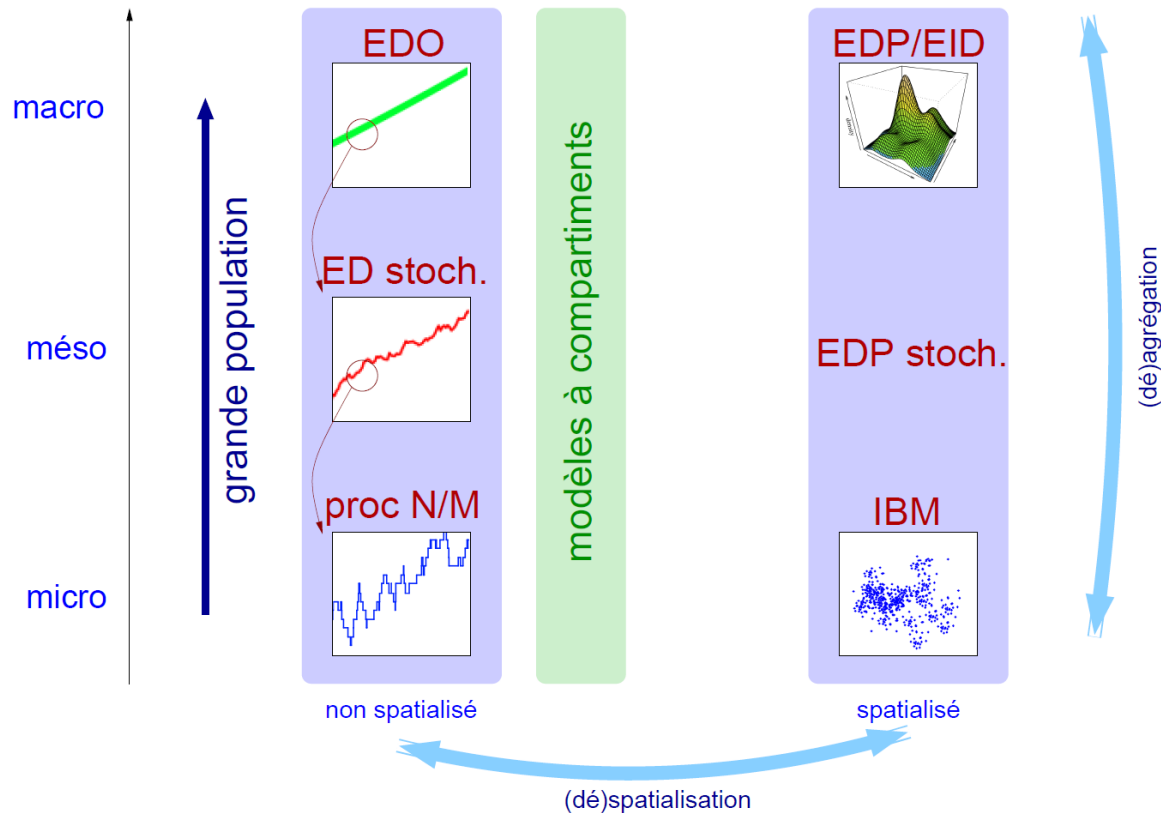
La méthanisation ou digestion anaérobie

Hier et aujourd'hui



Pas d'a priori concernant la modélisation

- Modélisation (mise en équations) statique/dynamique, déterministe et/ou stochastique, informatique...



_02

Perspective(s) historique(s) – les modèles déterministes



Introduction

La notion de modèle est ancienne et remonte probablement bien avant Fibonacci (1170 - 1245). S'en est suivi à partir du XVIIIème siècle, de très nombreux travaux notamment avec Euler (1707 – 1783) ou encore Gause au début du XXème (ouverture du champ de l'écologie mathématique).

Ce qui précède sont des « trivialités d'historien » qui tournent autour du système de Lotka-Volterra. Dans le domaine scientifique, 3 faits – autour desquels notre cours va plus ou moins graviter - nous permettent de revisiter ces travaux :

- Découverte de phénomènes « étranges », solutions de systèmes d'équations différentielles « pourtant simples » (années 70)
- Remise en cause du modèle théorique dominant de ressource-dépendance dans la modélisation de la relation proie-prédateur (années 80)
- Avènement des ordinateurs accessibles à tous permettant de simuler les systèmes dynamiques



Introduction

L'un des objectifs – atteignable – de ce cours est d'appréhender ce que l'on peut apprendre de la simulation et des mathématiques : celui qui n'a pas programmé un modèle ***réaliste de bioprocédé*** ne peut pas le comprendre!

Mais qu'est-ce qu'un modèle [de processus biologique(s)]?

Coller à des données = modèle!!!!

Dans le cadre de ce cours, un modèle est une entité mathématique permettant « d'appréhender » un processus biologique réalisé par un écosystème microbien ou un procédé biotechnologique (mise en œuvre de cet écosystème dans un environnement contrôlé)

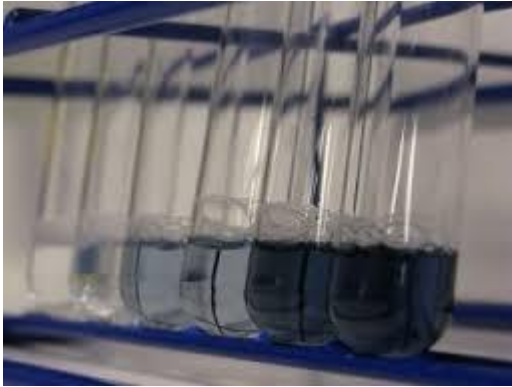


_03

Les bioprocédés et l'arbre du vivant



Mais qu'est-ce qu'un réacteur biologique

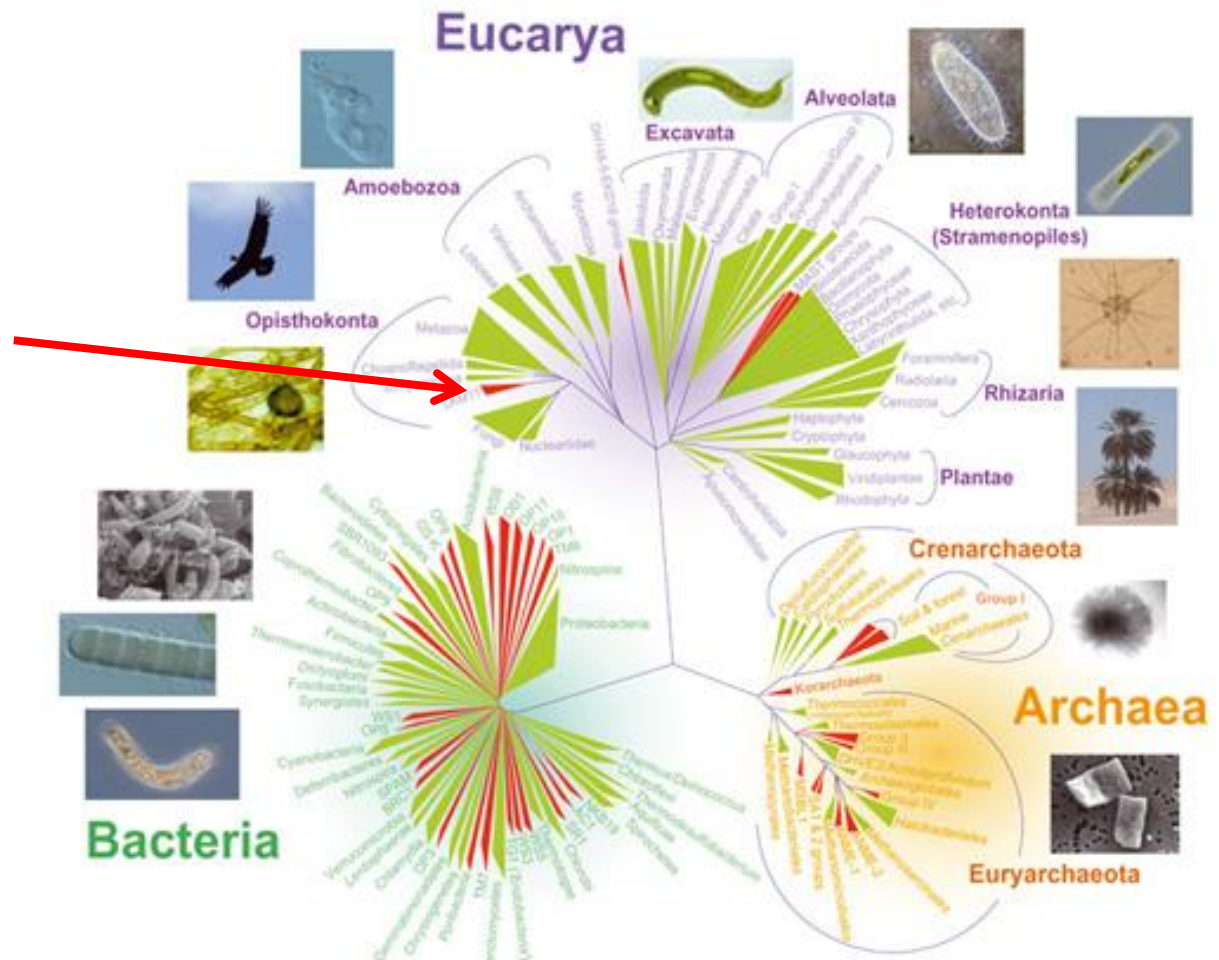


Bioprocédés vs écosystèmes



L'arbre du vivant

You are here, with your cat,
your dog and your red fish...



INRAE

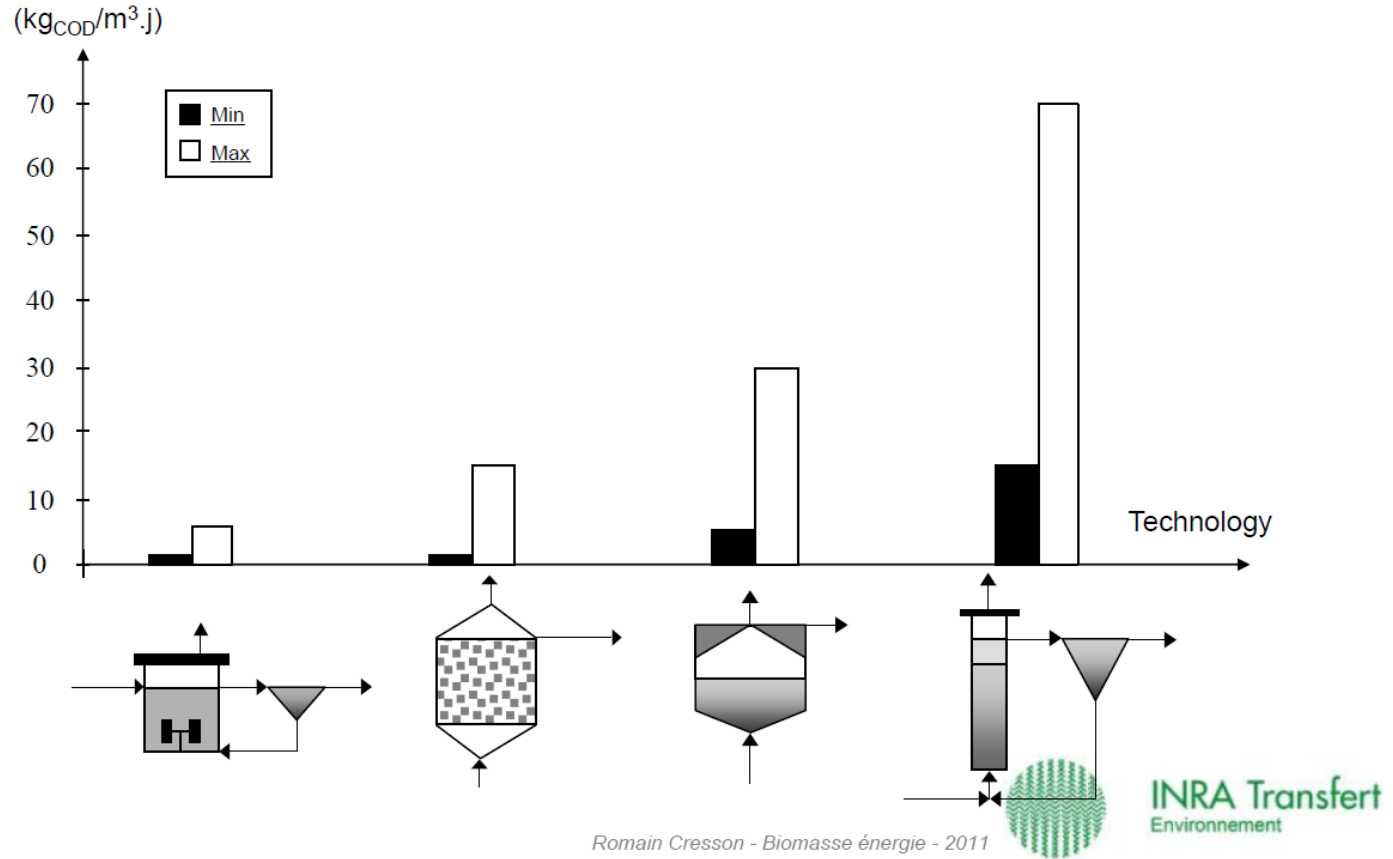
Ecole CIMPA "Vert numérique"

23/09/2022 / J. Harmand

Impact du procédé

Performance of AD processes is related to the treated waste(water) and process design

Organic loading rate



Nos objectifs

- Comprendre
 - Comment les microorganismes se multiplient?
 - Rôle/genèse de la diversité
 - Quelles interactions entre les entités vivantes, quelle structure de ces interactions?
 - ...

- Concevoir/agir/optimiser
 - Quelles capacités des écosystèmes pour les besoins anthropiques?
 - Quel procédé pour quel objectif de production/transformation?
 - **Quels moyens d'action : entrées, procédés ou écosystèmes?**
 - ...



_04

La modélisation bilan-matière des réacteurs biologiques



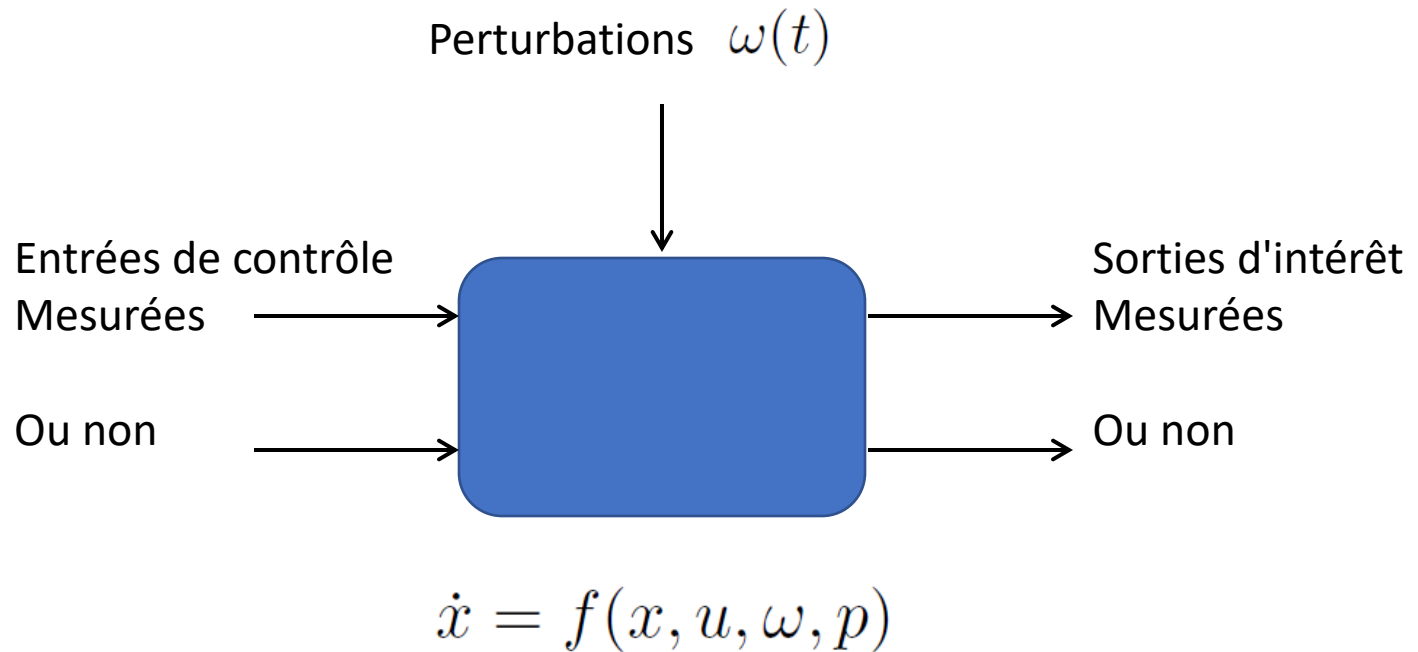
Rappels

Qu'est-ce qu'une équation différentielle?

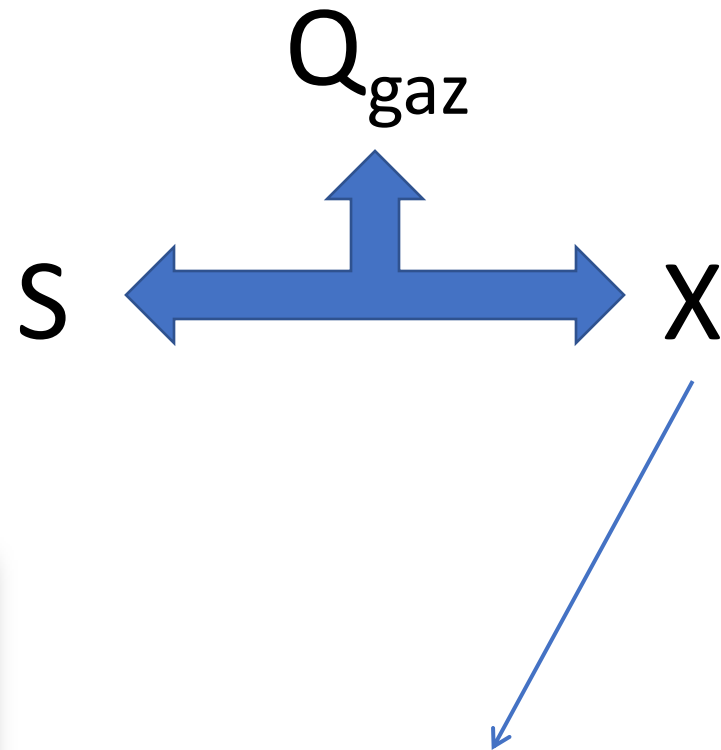
- Notée $\dot{x}(t) = f(x(t))$
- C'est une équation qui, étant donné $x(0)$, a comme solution une courbe et non un nombre
- Qui dit équation dit « existence et unicité des solutions »
- Dans les systèmes physiques, il est courant que l'on ait des « entrées » dans les systèmes, généralement notés « u ». On note alors $\dot{x}(t) = f(x(t), u(t))$



Rappels



Du procédé à la formalisation

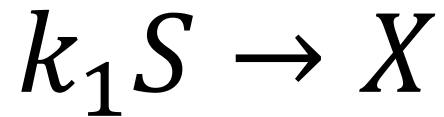


Qu'est-ce que la biomasse?
Qu'est-ce qu'une espèce?

...

Modélisation des réacteurs biologiques

La croissance d'une biomasse sur un substrat

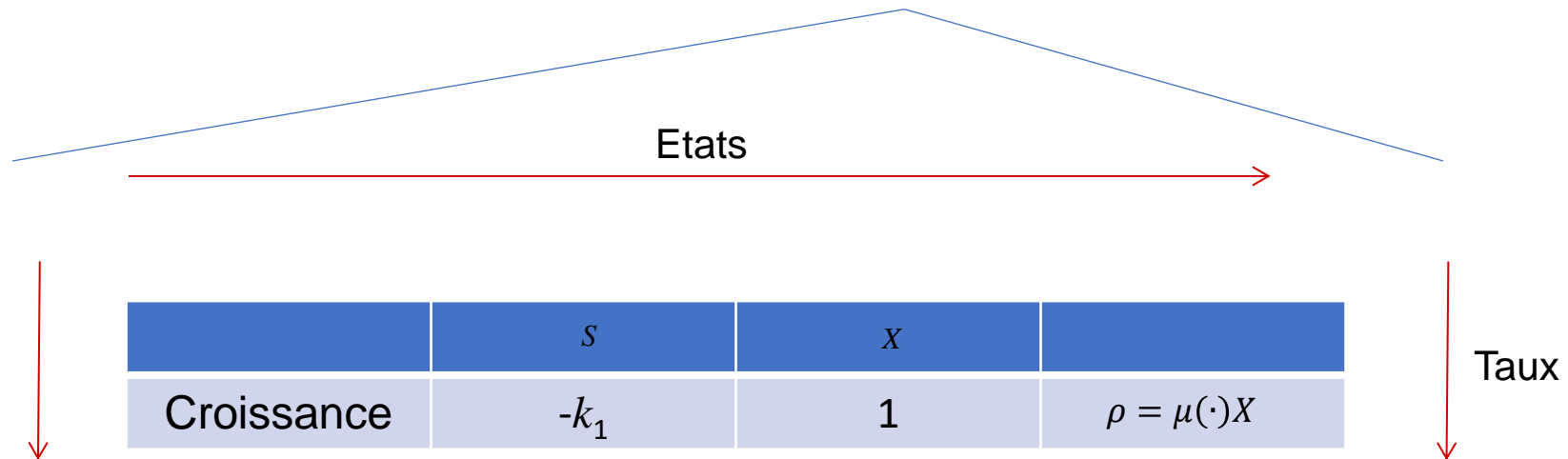


Etats			
Processus	s	x	
Croissance	$-k_1$	1	$\rho = \mu(\cdot)X$



Modélisation des réacteurs biologiques

$$\dot{x}_i = (x_i^{in} - x_i)D \pm \sum_i^N k_i \rho_i$$

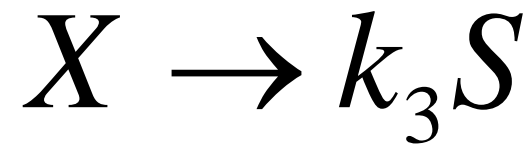
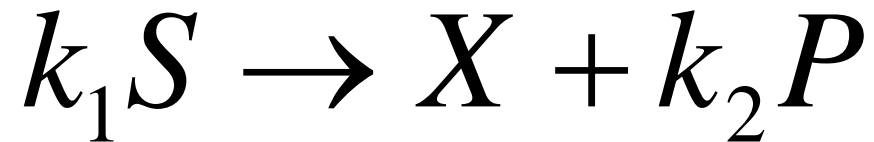


Si la somme de chaque ligne est nulle, le modèle « boucle »!!!



Modélisation des réacteurs biologiques

La mortalité avec recyclage de matière organique et production d'un produit



Modélisation des réacteurs biologiques

		Etats			
Processus		S	X	P	
	Croissance	$-k_1$	1	k_2	$\rho_1 = \mu(\cdot)X$
	Mortalité	k_3	-1		$\rho_2 = mX$

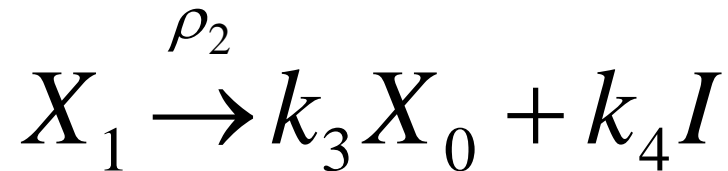
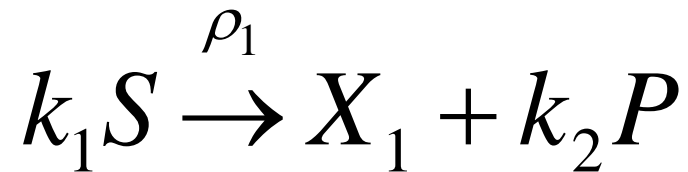
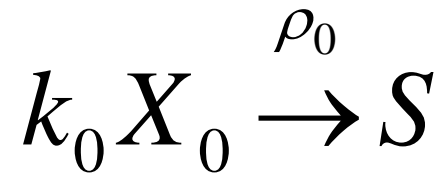
Modélisation des réacteurs biologiques

$$\begin{cases} \frac{dX}{dt} = (\mu(S) - D)X - mX \\ \frac{dS}{dt} = -k_1\mu(S)X + (S_{in} - S)D + k_3mX \\ \frac{dS}{dt} = k_2\mu(S)X - PD \end{cases}$$



Modélisation des réacteurs biologiques

La mortalité avec recyclage de matière organique, production de produit, d'un inerte et hydrolyse



Modélisation des réacteurs biologiques

	X_0	S	X	P	I	
Hydrolyse	$-k_0$	1				$\rho_1(\cdot)$
Croissance		$-k_1$	1	k_2		$\rho_2 = \mu(S)X$
Mortalité	k_3		-1		k_4	$\rho_3 = mX$



Questions d'unités

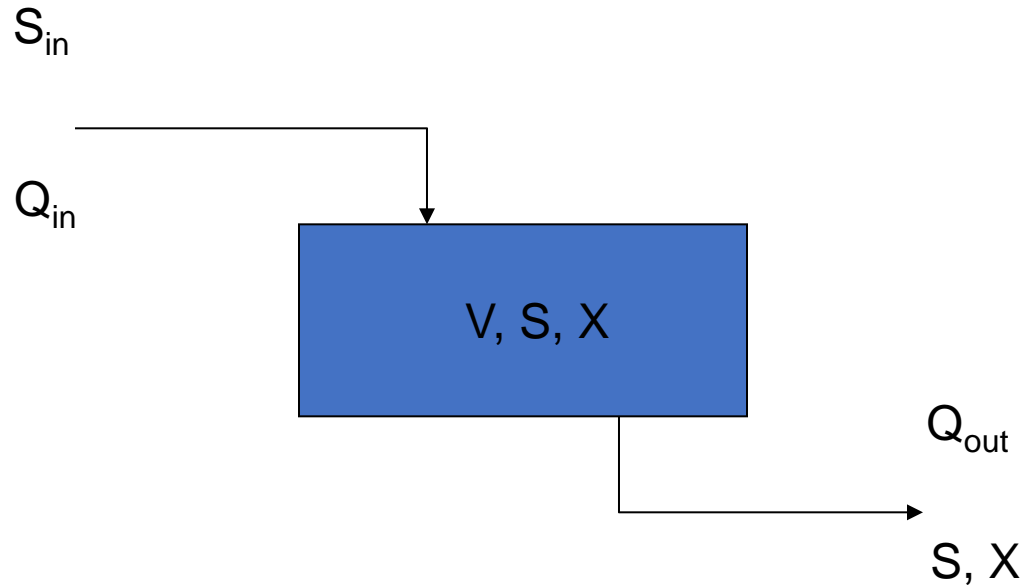
ATTENTION

On écrit des équations de physique!!!

Les paramètres/variables doivent être homogènes!!!



Formalisation (1,30h)



$$\frac{d(SV)}{dt} = \text{"masse de S entrante"} - \text{"masse de S soutirée"} \dots$$

$\dots + \text{"production"} - \text{"consommation"}$



Réacteurs biologiques

Le cas général

$$\begin{cases} \frac{d(SV)}{dt} = S_{in}Q_{in} - SQ_{out} - \frac{\mu(\cdot)}{Y} VX \\ \frac{d(XV)}{dt} = \mu(\cdot) VX - Q_{in}X \\ \frac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$



Modélisation des réacteurs biologiques

Ou :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d(SV)}{dt} = S \frac{dV}{dt} + V \frac{dS}{dt} = S_{in} Q_{in} - S Q_{out} - \frac{\mu(\cdot)}{Y} VX \\ \frac{d(XV)}{dt} = X \frac{dV}{dt} + V \frac{dX}{dt} = \mu(\cdot) VX - Q_{in} X \\ \frac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{array} \right.$$

Modélisation des réacteurs biologiques

D'où :

$$\begin{cases} V \frac{dS}{dt} = -S(Q_{in} - Q_{out}) + S_{in}Q_{in} - SQ_{out} - \frac{\mu(\cdot)}{Y} VX \\ V \frac{dX}{dt} = -X(Q_{in} - Q_{out}) + \mu(\cdot) VX - Q_{in}X \\ \frac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$

Modélisation des réacteurs biologiques

Et finalement :

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -S \frac{Q_{in}}{V} + \frac{Q_{in}}{V} S_{in} - \frac{\mu(\cdot)}{Y} X \\ \frac{dX}{dt} = -X \frac{Q_{in}}{V} + \mu(\cdot) X \\ \frac{dV}{dt} = Q_{in} - Q_{out} \end{cases}$$

Modélisation des réacteurs biologiques

En mode de fonctionnement continu

V est constant $Q_{in} = Q_{out} = Q$

(c'est précisément le cas du chémostat)

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = S_{in} \frac{Q}{V} - S \frac{Q}{V} - \frac{\mu(\cdot)}{Y} X = (S_{in} - S) D - \frac{\mu(\cdot)}{Y} X \\ \frac{dX}{dt} = \mu(\cdot) X - \frac{Q}{V} X = (\mu(\cdot) - D) X \end{cases}$$

Quelques propriétés

Modèle "minimal"
 $s(0)$ et $x(0) > 0$

$$\begin{cases} \frac{ds}{dt} = D(S_{in} - s) - \mu(s)x \\ \frac{dx}{dt} = (\mu(s) - D)x \end{cases}$$

Existence d'invariants : axe horizontal et la droite $x+s=S_{in}$ (propriété de conservation de la matière), qui est attractive.

On peut intégrer explicitement :

$$\begin{cases} \frac{dz}{dt} = D(S_{in} - z) \\ z(0) = s(0) + x(0) \end{cases} \implies z(t) = S_{in} + ((s(0) + x(0)) - S_{in})e^{-Dt}$$

On voit qu'après un transitoire on a :

$$s(t) + x(t) \approx S_{in}$$

Quelques propriétés

- *Les solutions sont bornées.* Cela découle immédiatement de ce que $t \mapsto z(t)$ est une fonction bornée, que $s + x = z$ et que s et x sont positifs ou nuls.
- *Les équilibres.* Les équilibres de (2.1) sont les solutions de :

$$\begin{cases} 0 &= D(S_{in} - s) - \mu(s) x \\ 0 &= (\mu(s) - D) x \end{cases} \quad (2.7)$$

Il y a toujours la solution $(S_{in}, 0)$ dite solution de "lessivage" (voir § 2.2.3 pour des explications sur le terme "lessivage"). Les autres solutions sont :

$$(s^*, x^*)$$

où s^* est une valeur de s telle que $\mu(s^*) = D$ et $x^* = S_{in} - s^*$.



Quelques propriétés

L'équilibre avec biomasse.

Lorsque $D < \mu_{max}$ nous notons $\lambda(D)$ l'unique s tel que $\mu(s) = D$ (il est unique puisque $s \mapsto \mu(s)$ est strictement croissante) sinon, nous notons $\lambda(D) = +\infty$. Si $s < \lambda(D)$ la vitesse de croissance de x :

$$\frac{dx}{dt} = (\mu(s) - D)x$$

est strictement négative, alors que si $s > \lambda(D)$ la la vitesse de croissance est strictement positive. D'où la définition :

DÉFINITION 2.1.– La quantité $\lambda(D)$ s'appelle le *seuil de croissance*.



Quid de $\mu(\cdot)$?

$$\begin{cases} \dot{X} &= (\mu(\cdot) - D)X \\ \dot{S} &= (S_{in} - S)D - \frac{\mu(\cdot)}{Y}X \end{cases}$$

Quatre grandes classes de fonctions :

- Substrat-dépendance – limitation
- Substrat-dépendance – Inhibition
- Densité-dépendance
- Autre (p.e. inhibition par le produit)...



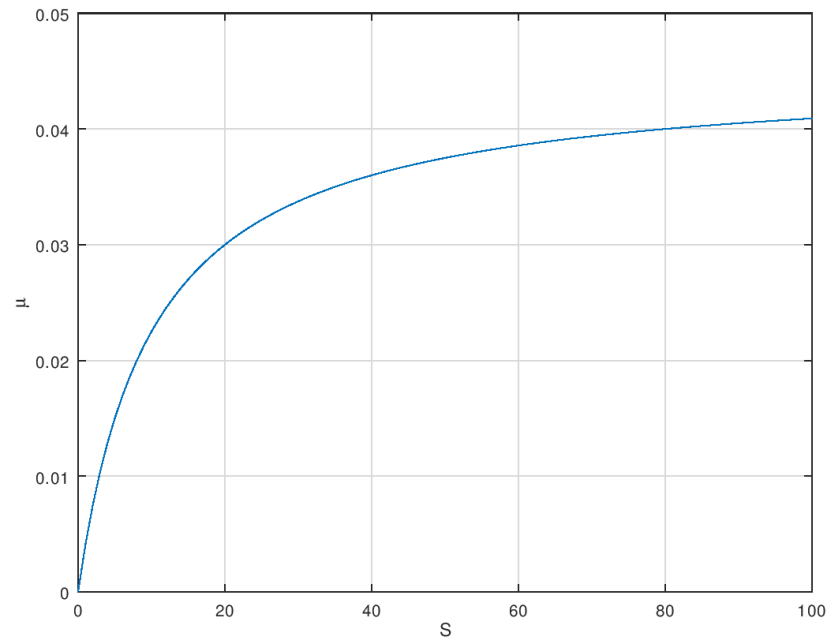
Substrat-dépendance (limitation)

La plus connue, la fonction de Monod :

$$\mu_{max} \frac{S}{S + K_S}$$

« On dit » qu'elle vient de Michaelis-Menten (enzymologie). Cf. par exemple Wikipedia...

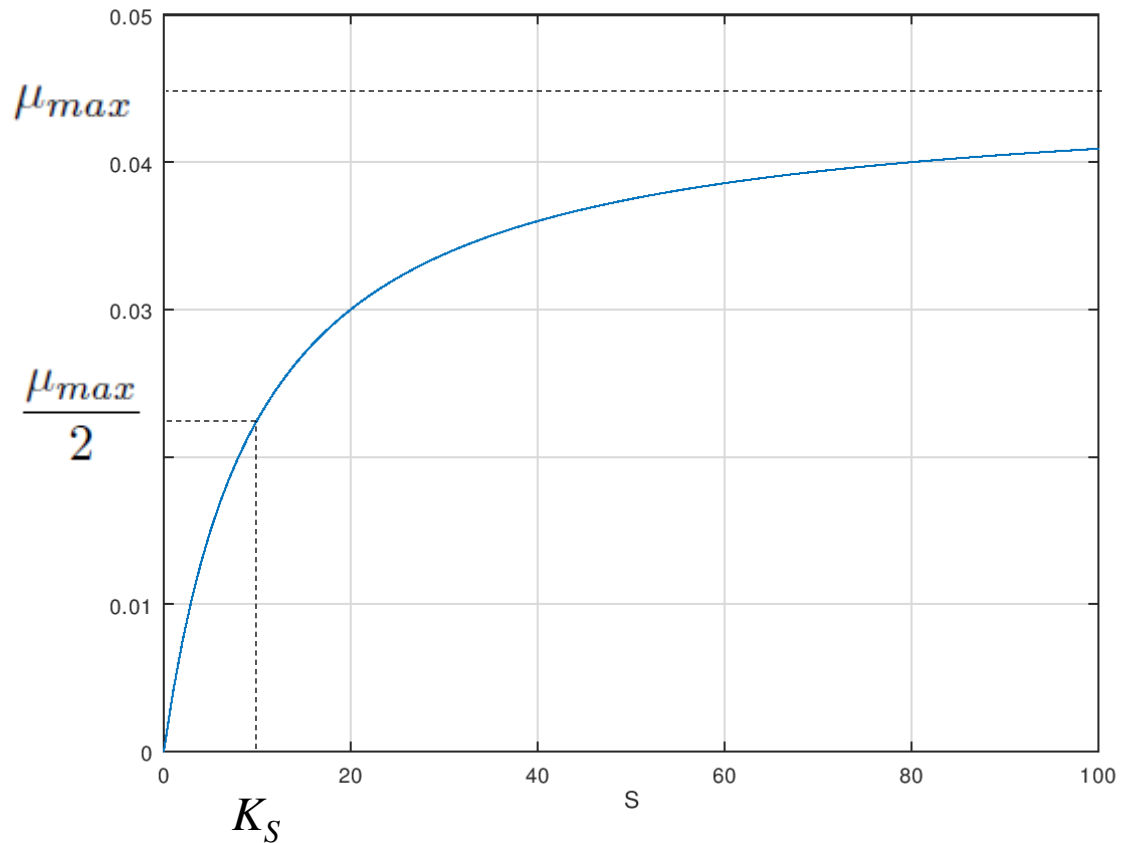
- $\mu_{max} = 0.045 \text{ (T}^{-1}\text{)}$
- $K_S = 10 \text{ (M/L)}$



Substrat-dépendance (limitation)

$$\mu_{max} \frac{S}{S + K_S}$$

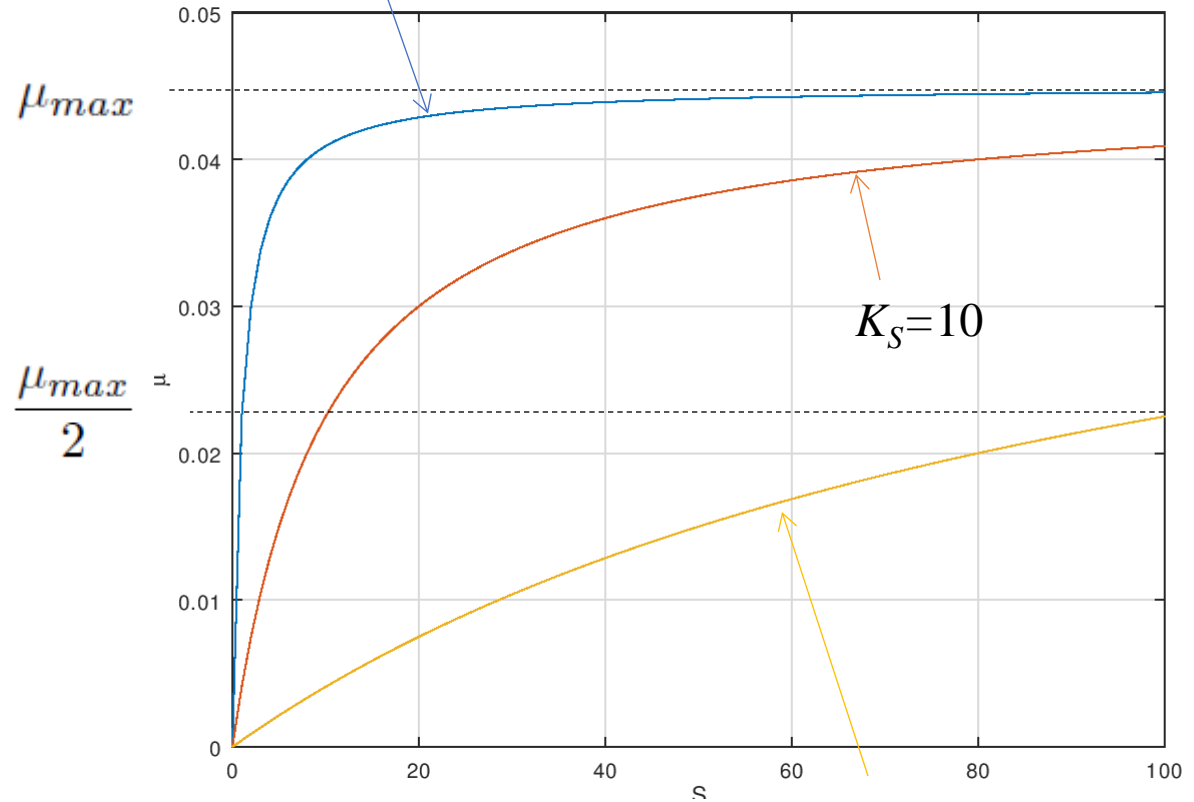
- Croissante en S
- $\mu(K_S) = \frac{\mu_{max}}{2}$
- $\lim_{S \rightarrow \infty} = \mu_{max}$



Substrat-dépendance (limitation)

$K_S=1$ (bonne « affinité » au substrat)

$$\mu_{max} \frac{S}{S + K_S}$$

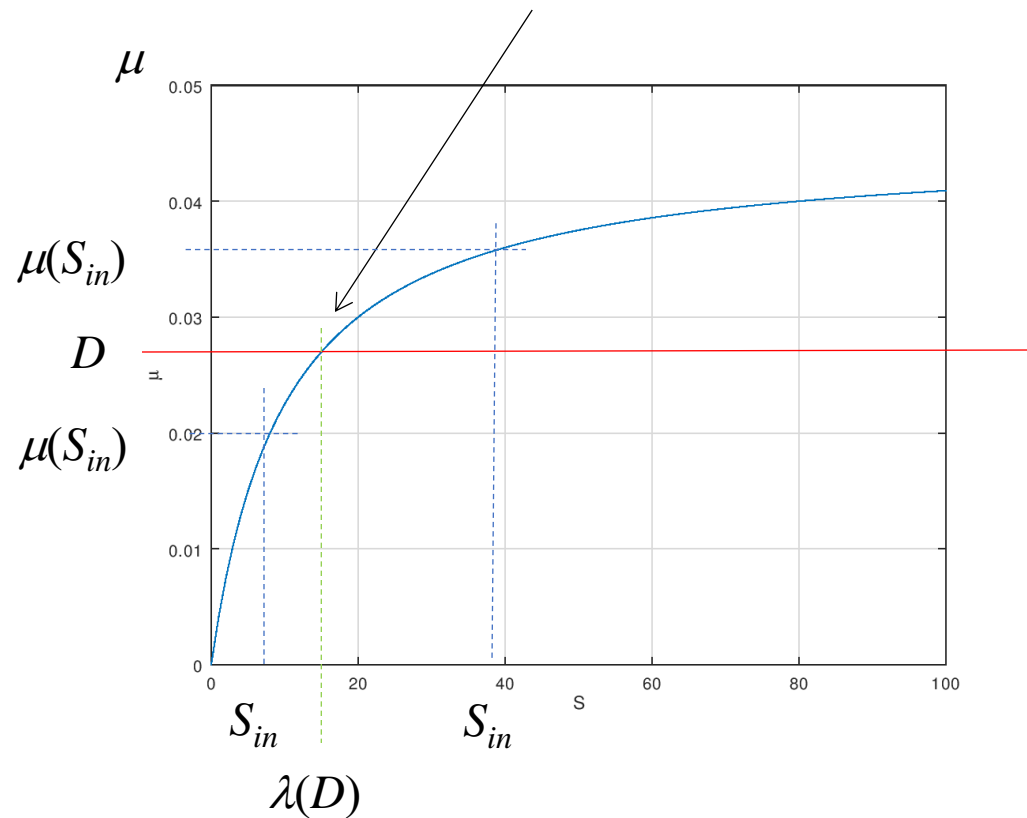


$K_S=100$
(« mauvaise » affinité au substrat)



Que peuvent les mathématiques?

$$\mu(s^*) = D$$



Que peuvent les mathématiques?

Cinétiques de type Monod : au plus 2 points d'équilibre

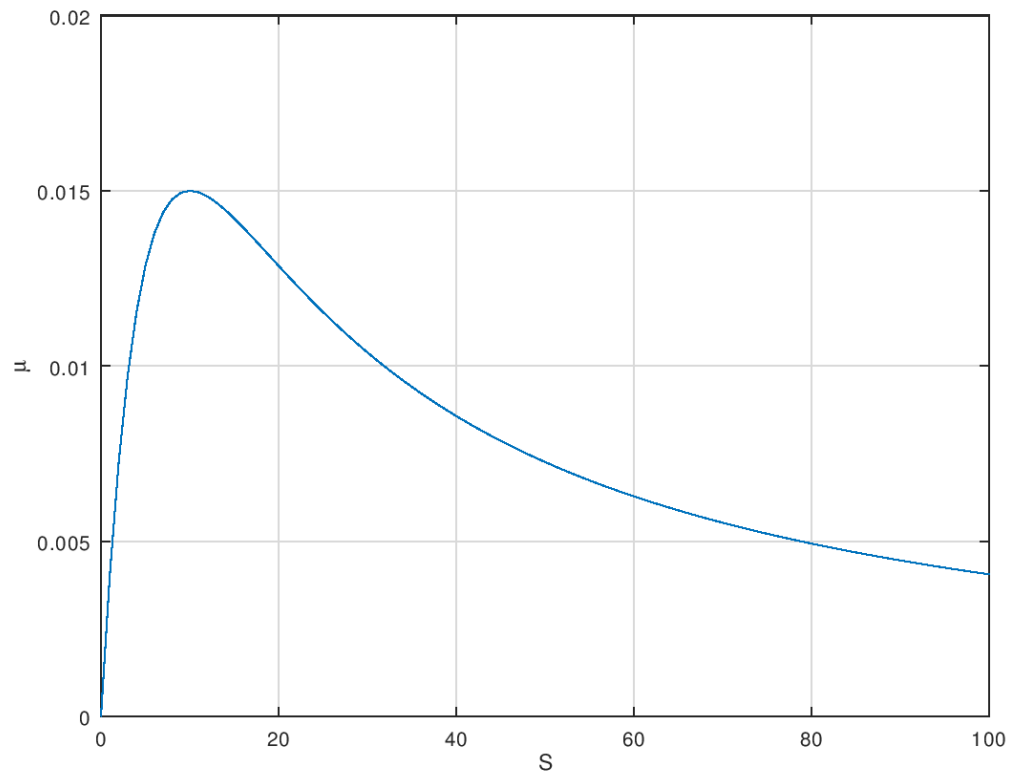
- Lessivage $(S_{in}, 0)$ – existe toujours
- Le point d'équilibre "fonctionnel" $(s^*, S_{in}-s^*)$ – existe si $D < \mu(S_{in})$



Substrat-dépendance (limitation/inhibition)

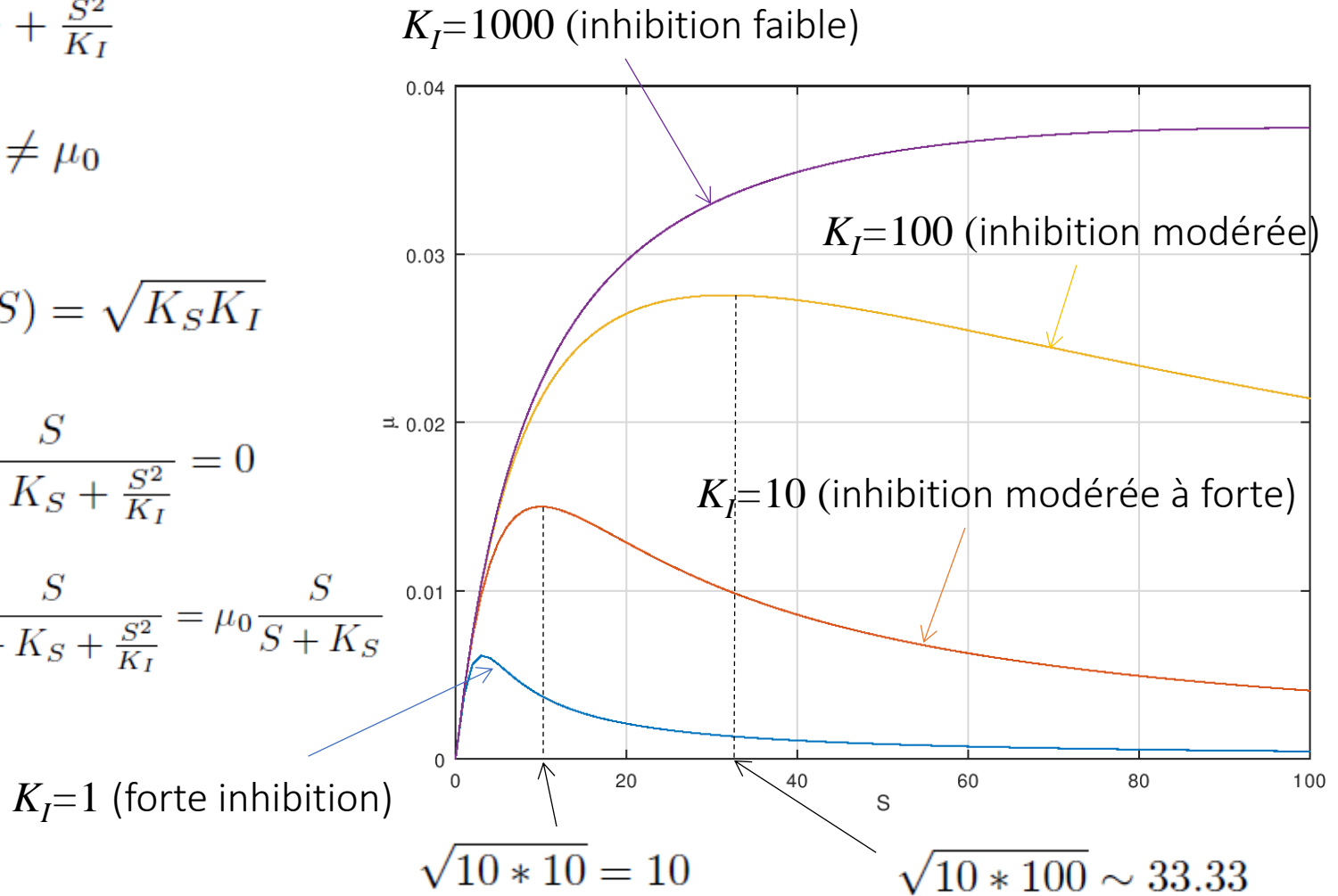
La plus connue, la fonction de Haldane : $\mu_0 \frac{S}{S + K_S + \frac{S^2}{K_I}}$

- Croissante, atteint un maximum puis décroissante en S
- $\mu_0 = 0.045 \text{ (T}^{-1}\text{)}$
- $K_S = 10 \text{ (M/L)}$
- $K_I = 10 \text{ (M/L)}$

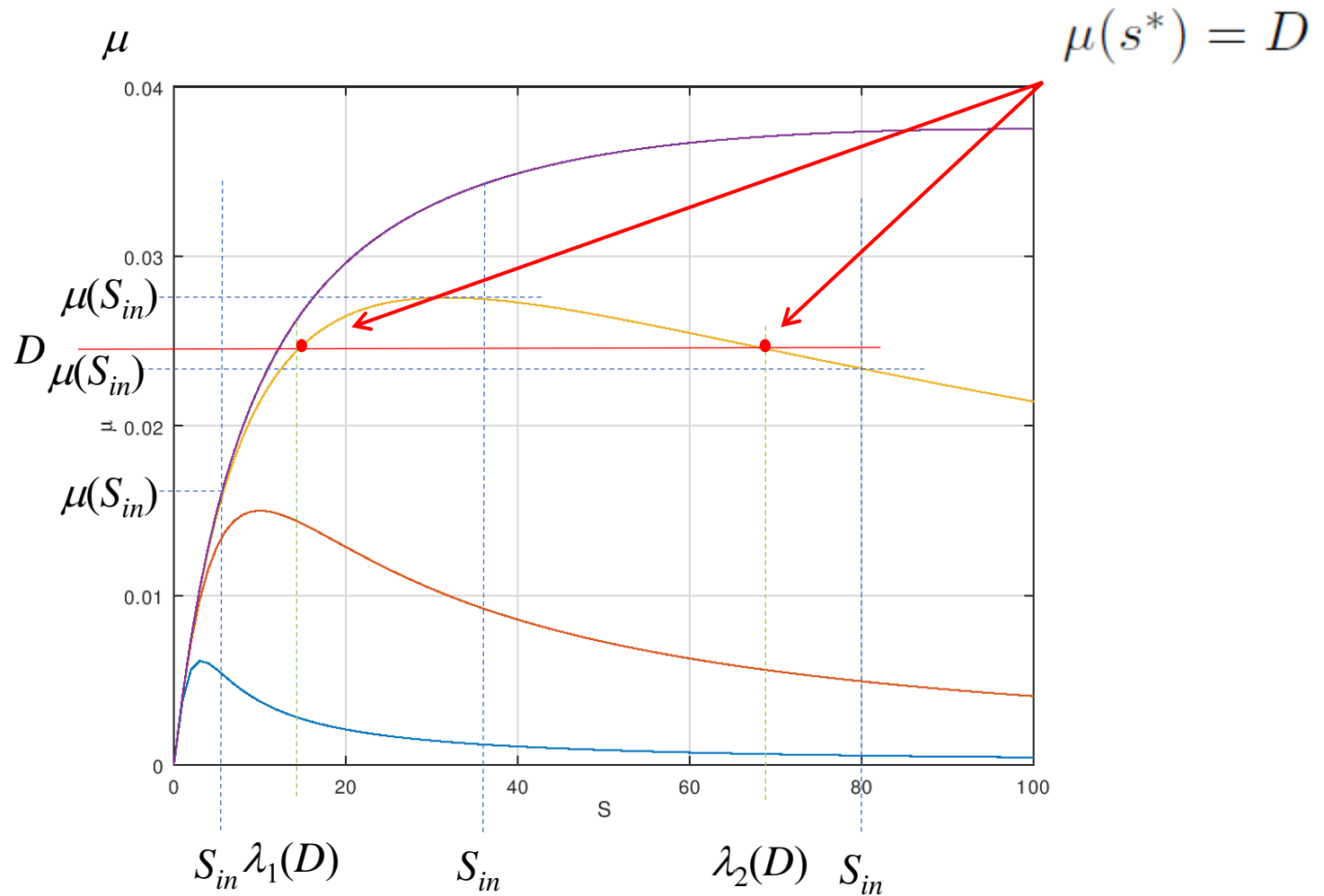


Substrat-dépendance (limitation/inhibition)

- $\mu_0 \frac{S}{S + K_S + \frac{S^2}{K_I}}$
- $\max_S \mu(S) \neq \mu_0$
- $S / \max_S \mu(S) = \sqrt{K_S K_I}$
- $\lim_{S \rightarrow \infty} \mu_0 \frac{S}{S + K_S + \frac{S^2}{K_I}} = 0$
- $\lim_{K_I \rightarrow \infty} \mu_0 \frac{S}{S + K_S + \frac{S^2}{K_I}} = \mu_0 \frac{S}{S + K_S}$



Que peuvent les mathématiques?



Que peuvent les mathématiques?

Cinétiques de type Haldane : au plus 3 points d'équilibre

- Lessivage $(S_{in}, 0)$ – existe toujours
- Le point d'équilibre positif #1 $(\lambda_1(D), S_{in} - \lambda_1(D))$ - existe si $\lambda_1(D) < S_{in}$
- Le point d'équilibre positif #2 $(\lambda_2(D), S_{in} - \lambda_2(D))$ - existe si $\lambda_2(D) < S_{in}$



Que peuvent les mathématiques?

Définitions : Le point d'équilibre \bar{x} du système dynamique $\dot{x} = f(x)$ est dit :

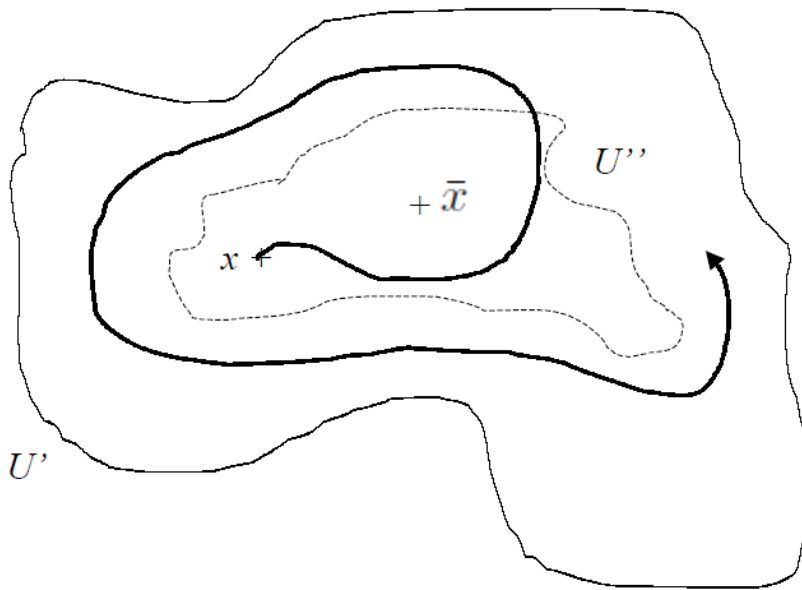
- *stable* si pour tout voisinage U' de \bar{x} il existe un autre voisinage U'' de \bar{x} tel que pour tout x_0 dans U'' , la solution du système dynamique $\dot{x} = f(x)$, $x(0) = x_0$ est définie et appartient à U' pour tout temps (cf. la figure);
- *asymptotiquement stable* s'il est stable et s'il existe un voisinage U' de \bar{x} tel que pour tout x dans U' , la solution du système dynamique $\dot{x} = f(x)$ tend vers \bar{x} lorsque t tend vers l'infini (cette propriété définit un point "attractif") (cf. la figure);
- *globalement asymptotiquement stable* si pour toute condition initiale x_0 , la solution de $\dot{x} = f(x)$, $x(0) = x_0$ converge asymptotiquement vers \bar{x} lorsque t tend vers l'infini;
- *instable* s'il n'est pas stable.

En d'autres termes, être stable signifie que si la condition initiale n'est pas "très éloignée" du point d'équilibre, la trajectoire restera peu éloignée du point d'équilibre. Etre asymptotiquement stable, c'est en outre garantir que la trajectoire va converger vers \bar{x} lorsque t tend vers l'infini.

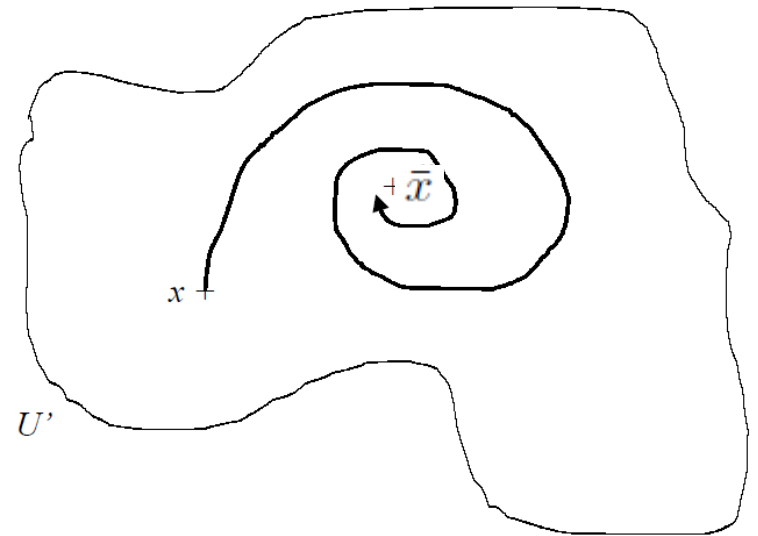


Que peuvent les mathématiques?

Formalisation mathématique pour les systèmes dynamiques : les concepts



Points « stables »



Points « attractif »

Que peuvent les mathématiques?

Théorème (Lyapunov) : Un point d'équilibre \bar{x} du système $\dot{x} = f(x)$ est asymptotiquement stable si toutes les racines du polynôme caractéristique de la matrice $A = Jac(f(\bar{x}))$ sont à partie réelle strictement négatives. Réciproquement, si au moins une valeur propre de A est à partie réelle strictement positive, alors le système est instable.



Que peuvent les mathématiques?

Rappel de la procédure :

- On calcule les équilibres
- On linéarise autour de ces équilibres
- On calcule les valeurs propres du système
 - Si les valeurs propres sont à parties réelles négatives, le point d'équilibre est [localement] stable
 - Sinon, il est [localement] instable

Cette approche reste une démarche « numérique »!



Que peuvent les mathématiques?

En fait, on peut rester « générique »!

$$\begin{cases} \dot{X} = (\mu(S) - D)X \\ \dot{S} = -\mu(S)X + (S_{in} - S)D \end{cases}$$

$$D = \bar{D} + u, \quad X = \bar{X} + x_1, \quad S = \bar{S} + x_2$$

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = \frac{d}{dt}(X - \bar{X}) \\ \dot{x}_2 = \frac{d}{dt}(S - \bar{S}) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \dot{X} = \frac{d}{dt}(\bar{X} + x_1) = \dot{x}_1 = \mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) - (\bar{D} + u)(\bar{X} + x_1) \\ \dot{S} = \frac{d}{dt}(\bar{S} + x_2) = \dot{x}_2 = -\mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) + S_{in}(\bar{D} + u) - (\bar{D} + u)(\bar{S} + x_2) \end{cases}$$

Que peuvent les mathématiques?

$$\begin{cases} \dot{X} = \frac{d}{dt}(\bar{X} + x_1) = \dot{x}_1 = \mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) - (\bar{D} + u)(\bar{X} + x_1) \\ \dot{S} = \frac{d}{dt}(\bar{S} + x_2) = \dot{x}_2 = -\mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) + S_{in}(\bar{D} + u) - (\bar{D} + u)(\bar{S} + x_2) \end{cases}$$

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x)$$

$$\begin{aligned} \mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) &= (\mu(\bar{S}) + x_2\mu'(\bar{S}))(\bar{X} + x_1) \\ &= \mu(\bar{S})\bar{X} + \mu(\bar{S})x_1 + x_2\mu'(\bar{S})\bar{X} + x_1x_2\mu'(\bar{S}) \\ &\approx \mu(\bar{S})\bar{X} + \mu(\bar{S})x_1 + x_2\mu'(\bar{S})\bar{X} \end{aligned}$$



0

$$\begin{aligned} -(\bar{D} + u)(\bar{X} + x_1) &= -\bar{D}\bar{X} - \bar{D}x_1 - u\bar{X} - ux_1 \\ &\approx -\bar{D}\bar{X} - \bar{D}x_1 - u\bar{X} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &\approx \mu(\bar{S})\bar{X} + \mu(\bar{S})x_1 + x_2\mu'(\bar{S})\bar{X} - \bar{D}\bar{X} - \bar{D}x_1 - u\bar{X} \\ &\approx (\mu(\bar{S}) - \bar{D})x_1 + \mu'(\bar{S})\bar{X}x_2 - \bar{X}u \end{aligned}$$

Que peuvent les mathématiques?

$$\begin{cases} \dot{X} = \frac{d}{dt}(\bar{X} + x_1) = \dot{x}_1 = \mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) - (\bar{D} + u)(\bar{X} + x_1) \\ \dot{S} = \frac{d}{dt}(\bar{S} + x_2) = \dot{x}_2 = -\mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) + S_{in}(\bar{D} + u) - (\bar{D} + u)(\bar{S} + x_2) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} -\mu(\bar{S} + x_2)(\bar{X} + x_1) &= -(\mu(\bar{S}) + x_2\mu'(\bar{S}))(\bar{X} + x_1) \\ &\approx -\mu(\bar{S})\bar{X} - \mu(\bar{S})x_1 - x_2\mu'(\bar{S})\bar{X} \end{aligned}$$

$$S_{in}(\bar{D} + u) = S_{in}\bar{D} + S_{in}u$$

$$\begin{aligned} -(\bar{D} + u)(\bar{S} + x_2) &= -\bar{D}\bar{S} - \bar{D}x_2 - u\bar{S} - ux_2 \\ &\approx -\bar{D}\bar{S} - \bar{D}x_2 - u\bar{S} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \dot{x}_2 &\approx -\mu(\bar{S})\bar{X} - \mu(\bar{S})x_1 - x_2\mu'(\bar{S})\bar{X} + S_{in}\bar{D} + S_{in}u - \bar{D}\bar{S} - \bar{D}x_2 - u\bar{S} \\ &= -\mu(\bar{S})x_1 - (\mu'(\bar{S})\bar{X} + \bar{D})x_2 + (S_{in} - \bar{S})u \end{aligned}$$

Que peuvent les mathématiques?

D'où :

$$\begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} \mu(\bar{S}) - \bar{D} & \mu'(\bar{S})\bar{X} \\ -\mu(\bar{S}) & -(\mu'(\bar{S})\bar{X} + \bar{D}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\bar{X} \\ S_{in} - \bar{S} \end{bmatrix} u = Ax + Bu$$



Que peuvent les mathématiques?

Stabilité du point $\{0, S_{in}\}$

Dans ce cas, on a :

$$A = \begin{bmatrix} \mu(S_{in}) - \bar{D} & 0 \\ -\frac{\mu(S_{in})}{Y} & -\bar{D} \end{bmatrix}$$

Si λ_1 et λ_2 sont les valeurs propres de A , on en déduit :

$$\begin{cases} \Omega &= \mu(S_{in}) - 2\bar{D} \\ \Delta &= -\bar{D}(\mu(S_{in}) - \bar{D}) \end{cases}$$

$$\text{où } \Omega = \text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{ et } \Delta = \det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i.$$

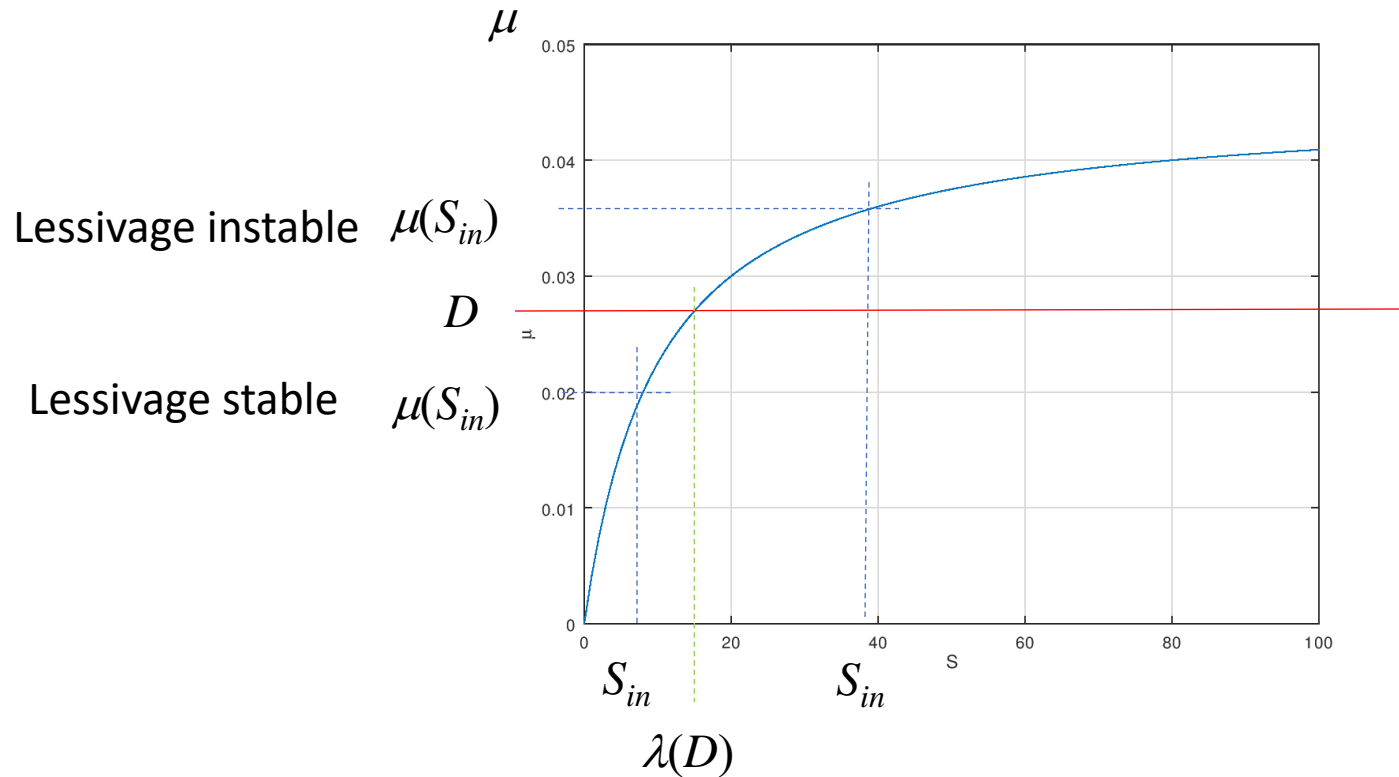
D'où on tire $\lambda_1 = -\bar{D}$ et $\lambda_2 = \mu(S_{in}) - \bar{D}$.

On en déduit que :

- Si $\mu(S_{in}) - \bar{D} > 0$, le point d'équilibre $\{0, S_{in}\}$ est asymptotiquement instable.
- Si $\mu(S_{in}) - \bar{D} < 0$ alors le point d'équilibre $\{0, S_{in}\}$ est asymptotiquement stable.

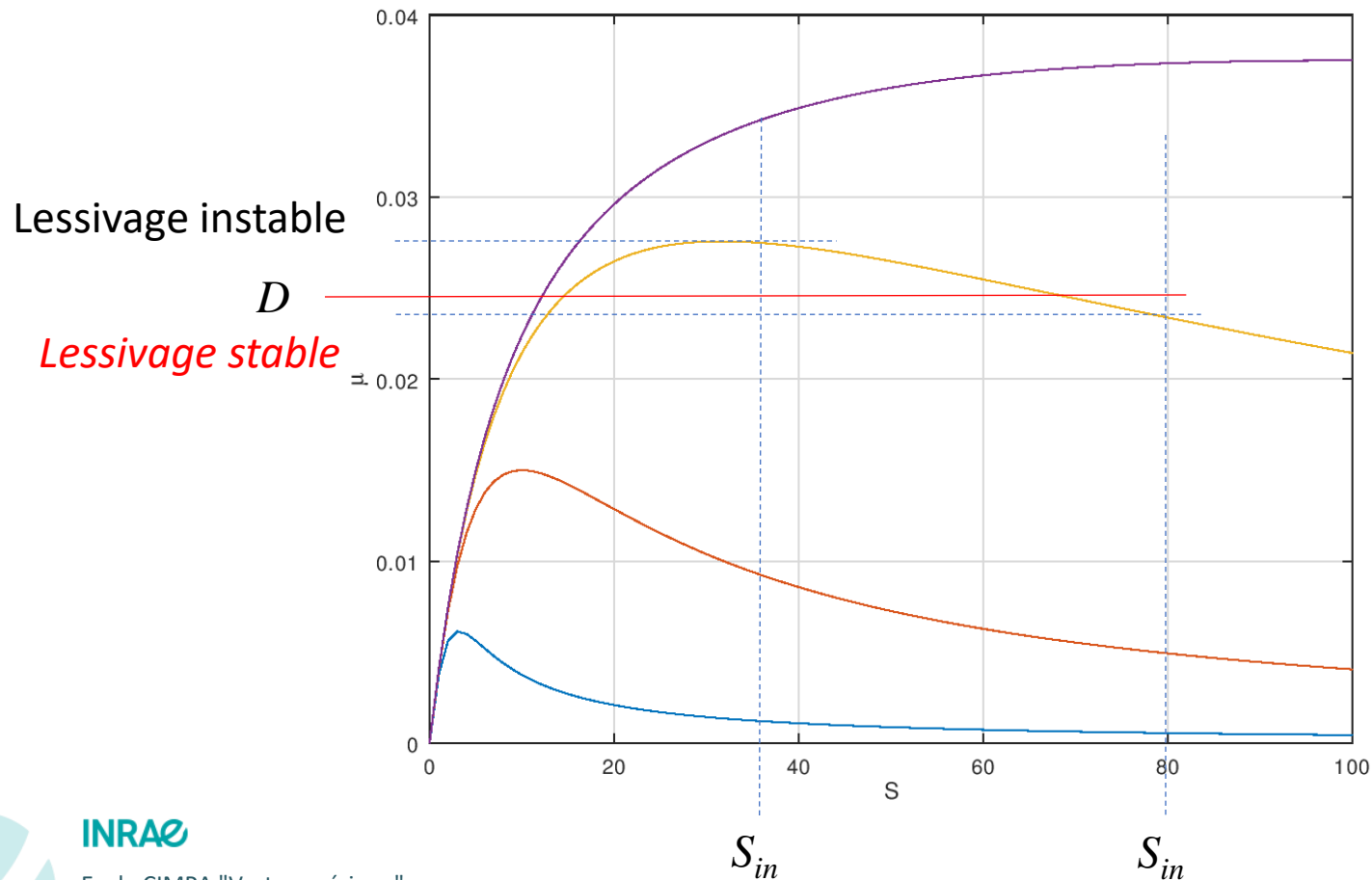


Que peuvent les mathématiques?



Que peuvent les mathématiques?

Remarque Dans le cas où $\mu(\cdot)$ n'est pas monotone, pour S_{in} grand (ou tout simplement pour tout $\bar{D} > \max(\mu(\cdot))$) il se peut que $\mu(S_{in}) - \bar{D} < 0$. On trouve là l'argument essentiel qui justifie la mise au point d'algorithmes de commande pour les bioprocédés : lorsque la cinétique n'est pas monotone, le point d'équilibre $\{0, S_{in}\}$ correspondant au lessivage est stable.



Que peuvent les mathématiques?

Stabilité du point $\{\bar{X}, \bar{S}\}|_{\bar{X} \neq 0}$

Soient $\delta X = X - \bar{X}$ et $\delta S = S - \bar{S}$. En utilisant le développement de Taylor au premier ordre autour de \bar{x} , on obtient facilement :

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \mu'(\bar{S}) \bar{X} \\ -\frac{\mu(\bar{S})}{Y} & -\frac{\mu'(\bar{S}) \bar{X}}{Y} - \bar{D} \end{bmatrix}$$

$$\text{avec } \mu(\bar{S}) = \bar{D}, \mu'(S) = \frac{\partial \mu(S)}{\partial S}$$

Si λ_1 et λ_2 sont les valeurs propres de A , on en déduit :

$$\begin{cases} \Omega &= -\frac{\mu'(\bar{S}) \bar{X}}{Y} - \bar{D} \\ \Delta &= \frac{\bar{D} \mu'(\bar{S}) \bar{X}}{Y} \end{cases}$$

$$\text{où } \Omega = \text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i \text{ et } \Delta = \det(A) = \prod_{i=1}^n \lambda_i.$$

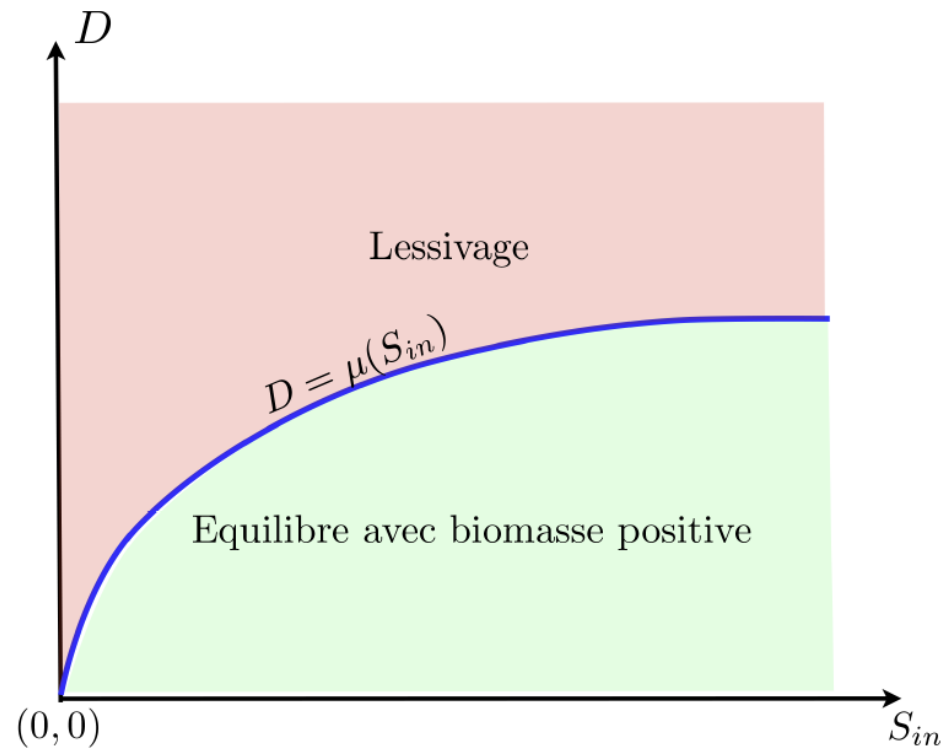


Que peuvent les mathématiques?

Take home messages

- Monod

S_{in}	$\lambda(D) < S_{in}$	$\lambda(D) = S_{in}$	$\lambda(D) > S_{in}$
E_0	Instable	Stable	LES
E_1	LES	N'existe pas	N'existe pas

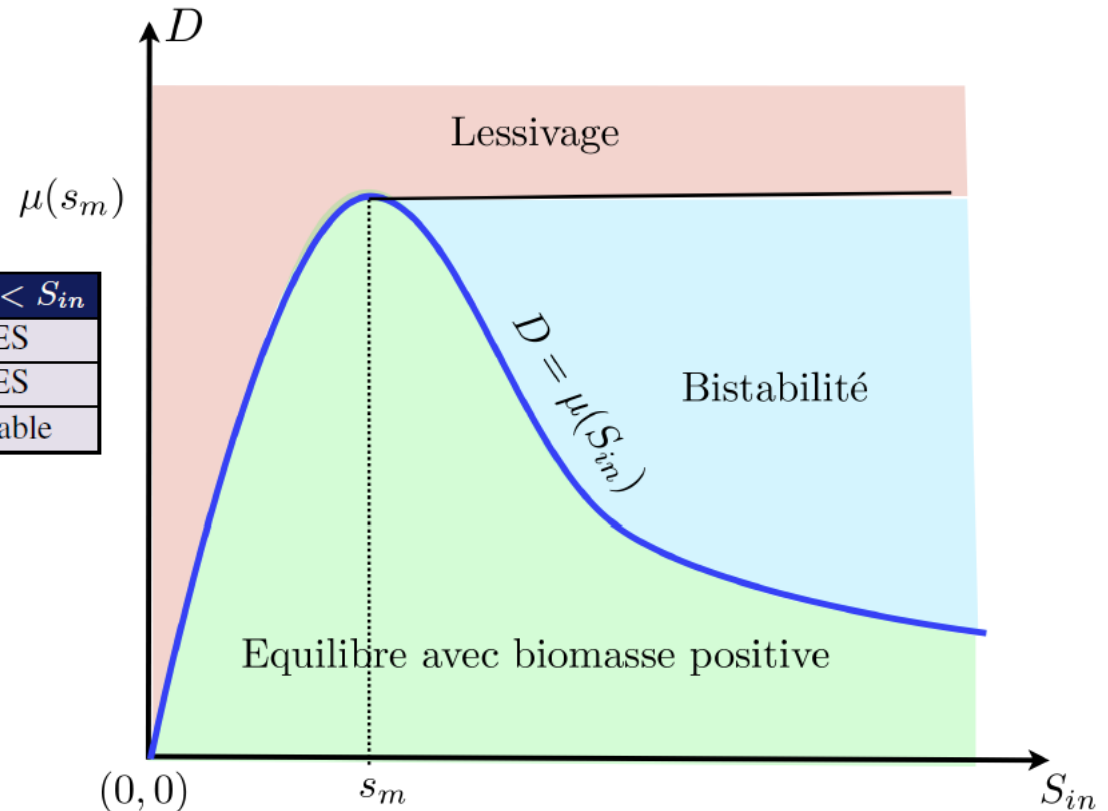


Que peuvent les mathématiques?

Take home messages

- Haldane

S_{in}	$S_{in} < \lambda(D)$	$\lambda(D) < S_{in} < \bar{\lambda}(D)$	$\bar{\lambda}(D) < S_{in}$
E_0	LES	Instable	LES
E_1	N'existe pas	LES	LES
E_2	N'existe pas	N'existe pas	Instable



Que peuvent les mathématiques?

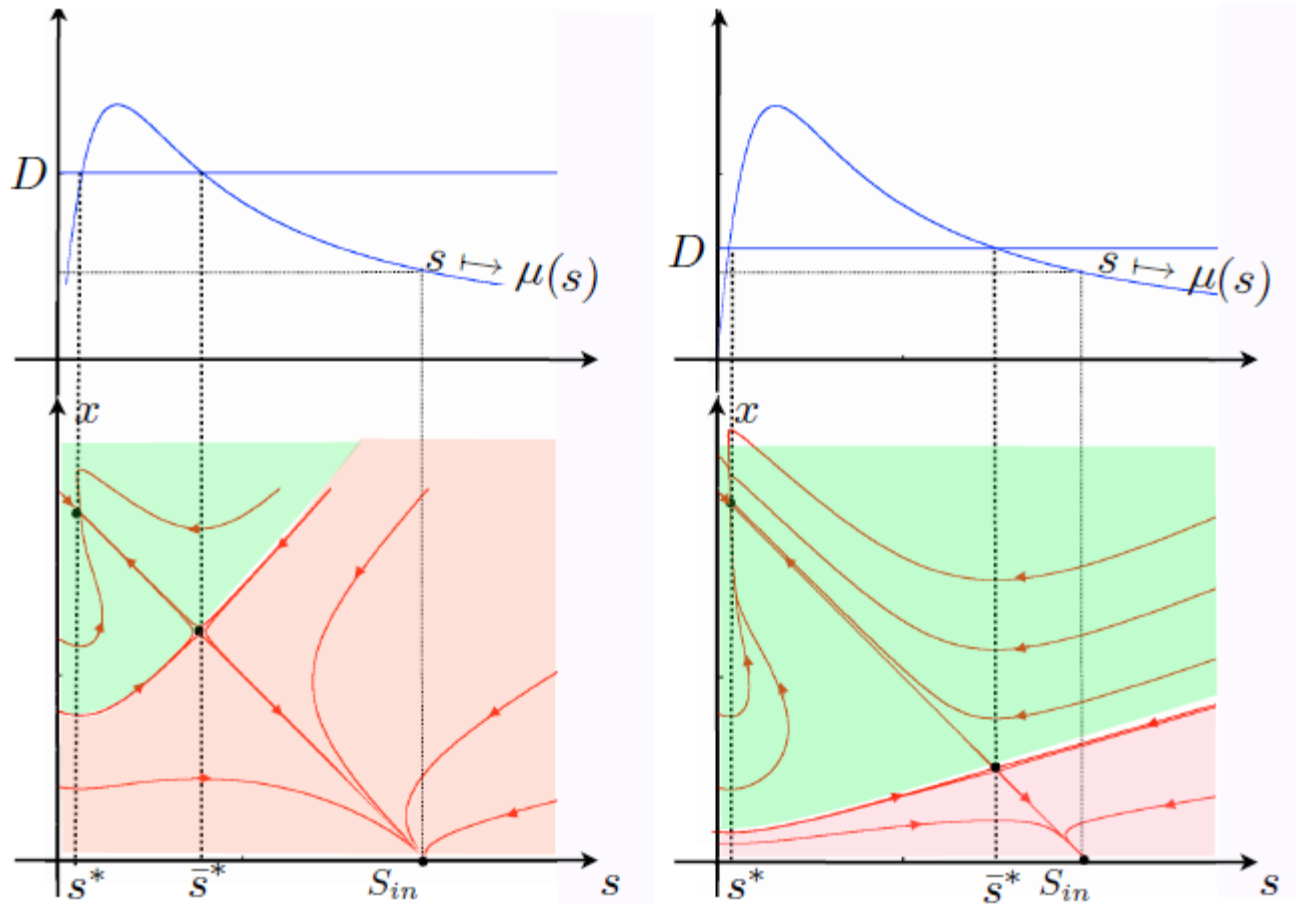


Figure 2.7. *Portrait de phase de (2.21) : $D = 1$ à gauche ; $D = 0.6$ à droite.*

Que peuvent les mathématiques?

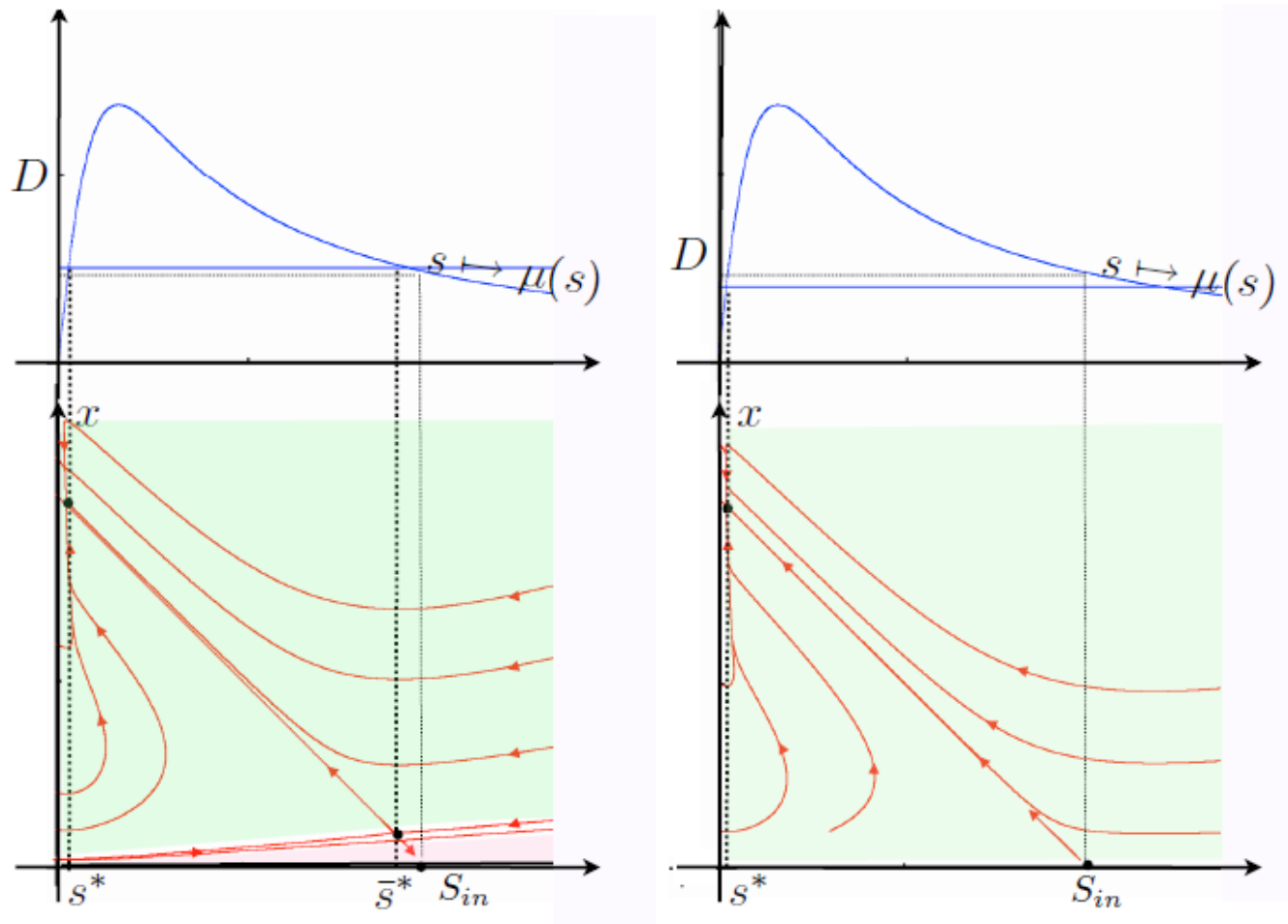


Figure 2.8. *Portrait de phase de (2.21) : $D = 0.5$ à gauche ; $D = 0.4$ à droite.*

_05

Liens avec le réel...



INRAE

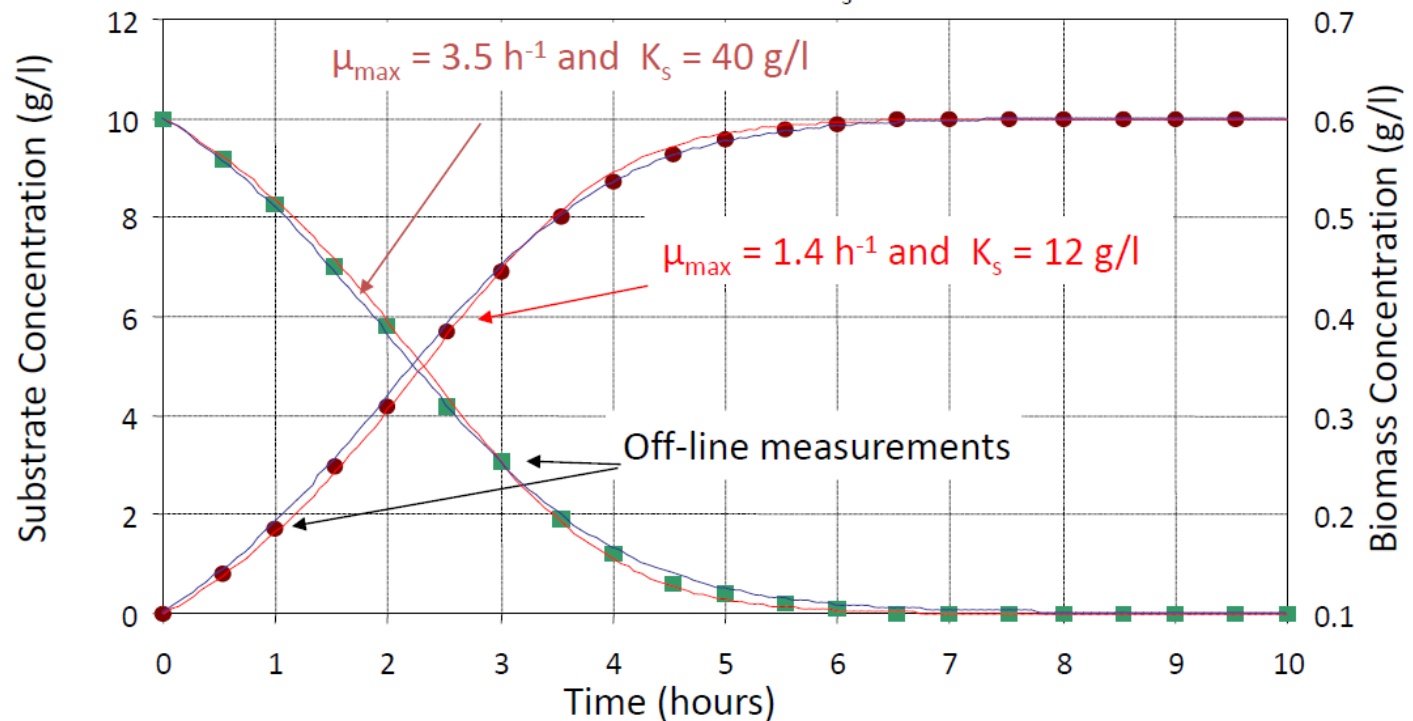
Ecole CIMPA "Vert numérique"

23/09/2022 / J. Harmand

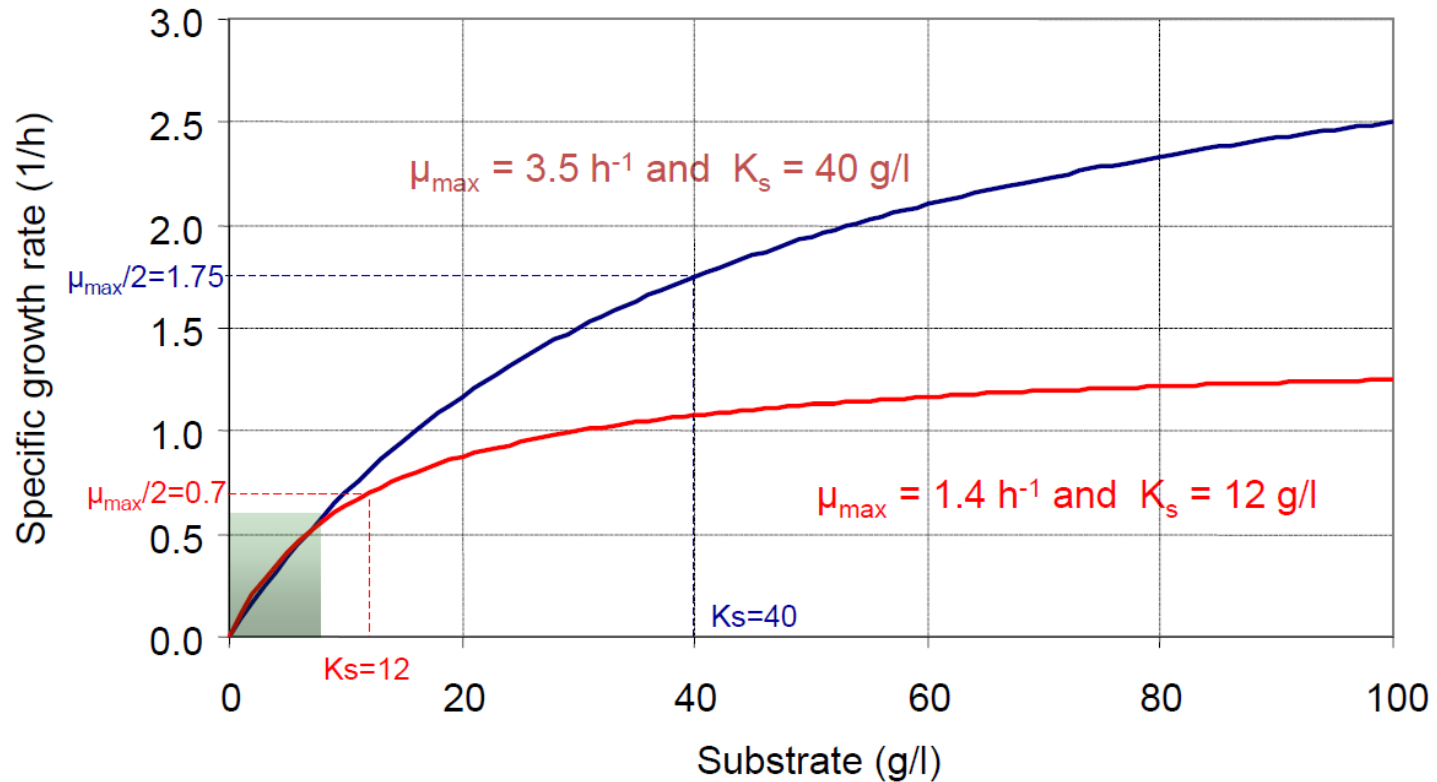
Difficultés potentielles

In practice, the identifiability of the kinetic is far from being guaranteed !..

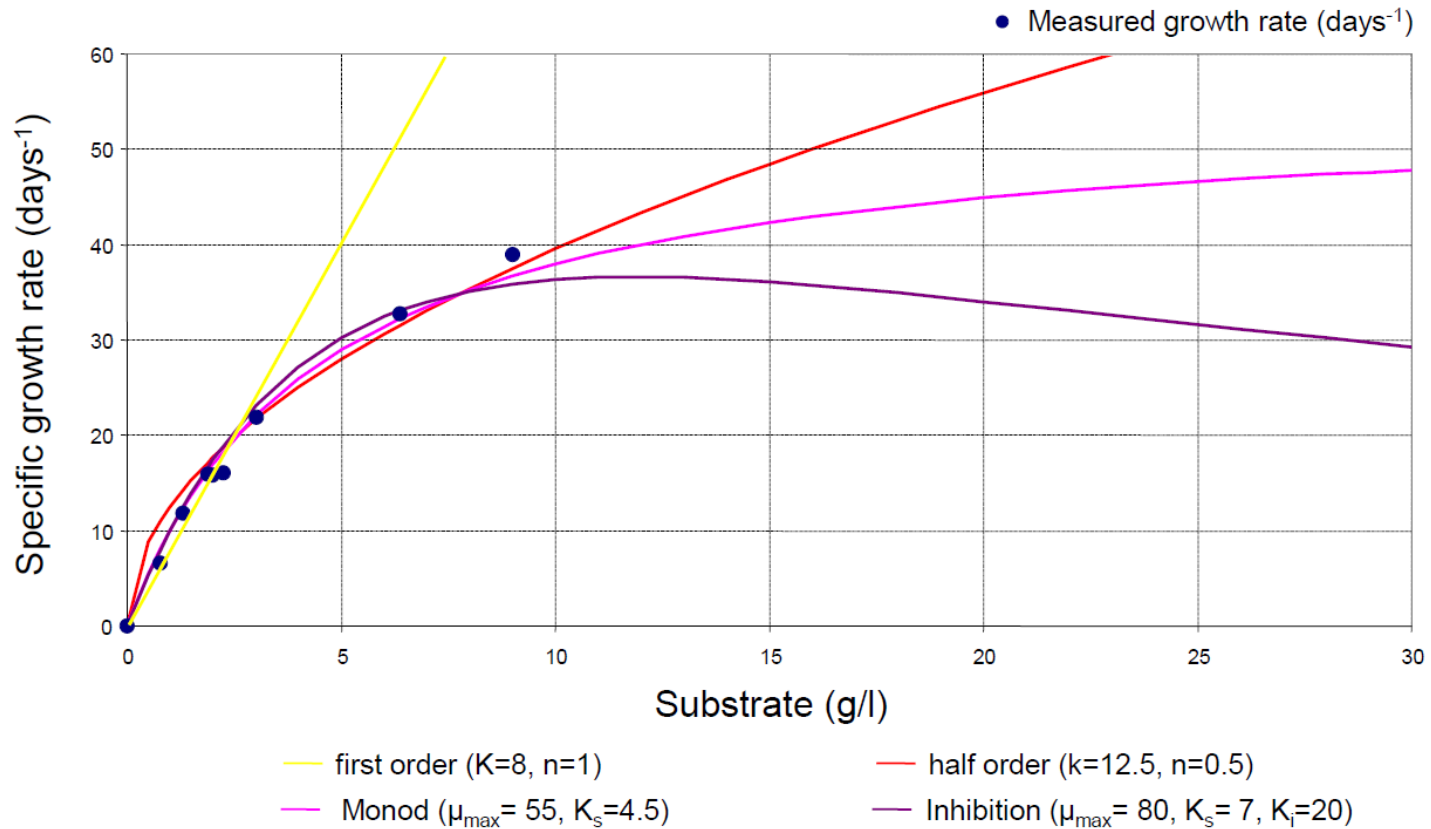
$$\text{For example : } \mu = \mu_{\max} \frac{S}{K_s + S}$$



Difficultés potentielles



Difficultés potentielles



Three-Reaction Model for the Anaerobic Digestion of Microalgae

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

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

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

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

³Department of Chemical Engineering, McMaster University, Canada

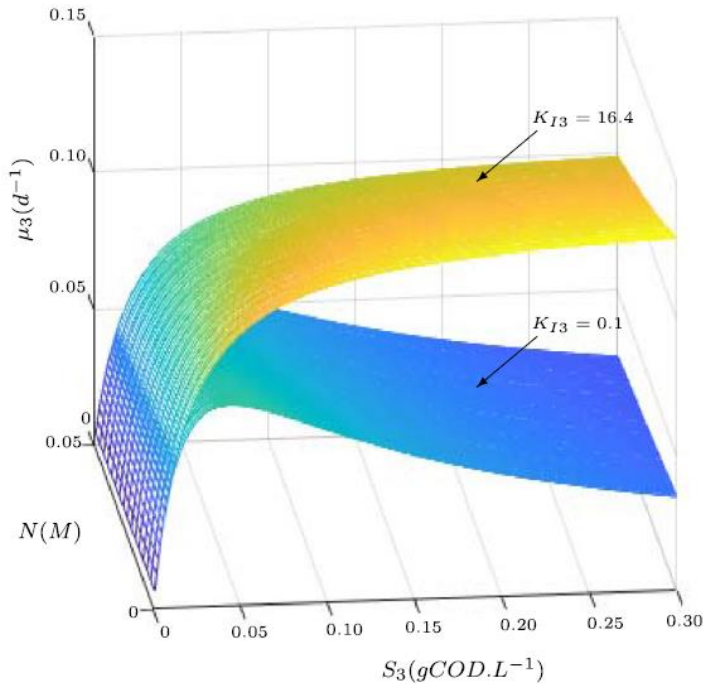
⁴INRA, UR050, Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement, Avenue des Etangs, Narbonne, France

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

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

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

Difficultés potentielles



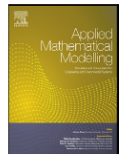
Applied Mathematical Modelling 61 (2018) 351–376



Contents lists available at ScienceDirect

Applied Mathematical Modelling

journal homepage: www.elsevier.com/locate/apm



Effect of control parameters on biogas production during the anaerobic digestion of protein-rich substrates

Zeyneb Khedim^{a,*}, Boumediène Benyahia^a, Brahim Cherki^a, Tewfik Sari^b, Jérôme Harmand^c

^a Laboratoire d'Automatique de Tlemcen, Université de Tlemcen, BP 230, Tlemcen 13000, Algeria

^b ITAP, Irstea, Montpellier SupAgro, Univ Montpellier, Montpellier, France

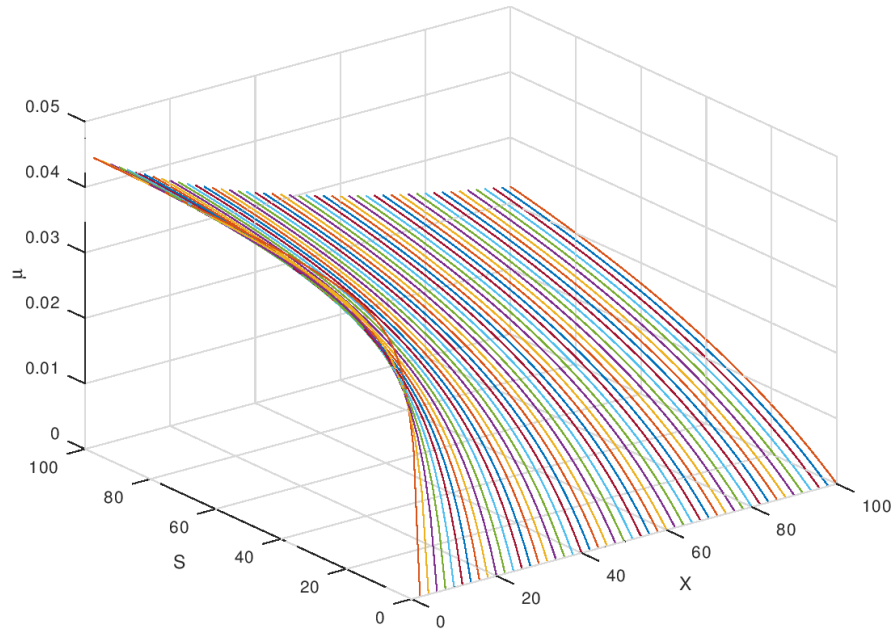
^c LBE, Univ Montpellier, INRA, Narbonne 11100, France



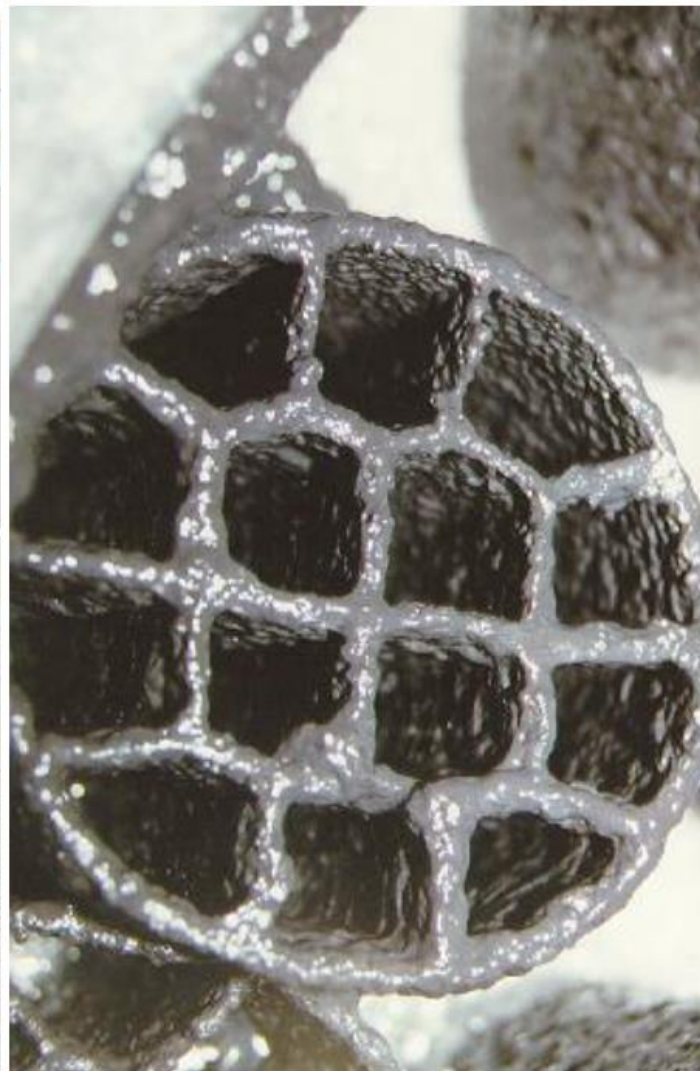
Densité-dépendance

La plus connue, la fonction de Contois : $\mu(S, X) = \mu_{max} \frac{S}{S + K_C X}$
Equivalent à un Monod en S/X !

- Croissante en S ,
décroissante en X
- $\mu_0 = 0.045 \text{ (T}^{-1}\text{)}$
- $K_C = 1 \text{ (-)}$



Impact du procédé



Take-home messages

- La démarche de modélisation est générique : un modèle dépend de l'objectif pour lequel il est développé!
- Les mathématiques (ou la simulation) peuvent permettre d'analyser le modèle et de tirer de nombreuses informations « qualitatives » (recherche des équilibres et de leur nature)
- S'il s'agit juste de faire coller des simulation à des données, des outils de simulation très performants existent sur le marché (SUMO, West, GPSX, SIMBA...)



_06

Pour aller plus loin

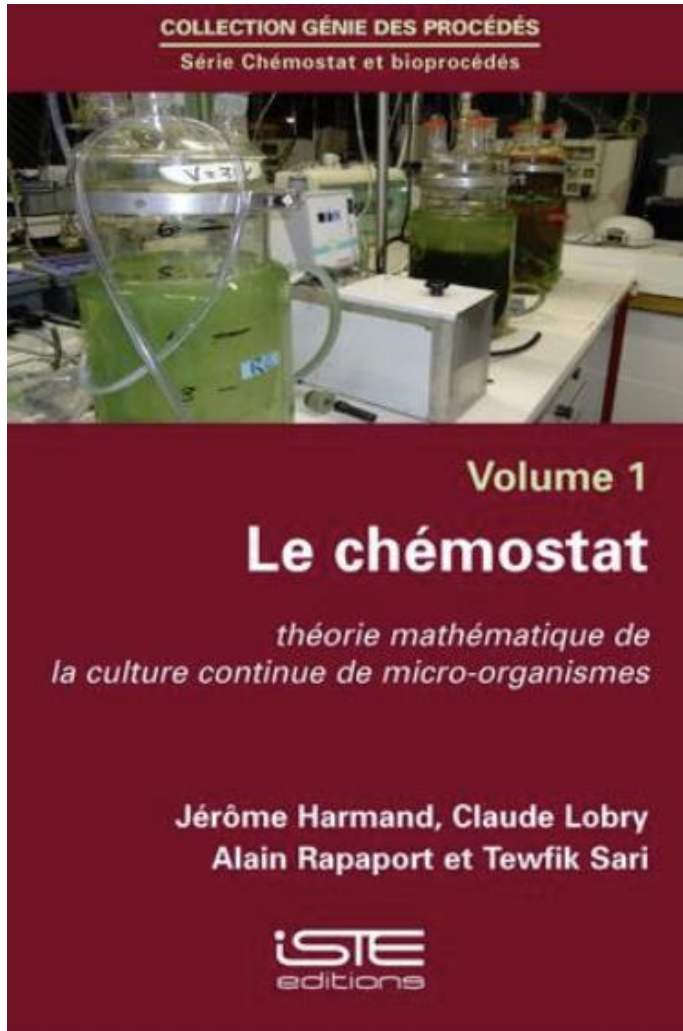


INRAE

Ecole CIMPA "Vert numérique"

23/09/2022 / J. Harmand

Pour aller plus loin en théorie du chémostat



- Les bioréacteurs
- La croissance d'une seule espèce
- L'exclusion compétitive
- La compétition : le modèle densité-dépendant
- Des modèles plus complexes
- Originalité : cinétiques génériques

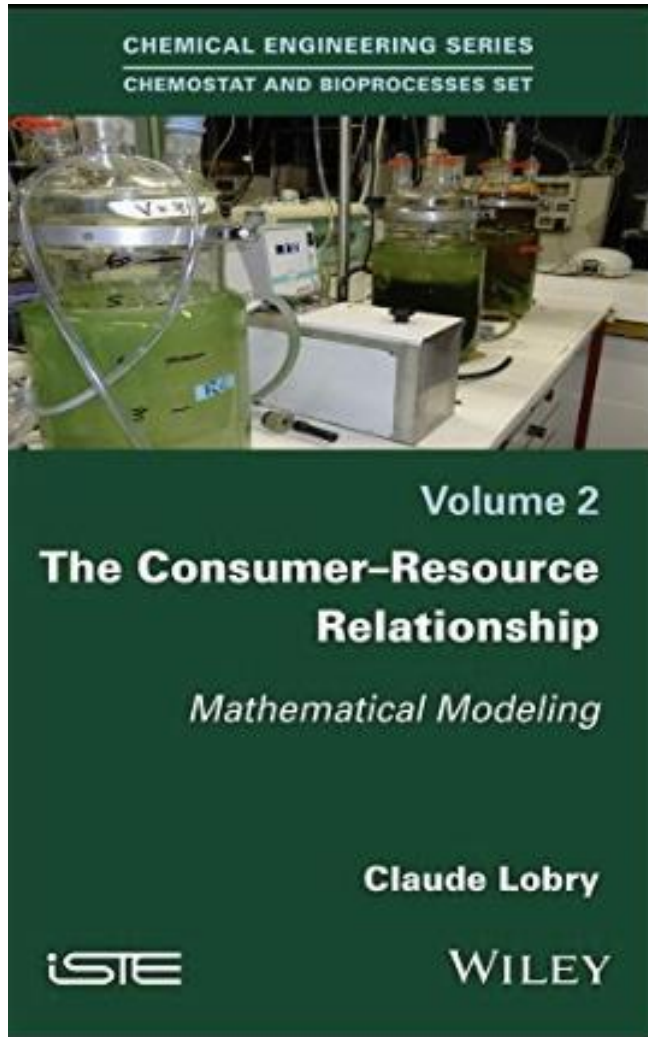


INRAE

Ecole CIMPA "Vert numérique"

23/09/2022 / J. Harmand

Pour aller plus loin en écologie mathématique



- Un peu de patience!

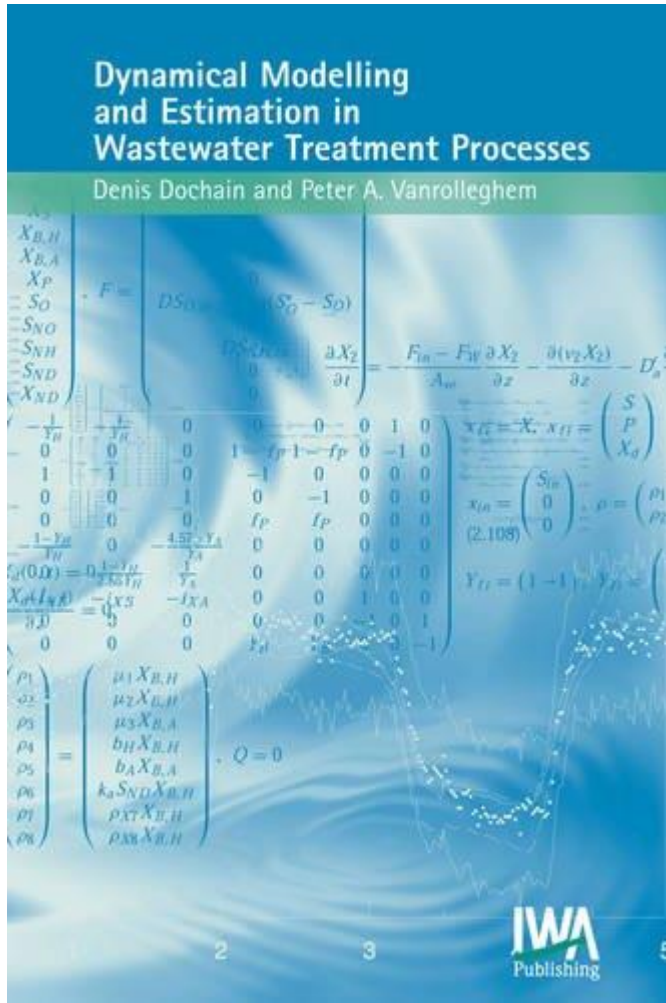


Pour aller plus loin en identification paramétrique des systèmes biologiques



- Quels enjeux pour l'automatique des bioprocédés ?
- Modèles dynamiques de procédés biochimiques
- Propriétés des modèles
- Identification de modèles de bioprocédés
- Estimation d'état
- Concepts de base de la commande des bioprocédés
- Commande optimale des bioréacteurs
- Outils d'aide au diagnostic et détection de pannes

Pour aller plus loin en identification paramétrique des systèmes biologiques



- Modélisation des systèmes de traitement des eaux

Merci pour votre attention!

