



Relations ressources-consommateurs

Contexte et problématique

Partie 2. Conception optimale des bioprocédés continus

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

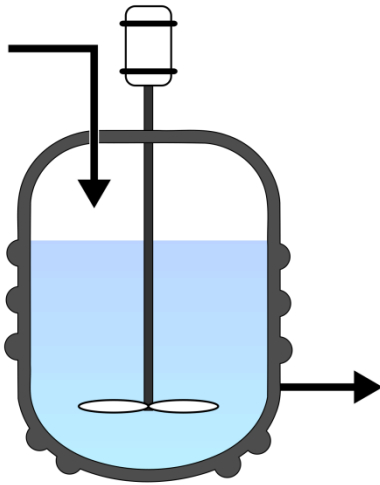
Les réacteurs idéaux en génie des procédés

En génie des procédés les réacteurs idéaux comprennent trois classes différentes selon qu'ils sont opérés en continu, en semi-continu ou de manière discontinue :

- le chemostat, également appelé 'réacteur continu parfaitement mélangé', CSTR en anglais pour 'Continuous Stirred Tank Reactor';
- les réacteurs à écoulement dit 'piston' (ou simplement 'réacteurs piston'), PFR en anglais pour 'Piston Flow Reactor' ;
- le 'réacteur semi-continu', 'fedbatch' en anglais ;
- le 'réacteur discontinu' ou 'réacteur fermé', 'batch' en anglais.



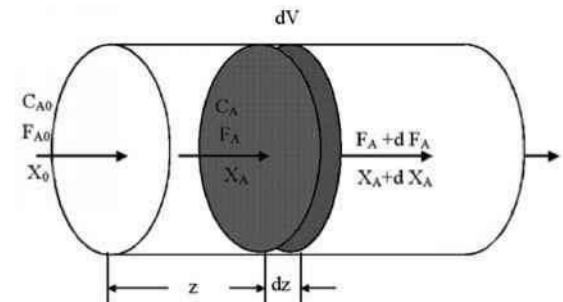
Les réacteurs idéaux en génie des procédés



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

$$\begin{cases} \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = q \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) - \mu(S)X \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = q \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + \mu(S)X \\ X(0, z) = X_0(z) ; X(t, 0) = X_{in} \\ S(0, z) = S_0(z) ; S(t, 0) = S_{in} \end{cases}$$

$$0 \leq z \leq l$$



$$q = \frac{Q_{in}}{\pi R^2}$$

Qu'appelle-t-on "conception optimale" de bioprocédés?

Quelle configuration de réacteurs idéaux – possiblement connectés entre eux – permet-elle d'optimiser, à l'équilibre, un indice de performance donné?



Différents critères

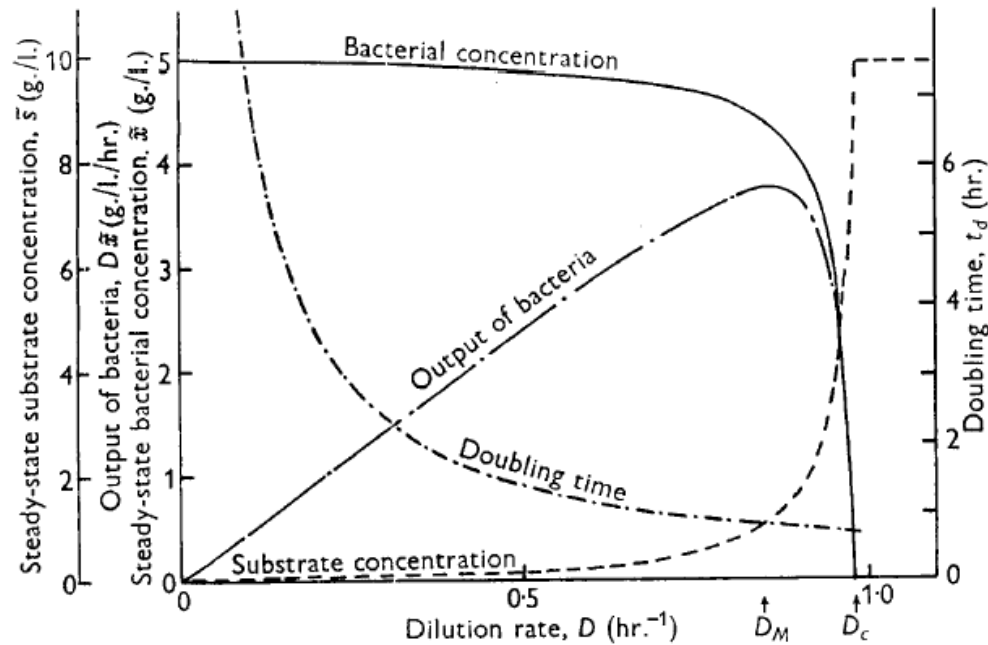


Figure 1: Steady state of a CSTR as a function of the dilution rate : biomass concentration, substrate concentration and DX .

D. Herbert. *In Continuous Cultivation of Microorganisms, Proc. 2nd symposium on the Continuous Culture of Microorganisms, 18-23 June 1962, Prague, CSSR.* Academic Press, I. Málek, K. Beran and J. Hospodka, 1964.

Quels indices/critères de performance?

- La minimisation des temps de séjour (Pb #1)
 - Etant donnés des contraintes entrées-sortie, une cinétique et un débit d'alimentation, quel système composé d'une interconnexion de réacteurs idéaux permet d'obtenir ces performances avec un volume total minimal ?

- Maximisation de la productivité (Pb #2)
 - Etant données des contraintes d'entrée, une cinétique, un volume total du système, quel système composé d'une interconnexion de réacteurs idéaux permet d'obtenir la plus faible concentration de sortie en substrat ?

- Maximisation de la productivité (Pb #3)
 - Etant données des contraintes d'entrée, une cinétique, un volume total du système, quel système composé d'une interconnexion de réacteurs idéaux permet d'obtenir la meilleure productivité (DX) ?

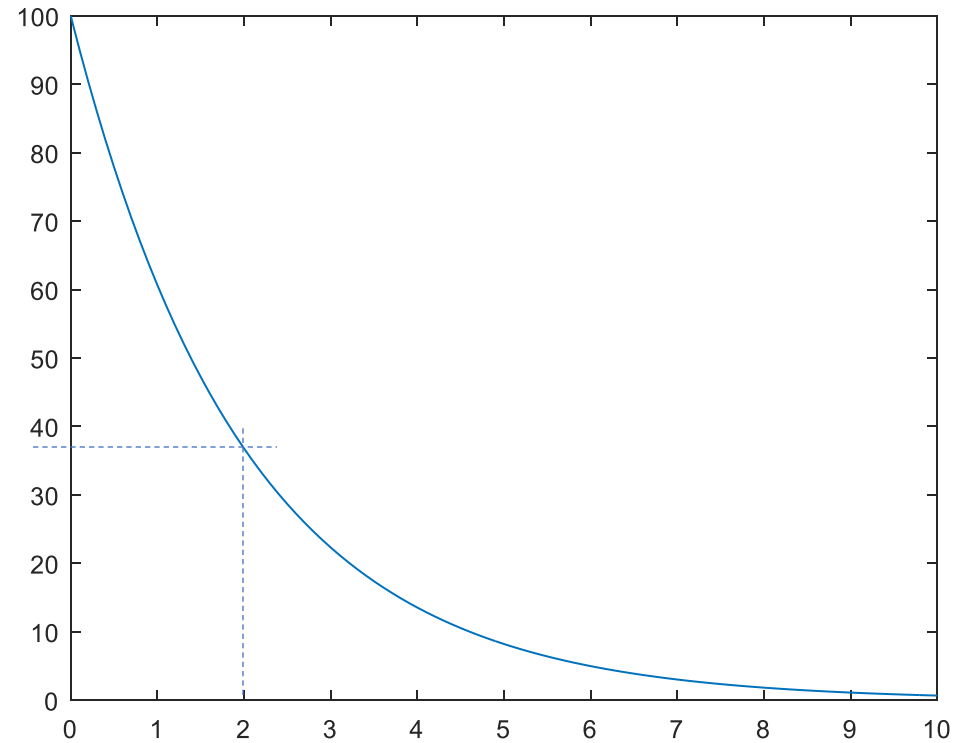
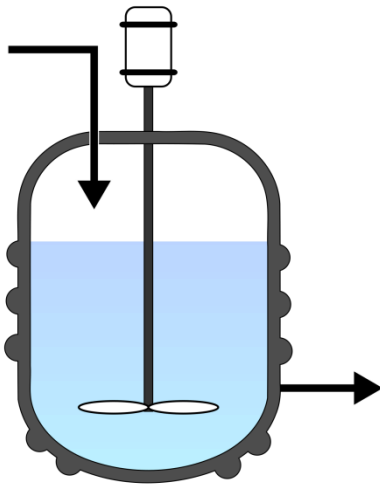


La DTS pour résoudre les problèmes de type Pb #1

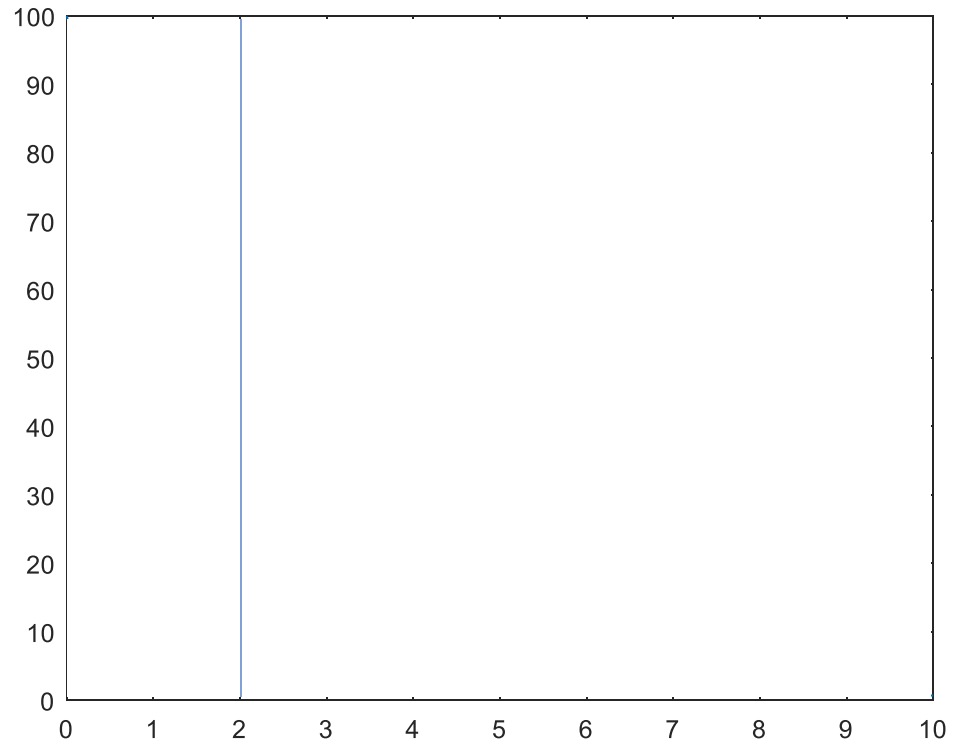
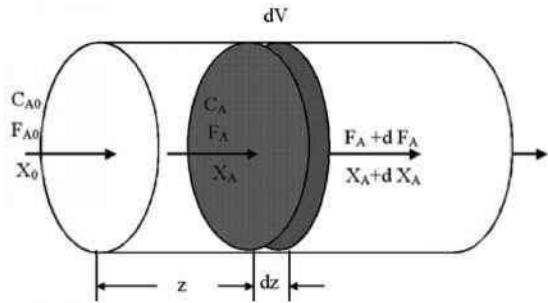
- La détermination de la Distribution des Temps de Séjour ou DTS est une méthode du génie des procédés pour caractériser les propriétés hydrodynamiques entrée-sortie d'un réacteur. C'est une fonction du temps qui représente une "distribution de fréquences" notée généralement $E(t)$;
- En automatique, on parle de réponse du système à un échelon ou une impulsion;
- S'agissant d'une détermination de l'hydrodynamique, il s'agit d'une expérimentation "à froid".



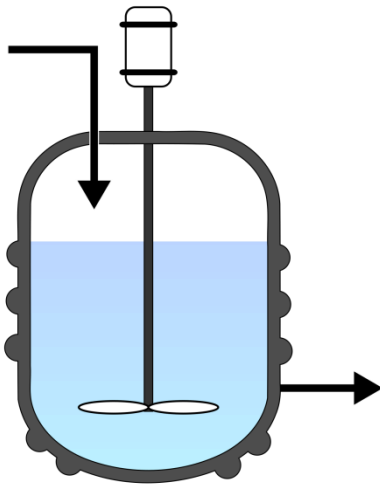
La DTS pour résoudre les problèmes de type Pb #1



La DTS pour résoudre les problèmes de type Pb #1



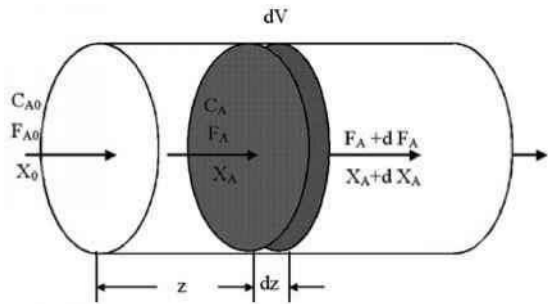
Calcul du temps de séjour



$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$

$$\tau_{2CSTR} = \frac{S_{in} - S_1}{\mu(S_1)(M - S_1)} + \frac{S_1 - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$

Calcul du temps de séjour



$$\tau_{PFR} = \int_0^l \frac{\pi R^2 d\xi}{Q_{in}} = \int_{S_{out}}^{S_{in}} \frac{d\xi}{\mu(\xi)(M - \xi)}$$

Rôle important de la *fonction f*

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$

$$f(S) = \frac{1}{\mu(S)(M - S)} \quad \tau_{PFR} = \int_0^l \frac{\pi R^2 d\xi}{Q_{in}} = \int_{S_{out}}^{S_{in}} \frac{d\xi}{\mu(\xi)(M - \xi)}$$

$$\tau_{2CSTR} = \frac{S_{in} - S_1}{\mu(S_1)(M - S_1)} + \frac{S_1 - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



Rôle important de la *fonction f*

$$f(S) = \frac{1}{\mu(S)(M-S)}$$

Pour toutes les fonctions de croissance usuelles, cette fonction :

- Est positive
- Admet deux asymptotes verticales en 0 et en M
- Admet un seul minimum

Décroissante, passe par un minimum puis croissante

Les fonctions testées :

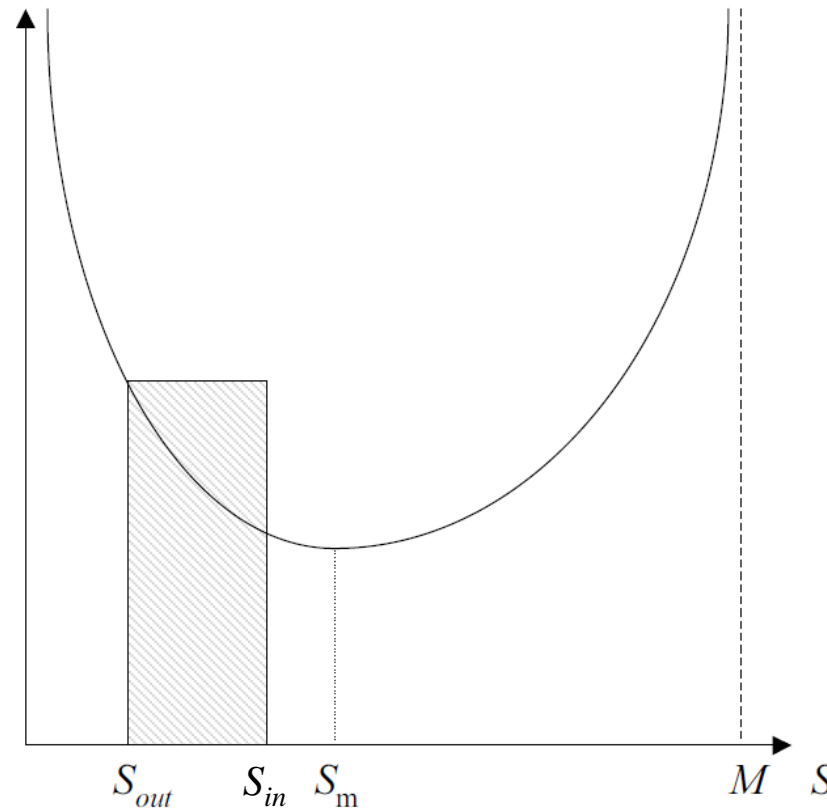
- Monod
- Haldane
- Contois
- Inhibitions létale et non létale par le produit
- ...

$$\mu_{max} \frac{S}{S+K_S} \left(1 - \frac{P}{K_P}\right)$$

$$\mu_{max} \frac{S}{S+K_S} \frac{1}{\frac{P}{K_P}}$$

Approche graphique

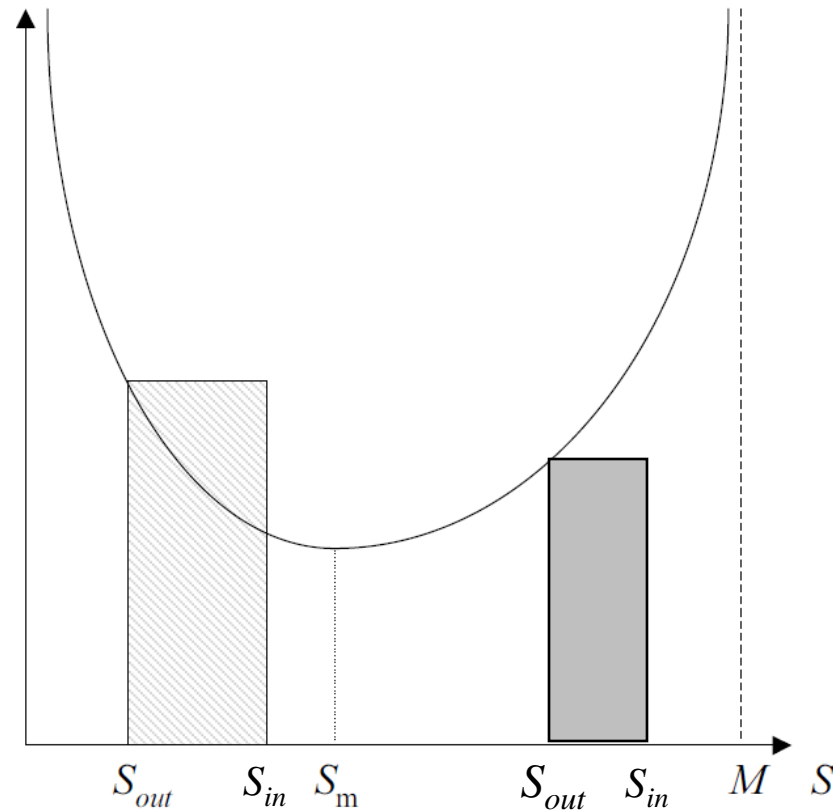
$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



Aire délimitée par
 $f(S_{out}) \cdot (S_{in} - S_{out})$

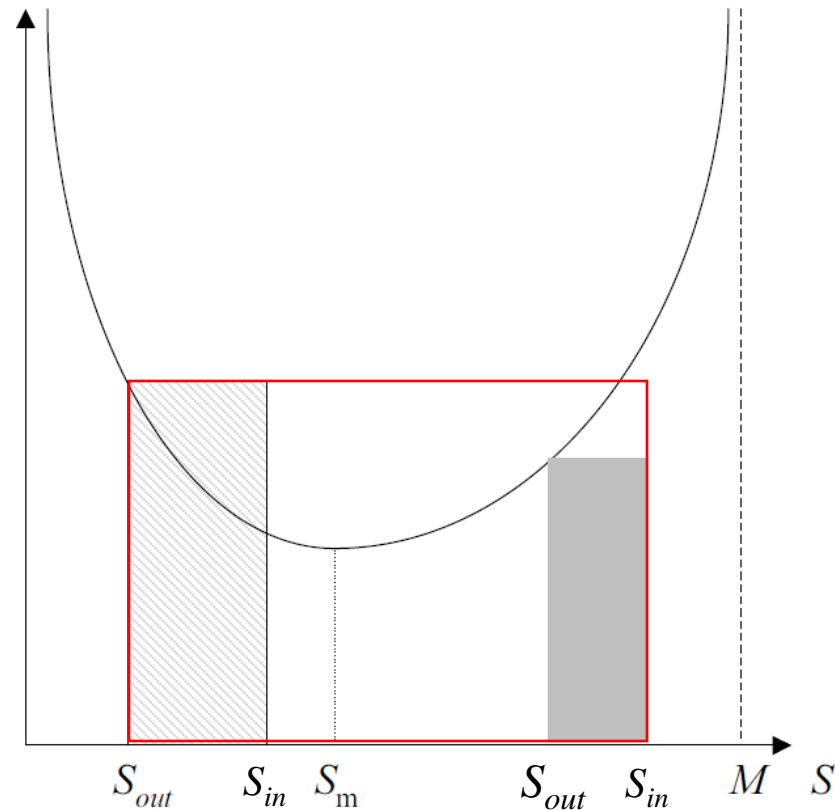
Approche graphique

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



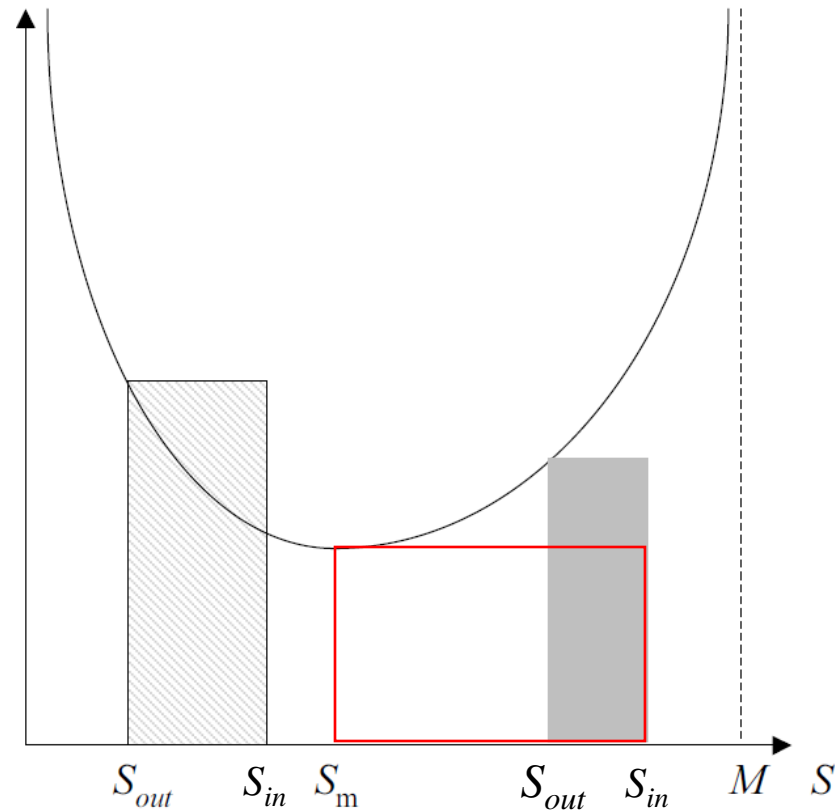
Approche graphique

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



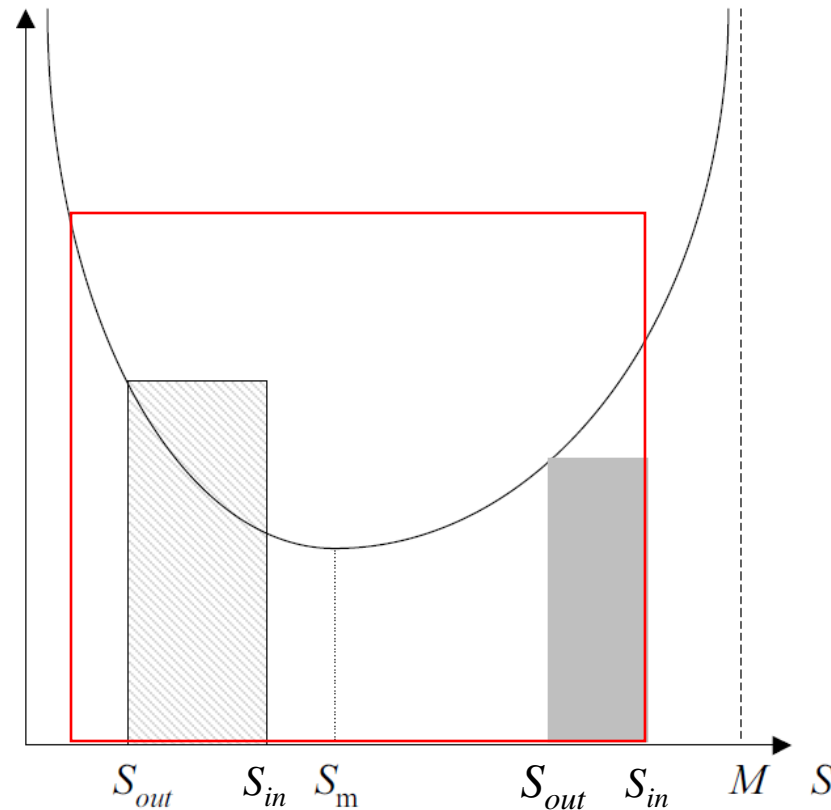
Approche graphique

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



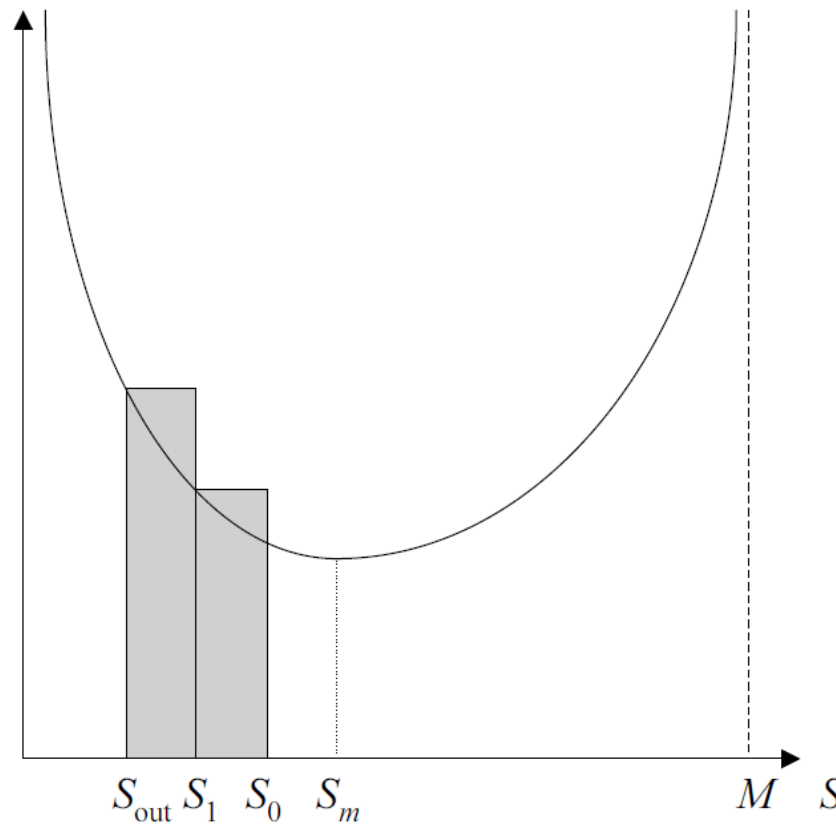
Approche graphique

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



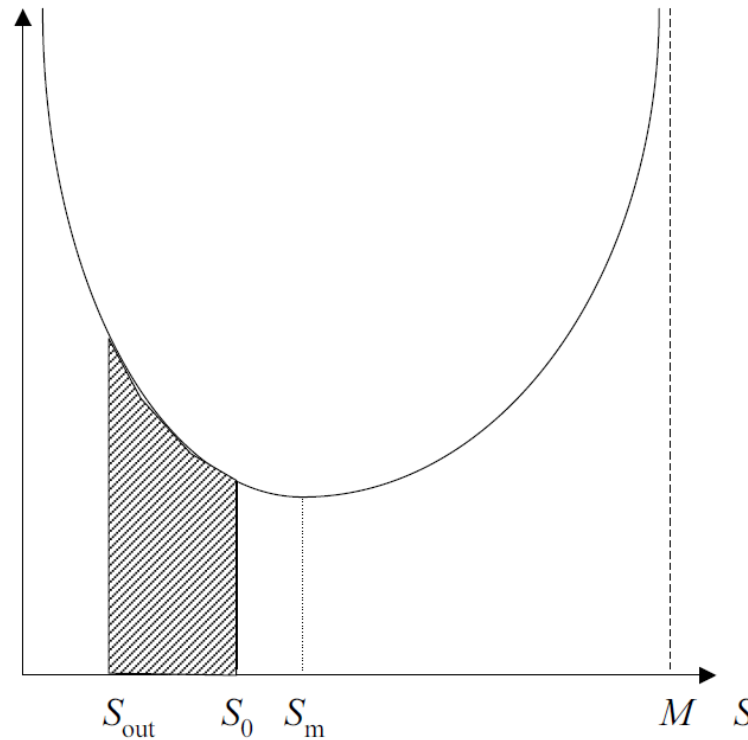
Approche graphique

$$\tau_{2CSTR} = \frac{S_{in} - S_1}{\mu(S_1)(M - S_1)} + \frac{S_1 - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})}$$



Approche graphique

$$\tau_{PFR} = \int_0^l \frac{\pi R^2 d\xi}{Q_{in}} = \int_{S_{out}}^{S_{in}} \frac{d\xi}{\mu(\xi)(M - \xi)}$$



Aire sous la courbe
"entre Sout et Sin"

Résolution du Pb #1

On résume ainsi ces résultats comme suit selon les positions relatives de S_{in} et S_{out} par rapport à \bar{S} :

- $\bar{S} \leq S_{out} < S_{in}$. Le système dont le TDS est le plus court est constitué d'1 seul chemostat ;
- $S_{out} < \bar{S} < S_{in}$. La configuration optimale est un premier réacteur cstr qui fait chuter la concentration de S_{in} à \bar{S} suivi d'un réacteur piston ;
- $S_{out} < S_{in} \leq \bar{S}$. La configuration optimale est un pfr (qui peut être approximer par un grand nombre de cstr en série).

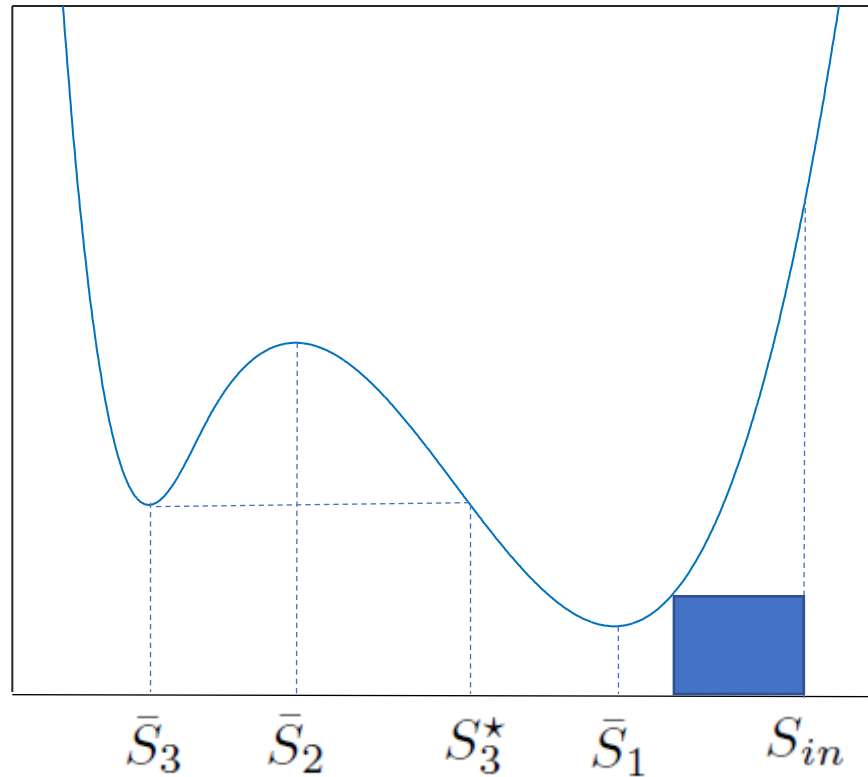


Extensions

- Autres fonctions f ?
- Dans tous les cas,
 - L'approche graphique reste valide
 - Il reste les asymptotes verticales en 0 et \sin
 - Plusieurs minima?

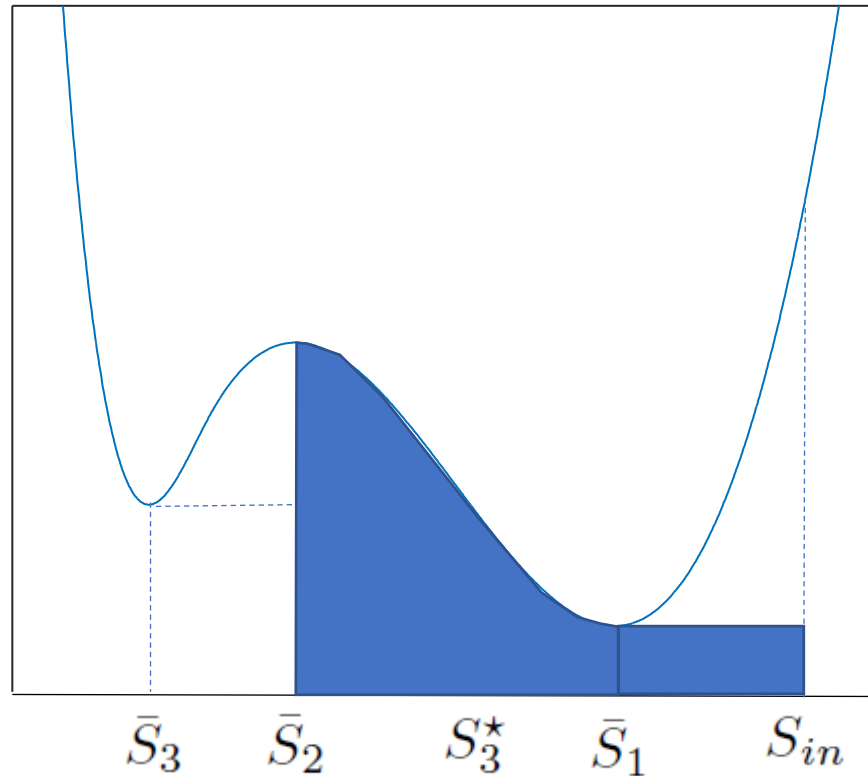


Extensions



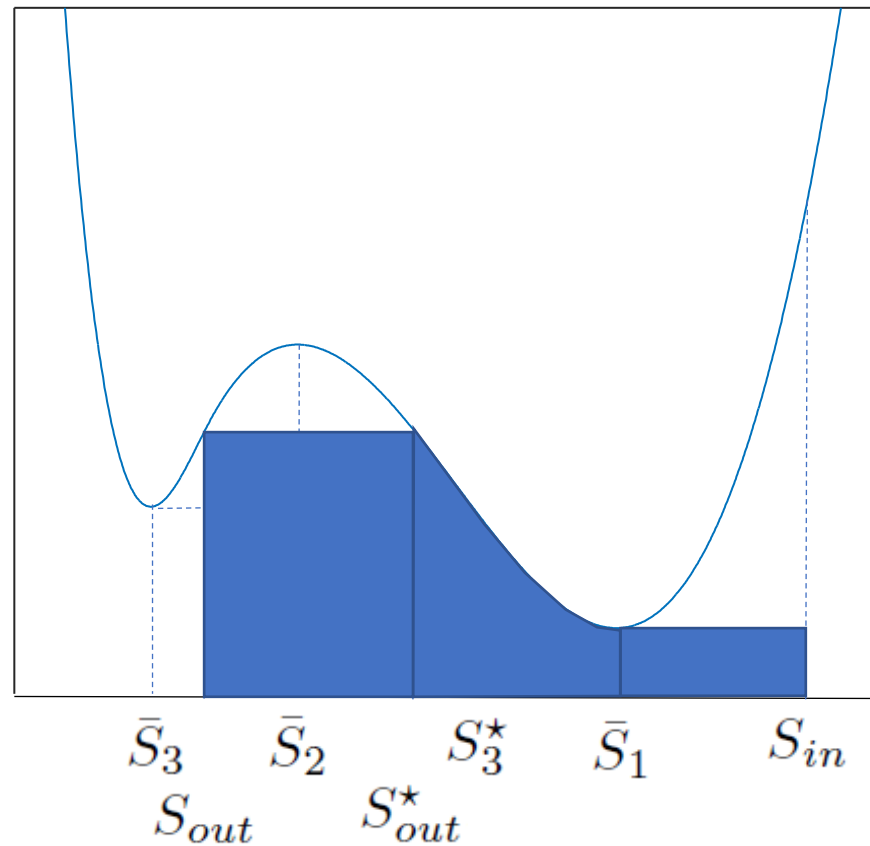
1 CSTR est optimal si $\bar{S}_1 < S_{out}$

Extensions



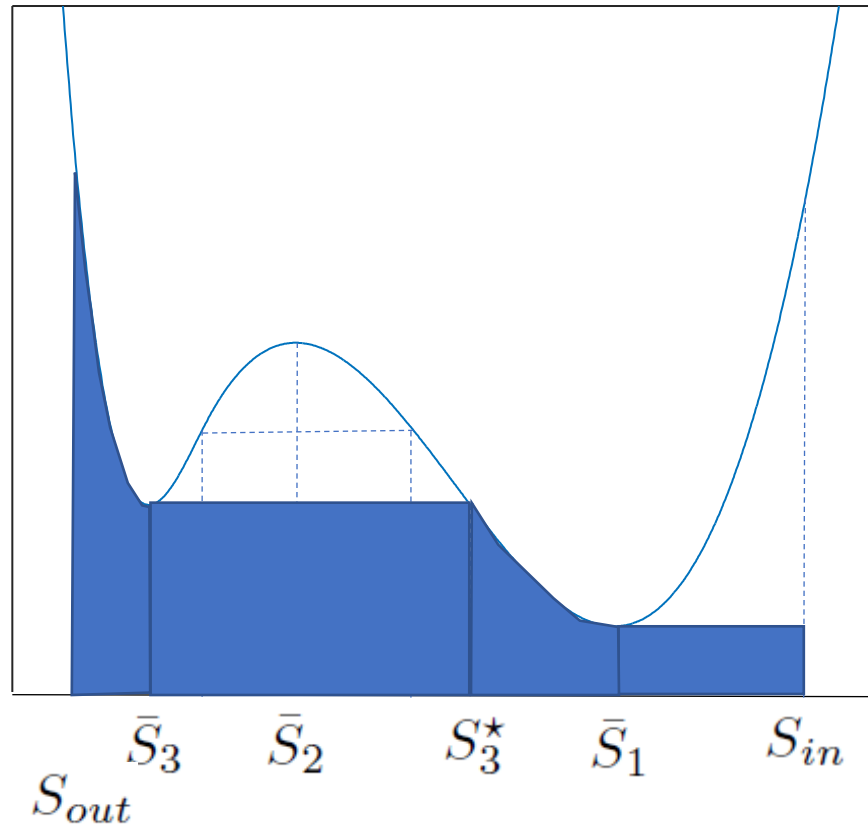
1 CSTR amenant la concentration intermédiaire à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR est optimal si $\bar{S}_2 < S_{out} < \bar{S}_1$;

Extensions



1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR amenant la concentration à S_{out}^* , lui-même suivi d'un CSTR si $\bar{S}_3 < S_{out} < \bar{S}_2$;

Extensions



1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR amenant la concentration à S_3^* , lui-même suivi d'un CSTR amenant la concentration à S_3^* , lui-même suivi d'un PFR si $S_{out} < \bar{S}_3$.

Extensions

5.1 $f(\bar{S}_3) < f(\bar{S}_1)$

Pour ce cas, introduisons S_1^* la valeur de S telle que $f(S_1^*) = f(\bar{S}_1)$ (on a donc nécessairement $\bar{S}_3 < S_1^* < \bar{S}_2$). Supposons en outre que $\bar{S}_1 < S_{in}$. On montre que :

- 1 CSTR est optimal si $\bar{S}_1 < S_{out}$ ou $\bar{S}_3 < S_{out} < S_1^*$;
- 1 CSTR amenant la concentration intermédiaire à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR est optimal si $\bar{S}_2 < S_{out} < \bar{S}_1$;
- 1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR amenant la concentration à S_{out}^* , lui-même suivi d'un CSTR si $S_1^* < \bar{S}_2$;
- 1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_3 , suivi d'1 PFR si $S_{out} < \bar{S}_3$.

De ces raisonnements, on déduit les configurations optimales pour des valeurs de S_{in} plus petites : comme précédemment, on montre que les configurations optimales sont soit un seul PFR, soit un seul CSTR, soit une succession de ces deux réacteurs idéaux.



Merci pour votre attention!

