

vADer, un Nouveau Modèle de la Digestion Anaérobie conçu pour la Conduite de Procédé et la Rigueur des Bilans

Sorosh Samiei¹, Xiaojun Liu¹, Laura André², Stéphane Mottelet¹, André Pauss¹, Thierry Ribeiro¹

¹ Université de technologie de Compiègne, ESCOM, TIMR, Alliance Sorbonne Université, Compiègne, France
² Institut Polytechnique UniLaSalle, ECLOR - ULR 7519, 19 Rue Pierre Waguet, BP 30313, 60026 Beauvais, France

Contexte

- Hauts-de-France : Hautement agricole** (68% du territoire régional), **croissance de la digestion anaérobie** pour valoriser les **déchets organiques**, l'essor de la méthanisation par la **voie sèche**
- Interreg OBIWAN France-Wallonie-Vlaanderen** : transformer les flux de **déchets organiques** en **produits chimiques avancés** grâce à la **digestion anaérobie**. Porté par un consortium de **partenaires académiques et industriels**
- Problématique de **Variabilité** saisonnière/régionale des **intrants** : **fluctuation** de la production, **pertes d'efficacité** des procédés **en aval** et **déstabilisation** du digesteur
- Projet doctoral** : **stabilisation** de la **composition** et du **débit** du biogaz malgré les variabilités

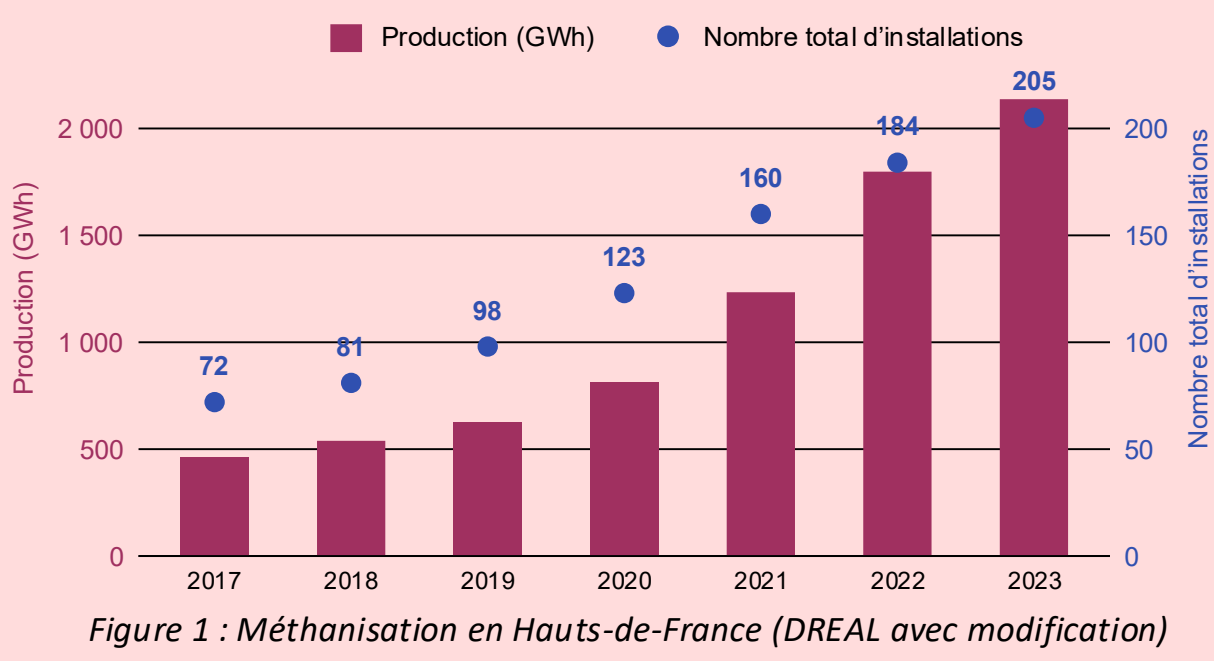
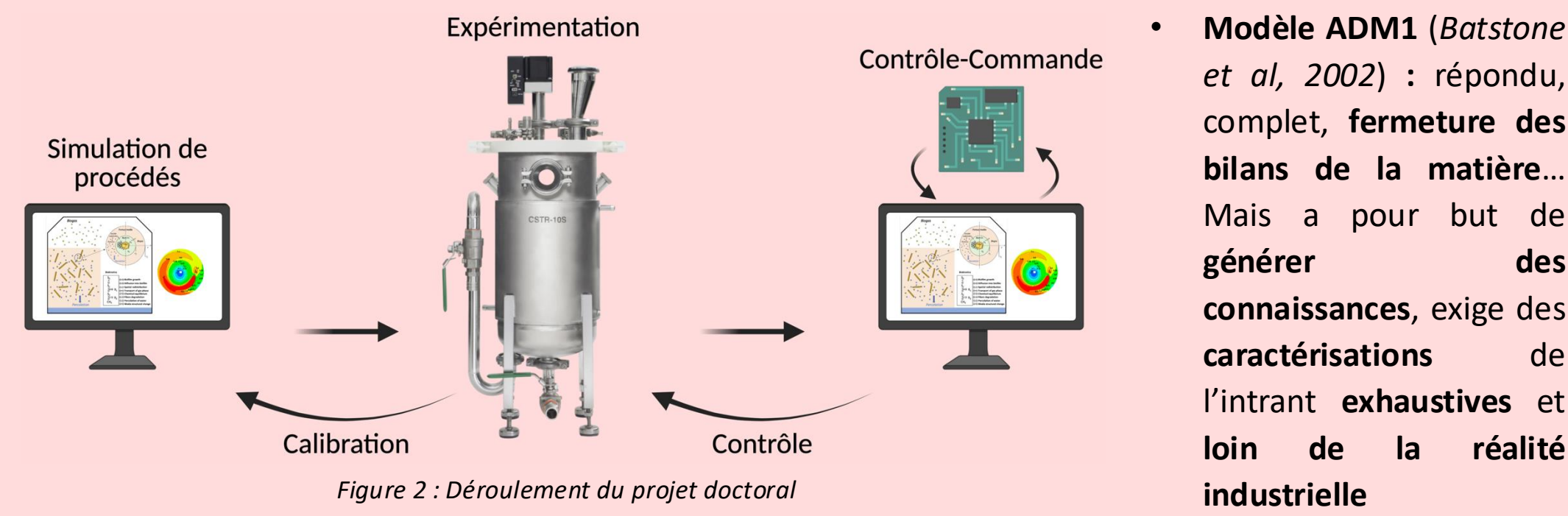


Figure 1 : Méthanisation en Hauts-de-France (DREAL avec modification)



- Modèle AM2** (Bernard et al, 2001) : simple, à but de **contrôle-commande**, alimenté par des **mesures réalisées pour le suivi du procédé**, n'est pas basé sur la **fermeture des bilans**
- Le modèle **AM2** et ces dérivées : **recalibration complète de la stœchiométrie** (longue, coûteuse) à chaque changement des caractéristiques des intrants. Un **modèle basé sur la fermeture des bilans** ne nécessite que le **recalcul** de la stœchiométrie.

Littérature AM2

- Objectif** : étudier les modèles basés sur **AM2** et la fermeture de leurs **bilans élémentaire**
- Méthode** :
 - Composition élémentaire** des intrants (estimation, substitution)
 - Coefficients stœchiométriques** des réactions biochimiques en unité molaire
 - Calcul de la **fermeture de bilan** :

$$Bilan = \frac{\sum Entrée_e}{\sum Sortie_e} * 100$$

(où $e \in \{C, H, O, N, S, DCO\}$)

- Limites** :
 - Incertitude** des compositions : estimation par mesures de suivi (Moscoviz et Jimenez, 2021), substitution si impossible par la composition donnée par un article similaire)
 - Ajustement des **réactions** à un **cadre unique**
 - Exclusion des articles** manquant de coefficients stœchiométriques ou d'espèces chimiques cruciales (ex: biomasse, CO₂)
- Résultats** :
 - Bernard et al, 2001** :
 - Composition élémentaire estimée par mesures opératoires (TOC, COD & VS)
 - Coefficients calibrés pour un procédé => bilans non bouclés
 - Donoso et al, 2014** :
 - Modèle basé sur la fermeture du bilan DCO => autres bilans incomplets
 - Composition de l'intrant inestimable : données tirées de Rose, 2007
 - Fedorovich et al, 2003** :
 - Stœchiométrie tirée d'ADM1 => fermeture des bilans élémentaires
 - Équilibre de DCO non prise en compte pour la réaction de réduction de sulfure
 - Mairet et al, 2011** :
 - Fermeture bilan DCO par conception
 - Défaut de bilan d'azote : calcul de DCO théorique inconsistent
- Discussions** :
 - AM2 permet le contrôle de procédé & ne nécessite que des mesures opératoires... Mais ne permet pas la fermeture des bilans
 - ADM1 remédie à ce manque de précision, mais restreinte en application agricole par ces besoins en caractérisation des intrants
 - Besoin d'un compromis opérationnel**: **simplicité d'AM2** pour le **contrôle**, basé sur les **mesures de suivi de procédé**, **précision élémentaire d'ADM1**

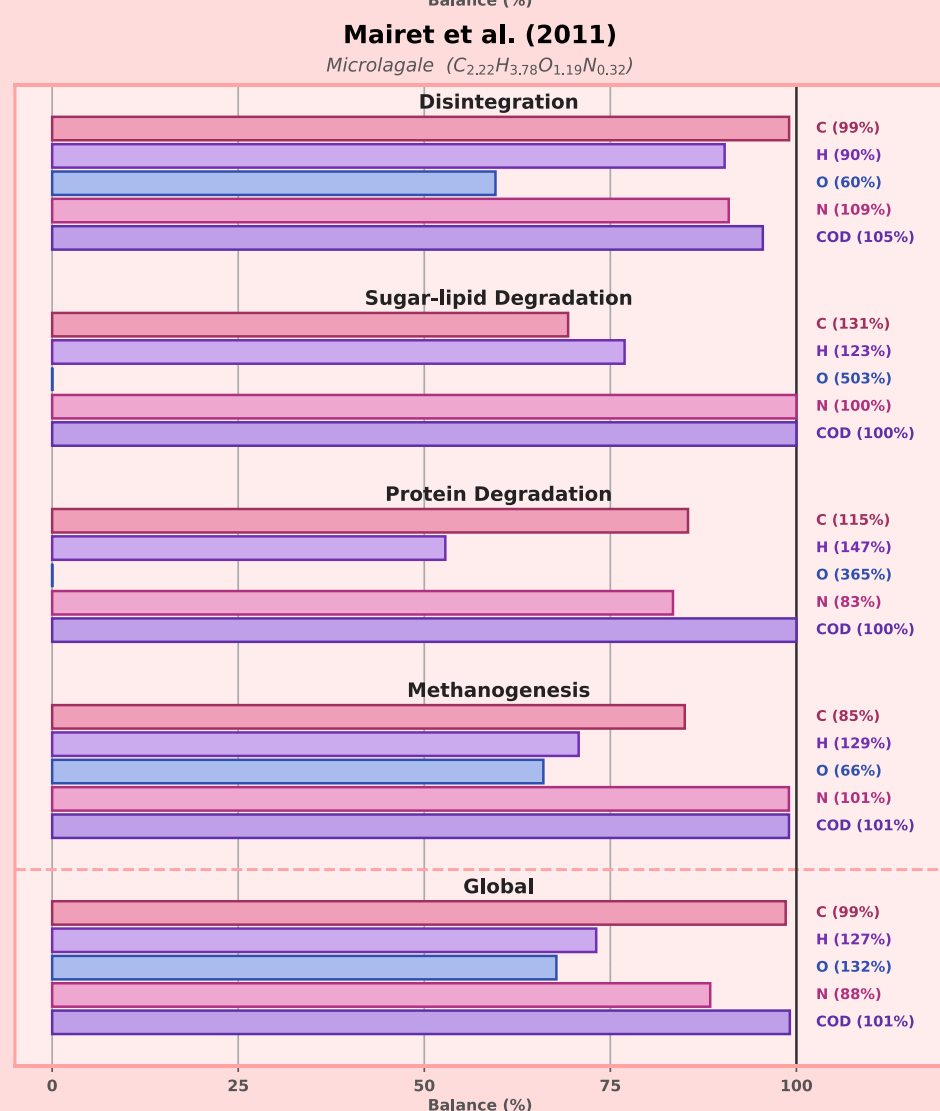
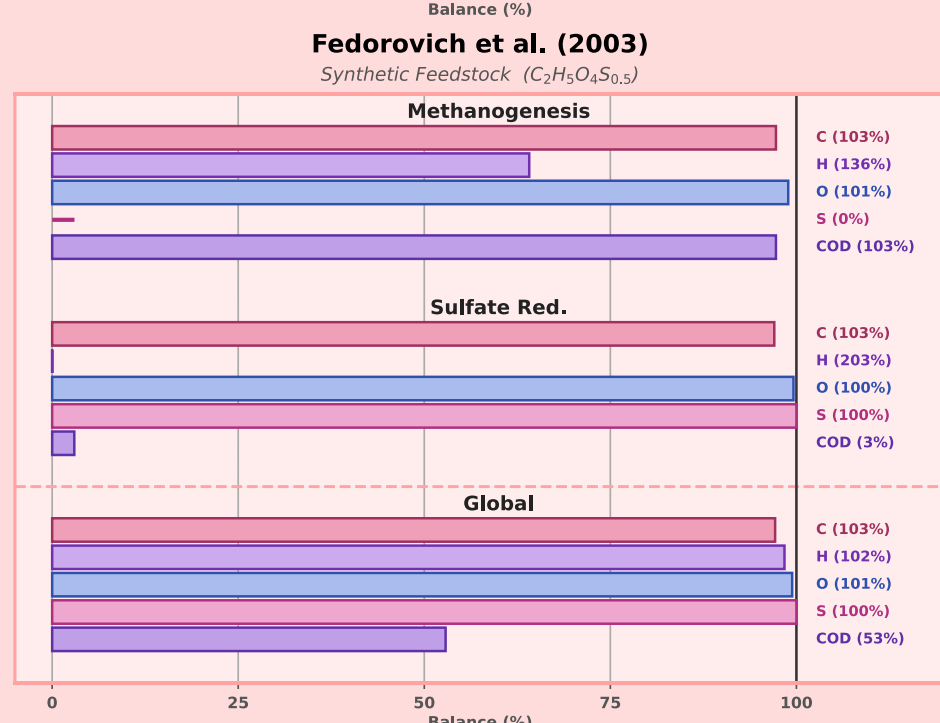
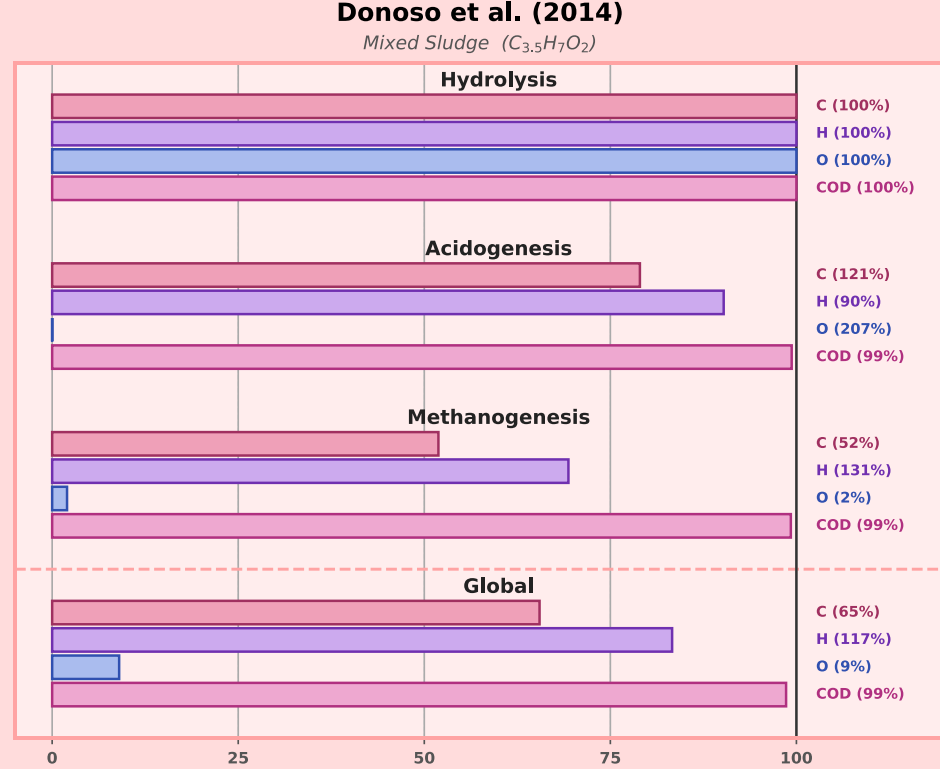
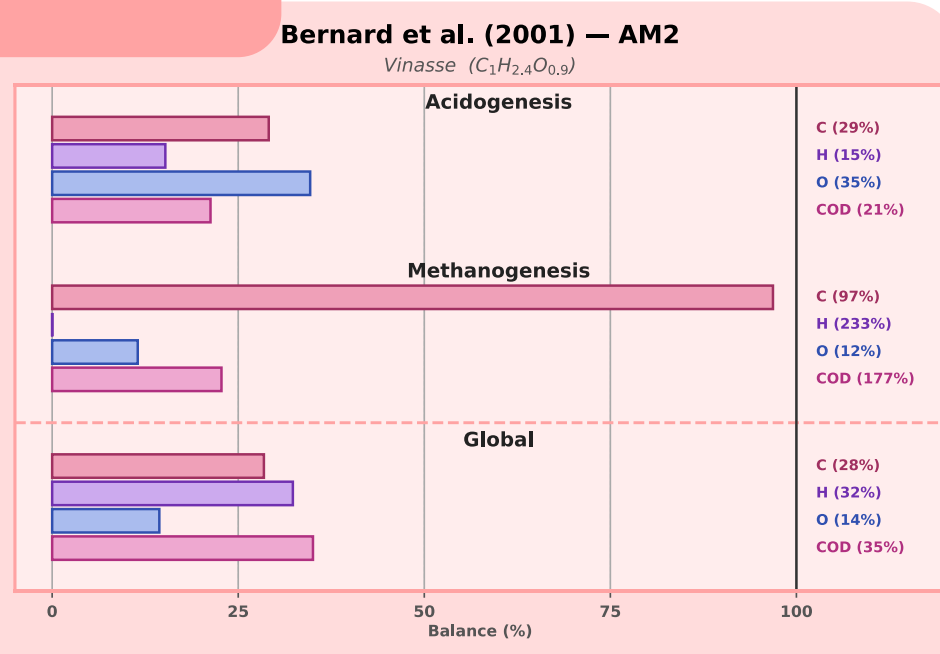


Figure 3 : Fermeture des bilans modèle AM2

vADer, le nouveau modèle

- Objectif** : vADer est un modèle **statique**, garantissant la **fermeture des bilans** élémentaires, s'appuyant sur des **mesures orientées conduite de procédé** : équilibre entre la **simplicité d'AM2** et la **rigueur d'ADM1**
- Choix des mesures** : Des mesures plus approfondies que la pratique industrielle, mais moins coûteuses en ressources, en temps et en investissement qu'ADM1 : **FOS/TAC**, **azote ammoniacal (NH₄⁺-N)**, **potentiel biométhane (BMP)**, **analyse élémentaire (CHONS)** :
 - Apport clé : caractériser les **digestats BMP en plus de ces intrants** : le BMP informe la fraction dégradable en digestion anaérobie (**fb**) et guide la composition de la **fraction inerte**
- Stœchiométrie du modèle** : les coefficients des **réactions constantes** (**dégradation** = acidogénèse + acétogénèse, **méthanogénèse** = acétotrophe + hydrogenotrophe, **sulfato réduction**) sourcés de la littérature (ADM1 R1, Weinrich et Nelles, 2021). Les coefficients de l'étape de **désintégration** sont déterminés pour chaque intrant.
- Résolution** : Un **solveur de programmation quadratique** (qpsolve, Scilab) réconcilie les **mesures** pour estimer les quantités des **fractions biochimiques** (protéines, lipides, carbohydrates, fraction inerte).
- 7 inconnus** (4 fractions + composition inerte), **5 bilans** (C, H, O, N, DCO) => besoin de contraintes souples en plus :
 - Contraintes dures** : fermeture des bilans **élémentaires** (C, H, O et N) et de la demande chimique en oxygène (**DCO**), obligatoire à **100%**
 - Contraintes souples** : composition élémentaire de la **fraction inerte** ancree sur celle du **digestat du BMP**, répartition des **fractions biochimiques** guidée par celle de la **littérature**.

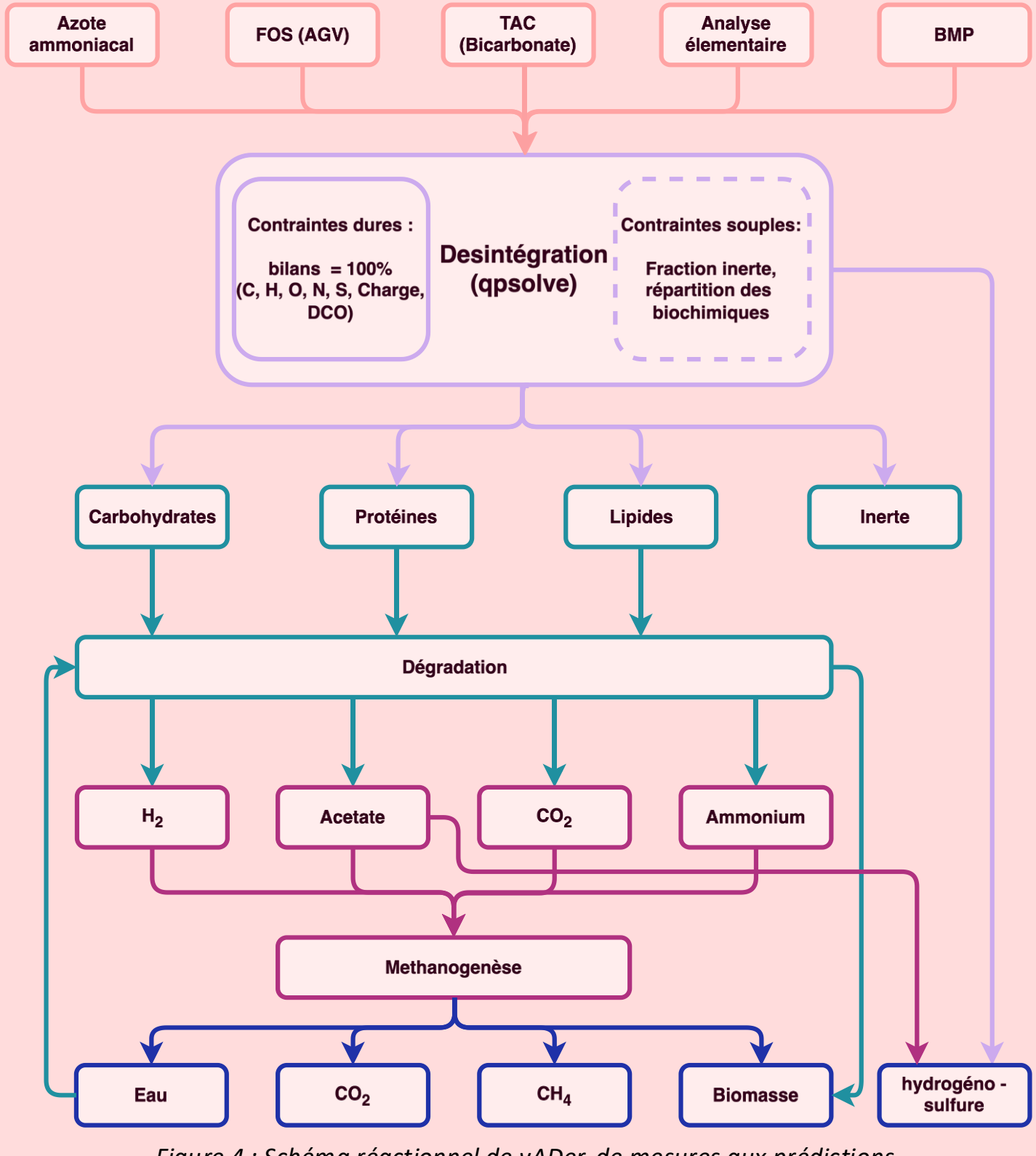


Figure 4 : Schéma réactionnel de vADer, de mesures aux prédictions

- Validation expérimentale** :
 - Avec l'**objectif de contrôler la composition du biogaz**, il est crucial que vADer la modélise avec précision. Le cadre statique est **confronté aux résultats expérimentaux** pour évaluer sa performance.
 - Configuration expérimentale** : Réacteurs batch de 5 L, sans agitation, mésophile (37 °C), débit et composition de biogaz mesurés :
 - Réacteur **paille** : 2000 g d'inoculum (140 g_{VS}) + 166 g de paille (140 g_{VS})
 - Réacteur **fumier** : 2000 g d'inoculum (140 g_{VS}) + 537 g de fumier (140 g_{VS})
 - Résultat** : Les compositions de biogaz (% méthane) modélisées et observées concordent.

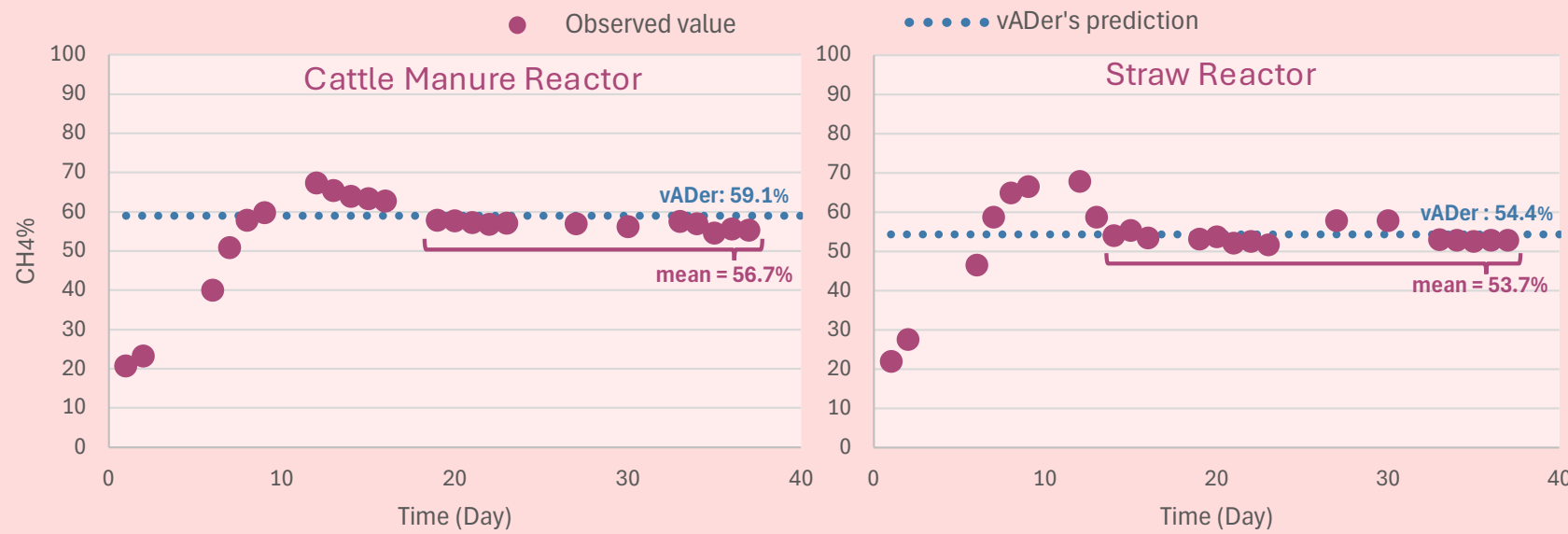


Figure 5 : Composition observée et modélisée de biogaz des réacteurs alimentés par le fumier (gauche) et paille (droite)

- Discussions** :
 - vADer remplace la caractérisation biochimique onéreuse par des mesures adaptées au terrain, le rendant apte aux applications industrielles
 - La fermeture des bilans élémentaires garantit la précision
 - Jusqu'à présent, la validation est uniquement statique : la modélisation et la validation dynamiques constituent la prochaine étape.

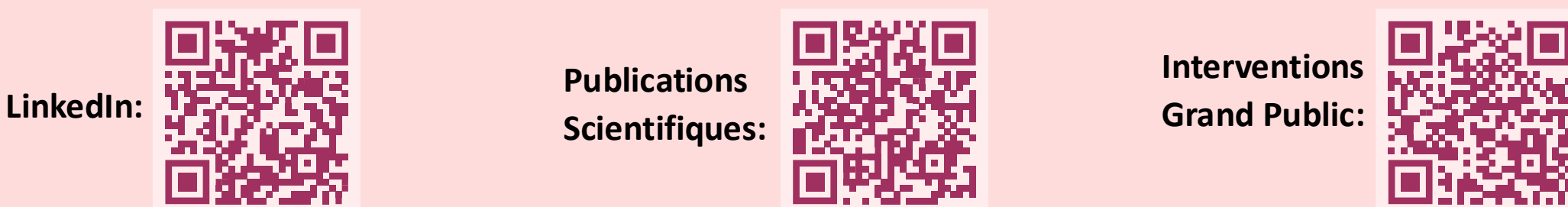
Conclusions

- Pour mieux valoriser les déchets agricoles abondants des Hauts-de-France, le projet **Interreg OBWIAN** vise à monter dans la chaîne de valeur, et cela en circuit fermé de carbone.
- Les modèles de la **littérature** à visé de contrôle-commande ne satisfont pas la fermeture des bilans.
- vADer** est un modèle statique **parcimonieux** qui boucle systématiquement les **bilans** macro-élémentaires et DCO à partir de **mesures de terrain** pratiques (BMP, FOS/TAC, NH₄⁺).
- Innovation** : fractionnement reconstruit par un **solveur QP** : guidé par la **littérature** et le **digestat de BMP**
- Validation** : prédictions du **méthane conformes aux mesures à l'échelle pilote** (batch paille et fumier)
- Perspectives** : extension aux cinétiques dynamiques, calibration et intégration pour la commande.

Références clés

- Bernard et al., Biotech & Bioengineering. 75, 424–438 (2001).
- Batstone et al, Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1)(IWA Publishing, London, 2002), Scientific and Technical Report Ser.
- Weinrich et Nelles, Bioresource Technology. 333, 125124 (2021).
- Moscoviz et Jimenez, Bioresource Technology. 337, 125402 (2021).

Échangeons !



Remerciements

