HAL
open science

Réduction de modèles de procédés biotechnologiques : Applications à l'ADM1

Sonia Hassam

To cite this version:

Sonia Hassam. Réduction de modèles de procédés biotechnologiques : Applications à l'ADM1. Automatique / Robotique. Université de Tlemcen, 2015. Français. NNT : . tel-01249831

HAL Id: tel-01249831

https://hal.science/tel-01249831v1

Submitted on 3 Jan 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Aboubekr Belkaid Tlemcen
Faculté de Technologie
Département de Génie Électrique et Électronique

Laboratoire d'Automatique de Tlemcen

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

Docteur de l'Université de Tlemcen

présentée par

Sonial Hassam

Titre :

Réduction de modèles de procédés biotechnologiques : Applications à l'ADM1

Soutenue le xx xx xxxx devant le jury :

Président	B. Moussa Boudjemaa	Professeur à l'Université de Tlemcen.
Examinateur	K. Allia	Professeur à l'USTHB Alger.
Examinateur	M. F. Khelfi	Professeur à l'Université Oran 1.
Invité	T. Sari	Professeur à l'IRSTEA Montpellier.
Directeur de thèse	J. Harmand	Directeur de recherche à l'INRA Narbonne.
Co-directeur de thèse	B. Cherki	Professeur à l'Université de Tlemcen.

A mes parents et à toute ma famille

A mon mari

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier mon encadreur Mr Jérôme HARMAND, directeur de recherche au LBE, INRA de Narbonne pour tous ses précieux conseils, sa générosité, sa disponibilité et le suivi dont il a fait preuve tout au long de cette thèse.

Un grand merci également à mon co-encadreur Mr Brahim CHERKI, professeur à l'université de Tlemcen pour son aide, ses conseils et ses qualités tant humaines que professionnelles. Un merci commun à tous les deux pour m'avoir offert l'opportunité de découvrir de nouveaux horizons ...

Je remercie Mr Boumediene MOUSSA BOUDJEMAA pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de cette thèse.

Ma reconnaissance va également aux Professeurs Mme Khadidja ALLIA de l'USTHB, Alger et Mr Mohamed Fayçal KHELFI de l'université d'Oran en leur qualité d'examinateurs de cette thèse.

Je voudrais remercier également Mr SARI Tewfik, professeur et directeur de recherche à l'IRSTEA de Montpellier pour l'intérêt qu'il a porté à cette thèse avec ses conseils et ses éclaircissements, et d'avoir accepté de faire partie du jury de cette thèse en tant qu'invité.

Mes sincères remerciements vont également aux professeurs Mr Roberto CANZIANI, Mme Elena FICARA et Mme Francesca MALPEI, de Politecnico di Milano (Italie) pour l'accueil, la générosité et la disponibilité dont ils ont fait preuve lors de mes périodes de stages de 2009, 2010 et 2011. Cela a été un honneur de les connaître. Un merci particulier à Mme Elena FICARA pour l'aide, la générosité et la disponibilité dont elle a fait preuve tout au long de l'élaboration de cette thèse. Merci également à Mr Alberto LEVA, professeur à POLIMI, Italie pour son aide et ses conseils.

Mes remerciements vont également à Mr Boumediene BENYAHIA, maître de conférence à l'université de Tlemcen pour sa disponibilité, sa générosité et les nombreux conseils qu'il m'a procuré tout au long de cette thèse.

J'adresse un grand merci également à tous mes ami(e)s et collègues de l'université de Tlemcen et plus particulièrement ceux du département d'Automatique.

Et enfin, je remercie de tout mon cœur mes chers parents pour tout ce qu'ils ont fait pour moi, pour leur soutien et leur amour. Merci à mes sœurs Leïla et Imen et à mon frère Samir pour m'avoir toujours soutenu. Merci à mon mari "Omar" pour son soutien et sa présence à mes cotés.

Résumé

Cette thèse traite de la réduction d'un modèle mathématique de bioprocédés dans le but d'obtenir un modèle de dimension réduite à partir duquel il est possible de synthétiser des régulateurs ou observateurs qui puissent garantir performance, stabilité et robustesse. Le modèle en question est un modèle de digestion anaérobie (L'ADM1) très complet et basé sur un modèle phénoménologique permettant de simuler les réacteurs anaérobies. Dans une première partie, nous donnons un aperçu général sur la modélisation de la digestion anaérobie et nous décrivons plus particulièrement l'ADM1. Nous proposons, par la suite, différentes méthodes de réduction. La première méthode nommée "Homotopie" a été choisie car considérée comme une méthode systématique pour quantifier les interactions entre les variables d'état et leurs dynamiques. Cette méthode présentant certaines limites, nous proposons, en seconde partie, une méthode basée sur les réalisations équilibrées dont l'idée clé est de négliger les états les moins commandables et observables. Bien que cette méthode procure des résultats satisfaisants, le modèle réduit obtenu est un modèle linéaire, ce qui nous amène, en dernière partie, à proposer une méthode de réduction basée sur l'association de variables qui nous permet non seulement d'obtenir un modèle réduit non linéaire mais qui, en plus, nous permet de proposer une interface entre les variables de l'ADM1 et celles du modèle réduit.

Mots clés

ADM1, AM2, AM2HN, Association de variables, Contrôle, Digestion Anaérobie, Homotopie, Modélisation dynamique, Optimisation, Réalisations équilibrées.

PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS LIÉES À LA THÈSE

PUBLICATION

S. Hassam, E. Ficara, A. Leva, J. Harmand. *A generic and systematic procedure to derive a simplified model from the anaerobic digestion model No. 1 (ADM1).* Biochemical Engineering Journal, 99 : 193 - 203, 2015. DOI :10.1016/j.bej.2015.03.007.

COMMUNICATIONS DANS DES CONFÉRENCES INTERNATIONALES

S. Hassam, B. Cherki, E. Ficara, J. Harmand. *A systematic approach to reduce complex bioprocess models for control design - Application to the Anaerobic Digestion Models No.1.* SIAM Conference on Control and its application (CT11), July 25-27, 2011, Baltimore, Maryland, USA.

E. Ficara, **S. Hassam**, A. Allegrini, A. Leva, F. Malpei. *Anaerobic Digestion Models: A comparative Study.* MATHMOD VIENNA, Minisymposium Object−Oriented Modelling: New Challenges. 7th Vienna Conference on Mathematical Modeling, February 14−17, 2012. Austria.

S. Hassam, B. Cherki, E. Ficara, J. Harmand. *Towards a systematic approach to reduce complex bioprocess models - Application to the ADM1.* The 20th Mediterranean Conference on Control and Automation, MED 2012, 3-6 July, Barcelona, Spain.

Z. Khedim, **S. Hassam**, J. Harmand, B. Boumediene. *Anaerobic digestion models for control purposes : a short survey.* World Congress on Anaerobic Digestion, AD 14th, Viña del Mar, Chile, 15-18 Nov 2015.

PRÉSENTATIONS POSTERS

S. Hassam, B. Cherki, E. Ficara, J. Harmand. *Towards a systematic approach to reduce complex bioprocess models : Application to the ADM1.* Ecole symposium "Réductions de systèmes différentiels et application - RSDA 2012" 18-22 Mars 2012 Sidi Bel Abbès - Algérie.

S. Hassam, A. Allegrini, B. Cherki, E. Ficara, J. Harmand. *Modified AM2 with the hydrolysis step and the ammonium consideration.* 13th World congress on Anaerobic Digestion. Recovering (bio) Resources for the World. June 25-28 2013. Santiago de Compostela, Spain.

Table des matières

Introduction générale **1**

1 Modélisation de la digestion anaérobie **7**

1.1 Introduction et État de l'art 8

1.2 Le modèle ADM1 10

1.3 Variables de l'ADM1 11

1.4 Description des processus biochimiques 11

1.5 Expression des processus 12

1.6 Les inhibitions 13

1.7 pH et relation acide-base 13

1.8 Les transferts liquide-gaz 14

1.9 Applications de l'ADM1 14

1.9.1 Estimation des variables internes des processus de DA 14

1.9.2 Caractérisation du substrat d'entrée 15

1.9.3 Performances du processus de co-digestion 16

1.9.4 Description de la mono-fermentation 16

1.10 Modifications de l'ADM1 16

1.10.1 Équilibre de masse et caractérisation des composés 17

1.10.2 Modélisation dynamique de l'équilibre énergétique 17

1.10.3 Modélisation de la co-digestion 17

1.10.4 Modélisation de la diversité microbienne 18

1.10.5 Caractérisation des étapes de désintégration et d'hydrolyse 18

1.10.6 Estimation des paramètres cinétiques 18

1.10.7 Modification de la cinétique d'hydrolyse 19

1.11 Analyse et extensions de l'ADM1 19

1.12 Le contrôle de la digestion anaérobie 20

1.13 Problématique de contrôle - Nécessité de réduction 21

1.14 État de l'art sur les méthodes de réduction 22

1.15 Conclusion 24

2 Réduction de l'ADM1 par la méthode d'homotopie **25**

2.1 Introduction . . . 26

2.2 Présentation de la méthode d'homotopie . . . 26

2.3 La réduction du modèle ASM1 par la méthode d'homotopie (Chachuat et al.) . . . 27

2.4 Application à l'ADM1 . . . 28

2.5 Résultats de simulation . . . 29

2.5.1 Analyse des dynamiques de l'ADM1 . . . 29

2.5.2 Réduction du modèle . . . 30

2.5.3 Évaluation des modèles réduits . . . 32

2.5.4 Discussion . . . 34

2.5.5 Limites de la méthode . . . 34

2.6 Conclusion . . . 38

3 Réduction de l'ADM1 par les réalisations équilibrées **41**

3.1 Introduction . . . 42

3.2 État de l'art sur les réalisations équilibrées des systèmes non linéaires . . . 42

3.3 Réalisation équilibrée d'un système linéaire . . . 43

3.4 Réduction de l'ADM1 . . . 45

3.4.1 Linéarisation de l'ADM1 . . . 45

3.4.2 Réalisation équilibrée du modèle linéaire de l'ADM1 . . . 45

3.4.3 La qualité de l'approximation dépend-elle du point d'équilibre du système ? . . . 50

3.5 Conclusion . . . 53

4 Réduction de l'ADM1 par association de variables **55**

4.1 Introduction . . . 56

4.2 Le modèle AM2 . . . 56

4.3 Introduction de l'étape d'hydrolyse et de la libération de l'azote ammoniacal dans l'AM2 . . . 58

4.4 Association des variables de l'ADM1 et de l'AM2HN . . . 60

4.5 Identification des paramètres de l'AM2 et l'AM2HN . . . 63

4.5.1 Jeu de données . . . 63

4.5.2 Procédure d'identification . . . 65

4.5.3 Notions sur la régression linéaire . . . 66

4.5.4 Procédure d'estimation modifiée . . . 66

4.6 Réponses dynamiques . . . 70

4.7 Robustesse de l'AM2HN . . . 74

4.8 Estimation de la sensibilité . . . 76

4.9 Conclusion . . . 76

Conclusion générale **79**

A Les équations de l'ADM1 **89**

A.1 Équations de la phase aqueuse . . . 89

A.2 Équations de la phase gazeuse . . . 91

B Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés solubles (B.1) et particulaires (B.2) **95**

C Valeurs d'entrée, conditions initiales et valeurs d'équilibre considérées dans l'ADM1 **99**

D Réalisation équilibrée de systèmes non linéaires **101**

D.1 Quelques définitions . . . 101

D.1.1 Espaces vectoriels . . . 101

D.1.2 Sous-espaces vectoriels . . . 101

D.1.3 Familles génératrices, Span . . . 102

D.1.4 Matrice de transfert et Norme infinie . . . 102

D.2 Réalisation équilibrée d'un système non linéaire . . . 102

D.2.1 Analyse par composante principale (PCA) . . . 102

D.2.2 Espace de Hilbert . . . 103

D.2.3 Espace de Hilbert à noyau reproduisant . . . 104

D.2.4 Les grammiens empiriques dans RKHS . . . 105

D.2.5 Analyse par composante principale à noyau (Kernel PCA) . . . 106

D.2.6 La réduction d'ordre de modèle dans l'application . . . 107

D.2.7 Les dynamiques du système réduit . . . 109

D.2.8 Représentation de la dynamique dans RKHS . . . 109

D.2.9 L'approximation de la Jacobienne . . . 109

D.2.10 Le système dynamique réduit . . . 110

D.2.11 Sortie du système réduit . . . 110

E Équations des modèles réduits **111**

E.1 Équations du modèle #1 . . . 111

E.2 Équations du modèle #2 . . . 112

E.3 Équations du modèle #3 . . . 113

F Valeurs des points d'équilibres obtenus pour les différents HRT **115**

Table des figures

1 Production d'énergie à partir du biogaz [107] 2

2 Étapes et population bactérienne de la digestion anaérobie 2

1.1 Processus de conversion dans la digestion anaérobie utilisés pour le modèle ADM1 (Batstone et al., [6]) 10

1.2 Étapes intracellulaires et extra-cellulaires de l'ADM1 (Batstone et al., [6]) 12

2.1 Résultats de la méthode d'homotopie sur le modèle ASM1 (B. Chachuat, [21]) 28

2.2 Comparaison de l'ADM1 et du modèle #1 (ADM1: ligne continue, modèle #1: ligne pointillée) . . 32

2.3 Comparaison de l'ADM1 et du modèle #2 (ADM1: ligne continue, modèle #2: ligne pointillée) . . 33

2.4 Comparaison de l'ADM1 et du modèle #3 (ADM1: ligne continue, modèle #3: ligne pointillée) . . 33

2.5 Simulation des variables d'état de l'ADM1 35

2.6 Trajectoire des valeurs propres, λ_1 (en rouge), λ_2 (en vert) 36

2.7 A gauche, le composé $x_1(t)$ (en rouge), sa vraie approximation (en vert) et son approximation à partir de la méthode de réduction (en jaune). A droite le composé $x_2(t)$. Ici $x_1(0) = x_2(0) = 5$. . . 36

2.8 La trajectoire des valeurs propres 37

2.9 A gauche, le composé $x_1(t)$ (en rouge), sa vraie approximation (en vert) et sa mauvaise approximation (en jaune). A droite le composé $x_2(t)$. Ici $a = \frac{-1}{5}, x_1(0) = x_2(0) = 10$. 38

3.1 Diagramme de Bode pour l'analyse de la réponse fréquentielle de l'ADM1, ($u = q_{in}$ et $h(x) = q_{gaz}$) 46

3.2 Les valeurs singulières de Hankel de l'ADM1 linéarisé 46

3.3 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit (Borne d'erreur additive) . . . 47

3.4 Valeurs singulières du modèle ADM1 avec l'erreur multiplicative 47

3.5 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit (Borne d'erreur multiplicative) 48

3.6 Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit, (entrée $u = q_{in}$ et $sortie = q_{gaz}$) 48

3.7 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7 49

3.8 Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit 49

3.9 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (HRT=10 jours) . . 51

3.10 Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (TRH=10 jours) . . 51

3.11 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (HRT=30 jours) . . 51
3.12 Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (TRH=30 jours) . . 52
3.13 Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7 (HRT=60 jours) . . 52
3.14 Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7 (TRH=60 jours) . . 52

4.1 Réponse de S_1^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés 71
4.2 Réponse de (a) S_2^* (b), X_1^* (c) X_2^* (d) C^* (e) Z^* (f) CO_2^* (g) B^* (h) pH^* (i) q_{CH4}^* (j) q_C^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés . . . 71
4.3 Réponse de S_1^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés 72
4.4 Réponse de (a) S_2^* (b) X_1^* (c) X_2^* (d) C^* (e) Z^* (f) CO_2^* (g) B^* (h) pH^* (i) q_{CH4}^* (j) q_C^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés . . . 73
4.5 Réponse de (a) S_1^* (b) S_2^* (c)X_1^* (d) X_2^* (e) C^* (f) Z^* (g) CO_2^* (h) B^* (i) pH^* (j) X_T^* (k) q_C^* (l) q_{CH4}^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés 73
4.6 Réponse de (a) S_1^* (b) S_2^* (c)X_1^* (d) X_2^* (e) C^* (f) Z^* (g) CO_2^* (h) B^* (i) pH^* (j) X_T^* (k) q_C^* (l) q_{CH4}^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés 74
4.7 Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 1 (+21.88 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés . 75
4.8 Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 2 (+27.5 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés . 75
4.9 Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 3 (+21.88 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés . 75

B.1 Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés solubles (Batstone et al., [6]) 96
B.2 Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés particulaires (Batstone et al., [6]) 97

Liste des tableaux

1.1 Aperçu des principaux modèles de digestion anaérobie 9

1.2 Description des paramètres et variables du modèle ADM1 15

1.3 L'utilisation de l'ADM1 par rapport à différent types de réacteurs 19

1.4 Modification et extension de l'ADM1 selon différents auteurs 20

2.1 Variables d'état du modèle ASM1 (Chachuat et al. [22]) 27

2.2 Association valeurs propres (partie réelle) et constante de temps 29

3.1 Bornes d'erreur 48

4.1 Variables de l'AM2 et l'AM2HN et leur correspondance proposée avec les variables de l'ADM1 . . . 62

4.2 Jeu de données à l'équilibre généré par la simulation de l'ADM1 (digestion de boues activées) et utilisé pour étalonner le modèle original AM2 et la version améliorée AM2HN 64

4.3 Comparaison entre les coefficients de rendement de l'AM2, l'AM2HN et les valeurs moyennes de l'ADM1 69

4.4 Comparaison entre les paramètres cinétiques de l'AM2, l'AM2HN et les valeurs moyennes de l'ADM1 70

4.5 Résultats de l'étude de sensibilité de l'ADM1 et de l'AM2HN par rapport au paramètre d'hydrolyse k_{hyd} 76

C.1 Valeurs d'entrée ($q_{in} = 170m^3/jour$, Rosen and Jeppsson, [87]), conditions initiales et valeurs d'équilibre considérées dans l'ADM1 99

Glossaire des notations

AA	Amino acids
$ADM1$	Anaerobic Digestion Model $N°1$
AGV	Acides Gras Volatiles
$AGVT$	Acides Gras Volatiles Totales
$AM2$	Anaerobic Model $N°2$
$ASBR$	Anaerobic Sequencing Batch Reactor
$ASM1$	Activated Sludge Model $N°1$
B	Concentration du bicarbonate ($mmolL^{-1}$)
BA	Boues Activées
BMP	Biochemical Methane Potential
C	Concentration du carbone total inorganique ($mmolL^{-1}$)
CO_2	Concentration du dioxyde de carbone ($mmolL^{-1}$)
$CSTR$	Completely Stirred Tank Reactor
D	Taux de dilution ($jour^{-1}$)
DA	Digestion Anaérobie
$dynS_i$	variable d'état dynamique du composant S_i
DCO	Demande Chimique en Oxygène
$E.U$	Eaux Usées
EDO	Équation Différentielle Ordinaire
HCO_3	Concentration du bicarbonate ($molL^{-1}$)
k_1	Rendement de dégradation de S_1 par X_1
k_2	Rendement de production de S_2 par X_1 à partir de S_1
k_3	Rendement de dégradation de S_2 par X_2
k_4	Rendement de production de CO_2 par X_1 à partir de S_1
k_5	Rendement de production de CO_2 par X_2 à partir de S_2
k_6	Rendement de production de CH_4 par X_2 à partir de S_2
K_b	Constante d'équilibre ($molL^{-1}$)
K_H	Constante de Henry ($mmolL^{-1}atm^{-1}$)
k_{La}	Coefficient de transfert gaz-liquide ($jour^{-1}$)
K_I	Constante d'inhibition ($mmolL^{-1}$)
K_{S_1}	Constante de demi-saturation (gL^{-1})
K_{S_2}	Constante de demi-saturation ($mmolL^{-1}$)
$LCFA$	Long Chain Fatty Acids
MS	Mono-saccharide

N	Concentration de l'azote ($mmolL^{-1}$)
N_{bac}	Teneur en azote des bactéries ($kmoleN(kgCOD)^{-1}$)
N_{S_1}	Teneur en azote du substrat S_1 ($kmoleN(kgCOD)^{-1}$)
NH_3	Concentration de l'ammoniac libre ($molL^{-1}$)
NH_4^+	Concentration d'ammonium ($molL^{-1}$)
$OFMSW$	Organic Fraction of Municipal Solid Waste
$OMSW$	Olive Mill Solid Waste
OMW	Olive Mill Wastewater
P_C	Pression partielle du CO_2 (atm)
PID	Proportionnel Intégral Dérivé
PSD	Particle Size Distribution
q_C	Débit du gaz carbonique ($mmolL^{-1}d^{-1}$)
q_{in}	Débit d'entrée et de sortie (m^3jour^{-1})
q_M	Débit du méthane ($mmolL^{-1}d^{-1}$)
$RKHS$	Reproducing Kernel Hilbert Space
RTM	Ration Totale Mélangé
S_1	Concentration du substrat organique (gL^{-1})
S_2	Concentration des acides gras volatiles ($mmolL^{-1}$)
$\bar{S}_i$	Valeur à l'équilibre de la concentration du composé S_i
SV	Solides Volatiles
TRH	Temps de rétention hydraulique
TRS	Temps de rétention solide
$UASB$	Upflow Anaerobic Sludge Bed
$UASFB$	Upflow Anaerobic Sludge Filter Bed
V_{liq}	Volume liquide du réacteur (m^3)
WAS	Waste Activated Sludge
X_1	Concentration des bactéries acidogènes (gL^{-1})
X_2	Concentration des bactéries méthanogènes (gL^{-1})
Z	Alcalinité ($mmolL^{-1}$)
μ_1	Taux de croissance spécifique des bactéries acidogènes (d^{-1})
$\mu_{1,max}$	Taux de croissance maximum des bactéries acidogènes (d^{-1})
μ_2	Taux de croissance spécifique des bactéries méthanogènes (d^{-1})
$\mu_{2,max}$	Taux de croissance maximum des bactéries méthanogènes (d^{-1})
ρ_j	Taux de cinétique du processus j ($kgCODm^{-3}d^{-1}$ or $kmolm^{-3}d^{-1}$)

Introduction générale

Un réchauffement climatique probablement provoqué par l'accumulation de gaz à effet de serre générés par les activités humaines est déjà en cours. Ses conséquences sont une élévation du niveau de la mer, une amplification des phénomènes météorologiques extrêmes, des bouleversements des conditions de vie, ...
L'union européenne considère qu'il faut œuvrer pour limiter le réchauffement moyen de la Terre en deçà de $2°C$. Dans le cadre du document final issu de la conférence de Copenhague en 2009, tous les principaux pays du monde se sont mis d'accord sur cet objectif. Cela implique que les pays développés devraient, d'ici 2050, réduire collectivement leurs émissions de gaz à effet de serre de 80 à 95% par rapport aux niveaux de 1990 ([30]).
Un autre point important réside dans la prise de conscience des citoyens et des institutions de la problématique de l'environnement, en particulier envers la protection et la gestion des ressources hydriques nationales. Étant donné que les sociétés modernes doivent faire face à de nouveaux challenges, une utilisation plus efficace des ressources s'impose donc.
Dans ce contexte, le développement de technologies innovantes et productives est de rigueur. De nos jours, la technologie anaérobie est considérée comme une technologie évoluée qui n'est pas seulement appliquée pour traiter les déchets domestiques et industriels, mais également pour les valoriser. De plus, cette technologie apparait comme une nécessité vu les différents avantages qu'elle présente, entre autres, la production d'énergie renouvelable et la réduction des gaz à effet de serre puisqu'elle permet la production d'un biogaz riche en méthane et utilisable comme source d'énergie. En effet, le processus de digestion anaérobie permet aujourd'hui d'abattre les teneurs en matière organique de nombreux types de sous-produits et déchets biodégradables tels que les déchets organiques d'origine municipale ou industrielle, les effluents agroalimentaires et les déjections d'élevage ([97]). Selon les pays, certaines applications sont largement développées et l'offre industrielle et commerciale est solidement établie pour :

- la production de chaleur sous forme d'eau chaude ou de vapeur,
- la production d'air chaud pour le séchage,
- la production d'électricité par moteur à gaz, turbine à vapeur, turbine à gaz,
- la production combinée d'électricité et de chaleur par co-génération ([62]).

La digestion anaérobie

La digestion anaérobie est la décomposition de matière organique en absence d'oxygène, par l'action de micro-organismes anaérobies. Les micro-organismes métabolisent la matière organique en absence d'oxygène et produisent

un biogaz composé essentiellement de méthane (CH_4) et de gaz carbonique (CO_2) (Figure 1).

La digestion anaérobie se déroule en quatre étapes successives :

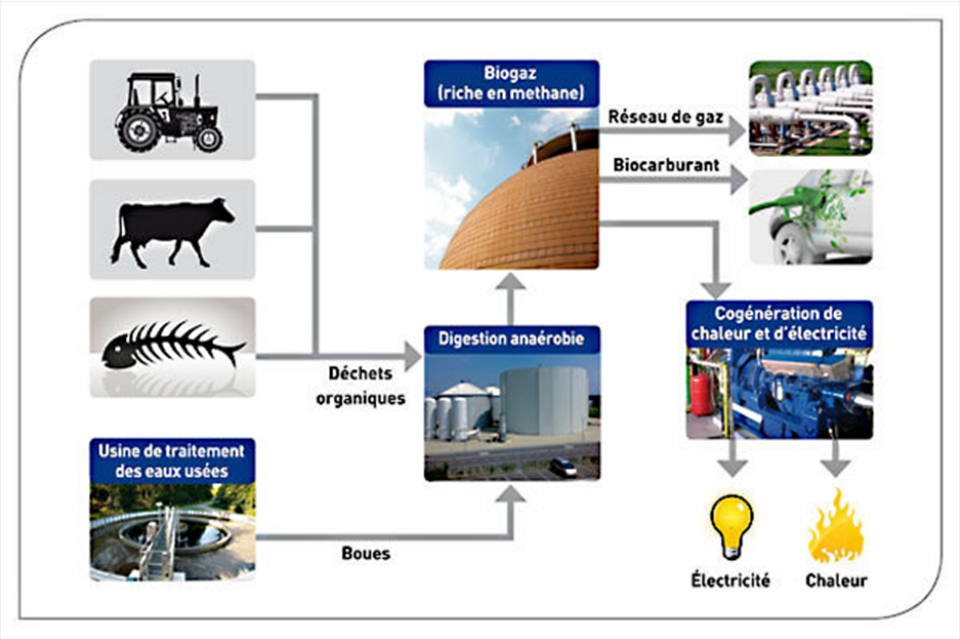

FIGURE 1 – Production d'énergie à partir du biogaz [107]

- l'hydrolyse,
- l'acidogenèse,
- l'acétogenèse,
- la méthanogenèse.

Chacune des étapes est développée par une population bactérienne différente, à savoir, les hydrolitiques, les acidogènes, les acétogènes et les méthanogènes. En biotechnologie, ces micro-organismes sont aussi appelés "biomasses" (Figure 2). Le digesteur, encore appelé fermenteur ou bioréacteur-anaérobie, est généralement constitué d'une cuve

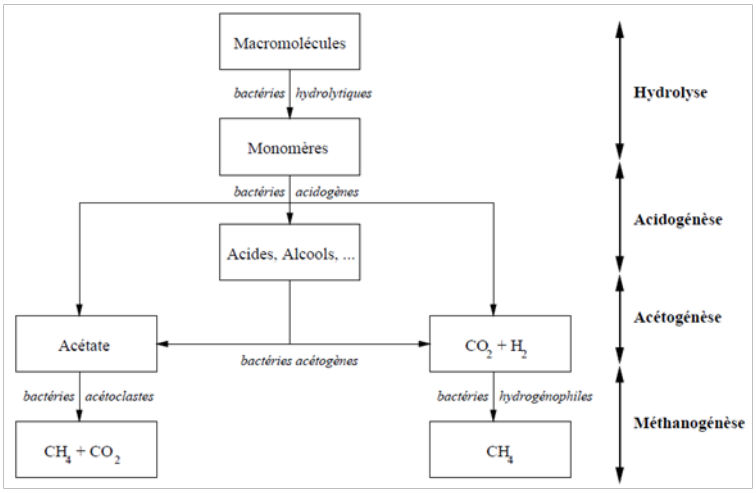

FIGURE 2 – Étapes et population bactérienne de la digestion anaérobie

fermée, étanche à l'air et de préférence isolée thermiquement de l'extérieur dans laquelle les microorganismes se côtoient pour dégrader biologiquement les effluents organiques et produire du biogaz. Le choix du digesteur varie en fonction du type de déchets à traiter et de l'application visée.

Dans un bioréacteur infiniment mélangé, quel que soit le mode de fonctionnement :

- batch (alimenté au début de la réaction),
- fed batch (alimenté tout au long de la réaction mais sans soutirage), ou
- continu (alimenté en permanence),

le comportement dynamique des différents composants de la réaction biologique découle directement de l'expression du bilan de matière, qui traduit que la variation de la quantité d'un composé est égale à la somme de ce qui est produit ou apporté, diminué de ce qui est consommé ou soutiré (Bernard, [13]). Cette approche conduit à des équations qui décrivent de manière équivalente la répartition de la matière dans le bioréacteur (Bastin et Dochain, [4]). C'est ce qu'on appelle un "Modèle".

Sur la notion de modèle

L'un des objectifs de disposer d'un modèle peut être de souhaiter simuler le procédé. Cela nécessite d'identifier ses paramètres à partir de données recueillis sur le système réel. Dans ce cas, les modèles sont confrontés au réel, d'une manière quantitative à l'aide de simulations, ou alors de manière qualitative en élaborant la théorie du modèle pour en étudier les propriétés.

Ainsi, la modélisation d'un procédé est une représentation virtuelle des processus biologiques, physiques et chimiques ayant lieu dans un bioréacteur. A partir de cette représentation, il est possible de simuler rapidement et à moindre coût, différents scénarios de traitement en tenant compte et en évaluant l'effet de variations quantitatives et qualitatives sur le fonctionnement. Cependant, cela n'est pas une tâche facile sachant que les modèles en biologie dépendent de lois empiriques. C'est pour cela que la qualité d'un modèle ainsi que sa structure doivent correspondre aux objectifs pour lesquels le modèle a été conçu. De plus, la mise au point d'un modèle doit s'accommoder des données disponibles, par exemple, un modèle complexe impliquant un grand nombre de paramètres exigera un grand jeu de données pour être identifié et validé.

Les modèles utilisés dans le cadre de l'automatique sont construits pour être intégrés dans un algorithme dont l'objectif peut être de développer une loi de commande pour réguler le système (contrôleur), d'estimer les variables du système qui ne sont pas mesurées directement (observateur), d'estimer un des paramètres du procédé (identification), ou encore de détecter et diagnostiquer une anomalie dans le fonctionnement du procédé (détection de panne et diagnostic) (Bernard, [13]).

D'autres objectifs comme l'optimisation et le contrôle de la digestion anaérobie sont d'importantes finalités qui peuvent être atteintes en utilisant des modèles appropriés.

Il faut préciser que c'est l'actuelle modélisation des procédés de valorisation de la biomasse solide qui a amené un important regain d'intérêt de la DA depuis environ l'an 2000. Du coup, alors que les premiers modèles négligeaient l'hydrolyse, les travaux les plus récents en modélisation de la DA sont réalisés en supposant que l'hydrolyse est l'étape limitante.

Ainsi, la modélisation apparait comme le mot d'ordre pour développer, appliquer et valider le suivi en ligne de la digestion anaérobie.

Pourquoi réduire ?

La réduction de modèle n'est pas un but en soit. Sans préciser le but de la réduction, la réduction de modèle n'a pas de sens. Dans cette thèse, nous évaluons la qualité de techniques de réduction de modèles afin que les modèles réduits obtenus puissent être utilisés pour la synthèse de contrôleurs, sans toutefois aller jusqu'à cette étape dans le manuscrit.

Dans la théorie des systèmes, on associe la réduction de modèle avec la réduction d'ordre de modèle, ce qui implique une réduction du nombre des équations différentielles.

Un modèle n'est pas caractérisé seulement par le nombre de ses équations différentielles et algébriques, mais également par ses propriétés structurelles telles que la commandabilité-observabilité. Les échelles de temps, la non linéarité et les états d'équilibre sont également d'importantes propriétés à considérer lors de l'évaluation des techniques de réduction.

L'utilisation de modèles complexes tels que l'ADM1 (que nous verrons en détail dans le chapitre suivant) peut présenter des difficultés dans la détermination des nombreux paramètres du modèle, et la manipulation d'un grand nombre d'équations peut limiter l'applicabilité pour l'analyse dynamique, la simulation et le contrôle du processus. Autrement dit, nous avons besoin de modèles simples qui décrivent d'une manière adéquate les dynamiques des variables. Une telle réduction est généralement possible vu que (a) certains processus peuvent ne pas avoir ou avoir un faible impact sur les variables mesurées du processus en question, i.e. elles peuvent être non observables ou bien négligeables, (b) certains processus peuvent être regroupés sans perte d'information, (c) certains processus exhibent des transitoires plus rapides sur une échelle de temps donnée que d'autres et, par conséquent, peuvent être considérés comme subissant des changements instantanés. De plus, la conception d'un contrôleur basé sur un modèle réduit entraînera une structure plus simple du contrôleur mais qui doit conserver les caractéristiques importantes du processus.

Cette thèse est composée de quatre chapitres organisés comme suit :

- Dans le chapitre 1, nous donnons un aperçu des principaux modèles de la digestion anaérobie. La présentation d'un de ces modèle (l'ADM1) ainsi que ses différentes applications et modifications font également objet de ce chapitre.
- Le chapitre 2 est dédié à la réduction de l'ADM1 par la méthode d'homotopie. Cette méthode est présentée puis appliquée à l'ADM1. Une partie de ce chapitre est dédié à l'application de la méthode d'homotopie pour réduire l'ASM1.
- La réduction de l'ADM1 par les réalisations équilibrées fait l'objet du chapitre 3. Un état de l'art sur les réalisations équilibrées des systèmes non linéaires est également présenté dans ce chapitre.
- Dans le quatrième et dernier chapitre, nous abordons la réduction de l'ADM1 par association de variables. Nous présentons tout d'abord le modèle AM2 puis nous introduisons l'étape d'hydrolyse et la libération de l'azote ammoniacal dans l'AM2 avant de passer à l'association des variables de l'ADM1 et du nouveau modèle

AM2HN.

A la fin de la thèse, une conclusion générale et des perspectives sont dressées. Les principaux résultats de la thèse sont mentionnés et sont proposés un certain nombre de voies pour des futurs travaux de recherche.

Chapitre 1

Modélisation de la digestion anaérobie

Guide de lecture :

Le premier objet de ce chapitre est de passer en revue l'historique de la modélisation de la digestion anaérobie principalement en fonction des cinétiques utilisées et des processus mis en jeu. Par la suite, nous nous intéressons plus particulièrement à un modèle bien connu de digestion anaérobie : l'ADM1. Nous décrivons en détail les processus impliqués dans ce modèle, les équations dynamiques, pour finir avec différentes modifications qui ont été apportées à ce modèle au cours des années souvent dictées par des applications spécifiques de la digestion anaérobie.

1.1 Introduction et État de l'art

La mise en œuvre du processus complexe de la digestion anaérobie présente souvent des problèmes de stabilité qui peuvent être prévenus à travers des stratégies de contrôle appropriées. Ainsi que souligné dans l'introduction générale, dans le but de pouvoir concevoir et faire fonctionner efficacement des systèmes de digestion anaérobie, il est nécessaire de développer des modèles mathématiques.

Au cours des années, différents modèles ont été développés pour décrire le processus de la digestion anaérobie. Les premiers modèles proposés dans les années 60 ne considéraient qu'une seule population microbienne. Par la suite, ces modèles ont été améliorés et détaillés dans le but de décrire au mieux la complexité du processus.

Parmi les nombreux modèles de digestion anaérobie présents dans la littérature, certains sont des modèles simples mais sans être très précis dans la description du comportement du digesteur anaérobie. D'autres, plus complexes, comportent diverses cinétiques, groupes bactériens, processus, étapes limitantes et inhibitions.

Le premier modèle mathématique de bioréacteurs anaérobies a été proposé dans les années 1970 par Graef et Andrews ([48]). Il comprenait un processus de méthanogenèse avec une cinétique de Andrews, la méthanogenèse étant considérée comme l'étape limitante. Dans le Tableau 1.1 nous présentons un aperçu de l'évolution de la modélisation au cours des années en fonction, entre autres, des processus et phénomènes d'inhibitions pris en compte. Il est clair qu'avec le temps les objectifs de la modélisation de la digestion anaérobie ont changé et de ce fait les modèles ont évolué pour répondre à des exigences bien précises que nous verrons en détail dans la suite de ce chapitre.

Table 1.1 – Aperçu des principaux modèles de digestion anaérobie

Modèles	Cinétiques	Processus	Étapes limitantes
Kleinstruer et al. ([58])	Andrews	acétogenèse, méthanogenèse	méthanogenèse
Mosey ([74])	Monod	acétogenèse, méthanogenèse	acitogenèse
Moletta et al. ([72])	Andrews	acétogenèse, méthanogenèse	méthanogenèse
Smith et al. ([98])	premier ordre	hydrolyse, acidogenèse	méthanogenèse
Bryers ([19])	premier ordre, Monod	hydrolyse, acidogenèse, méthanogenèse	acitogenèse
Costello ([25])	Monod	acidogenèse, méthanogenèse	acétogenèse
Siegrist et al. ([95])	premier ordre, Monod	hydrolyse, fermentation, oxydation, conversion	acétogenèse
Kiely et al. ([56])	Monod	hydrolyse/acidogenèse, méthanogenèse acétoclaste	
Lokshina et Vavilin ([63])	Andrews	dégradation du propionate et acétate	
Bernard et al. ([12])	Monod, Haldane	acidogenèse, méthanogenèse	méthanogenèse
Batstone et al. ([6])	premier ordre, Monod	désintégration, hydrolyse, acidogenèse, acétogenèse, méthanogenèse	hydrolyse
Siegrist et al. ([96])	mathématique, Monod	hydrolyse, extraction du biogaz, fermentation, oxydation, méthanogenèse	
Sötemann et al. ([99])	premier ordre, Monod, Contois	hydrolyse, acidogenèse, acétogenèse, méthanogenèse	hydrolyse
Pontes et Pinto ([81])	Monod	acidogenèse, acétogenèse, méthanogenèse	hydrolyse
Nopharatana et al. ([78])	Contois	hydrolyse, acidogenèse, méthanogenèse	hydrolyse

1.2 Le modèle ADM1

L'ADM1, pour Anaerobic Digestion Model No 01, a été développé par un groupe de travail de l'IWA (International Water Association) en 2002 (Batstone et al., [6]). La *DCO*, communément utilisée pour caractériser les composés organiques dans les eaux usées, est considérée comme étant l'unité de la plupart des modèles décrivant les processus de traitement des eaux usées. L'intérêt de l'ADM1 réside dans le fait qu'il repose sur le fractionnement de la DCO ce qui permet de faire facilement des bilans. De plus, les trois phases (solide, liquide et gazeuse) sont modélisées (Figure 1.1).

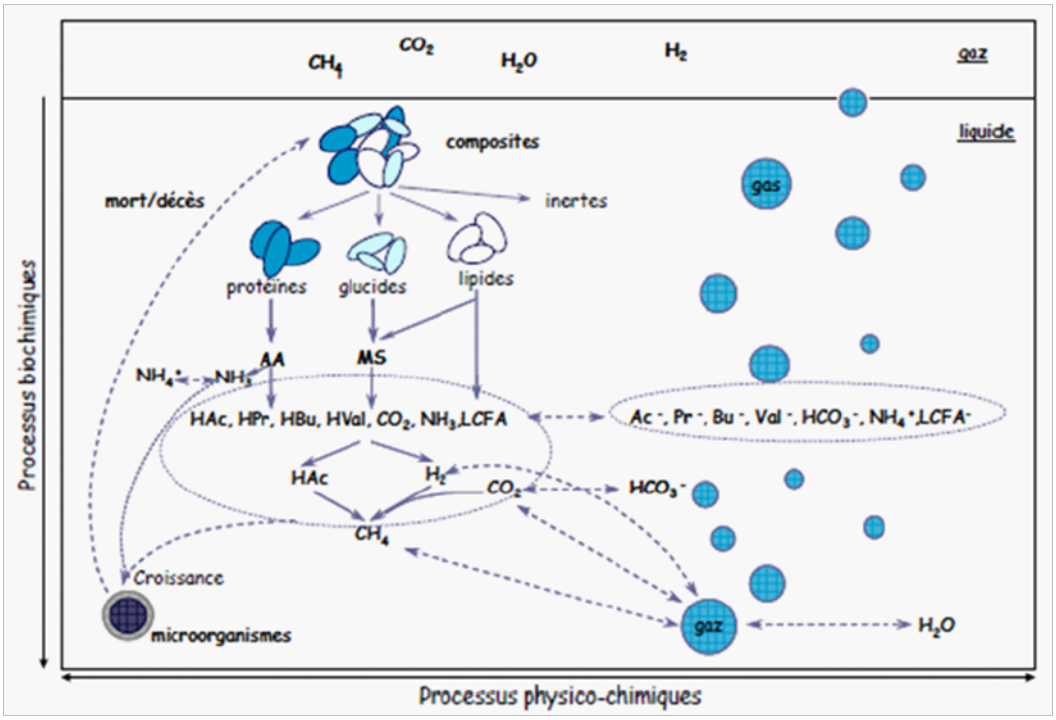

FIGURE 1.1 – Processus de conversion dans la digestion anaérobie utilisés pour le modèle ADM1 (Batstone et al., [6])

Dans sa version de base, ce modèle décrit 19 processus biochimiques, 3 processus cinétiques de transfert gaz-liquide et 7 populations bactériennes différentes, dont deux biomasses pour la dégradation des sucres solubles et des acides aminés, trois pour le propionate, le butyrate et valerate et les acides gras longues chaines et enfin deux biomasses pour l'hydrogène et l'acétate dans la phase de méthanogénèse.

L'ADM1 est actuellement le modèle le plus complet pour décrire le processus de la digestion anaérobie. En effet, très utile pour le « benchmarking », il a été largement utilisé dans des applications académiques et pratiques. Il a été testé avec succès sur divers systèmes allant des réacteurs UASB thermophiles à forts rendements à l'échelle laboratoire, à la digestion de boues à pleine échelle (Fezzani et al., [34], Zaher et al., [114]). Ce modèle a été conçu comme une base à partir de laquelle de nombreuses évolutions sont possibles comme dans (Batstone et al., [7]).

Dans la littérature on distingue 3 versions principales de l'ADM1 : (i) la description standard, donnée par le groupe de travail de l'IWA pour le modèle mathématique des processus de la digestion anaérobie (Batstone et al., [6]), (ii) la version COST (Rosen et Jeppsson, [87], Rosen et al., [88]) et (iii) La version CEIT (Université de Navarre) adaptée pour le « plant-wide modelling » (PWM), i.e. ADM1-PWM (De gracia et al., [47], De gracia et al., [46]). La différence entre ces versions de l'ADM1 réside principalement dans les équilibres de masse du modèle : dans sa

version originale, le modèle possède un équilibre de masse complet pour la DCO. Dans Rosen et Jeppsson ([87]), l'utilisation des paramètres par défaut mène vers un déséquilibre de C et de N inorganiques ce qui peut donner de fausses prédictions de la composition du biogaz. Cependant, cette différence n'est pas décrite dans les équations et dans la version COST, les coefficients stoichiométriques, les équations de la dégradation de la biomasse et la composition des paramètres sont ajustés en conséquence pour équilibrer la DCO, C et N. Dans la version ADM1-PWM ont été introduite 6 équations de conservation pour les éléments et charges C, H, N, O et P pour chaque processus. Cette version considère également le processus de dégradation de la biomasse distincte du processus de dégradation des substrats particulaires avec ses propres coefficients stoichiométriques. De plus, l'évaporation de l'eau est incluse dans le modèle.

1.3 Variables de l'ADM1

Les variables de l'ADM1 incluent des composés solubles et particulaires. Toutes les concentrations des composés organiques ainsi que de l'hydrogène moléculaire et des biomasses sont exprimées en DCO. Les composés azotés et carbonés inorganiques sont en moles. Ces unités ont été retenues car elles permettent d'écrire des bilans en termes de transfert d'électrons et de degré d'oxydation du carbone. De plus, elles permettent une conversion relativement aisée entre le modèle ADM1 et le modèle ASM1.

Les composés sont fractionnés selon leur rôle dans la croissance de la biomasse :

- Les fractions inertes (indice I), apportées par l'influent ou issu de la lyse bactérienne et de l'hydrolyse des molécules complexes, ne sont pas dégradables et ne participent donc pas à la croissance. Les composés inertes solubles (S_I) se comportent comme des traceurs dans la station alors que les composés particulaires inertes (X_I) sont piégés dans la boue.
- Les fractions dégradables sont des substrats utilisés pour la croissance bactérienne. On distingue deux catégories (solubles et particulaires). Les composés solubles sont ceux qui passent au travers de la paroi cellulaire de la biomasse et immédiatement utilisés. Ils sont représentés par S. Les composés particulaires représentent les biomasses et les composés incapables de traverser la paroi bactérienne et devant subir une étape d'hydrolyse limitante. Ils sont représentés par X.

1.4 Description des processus biochimiques

Le modèle ADM1 inclut les étapes extracellulaires de désintégration et d'hydrolyse et les trois principales étapes intracellulaires d'acidogénèse, d'acétogénèse et de méthanogénèse (Figure 1.2).

La désintégration et l'hydrolyse

La désintégration et l'hydrolyse sont des processus biologiques extracellulaires. Ils permettent, via une action enzymatique, la solubilisation des molécules complexes en leurs monomères utilisables par la biomasse. La désintégration convertit le substrat particulaire composite en inertes, carbohydrates particulaires, protéines et lipides. L'hydrolyse convertit les carbohydrates particulaires, protéines et lipides en sucres simples (MS), acides aminés (AA) et en

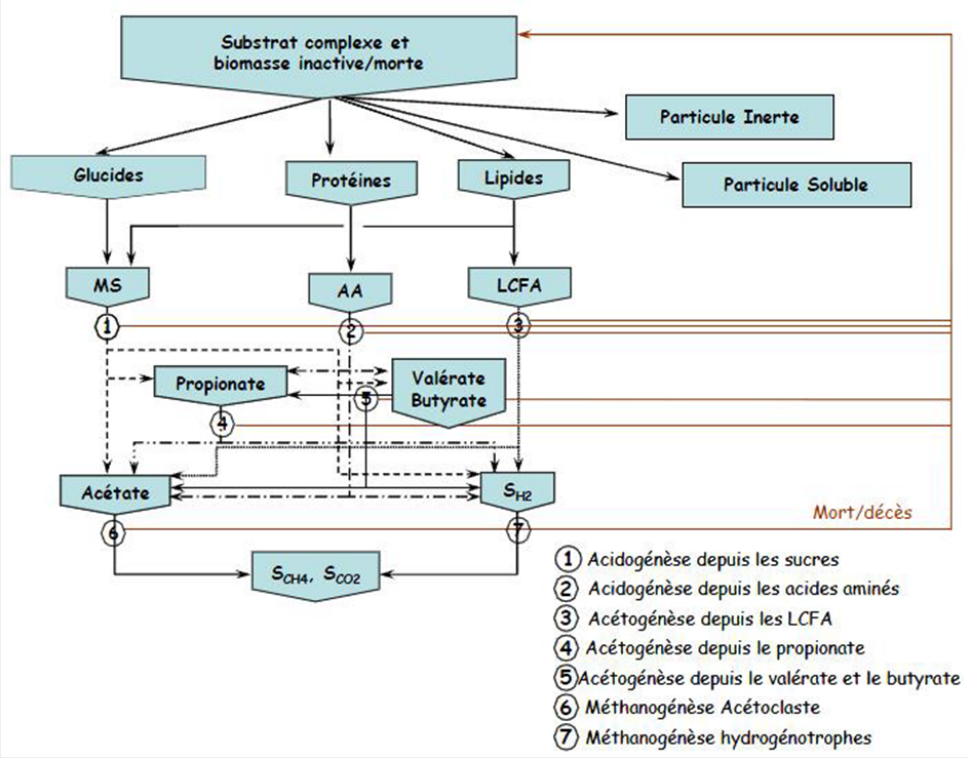

FIGURE 1.2 – Étapes intracellulaires et extra-cellulaires de l'ADM1 (Batstone et al., [6])

acides gras longues chaînes (LCFA). Ces deux processus sont représentés par des cinétiques du premier ordre.

L'acidogénèse

L'acidogenèse ou fermentation est généralement définie comme la production biologique d'acides en anaérobiose et sans donneur ou accepteur d'électrons externes. Cette réaction prend en compte la dégradation des sucres solubles et des acides aminés par deux biomasses différentes.

L'acétogenèse

La dégradation des acides gras volatils et longues chaînes se fait par oxydation. C'est l'étape d'acétogenèse qui conduit à la production d'acétate et d'hydrogène. Cependant, la production d'hydrogène doit être maintenue à un niveau de faible concentration afin de garder la réaction thermodynamiquement possible. L'hydrogène est utilisé par la biomasse méthanogène.

Le modèle considère trois groupes d'acides gras différents : le propionate, le butyrate et valérate et les acides gras longues chaînes.

La méthanogenèse

Le modèle considère deux voies de méthanogenèse différentes : l'une à partir de l'hydrogène, l'autre à partir de l'acétate. Deux biomasses différentes sont aussi considérées.

1.5 Expression des processus

Les étapes extra-cellulaires sont identifiées comme des cinétiques du premier ordre. Les étapes intracellulaires sont décrites selon trois processus : croissance/consommation et décès. Les cinétiques de décès de la biomasse sont du premier ordre. La consommation du substrat est une équation du type Monod, en relation avec la croissance

de la biomasse via le rendement de cette dernière pour le substrat considéré.

L'ensemble des processus est alors exprimé sous forme de matrice, dite matrice de Gujer [50], comportant une ligne par processus et une colonne par composé, représentée dans les Figures B.1 et B.2 (voir Annexe B) et dans le même format que les modèles ASM.

Le modèle comporte ainsi 24 composés et 19 processus nécessitant l'utilisation de 55 paramètres parmi lesquels des constantes de demi−saturation (K_S), des rendements de consommation/production (k_m), des constantes d'inhibition (K_I) et des taux de mortalité. Des constantes d'état sont également utilisées afin de retranscrire les dissociations acide−base et les transferts gaz−liquide.

1.6 Les inhibitions

Différentes inhibitions sont prises en compte dans le modèle afin de considérer l'influence du pH, de l'hydrogène, de l'ammoniaque et de l'azote inorganique. Les relations exprimant ces différentes inhibitions sont reportées dans l'Annexe A.

1.7 pH et relation acide-base

La détermination du pH dans le modèle se fait par la résolution de l'équation de l'équilibre des charges :

$$\sum S_{C^+} = \sum S_{A^-} \tag{1.1}$$

ou

$$S_{cat} + S_{NH4^+} + S_{H^+} - S_{HCO3^-} - \frac{S_{ac^-}}{64} - \frac{S_{pro^-}}{112} - \frac{S_{bu^-}}{160} - \frac{S_{va^-}}{208} - S_{OH^-} - S_{an} = 0 \tag{1.2}$$

Avec

$$S_{OH^-} - \frac{K_w}{S_{H^+}} = 0 \tag{1.3}$$

on a

$$S_{H^+} - \frac{K_w}{S_{H^+}} = S_{an} + S_{HCO3^-} + \frac{S_{ac^-}}{64} + \frac{S_{pro^-}}{112} + \frac{S_{bu^-}}{160} + \frac{S_{va^-}}{208} - S_{cat} - S_{NH4^+} = \theta \tag{1.4}$$

ou encore

$$S_{H^+}^2 - S_{H^+}.\theta - K_W = 0 \tag{1.5}$$

soit

$$S_{H^+} = \frac{-\theta + \sqrt{\theta^2 - 4.K_W}}{2} \tag{1.6}$$

La racine négative de l'équation (1.5) n'est évidement pas une solution valide, et donc seule la racine positive est prise en compte. Le pH est alors donné par l'équation :

$$pH = -log_{10}(S_{H^+}) \tag{1.7}$$

1.8 Les transferts liquide-gaz

Les phases gazeuse et liquide dans le réacteur sont en équilibre entre elles via le transfert à l'interface. Cet équilibre est décrit par la loi de Henry :

$$K_H.p_{gaz,i} - S_{liq,i} = 0 \tag{1.8}$$

Il est alors possible de déterminer le taux de transfert massique spécifique d'un gaz i à partir de la relation :

$$\rho_{T,i} = k_{La}.(S_{liq,i} - K_H.p_{gaz,i}) \tag{1.9}$$

Comme cela a été cité dans le chapitre "Introduction", plusieurs versions de l'ADM1 existent dans la littérature. Pour nos travaux, nous avons fait appel à la version de l'ADM1 de Rosen et Jeppsson, [88]. Dans le Tableau 1.2, sont résumés les descriptions des différents paramètres, coefficients et variables utilisés ainsi que leurs unités. Les équations de l'ADM1 se trouvent en Annexe A.

1.9 Applications de l'ADM1

Dans la littérature, le modèle ADM1 a été largement appliqué et a prouvé son efficacité dans plusieurs travaux. Ces derniers peuvent être classés dans les domaines suivants :

1.9.1 Estimation des variables internes des processus de DA

Dans les travaux de Gaida et al. [41], les auteurs ont utilisé l'ADM1 pour estimer les états internes de la DA. Les auteurs ont souligné l'importance de l'optimisation du fonctionnement d'une installation de biogaz à grande échelle pour faire de la biomasse une source compétitive d'énergie renouvelable.
La qualité des prédictions du modèle dépend fortement de l'identification des paramètres cinétiques, dont l'estimation est généralement faite manuellement par comparaison visuelle des résultats expérimentaux (Boubaker et al. [16]). Dans ce sens, un exemple d'étalonnage de l'ADM1 se trouve dans les travaux de Girault et al. [45]. Les auteurs ont mis au point une procédure d'étalonnage basée sur des tests expérimentaux pour traduire de manière

Table 1.2 – Description des paramètres et variables du modèle ADM1

Symbole	Description	Unité
C_i	Teneur en carbone du composant i	$kmoleC/kgDCO$
N_i	Teneur en azote du composant i	$kmoleN/kgDCO$
$f_{produit,substrat}$	Rendement du produit sur le substrat	$kgDCO/kgDCO$
K_H	Coefficient de la loi de Henry	M/bar
R	Constante des gaz ($8.3145.10^{-2}$)	$bar/M/K$
$k_{A,Bi}$	Paramètre cinétique acide-base	j^{-1}
k_{dec}	Taux de mortalité	j^{-1}
$I_{inhibiteur,processus}$	Fonction d'inhibition	
k_{La}	Coefficient de transfert gaz-liquide	j^{-1}
$k_{m,processus}$	Taux de croissance maximum	$kgDCO_S/kgDCO_X/d$
$K_{s,processus}$	Coefficient de demi-saturation	$kgDCO_S/m^3$
ρ_j	Cinétique du processus j	$kgDCO_S/m^3/j$
$Y_{substrat}$	Rendement de la biomasse sur le substrat	$kgDCO_X/kgDCO_S$
$p_{gaz,i}$	Pression du gaz i	Bar
P_{gaz}	Pression du gaz total	Bar
S_i	Composé soluble i	$kgDCO/m^3$
X_i	Composé particulaire i	$kgDCO/m^3$
T	Température	K
V	Volume	m^3

satisfaisante les dynamiques de dégradation des différents substrats considérés. L'étalonnage des paramètres sélectionnés a été effectué en utilisant simultanément les résultats issus d'un digesteur opérant d'une manière continue et les résultats de tests batch réalisés avec la boue issue du digesteur et l'addition de substrats spécifiques.

Dans Souza et al. [100], les auteurs ont utilisé des tests de potentiel méthane (Biochemical Methane Potential (BMP)) comme une source de données pour l'étalonnage de l'ADM1, afin d'évaluer les effets du pré−traitement de l'auto−hydrolyse sur la DA de boues activées. De plus, la méthodologie simplifiée de fractionnement de la DCO utilisée a été un facteur important pour l'obtention d'un bon modèle.

1.9.2 Caractérisation du substrat d'entrée

Même pour un modèle complexe comme l'ADM1, qui fait la distinction entre différentes fractions organiques comme les glucides, protéines et lipides, la description réaliste du substrat d'entrée est fondamentale (Kleerebezem et al. [57] ; Girault et al. [44]).

Une des premières applications de l'ADM1 a été présentée dans les travaux de Zaher et al. [113]. Les auteurs ont utilisé les mesures expérimentales, le modèle et les informations sur la composition de l'eau usée pour élargir les connaissances sur les caractéristiques de l'influent afin de pouvoir décrire le comportement du réacteur.

Dans les travaux de Huete et al. [53], a été présenté une méthodologie systématique pour caractériser les boues en entrée en terme de composés de l'ADM1, à partir de mesures expérimentales. La méthodologie a été vérifiée expérimentalement avec un digesteur pilote CSTR mésophile traitant un mélange de boues primaires et secondaires. Les simulations ont été réalisées en utilisant différentes versions de l'ADM1 (Batstone et al. [6] ; Rosen et Jeppsson, [88] et la version ADM1−PWM) et ont prouvé que l'équilibre de masse général peut être fait sans introduire d'imprécisions supplémentaires ou de complexité au modèle.

1.9.3 Performances du processus de co-digestion

Comme reporté dans Mata-Alvarez et al. ([71]), tous les auteurs qui ont utilisé l'ADM1 pour décrire la co−digestion ont considéré les hypothèses suivantes : (1) Les composés de l'ADM1 en terme de composites ne peuvent pas être utilisés en tant que fraction du débit d'entrée, et la caractérisation du substrat doit être faite en termes de glucides, protéines et lipides (Lubken et al. [65] ; Fezzani et al. [35] ; Gali et al. [42] ; Zaher et al. [112]), et (2) l'étape de désintégration/hydrolyse est en générale considérée comme une étape limitante durant le processus de digestion anaérobie (Lubken et al. [65] ; Esposito et al. [29] ; Gali et al. [42] ; Zaher et al. [112]).
Lübken et al. ([65]) ont appliqué l'ADM1 pour simuler la production d'énergie en considérant du fumier de bovins et des cultures énergétiques.
Les auteurs de Astals et al. ([3]) ont également utilisé l'ADM1 cette fois-ci pour simuler les différents profils de la production du méthane pour le mélange testé. Cela leur a permis de prédire la production du méthane et les limites relatives au manque/excès de l'azote pendant le processus de co-digestion du lisier de porc et de la glycérine.

1.9.4 Description de la mono-fermentation

Dans les travaux de Wichern et al. ([111]), l'ADM1 a été appliqué pour décrire la fermentation de l'ensilage d'herbes comme mono-substrat. Tout d'abord, la DCO en entrée a été fractionnée en se basant sur des mesures. Par la suite, un étalonnage manuel a été effectué en changeant les constantes d'inhibition de l'hydrogène durant la dégradation du propionate et butyrate/valérate ainsi que la constante d'inhibition de NH_3 durant la consommation de l'acétate. Les simulations dynamiques des processus biochimiques ont prouvé, entre autres, que l'ADM1 était capable de décrire la dégradation de la mono-fermentation.

Le modèle ADM1 peut être, dans certains cas, difficile à appliquer. Par exemple, pour les réactions de fermentation impliquant des substrats carbonés avec un état d'oxydation fortement différent de la biomasse, l'approche basée sur la DCO n'est pas pratique comme décrit dans Kleerebezem et van Loosdrecht [57].
Un autre "défaut" reporté par Batstone et al. [7], est que la stoechiométrie de l'ADM1 se concentre sur le catabolisme plutôt que l'anabolisme, i.e., le carbone inorganique peut être utilisé d'une manière irréaliste comme source de carbone durant certaines réactions anaboliques.
Au vu de cela, l'ADM1 a besoin d'être développé pour mener à un nouveau modèle qui puisse mieux décrire les phénomènes physico-chimiques, le pH, etc...

1.10 Modifications de l'ADM1

Un grand nombre d'auteurs ont dédié leurs travaux à la modification de l'ADM1 pour diverses applications. Cela a permis d'introduire de nouvelles connaissances par rapport à celles acquises depuis 2002. Les raisons de ces modifications sont diverses et variées ; nous pouvons en citer quelques-unes :

– Prendre en considération la diversité microbienne en augmentant le nombre des espèces associées à chaque

réaction (Ramirez et al. [84]) ;

- Améliorer la modélisation de certaines étapes, telle que l'hydrolyse, en proposant une cinétique de Contois au lieu d'une cinétique de premier ordre (Vavilin et al. ([106])) ;
- Permettre de nouvelles extensions, telle que la réduction des sulfates (Federovich et al. ([31])).

Les extensions les plus souvent demandées sont la réduction de sulfate et la description du comportement de la précipitation du phosphore et des minéraux. Ces extensions en général dépendent des besoins spécifiques et nous pouvons les classer comme dans ce qui suit :

1.10.1 Équilibre de masse et caractérisation des composés

Dans De gracia et al. ([47]) les auteurs ont appliqué à l'ADM1 une méthodologie basée sur l'utilisation de fractions de masses élémentaires pour créer une base théorique rigoureuse pour les processus de conversion, afin de faciliter, entre autres, la vérification de la continuité des masses et charges des processus de transformation en utilisant la notation de la matrice de Gujer. Cette méthodologie a été appliquée à l'ADM1 dans le but de caractériser les composés impliqués dans les processus, calculer les paramètres de conversion pour identifier les éventuels déséquilibres, visualiser la matrice stœchiométrique au complet basée sur différents formalismes, et construire des flux massiques à travers les transformations du modèle. L'ADM1 a été facilement adapté à cette méthodologie avec l'addition de 9 composés et 3 processus.
Ce modèle ADM1 a été pris comme référence pour la simulation d'agro-déchets dans Gali et al. ([42]). Le modèle a été structuré avec une équation différentielle pour chaque paire acide/base des composés solubles. De cette façon, il y a 10 équilibres ou termes de compensation considérant la charge des composés élémentaires N, C, P, et S. L'implémentation de H_2S en l'état gazeux et soluble a été une nouvelle modification par rapport à l'ADM1.

1.10.2 Modélisation dynamique de l'équilibre énergétique

Pour la digestion du lisier, la matière organique est décrite majoritairement en terme de solides volatiles (SV) (Lubken et al. [65]). La teneur organique élevée et la structure non homogène du lisier justifient la mesure des SV au lieu de la DCO. Par conséquent, une corrélation entre la DCO et les SV a été formulée par mesure dans Lubken et al. ([65]), d'où un modèle dynamique d'équilibre énergétique pour permettre le calcul dynamique de la production nette d'énergie de bioréacteurs anaérobies.

1.10.3 Modélisation de la co-digestion

En appliquant l'ADM1 pour la modélisation de la co-digestion anaérobie mésophile d'eaux usées provenant de moulins à huile (OMW) avec des déchets solides de même provenance (OMSW), Boubaker et al. ([16]) ont suggéré des modifications à l'ADM1 en ajoutant une fonction non compétitive dans le facteur d'inhibition appliquée au taux de consommation de l'acétate, pour prendre en considération l'inhibition des étapes méthanogènes par une concentration élevée des acides gras volatiles totales ($TVFA$). Selon les auteurs, sans ajouter ces termes d'inhibition, l'ADM1 original ne pourrait pas prédire la défaillance du réacteur à des TRH courts.

Dans les travaux de Esposito et al. ([29]), les auteurs ont modifié l'ADM1 dans le but d'inclure la possibilité de modéliser la désintégration de deux différents substrats d'entrée. Plus précisément, leur modèle considère des cinétiques de premier ordre pour la désintégration des boues usées et des cinétiques basées sur la surface pour modéliser la désintégration des OFMSW. Lorsque les déchets organiques solides sont présents dans l'influent du réacteur, le processus de désintégration est l'étape limitante du processus global de co-digestion. Pour cela, les auteurs ont rapporté que l'avantage principal de l'approche de modélisation proposée est que la constante de cinétique d'un tel processus ne dépend pas de la distribution de la taille des particules des eaux usées (PSD), mais dépend uniquement de sa nature et de sa composition.

1.10.4 Modélisation de la diversité microbienne

Ramirez et Steyer ([83]) ont développé une approche de modélisation pour traiter la diversité microbienne qui consiste en l'extension du nombre des équilibres de masse pour un nombre d'espèces arbitraire ayant la même fonction (effectuant la même réaction), tout en utilisant un mécanisme stochastique pour sélectionner les paramètres microbiens correspondants. Une année plus tard, Ramirez et al. ([84]) ont étendu l'ADM1 avec diverses espèces pour chaque réaction pour décrire la diversité microbienne entre les organismes du même groupe fonctionnel. Le modèle étendu a été par la suite appliqué pour traiter la diversité microbienne dans des conditions dites normales, ne menant pas au déséquilibre du processus, et anormales, caractérisées par la présence de niveaux inhibiteurs d'ammoniaque dans le réacteur.

1.10.5 Caractérisation des étapes de désintégration et d'hydrolyse

Les auteurs de Ramirez et al. ([82]) ont caractérisé les étapes de désintégration et d'hydrolyse pour les intégrer dans l'ADM1 afin d'obtenir un modèle capable de prédire et d'interpréter des résultats à partir de la digestion anaérobie thermophile de boues activées pré-traitées thermiquement. L'ADM1 modifié était basé sur l'hypothèse que les processus de désintégration et d'hydrolyse sont décrits selon le modèle de Contois et l'inhibition de l'ammoniaque pour les méthanogènes acéticlastiques peut être représentée selon la fonction générale de Hill (Hill and Barth [52]).

1.10.6 Estimation des paramètres cinétiques

Dans les travaux de Koch et al. ([59]), l'ADM1 a été étendu pour décrire l'influence de concentrations élevées de solides sur l'hydrolyse. Le modèle a été modifié avec un composé séparé des produits inertes, d'une manière similaire à l'approche du modèle ASM1. Les paramètres cinétiques de l'ADM1 ont été estimé en évaluant la qualité des simulations selon le coefficient de rendement dit de Nash−Sutcliffe (Nash et Sutcliffe [75]) qui a été appliqué comme alternative pour l'étalonnage du modèle.

1.10.7 Modification de la cinétique d'hydrolyse

Dans Vavilin et al. ([106]), les auteurs ont montré que la cinétique de Contois utilisée pour décrire l'hydrolyse de solides biodégradables, était préférable à la traditionnelle cinétique de premier ordre. A ce propos, une version modifiée de l'ADM1 basée sur les cinétiques de Contois pour les étapes d'hydrolyse a été utilisée pour représenter la digestion anaérobie de micro-algues dans les travaux de Mairet et al. ([68]). Étant donné que l'hydrolyse est généralement connue comme l'une des étapes limitantes de la digestion de micro−algues, les auteurs ont considéré que les enzymes sont produites par la population bactérienne qui consomme les produits de l'hydrolyse. Ils ont proposé d'utiliser le modèle de Contois associé à la population bactérienne tout en précisant que ce choix ne nécessitait pas de nouvelles populations bactériennes mais uniquement une modification des taux de réaction. Dans l'implémentation de l'ADM1, une modification de la réaction physico−chimique a été apportée durant la modélisation du transfert liquide−gaz en calculant le débit de gaz à partir d'une surpression dans le ciel gazeux.

1.11 Analyse et extensions de l'ADM1

Dans les travaux de Bornhöft et al. [15], le modèle ADM1 a été analysé par rapport au taux de dilution et à la concentration du substrat. Cette étude a prouvé, d'une part que l'ADM1 a jusqu'à dix états d'équilibre coexistants pour les mêmes conditions opérationnelles et a fourni, d'autre part, d'importantes pistes pour l'amélioration du contrôle.

Certaines extensions de l'ADM1 ont mis l'accent sur des questions spécifiques. Par exemple, l'oxydation de l'éthanol a été incluse pour simuler la dégradation des eaux de vinasse dans un ASBR (Batstone et al. [9]). Dans les travaux de Penumathsa et al. ([80]), les auteurs ont proposé une modification pour étendre l'applicabilité de l'ADM1 à des systèmes fermentaires non-méthanogénes et en particulier à la production de bio-hydrogène.

Plus récemment, Jimenez et al. ([54]), ont adapté l'ADM1 pour inclure la bio-accessibilité des substrats. L'approche proposée a montré un fort potentiel d'application pour le design de réacteur et la commande avancée des processus de DA.

L'ADM1 a été appliqué, modifié et étendu par rapport à différents types de réacteurs anaérobies et aux caractéristiques de l'influent. Dans ce sens, dans le Tableau 1.3 et le Tableau 1.4, certaines des plus importantes utilisations et modifications/extensions de l'ADM1 sont reportées.

Table 1.3 – L'utilisation de l'ADM1 par rapport à différent types de réacteurs

Type de réacteur anaérobie	C^{ques} de l'influent	Auteurs	Utilisation de l'ADM1
Réacteur parfaitement mélangé (CSTR)	Eaux usées de distillerie	Zaher et al. ([113])	Application
Réacteur à lit filtré de boues anaérobie ascendant (UASFB)	Eaux usées de fromagerie	Ramirez et al. ([84])	Extension
Réacteur à lit de boues anaérobies ascendant (UASB)	Boue anaérobie granulaire	Tartakovsky et al. ([104])	Modification
Réacteur batch séquentiel anaérobie (ASBR)	Eaux usées de vinasse	Batstone et al. ([9])	Extension

Table 1.4 – Modification et extension de l'ADM1 selon différents auteurs

Auteur	Modification/Extension	Application
Batstone et al. ([9])	Dégradation de l'éthanol	E.U de vinasse
Batstone and Keller ([5])	Equation de précipitation du carbonate de calcium	Installation de traitements industriels
Ramirez et al., ([84])	Modélisation de la diversité microbienne	E.U d'abattoirs
Ramirez et al., ([82])	Modèle de Contois, fonction de Hill	Boues activées
Mairet et al., ([68])	Taux d'hydrolyse	Micro−algues
Koch et al., ([59])	Influence des solides sur l'hydrolyse	Herbe d'ensilage
Fezzani et Ben Cheikh ([35])	Dégradation de composés phénoliques	OMW, OMSW
Lübken et al., ([65])	Fractionnement du débit d'entrée	Fumier de bovins et RTM
Zaher et al. ([114])	Cinétiques de Cyanure	E.U avec toxiques irréversibles

Les travaux reportés dans les tableaux mettent en évidence les lacunes de l'ADM1 dont :

- La stoechiométrie est basée uniquement sur les réactions cataboliques (Batstone et al. ([7]). De fait, lorsque l'ADM1 est utilisé comme base pour l'estimation des produits métaboliques, il est nécessaire de faire appel à la version proposée par Kleerebezem et al. ([57]).
- Certaines études (siegrist et al. ([96]), Parker ([79])) ont montré que les valeurs des paramètres cinétiques K_S étaient plus faibles que celles de l'ADM1. Ceci étant, le jeu de paramètres recommandé par l'ADM1 est un compromis raisonnable mais qui nécessite une adaptation au cas par cas.
- La modélisation de la rétention des solides dans les bioréacteurs anaérobies à des TRS élevés a montré des incohérences (Kleerebezem et al. ([57])) dans le sens où les résultats ont montré des concentrations de biomasse peu réalistes à des valeurs élevées de TRS. L'alternative proposée par Kleerebezem et al. ([57]) est que dans ce cas, la modélisation doit être basée sur une concentration des solides constante dans le réacteur.

1.12 Le contrôle de la digestion anaérobie

Parmi les travaux traitant du contrôle de la DA, nous trouvons celui de Gaida et al. ([41]) où les auteurs ont développé une Toolbox de Matlab pour le suivi optimal, le fonctionnement et le contrôle. Selon eux, étant donné que l'ADM1 est un modèle boite-blanche, il est alors facile d'implémenter les capteurs virtuels à l'intérieur du modèle pour mesurer d'importants paramètres des processus physique et chimique qui peuvent être également mesurés en pratique. Leur but était d'optimiser le fonctionnement d'une installation de biogaz agro-industrielle et d'analyser le point de fonctionnement par rapport à un critère d'optimisation et à la stabilité.

Cependant, une analyse plus fine des propriétés de l'ADM1 pourrait probablement permettre d'améliorer l'optimisation de la DA, mais pour cela, le modèle ADM1 étant trop complexe, nous sommes amenés à chercher des candidats de complexité plus faible.

C'est un fait que l'ADM1 a été utilisé principalement pour calibrer les données expérimentales (Girault et al. [45]) plutôt que pour le contrôle, c'est pour cela que rares sont les travaux dédiés au contrôle de l'ADM1. Cependant, nous pouvons trouver dans la littérature des travaux sur le contrôle et l'optimisation de la digestion anaérobie basés principalement sur des modèles plus simples, dits "modèles réduits" par rapport au modèle de référence ADM1.

Un message adressé par ce qui précède est qu'il est nécessaire de recourir à la réduction de modèle, quand le but est de faire du contrôle et/ou de l'optimisation.

1.13 Problématique de contrôle - Nécessité de réduction

L'optimisation de la DA ainsi que l'évaluation de son fonctionnement en fonction de diverses alimentations ou conditions de fonctionnement, sont des objectifs importants qui peuvent être atteints en utilisant des modèles de digestion adaptés. Comme nous l'avons souligné auparavant, la qualité d'un modèle et surtout sa structure doivent correspondre à l'objectif pour lequel le modèle a été construit. En effet, un modèle peut être utilisé pour :

- Reproduire et expliquer un comportement observé ;
- Estimer les variables qui ne sont pas mesurées ;
- Estimer les paramètres d'un processus ;
- Agir sur le système pour contrôler ses variables ;
- etc.

Les modèles peuvent être à l'état d'équilibre mais peuvent être aussi plus complexes pour décrire les dynamiques du processus. Cependant, ces modèles qui décrivent en détail tous les processus impliqués dans la DA sont généralement difficile à utiliser pour le contrôle (Bastin et Dochain, [4]).

La théorie du contrôle vise à synthétiser des lois de commande en définissant des marges de performance et de robustesse par rapport à un modèle qui capture les principales caractéristiques d'un processus. Pour cela, il n'est pas très important d'avoir un modèle très détaillé du processus comme c'est le cas pour un modèle dit "de connaissance". Car sans être capable de caractériser le comportement qualitatif d'un modèle complexe (qui peut être étudié seulement numériquement), nous ne sommes pas capable de fixer des caractéristiques appropriées pour ses sorties. Il est donc nécessaire d'utiliser un modèle comprenant uniquement les principales caractéristiques dynamiques.

D'après Dochain et al. ([26]) : "Il serait intéressant de développer une procédure systématique pour réduire des modèles mathématiques de processus dépendants des objectifs du modèle et des informations disponibles". Un modèle "complet" n'est donc pas toujours nécessaire pour tous les utilisateurs et pour toutes les applications. Ainsi, le coût associé à l'identification des paramètres, à la caractérisation des substrats, à la construction du modèle, et à la validation et simulation du modèle peut être considérablement réduit s'il est possible de développer des modèles simples et adaptés.

Dans ce contexte, nous pouvons citer Bouleau ([17]) qui parle des modèles en biologie : "*L'impression générale que donnent ces travaux est un ensemble assez hétéroclite. Parfois des schématisations très sommaires sont appliquées à des situations complexes aux implications délicates, parfois au contraire sont employées des méthodes très sophistiquées sur des données très vagues. Des ébauches maladroites avoisinent des effets de style qui évoquent les Précieuses Ridicules. L'emploi de mathématiques trop complexes est un travers fréquent qui nuit gravement à la réputation des mathématiques. Le but peut être d'empêcher la discussion par des considérations savantes ou de tirer avantage d'une tournure à la mode mais le plus souvent cela vient de la tendance spontanée du modélisateur*

à améliorer en perfectionnant et en compliquant."

1.14 État de l'art sur les méthodes de réduction

Nombreuses sont les méthodes existantes pour la réduction de modèles. Il est possible d'appliquer directement la méthode de réduction choisie sur le modèle non linéaire, comme il est possible de linéariser le modèle avant d'appliquer la méthode de réduction. Nous détaillons ces deux notions dans ce qui suit.

Réduction linéaire

Il s'agit d'une simplification qui préserve le nombre d'équations du modèle original mais réduit la complexité des expressions dans les équations du modèle. On parle alors de linéarisation autour d'un point de fonctionnement. L'idée principale est de réécrire le système suivant :

$$\begin{cases} \dfrac{dx(t)}{dt} = f(x(t), u(t), \alpha) \\ y(t) = g(x(t), u(t), \alpha) \end{cases} \tag{1.10}$$

où :

t représente la variable temps, $x(t) \in \mathbb{R}^n$ représente le vecteur d'état, $u(t) \in \mathbb{R}^m$ représente le vecteur d'entrée, $y(t) \in \mathbb{R}^p$ représente le vecteur de sortie, α représente le vecteur des paramètres. n est la dimension de l'espace d'état, m est la dimension du vecteur d'entrée, et p est la dimension du vecteur de sortie. La fonction f décrit la dynamique du système, tandis que la fonction g décrit la manière dont les observations sont déduites à partir de l'état et de l'entrée ;

sous la forme suivante :

$$\begin{cases} \dfrac{d\tilde{x}(t)}{dt} = A.\tilde{x}(t) + B.\tilde{u}(t) \\ \tilde{y}(t) = C.\tilde{x}(t) + D.\tilde{u}(t) \end{cases} \tag{1.11}$$

où :

$\tilde{x}(t) = x(t) - x_{op}(t), \tilde{u}(t) = u(t) - u_{op}(t), \tilde{y}(t) = y(t) - y_{op}(t)$. A, B, C et D sont les matrices du système et A$\in \mathbb{R}^{nxn}$, B$\in \mathbb{R}^{nxm}$, C$\in \mathbb{R}^{pxn}$ et D$\in \mathbb{R}^{pxm}$, tandis que l'indice 'op' représente le point opérationnel.

Un exemple de réduction linéaire se trouve dans les travaux de Steffens et al. ([102]) qui ont présenté une technique quantitative pour compartimenter les états en rapides, moyens et lents. Leur contribution repose sur deux techniques mathématiques à savoir, l'*association valeur propre-état*, et la *méthode des perturbations singulières*. Pour l'association valeur propre-état, les auteurs ont utilisé la méthode mathématique d'homotopie (cf. Chapitre III) en linéarisant tous d'abord le système vu que la méthode décrite ici n'est applicable qu'aux systèmes linéaires. La technique d'association valeur propre-état a permis de quantifier la vitesse d'un état et cette information a été utilisée pour réduire le modèle via la technique des perturbations singulières. Cela a permis de réduire les équations d'état qui sont plus rapides que l'échelle de temps considérée, à des équations algébriques et celles qui sont plus

lentes en constantes. La méthode des perturbations singulières (Nayfeh, [76]) consiste en une transformation des équations différentielles rapides en équations algébriques. Éventuellement, les états lents peuvent être considérés comme constants.

Chachuat et al. [22] ont développé un modèle réduit simple et réaliste de l'ASM1 pour une petite station de traitement d'eaux usées, pour être utilisé pour la commande prédictive de modèle et le contrôle optimal. La méthode a été appliquée à un processus d'élimination du carbone et de l'azote utilisant le modèle ASM1 et où 23 équations différentielles ont pu être approximées à des équations algébriques. Tout d'abord, la dimension du modèle a été réduite par l'élimination de trois états lents considérés comme constants au moyen de la *méthode d'homotopie*. Par la suite, des simplifications basées sur des considérations heuristiques des composés organiques et azotés ont abouti au modèle final de 5 états.

La méthode de réduction par *les réalisations équilibrées* est également une méthode qui peut être appliquée aux modèles linéaires (cf. Chapitre II) mais également aux modèles non linéaires (Bouvrie et Hamzi [18] ; cf. Annexe D).

Réduction non linéaire

La linéarisation réduit considérablement l'effort de calcul. La simulation est alors plus fiable car le système non linéaire est remplacé par un système linéaire, plus facile à résoudre. Cependant, les modèles linéaires ne prédisent pas d'une manière adéquate les dynamiques du processus pour les cas où le système est éloigné du point opérationnel.

Plusieurs travaux ont été publiés sur la réduction d'ordre de modèles non linéaires par *Projection linéaire* (introduite par Chorin [23]), l'ordre se rapportant aux nombres d'équations différentielles. Dans la plupart de ces travaux, la projection est appliquée aux équations différentielles ordinaires. Comme nous l'avons vu, la réduction de modèle est souvent utile et nécessaire lorsqu'il s'agit de faire du contrôle. Dans ce sens, Marquardt ([69]) a utilisé *la méthode de Projection* dans le but de faire du contrôle basé sur l'optimisation. La procédure peut être formulée en trois étapes. Tout d'abord, une transformation est appliquée révélant les contributions importantes aux dynamiques du processus. Deuxièmement, le nouveau système de coordonnées est décomposé en deux sous-espaces. Et finalement, les dynamiques peuvent être formulées dans le nouveau système de coordonnées où les moins importantes sont tronquées ou ajoutées comme contraintes algébriques (résidualisation). Parmi les approches permettant le calcul des projections on peut citer : la décomposition orthogonale aux valeurs propres (Antoulas et Sorensen [2]).

La réduction de modèle peut également être guidée par la typologie du bioréacteur impliqué dans le schéma réactionnel. Par exemple, dans les travaux de Stamatelatou et al. ([101]) les auteurs ont développé une méthodologie systématique pour la réduction de modèles dynamiques pour les schémas réactionnels biochimiques multi-étapes dans un CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor). La méthode proposée est basée sur une formulation de la variété invariante du problème de réduction de modèle et en particulier sur la projection des dynamiques du CSTR sur la composante lente de la variété invariante (Waller et Makila [108]). Pour cela, la méthode a fait appel aux invariants de réaction (Gadewar et al. [40]) dans la description des dynamiques du CSTR. Cela a permis d'éliminer les dynamiques rapides de l'étape d'acidogenèse impliquée dans le processus de digestion anaérobie.

Réduction non linéaire et variables biologiques

Une autre manière de traiter le problème de la réduction de modèle est d'obtenir un modèle simple, non linéaire et qui de fait conserve le sens physique des variables, c'est-à-dire que les variables biologiques ont les mêmes propriétés que celles du modèle d'origine. Un tel modèle présente plusieurs avantages. D'abord, de part sa simplicité, c'est un candidat pour résoudre les problématiques de contrôle que les grands modèles peinent à résoudre. Ensuite, sa non linéarité est un atout majeur quand il s'agit de processus biologiques. Enfin, la conservation des variables biologiques permet de créer une interface entre lui et le modèle d'origine. Une telle procédure pour obtenir un modèle simplifié de la DA est présentée dans le Chapitre IV.

1.15 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté un historique sur la modélisation de la digestion anaérobie à partir des premiers modèles impliquant peu de processus jusqu'aux modèles dits 'complexes' impliquant plusieurs processus. Parmi ceux-ci, nous avons présenté le modèle ADM1 avec ses différentes étapes, processus et variables.

Nous avons présenté également différentes applications et modifications qui ont été apportés à ce modèle, et à travers desquelles nous avons pu déduire que l'ADM1 nécessitait certaines modifications en fonction de l'application que l'on en fait. Si le but de la modélisation est orienté vers le contrôle, alors il apparait la nécessité de simplifier ce modèle pour pouvoir l'utiliser. Le moyen le plus simple pour y arriver serait de réduire le modèle pour obtenir un modèle simple sans pour autant perdre certaines caractéristiques dynamiques du modèle d'origine. Pour cela il existe différentes méthodes de réduction. Dans ce contexte, dans le Chapitre II, l'une de ces méthodes de réduction est appliquée pour réduire l'ADM1 ; c'est la méthode d'homotopie.

Chapitre 2

Réduction de l'ADM1 par la méthode d'homotopie

Guide de lecture :

L'objet de ce chapitre est de présenter une méthode de réduction de modèles nommée "Homotopie". L'idée générale de cette méthode repose sur une transformation continue à partir d'un système initial dont les variables sont couplées vers un système final où ces variables sont découplées via une matrice dite d'homotopie. La transformation se fait à partir d'un système dynamique dont les états peuvent être reliés aux valeurs propres du système linéarisé correspondant.

Dans ce chapitre nous mettons en évidence, via son application à l'ADM1, les aspects positifs mais également négatifs de cette méthode.

2.1 Introduction

Dans la littérature, nous trouvons une technique mathématique utilisée pour la réduction de modèles, nommée "Homotopie". Cette méthode a été initialement proposée par De Carlo et Saeks ([20]) et Wasynczuk et De Carlo ([110]).

Les exemples de l'utilisation de l'homotopie sont nombreux. Ils incluent les travaux de Robertson et Cameron ([86]) et Garneau et al. ([43]) qui ont utilisé cette méthode pour déterminer la correspondance entre les variables d'état d'un modèle et les valeurs propres du modèle linéarisé dans le but de réduire des modèles non linéaires. Lui et al. ([38]) ont déclaré que la méthode d'homotopie semble être une méthode très efficace pour localiser les points singuliers des problèmes de bifurcation. Une application pratique de cette technique a été faite pour réduire le modèle ASM1 (Activated Sludge Model n° 1) en vue de la commande optimale d'un système d'aération (Chachuat et al. [22]).

2.2 Présentation de la méthode d'homotopie

Cette technique procure un moyen systématique de quantifier les interactions entre les variables d'état et les dynamiques des états tout en analysant leur éventuelle candidature à la réduction. Contrairement à la majorité des autres méthodes de réduction de modèle, ses principaux avantages sont que les modèles réduits obtenus restent non linéaires (Chachuat et al. [22]) et que les états conservent leur sens physique.

Cette méthode comporte plusieurs étapes :

- Tout d'abord, si le système est non linéaire, il faut procéder à sa linéarisation dans le but d'obtenir un système complètement découplé dont la relation valeur propre-état est évidente. La transformation permettant de passer du système diagonal au linéarisé du système original est décrite par l'équation (2.1) :

$$H(r) = (1-r).A_D + r.A \quad avec \quad 0 \leq r \leq 1 \tag{2.1}$$

  où H est la matrice d'homotopie ; A_D est la matrice représentant les équations découplées (diagonale de A) ; A est la matrice du modèle linéarisé et r est un paramètre qui permet d'obtenir une progression linéaire du système découplé vers le système couplé.

  La matrice d'homotopie H est obtenue en variant r de 0 à 1, les valeurs propres de H étant calculées pour chaque valeur de r. Ainsi, la variation des valeurs propres quand r varie de 0 à 1 donne des informations sur le degré de couplage des variables du système.

- Dans un second temps, l'association état-valeur propre va nous aider à classer les états en fonction de leur dynamique. A l'image des techniques lent-rapide, les états lents vont être considérés comme n'évoluant pas au cours du temps tandis que les états rapides vont être considérés comme convergents rapidement vers un équilibre. Cette formalisation va nous permettre d'obtenir une approximation quasi-stationnaire du système

qui décrit les relations d'évolution des variables lentes et rapides entre elles. Le système original peut alors être réduit i) en éliminant du système d'équations dynamiques les dérivées des variables rapides car chacune d'elles converge vers son équilibre (constante), et ii) en éliminant les dérivées des variables lentes car chacune d'elles conserve la valeur de sa condition initiale (constante). On obtient ainsi un système qui reste non linéaire et qui conserve, comme annoncé le sens physique des états originaux.

2.3 La réduction du modèle ASM1 par la méthode d'homotopie (Chachuat et al.)

Les procédés de traitement des eaux à boues activées sont caractérisés par des échelles de temps qui diffèrent de plusieurs ordres de grandeur. (Chachuat et al. [22]) ont caractérisé les dynamiques lentes et rapides du système en les classant sur une base de temps. Les valeurs propres λ du système linéarisé du modèle ASM1 ont été calculées puis associées aux variables d'état au moyen de la méthode d'homotopie.

Le modèle ASM1 distingue 8 processus de dégradation pour la description des mécanismes biologiques d'oxydation des matières organiques, de nitrification et de dénitrification. Les auteurs ont omis la description de l'alcalinité et ont associé les composés particulaires inertes avec ceux résultant de la mortalité de la biomasse. Ce modèle comporte donc 11 variables d'état définies dans le Tableau 2.1.

	Composé	Symbole	Unité
1	Matière organique soluble inerte	S_I	$g_{DCO}.m^{-3}$
2	Substrat facilement biodégradable	S_S	$g_{DCO}.m^{-3}$
3	Matière organique particulaire inerte	X_I	$g_{DCO}.m^{-3}$
4	Substrat lentement biodégradable	X_S	$g_{DCO}.m^{-3}$
5	Biomasse active hétérotrophe	$X_{B,H}$	$g_{DCO}.m^{-3}$
6	Biomasse active autotrophe	$X_{B,A}$	$g_{DCO}.m^{-3}$
7	Azote sous forme de nitrates et de nitrites	S_{NO}	$g_N.m^{-3}$
8	Azote sous forme d'ammoniaque	S_{NH}	$g_N.m^{-3}$
9	Azote organique soluble biodégradable	S_{ND}	$g_N.m^{-3}$
10	Azote organique particulaire biodégradable	X_{ND}	$g_N.m^{-3}$
11	Oxygène dissout	S_O	$g_{O2}.m^{-3}$

TABLE 2.1 – Variables d'état du modèle ASM1 (Chachuat et al. [22])

Les résultats de la méthode d'homotopie sont illustrés sur la Figure 2.1.

Les dynamiques des variables d'état X_I, $X_{B,H}$ et $X_{B,A}$ sont caractérisées par des valeurs propres λ_i faibles, i.e. elles ont des constantes de temps $\tau_i = \lambda_i^{-1}$ élevées (de l'ordre de plusieurs jours). Les valeurs propres associées à ces variables d'état sont inférieures aux autres valeurs propres d'environ un ordre de grandeur, et ceci durant l'ensemble du cycle. Les constantes de temps relatives à ces dynamiques sont de l'ordre de 10 jours (comprises entre 5 et 20 jours). Par conséquent, les auteurs estiment légitime de considérer que les concentrations X_I, $X_{B,H}$ et $X_{B,A}$ sont constantes sur des horizons de quelques heures.

En appliquant ces simplifications et en éliminant la concentration en composés organiques solubles inertes S_I (dont la dynamique est découplée de celles des autres composés), le nombre de variables d'état est réduit de 11 à 7.

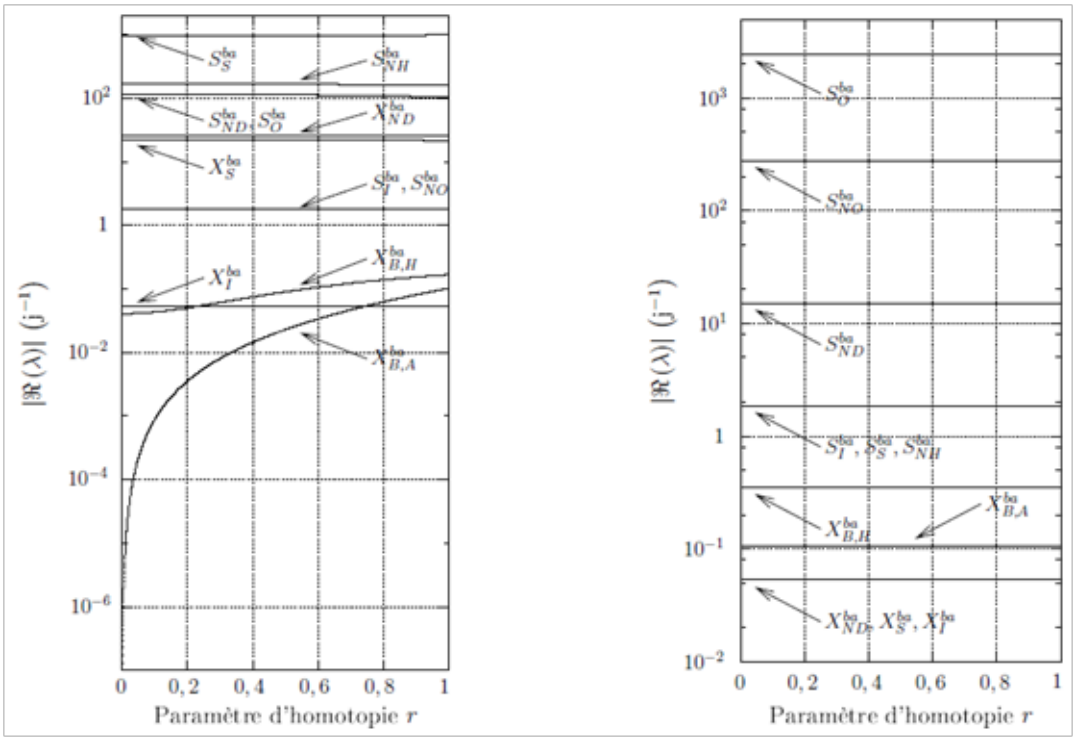

FIGURE 2.1 – Résultats de la méthode d'homotopie sur le modèle ASM1 (B. Chachuat, [21])

D'autres simplifications ont été apportées au modèle basées sur les spécificités du procédé ; elles concernent à la fois la description des composés organiques et des composés azotés.

A partir de ces résultats il est apparu opportun de tenter de réduire un modèle tel que l'ADM1 avec la technique d'homotopie, d'une part pour profiter d'une méthode simple et intuitive qui peut manifestement donner de bons résultats pour réduire des modèles complexes de bioprocédés aérobies comme montré dans Steffens et al. [102] et, d'autre part, pour voir si cette méthode peut donner dans tous les cas de bons résultats et évaluer son efficacité à travers la réduction d'un modèle complexe comme l'ADM1.

2.4 Application à l'ADM1

Dans cette application nous avons utilisé la version de l'ADM1 de Rosen et Jeppsson (cf. Chapitre I). Les variables d'entrée et les valeurs des conditions initiales sont présentes à l'Annexe C.

La méthode d'homotopie est alors appliquée à un point d'équilibre stable du système différentiel composé de 35 équations différentielles. Il est supposé que le système admet au moins un point d'équilibre localement asymptotiquement stable (les parties réelles des valeurs propres associées au système linéarisé autour du point d'équilibre sont strictement négatives). Pour ces calculs, Matlab a été utilisé pour résoudre les équations différentielles non linéaires et Maple a servi au calcul de la Jacobienne du système linéarisé autour de l'équilibre. Par la suite, en utilisant l'équation (2.1) il est possible de tracer les valeurs propres de H en fonction de r.

En "balayant" r de 0 à 1, nous pouvons connaitre quelle valeur propre du linéarisé est associée à chaque état du système.

2.5 Résultats de simulation

2.5.1 Analyse des dynamiques de l'ADM1

Afin d'analyser les résultats nous les classons par ordre croissant et nous transformons les valeurs propres en constantes de temps. Le Tableau 2.2 montre les valeurs propres et les constantes de temps (τ) pour chaque état au point d'équilibre choisi pour l'étude. Ce tableau résume l'information provenant de la technique d'association

Valeurs propres ($1/jour$)	Variables d'état correspondantes	τ (secondes)	τ (minutes)	τ (heures)	τ (jours)	τ (mois)	τ (années)
$1.64E+09$	S_{fa}	$5.26E-05$	$8.76E-07$	$1.46E-08$	$6.09E-10$	$2.03E-11$	$1.69E-12$
$1.63E+06$	S_{va}	$5.29E-02$	$8.81E-04$	$1.47E-05$	$6.12E-07$	$2.04E-08$	$1.70E-09$
$6.25E+05$	S_{pro}	$1.38E-01$	$2.30E-03$	$3.84E-05$	$1.60E-06$	$5.33E-08$	$4.44E-09$
$6.08E+05$	S_{ac}	$1.42E-01$	$2.37E-03$	$3.95E-05$	$1.65E-06$	$5.49E-08$	$4.57E-09$
$5.94E+05$	S_{h2}	$1.45E-01$	$2.42E-03$	$4.04E-05$	$1.68E-06$	$5.61E-08$	$4.67E-09$
$5.88E+05$	S_{ch4}	$1.47E-01$	$2.45E-03$	$4.08E-05$	$1.70E-06$	$5.67E-08$	$4.72E-09$
$4.57E+05$	S_{bu}	$1.89E-01$	$3.15E-03$	$5.26E-05$	$2.19E-06$	$7.30E-08$	$6.08E-09$
$1.84E+03$	S_{ic}	$4.69E+01$	$7.81E-01$	$1.30E-02$	$5.43E-04$	$1.81E-05$	$1.51E-06$
$3.14E+02$	S_{in}	$2.75E+02$	4.5861	$7.64E-02$	$3.18E-03$	$1.06E-04$	$8.85E-06$
$1.90E+02$	S_i	$4.56E+02$	7.5941	$1.27E-01$	$5.27E-03$	$1.76E-04$	$1.46E-05$
$8.60E+01$	X_c	$1.00E+03$	16.7469	$2.79E-01$	$1.16E-02$	$3.88E-04$	$3.23E-05$
$5.19E+01$	X_{ch}	$1.67E+03$	27.7601	$4.63E-01$	$1.93E-02$	$6.43E-04$	$5.35E-05$
$3.94E+01$	X_{pr}	$2.19E+03$	36.5065	$6.08E-01$	$2.54E-02$	$8.45E-04$	$7.04E-05$
$2.40E+01$	X_{su}	$3.60E+03$	$6.00E+01$	1.0000	$4.17E-02$	$1.39E-03$	$1.16E-04$
$1.90E+01$	X_{li}	$4.54E+03$	$7.56E+01$	1.2606	$5.25E-02$	$1.75E-03$	$1.46E-04$
$1.01E+01$	X_{h2}	$8.60E+03$	$1.43E+02$	2.3881	$9.95E-02$	$3.32E-03$	$2.76E-04$
$1.01E+01$	X_i	$8.60E+03$	$1.43E+02$	2.3881	$9.95E-02$	$3.32E-03$	$2.76E-04$
$1.01E+01$	S_{cat}	$8.60E+03$	$1.43E+02$	2.3881	$9.95E-02$	$3.32E-03$	$2.76E-04$
$2.30E+00$	X_{aa}	$3.76E+04$	$6.26E+02$	10.4352	$4.35E-01$	$1.45E-02$	$1.21E-03$
$1.45E+00$	X_{c4}	$5.95E+04$	$9.91E+02$	16.5141	$6.88E-01$	$2.29E-02$	$1.91E-03$
$1.21E+00$	X_{fa}	$7.16E+04$	$1.19E+03$	19.9021	$8.29E-01$	$2.76E-02$	$2.30E-03$
$5.42E-01$	X_{pro}	$1.59E+05$	$2.66E+03$	$4.43E+01$	1.8442	$6.15E-02$	$5.12E-03$
$2.99E-01$	X_{ac}	$2.89E+05$	$4.82E+03$	$8.04E+01$	3.3493	$1.12E-01$	$9.30E-03$
$7.48E-02$	S_{bum}	$1.15E+06$	$1.92E+04$	$3.21E+02$	13.3629	$4.45E-01$	$3.71E-02$
$7.09E-02$	S_{prom}	$1.22E+06$	$2.03E+04$	$3.39E+02$	14.1060	$4.70E-01$	$3.92E-02$
$7.06E-02$	S_{acm}	$1.22E+06$	$2.04E+04$	$3.40E+02$	14.1663	$4.72E-01$	$3.94E-02$
$7.01E-02$	S_{hco3}	$1.23E+06$	$2.05E+04$	$3.42E+02$	14.2708	$4.76E-01$	$3.96E-02$
$7.00E-02$	S_{gash2}	$1.23E+06$	$2.06E+04$	$3.43E+02$	14.2839	$4.76E-01$	$3.97E-02$
$7.00E-02$	S_{nh3}	$1.23E+06$	$2.06E+04$	$3.43E+02$	14.2873	$4.76E-01$	$3.97E-02$
$6.12E-02$	S_{vam}	$1.41E+06$	$2.35E+04$	$3.92E+02$	16.3508	$5.45E-01$	$4.54E-02$
$5.00E-02$	S_{an}	$1.73E+06$	$2.88E+04$	$4.80E+02$	19.9996	$6.67E-01$	$5.56E-02$
$5.00E-02$	S_{su}	$1.73E+06$	$2.88E+04$	$4.80E+02$	$20,0000$	$6.67E-01$	$5.56E-02$
$5.00E-02$	S_{aa}	$1.73E+06$	$2.88E+04$	$4.80E+02$	$20,0000$	$6.67E-01$	$5.56E-02$
$5.00E-02$	S_{gasch4}	$1.73E+06$	$2.88E+04$	$4.80E+02$	$20,0000$	$6.67E-01$	$5.56E-02$
$5.00E-02$	S_{gasco2}	$1.73E+06$	$2.88E+04$	$4.80E+02$	$20,0000$	$6.67E-01$	$5.56E-02$

TABLE 2.2 – Association valeurs propres (partie réelle) et constante de temps

valeur propre-état.

Il est bien connu que la digestion anaérobie suit une séquence d'étapes successives où les produits formés à une étape servent comme substrats à l'étape suivante. Cependant, ces étapes possèdent des vitesses différentes. Par exemple, l'acidogenèse et l'acétogenèse sont considérées comme des étapes rapides dans le processus de digestion anaérobie comparées à l'étape de méthanogenèse. Ceci est reflété par la dynamique des variables. En d'autres termes, si nous voulons nous assurer du bien fondé de la méthode d'homotopie, les résultats obtenus concernant les dynamiques des différentes variables doivent être conforme aux dynamiques des composés représentés par ces variables d'état (échelles de temps rapide ou lente) pour le processus de digestion anaérobie considéré. Tout d'abord, examinons les

résultats obtenus : dans le Tableau 2.2, les variables d'état dans la partie supérieure sont considérées comme des variables rapides, elles sont représentées par les composés solubles tels que les acides gras longue chaine (S_{fa}). Le valerate (S_{va}), propionate (S_{pro}), butyrate (S_{bu}) et acétate (S_{ac}) sont également des composés solubles considérés comme des produits finaux à partir de l'acidogénèse des monosaccharides.

Étant donné que l'hydrolyse est un processus relativement lent, les composés qui subissent cette étape sont représentés dans la partie centrale du tableau (X_c, X_{ch}, X_{pr}). Les variables d'état dans la partie inférieure du tableau sont des variables lentes. Par exemple, le composé (S_{an}) représentant les anions est biologiquement inerte et dépendant donc uniquement du comportement hydrodynamique du réacteur. (S_{gasch4}) et (S_{gasco2}) sont considérées également comme des variables lentes, dans la mesure où ces composés sont considérés comme intermédiaires provenant de l'étape de méthanogenèse qui est une étape lente comme mentionné auparavant.

2.5.2 Réduction du modèle

A partir du Tableau 2.2, il est possible de sélectionner trois importantes échelles de temps : minutes, heures et jours. Par "importantes" nous voulons dire que ces échelles de temps sont les plus pertinentes concernant le processus de digestion anaérobie. De plus, la constante de temps la plus grande est équivalente à 20 jours dans le Tableau 2.2 ce qui correspond précisément au fait que le TRH considéré égale 20 jours.

Considérons le modèle général suivant :

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \tag{2.2}$$

avec $x(0) = x^0$

Nous supposons le point d'équilibre stable x^*. C'est l'équilibre vers lequel le système converge s'il est simulé à partir de x^0. L'application de la méthode d'homotopie au système 2.2 nous permet d'identifier les états que nous qualifions de lents (que nous noterons x_S), de rapides (que nous noterons x_F) et ceux dont la dynamique est intermédiaire (que nous noterons x_I) sur une plage de temps donnée. Ci-dessous, nous réorganisons le vecteur x par rapport aux dynamiques citées de façon que le système se réécrit comme :

$$\frac{dx}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{dx_F}{dt} & = \frac{1}{\varepsilon_1} f_F(x) \\ \frac{dx_I}{dt} & = f_I(x) \\ \frac{dx_S}{dt} & = \varepsilon_2 f_S(x) \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

où $\varepsilon_1 \ll 1$ et $\varepsilon_2 \ll 1$ sont des paramètres d'échelles de temps traduisant le fait que x_S est plus lent que x_I qui est lui-même plus lent que x_F. Le système est approprié pour étudier ce qui se passe quand $t \in [0, T]$. Pour une telle échelle de temps, le système 2.3 peut être approximé en fixant $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$. Le système 2.3 devient alors :

$$\begin{aligned} 0 &= f_F(x), \\ \frac{dx_I}{dt} &= f_I(x), \\ \frac{dx_S}{dt} &= 0. \end{aligned} \tag{2.4}$$

La dernière équation nous permet d'établir que $x_S(t) = x_S^0$. La première équation nous permet d'écrire x_F en fonction de x_I et x_S tel que $x_F = g_F(x_I, x_S) = g_F(x_I, x_S^0)$. Dans $t \in [0, T]$, le système 2.2 est alors approximé par la dynamique suivante (qui est également appelée approximation d'état quasi-stationnaire, QSSA de 2.2) :

$$\frac{dx_I}{dt} = f_I(g_F(x_I, x_S^0), x_I, x_S^0). \tag{2.5}$$

Il faut noter que cette approche est similaire à celle proposée dans Chachuat et al. [22] pour les systèmes aérobies. L'utilisation d'une telle expression est cependant problématique dans notre cas. En effet, la recherche de $x_F = g_F(x_I, x_S)$ exige de résoudre un ensemble d'équations algébriques non linéaires d'ordre potentiellement élevé. Alors qu'il apparait raisonnable de suivre cette méthode quand la dimension de g_F n'est pas trop élevée, cela peut s'avérer problématique si g_F est trop compliquée. Dans le cas de l'ADM1, nous faisons face à un problème dans lequel g_F est très non linéaire et implique plusieurs équations algébriques. C'est pour cela que nous proposons plutôt d'approximer x_F par les valeurs à l'équilibre des états associés. En d'autres termes, nous proposons de remplacer $g_F(x_I, x_S^0)$ dans 2.5 par x_F^* et le système 2.5 se réécrit :

$$\frac{dx_I}{dt} = f_I(x_F^*, x_I, x_S^0). \tag{2.6}$$

Ainsi, dans ce qui suit, les modèles réduits sont exprimés sous la forme de l'équation 2.6.

En utilisant le Tableau 2.2, nous pouvons extraire trois modèles réduits de différents ordres en sélectionnant x_F, x_I et x_S pour chacune des trois échelles de temps considérées.

En se basant sur les résultats obtenus à partir de l'association valeur propre et constante de temps du Tableau 2.2 le modèle réduit #1 établi autour d'une échelle de temps de la minute est d'ordre cinq (voir Annexe E pour le détails des équations). Par rapport aux notations introduites ci-dessus (cf. Eq. 2.6), le système peut s'écrire :

$$\frac{dx_{minutes}}{dt} = f_{minutes}(x_F^*, x_{minutes}, x_S^0). \tag{2.7}$$

où :

$$x_F^* = [S_{fa}^*, S_{va}^*, S_{pro}^*, S_{ac}^*, S_{h2}^*, S_{ch4}^*, S_{bu}^*, S_{ic}^*];$$
$$x_{minutes} = [S_{in}, S_i, X_c, X_{ch}, X_{pr}];$$
$$x_S^0 = [X_{su}^0, X_{li}^0, X_{h2}^0, X_i^0, S_{cat}^0, X_{aa}^0, X_{c4}^0, X_{fa}^0, X_{pro}^0, X_{ac}^0, S_{bum}^0, S_{prom}^0, S_{acm}^0, S_{hco3}^0, S_{gas,h2}^0, S_{nh3}^0, S_{vam}^0, S_{an}^0, S_{su}^0, S_{aa}^0, S_{gas,ch4}^0, S_{gas,co2}^0].$$

Nous rappelons que x_F^* correspond aux valeurs à l'équilibre de x_F et que x_S^0 correspond aux conditions initiales de x_S.

En suivant le même raisonnement, deux autres modèles réduits développés pour les échelles de temps de l'heure et du jour respectivement peuvent être déduis.

Le modèle réduit #2 établi autour d'une échelle de temps de l'heure est d'ordre huit (voir Annexe E pour le détail

des équations). Ainsi, le système s'écrit :

$$\frac{dx_{heures}}{dt} = f_{heures}(x_F^*, x_{heures}, x_S^0). \tag{2.8}$$

où :

$$x_F^* = [S_{fa}^*, S_{va}^*, S_{pro}^*, S_{ac}^*, S_{h2}^*, S_{ch4}^*, S_{bu}^*, S_{ic}^*, S_{in}^*, S_i^*, X_c^*, X_{ch}^*, X_{pr}^*];$$
$$x_{heures} = [X_{su}, X_{li}, X_{h2}, X_i, S_{cat}, X_{aa}, X_{c4}, X_{fa}];$$
$$x_S^0 = [X_{pro}^0, X_{ac}^0, S_{bum}^0, S_{prom}^0, S_{acm}^0, S_{hco3}^0, S_{gas,h2}^0, S_{nh3}^0, S_{vam}^0, S_{an}^0, S_{su}^0, S_{aa}^0, S_{gas,ch4}^0, S_{gas,co2}^0].$$

Le modèle réduit #3 établi autour d'une échelle de temps du jour est d'ordre quatorze (voir Annexe E). Ainsi, le système s'écrit :

$$\frac{dx_{jours}}{dt} = f_{jours}(x_F^*, x_{jours}, x_S^0). \tag{2.9}$$

où :

$$x_F^* = [S_{fa}^*, S_{va}^*, S_{pro}^*, S_{ac}^*, S_{h2}^*, S_{ch4}^*, S_{bu}^*, S_{ic}^*, S_{in}^*, S_i^*, X_c^*, X_{ch}^*, X_{pr}^* X_{su}^*, X_{li}^*, X_{h2}^*, X_i^*, S_{cat}^*, X_{aa}^*, X_{c4}^*, X_{fa}^*];$$
$$x_{jours} = [X_{pro}, X_{ac}, S_{bum}, S_{prom}, S_{acm}, S_{hco3}, S_{gas,h2}, S_{nh3}, S_{vam}, S_{an}, S_{su}, S_{aa}, S_{gas,ch4}, S_{gas,co2}];$$

et il n'y a pas de variables lentes x_S^0 dans ce modèle réduit.

2.5.3 Évaluation des modèles réduits

Afin de vérifier les performances des modèles réduits, nous comparons les simulations de l'ADM1 et ses formes réduites (Figs. 2.2, 2.3, 2.4,).

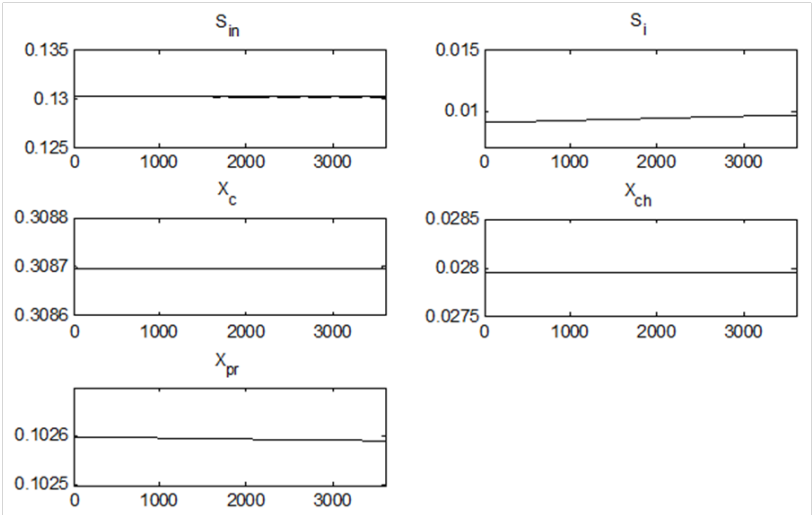

FIGURE 2.2 – Comparaison de l'ADM1 et du modèle #1 (ADM1: ligne continue, modèle #1: ligne pointillée)

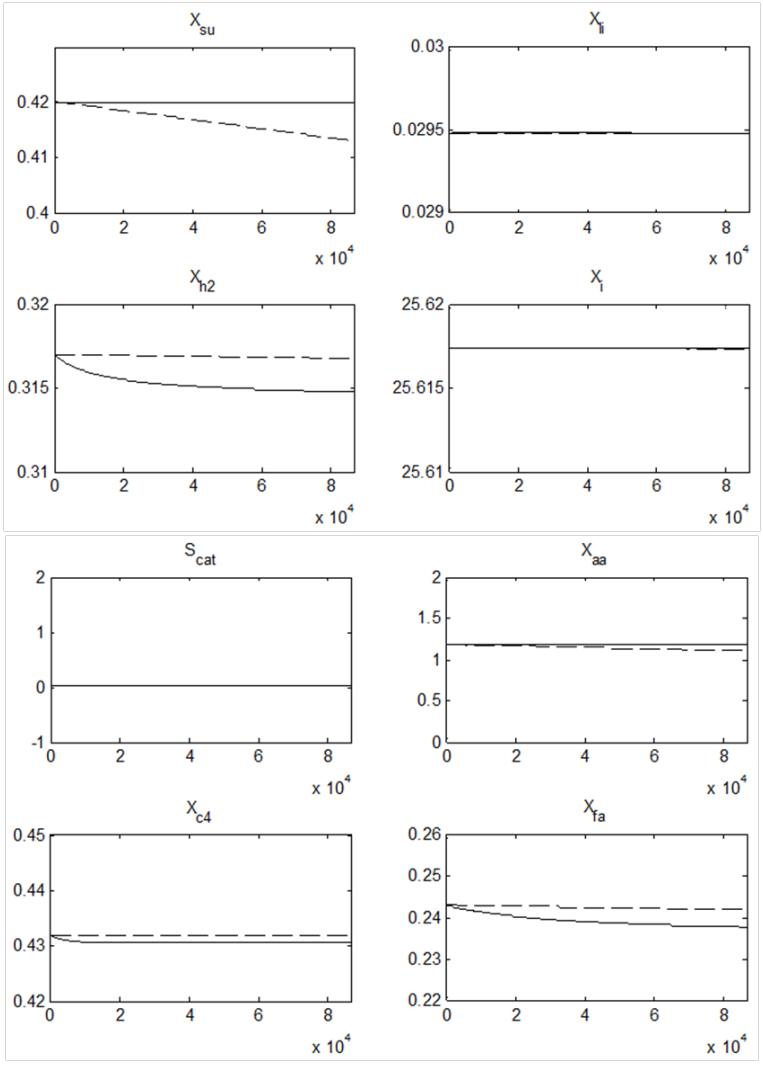

FIGURE 2.3 – Comparaison de l'ADM1 et du modèle #2 (ADM1: ligne continue, modèle #2: ligne pointillée)

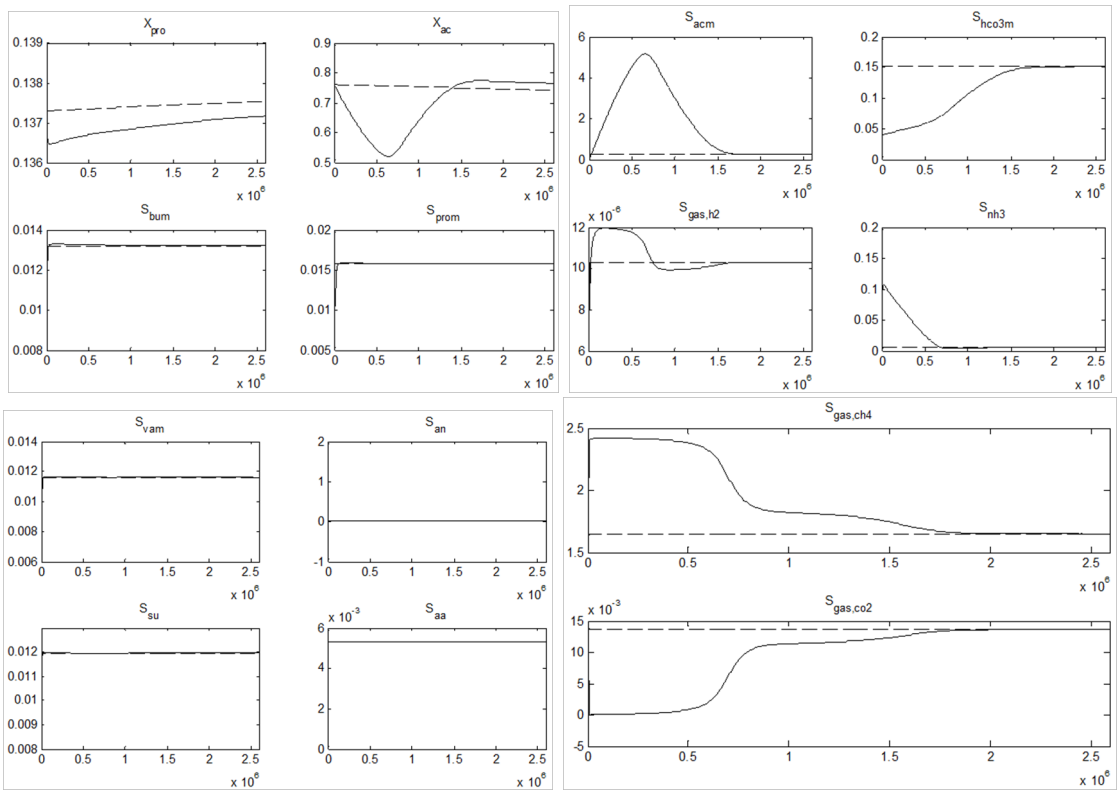

FIGURE 2.4 – Comparaison de l'ADM1 et du modèle #3 (ADM1: ligne continue, modèle #3: ligne pointillée)

2.5.4 Discussion

A partir des résultats de ces simulations, nous pouvons en déduire que le modèle #3 est le modèle réduit qui approxime le mieux le modèle original. On peut considérer que c'est parce que l'échelle de temps du jour est une échelle de temps "raisonnable" lorsqu'il s'agit de DA où certains composés exigent un certain temps pour subir les processus physico-chimiques et biologiques et pour générer les produits de la DA, i.e., le biogaz. Nous rappelons ici que dans le modèle linéaire obtenu, les variables rapides ont été remplacées par leurs valeurs à l'équilibre et que les variables lentes ont été remplacées par leurs conditions initiales.

Il est également intéressant d'étendre cette discussion en vérifiant si les dynamiques des variables d'état de l'ADM1 sont similaires à celles obtenues après l'application de la méthode d'homotopie sur l'ADM1, i.e., voir si les variables qui atteignent rapidement l'équilibre (variables rapides) et celles qui mettent plus de temps pour arriver à l'équilibre sont les mêmes que celles représentées dans le Tableau 2.2 en terme de constante de temps, afin d'avoir une vue plus générale sur les résultats de cette méthode. En d'autres termes, nous voulons voir si les variables de l'ADM1 conservent ou pas leurs dynamiques.

Ci-dessous (Figure 2.5) sont reportés les figures des variables d'états de l'ADM1 simulées sur un temps équivalent à 20 jours. Si l'on regarde les constantes de temps relatives aux variables d'état du Tableau 2.2 et les dynamiques de ces mêmes variables représentées sur la Figure 2.5, on peut voir clairement qu'il y a quelques discordances entre les dynamiques des variables d'état. Par exemple, dans la Figure 2.5 nous voyons bien que les dynamiques des variables S_{su}, S_{aa}, S_{an}, S_{vam} sont des dynamiques rapides i.e., elles atteignent rapidement leurs équilibres, alors qu'à partir du Tableau 2.2 ces mêmes dynamiques apparaissent au bas du tableau, laissant croire que ce sont des dynamiques lentes, ce qui n'est pas le cas. D'autre part, les dynamiques des variables S_{ac}, S_{ch4} et S_{ic} apparaissant en haut du Tableau 2.2 et laissant croire que ces variables ont des dynamiques rapides, ne peuvent être considérées comme telles vue l'évolution de leurs dynamiques comme représentées dans la Figure 2.5.

2.5.5 Limites de la méthode

A partir des résultats ci-dessus, nous pouvons dire que seule la comparaison des modèles réduits avec le modèle ADM1 permet de dire si oui ou non ces modèles réduits sont satisfaisants. Nous n'avons aucun argument théorique pour s'en assurer, puisque c'est la méthode d'homotope qui a permis de détecter les variables rapides et que c'est notre réduction dans laquelle les variables rapides sont remplacées par l'équilibre, au lieu du quasi-équilibre dépendant des variable lentes, qui a servi à construire ce modèle réduit.

Dans ce qui suit, deux exemples simples sont présentés pour mettre en exergue les résultats contradictoires de la méthode d'homotopie ainsi que ses limites :

Exemple 1 :

Le but du premier exemple est de montrer que la procédure peut mener vers des conclusions satisfaisantes.

Considérons le système linéaire :

$$\frac{dx}{dt} = A, \qquad A = \begin{pmatrix} -4 & 0.5 \\ 0.2 & -6 \end{pmatrix} \tag{2.10}$$

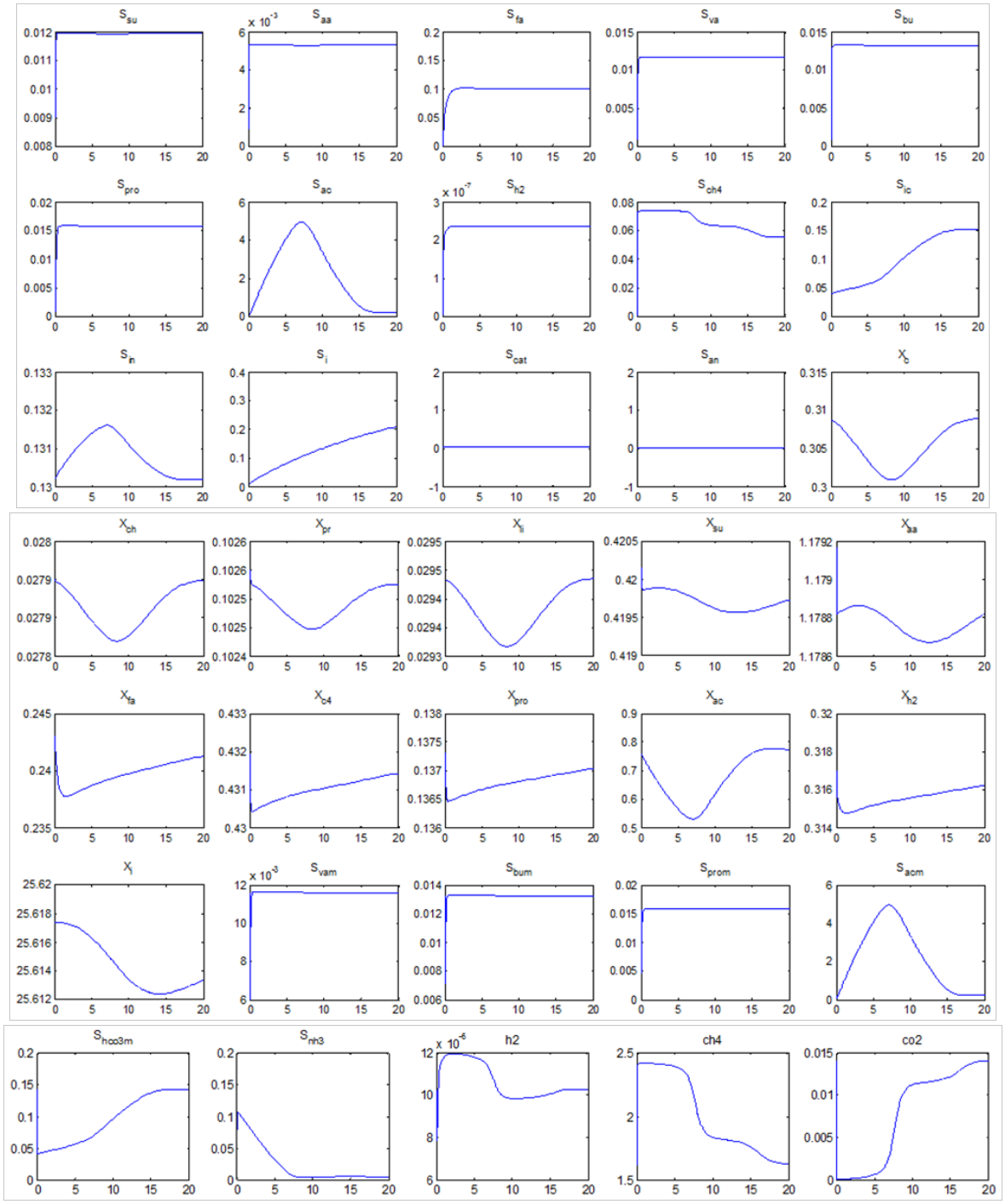

FIGURE 2.5 – Simulation des variables d'état de l'ADM1

Nous utilisons la procédure d'homotopie

$$H(r) = rA + (1-r)diag(A) = \begin{pmatrix} -4 & \frac{1}{2}r \\ \frac{1}{5}r & -6 \end{pmatrix} \tag{2.11}$$

Les valeurs propres de $H(r)$ représentées sur la Figure 2.6 sont :

$\lambda_1(r) = -5 + \frac{1}{10}\sqrt{100+10r^2}$, $\lambda_2(r) = -5 - \frac{1}{10}\sqrt{100+10r^2}$. La valeur propre $\lambda_2(0) = -6$ est associé à l'état x_2. C'est la variable rapide du système diagonal initial obtenu pour $r = 0$. Si cette variable est également considérée comme rapide pour le système finale (2.10) obtenu pour $r = 1$, alors la réduction de ce système sur l'état quasi-stationnaire :

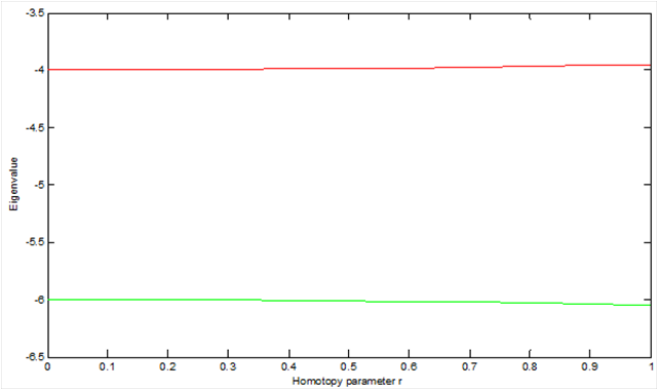

FIGURE 2.6 – Trajectoire des valeurs propres, λ_1 (en rouge), λ_2 (en vert)

$$\dot{x_2} = 0 \Leftrightarrow 0.2x_1 = 6x_2 \Leftrightarrow x_2 = \tfrac{1}{30}x_1$$

est donnée en replaçant dans la première équation de 2.10, la variable rapide par $x_2 = \frac{1}{30}x_1$. Cette réduction mène au modèle réduit :

$$\dot{x_1} = -4x_1 + \tfrac{1}{2}\tfrac{1}{30}x_1 = -3.98x_1$$

Selon cette construction, une solution de 2.10 $x_1(t)$ sera approximée par la solution du modèle réduit avec la même condition initiale, à savoir

$x_1(t) \approx x_1(0)\,\mathrm{e}^{-3.98t}$,

et, la composante $x_2(t)$ d'une solution de 2.10 sera approximée par l'état quasi-stationnaire, à savoir

$x_2(t) \approx \frac{1}{30}x_1(0)\,\mathrm{e}^{-3.98t}$.

La solution de 2.10 est donnée par :

$$x_1(t) = [0.98x_1(0) + 0.24x_2(0)]e^{-3.95t} + [0.023x_1(0) - 0.24x_2(0)]e^{-6.05t} \tag{2.12}$$

$$x_2(t) = [0.095x_1(0) + 0.0234x_2(0)]e^{-3.95t} - [0.095x_1(0) - 0.98x_2(0)]e^{-6.05t} \tag{2.13}$$

En comparant cette approximation et celle donnée par la réduction quasi-stationnaire (Figure 2.7) nous pouvons déduire que dans ce cas l'application de la technique d'homotopie mène à des résultats satisfaisants.

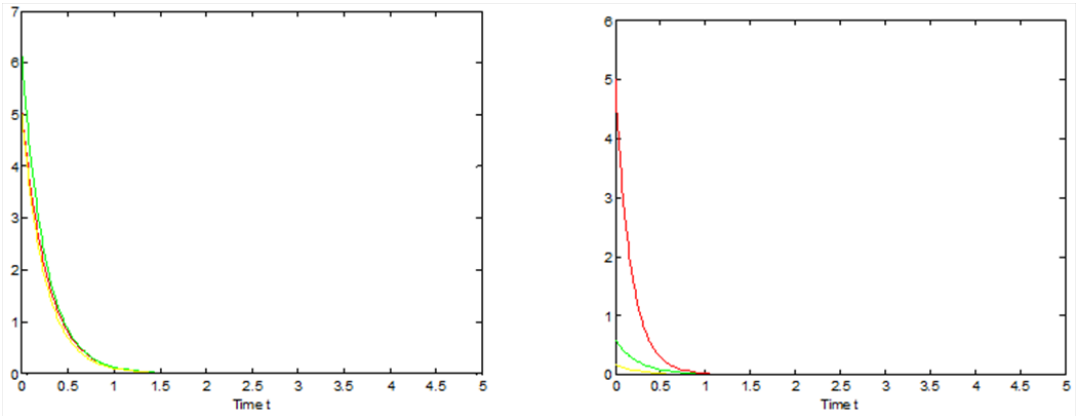

FIGURE 2.7 – A gauche, le composé $x_1(t)$ (en rouge), sa vraie approximation (en vert) et son approximation à partir de la méthode de réduction (en jaune). A droite le composé $x_2(t)$. Ici $x_1(0) = x_2(0) = 5$.

Exemple 2 :

Le but du second exemple est de montrer que la procédure peut mener à des conclusions très mauvaises.

Considérons le système linéaire

$$\frac{dx}{dt} = Ax, \qquad A = \begin{pmatrix} -4 & \frac{5}{a} \\ 3a & -6 \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

où $a \neq 0$ est un paramètre réel. Nous utilisons la procédure d'homotopie :

$H(r) = rA + (1-r)diag(A) = \begin{pmatrix} -4 & \frac{5r}{a} \\ 3ar & -6 \end{pmatrix}$

Les valeurs propres de $H(r)$ représentées sur la Figure 2.8 sont :

$\lambda_1(r) = -5 + \sqrt{1+15r^2}, \qquad \lambda_2(r) = -5 - \sqrt{1+15r^2}.$

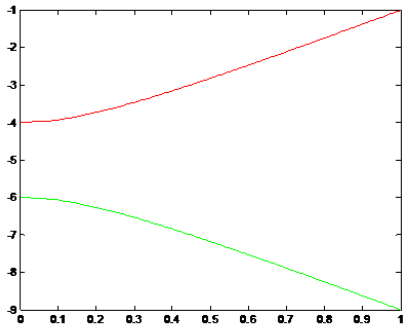

FIGURE 2.8 – La trajectoire des valeurs propres

La valeur propre $\lambda_2(0) = -6$ est associée à l'état x_2. C'est la variable rapide du système diagonal initial obtenu pour $r = 0$. Si cette variable est considérée également comme rapide pour le système final 2.14 obtenu pour $r = 1$, alors la réduction de ce système sur l'état quasi-stationnaire :

$$\dot{x_2} = 0 \Leftrightarrow 3ax_1 = 6x_2 \Leftrightarrow x_2 = \tfrac{ax_1}{2}$$

est donnée en remplaçant dans la première équation de 2.14, la variable rapide par $x_2 = \frac{ax_1}{2}$. Cette réduction mène au modèle réduit :

$$\dot{x_1} = -4x_1 + \tfrac{5x_1}{2} = \tfrac{-3x_1}{2}$$

Selon cette construction une solution $x_1(t)$ de 2.14 sera approximée par la solution du modèle réduit avec la même condition initiale, à savoir

$x_1(t) \approx x_1(0)\,\mathrm{e}^{-3/2t}$,

et la composante $x_2(t)$ d'une solution de 2.14 sera approximée par l'état quasi-stationnaire, à savoir

$x_2(t) \approx \frac{a}{2}x_1(0)\,\mathrm{e}^{-3/2t}$.

Ces conclusions sont évidement fausses, car on ne peut pas s'attendre à ce que ces approximations soient valables pour toutes les valeurs du paramètre a dans 2.14 et diverses valeurs de la condition initiale $x_2(0)$. Plus précisément

la solution de 2.14 est donnée par :

$$x_1(t) = \frac{5}{8a}[ax_1(0) + x_2(0)]e^{-t} + \frac{5}{8a}[\frac{3}{5}ax_1(0) - x_2(0)]e^{-9t} \tag{2.15}$$

$$x_2(t) = \frac{3}{8}[ax_1(0) + x_2(0)]e^{-t} - \frac{5}{8}[\frac{3}{5}ax_1(0) - x_2(0)]e^{-9t} \tag{2.16}$$

La vraie approximation devrait donc être :

$$x_1(t) = \frac{5}{8a}[ax_1(0) + x_2(0)]e^{-t} \tag{2.17}$$

$$x_2(t) = \frac{3}{8}[ax_1(0) + x_2(0)]e^{-t} \tag{2.18}$$

ce qui est incompatible avec les approximations données par la réduction quasi-stationnaire (Figure 2.9).

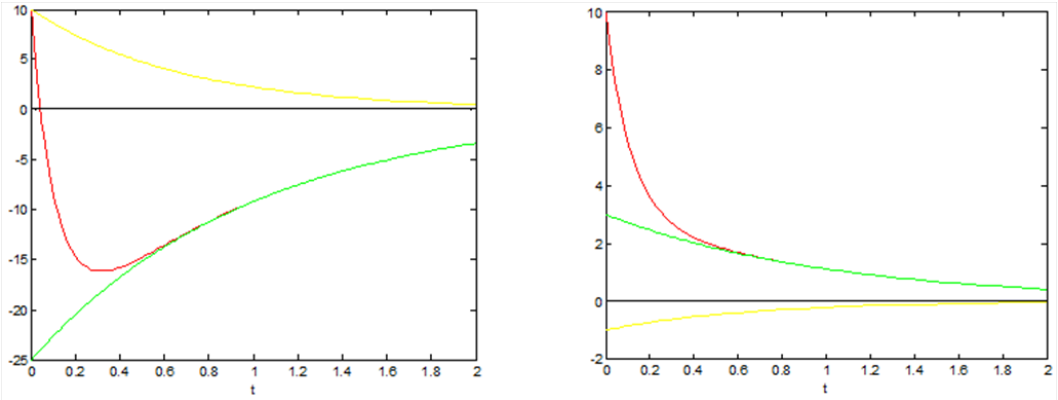

FIGURE 2.9 – A gauche, le composé $x_1(t)$ (en rouge), sa vraie approximation (en vert) et sa mauvaise approximation (en jaune). A droite le composé $x_2(t)$. Ici $a = \frac{-1}{5}, x_1(0) = x_2(0) = 10$.

2.6 Conclusion

La méthode d'homotopie est une technique basée sur l'association valeur propre - état. Les valeurs propres décrivent les propriétés dynamiques des modèles et procurent d'importantes informations sur la réponse transitoire d'un système. Si une valeur propre donnée peut être associée à un état donné alors la dynamique de cet état peut être quantifiée.

Dans ce chapitre, nous avons voulu appliquer la méthode d'homotopie pour réduire l'ADM1. L'association valeur propre - état a permis de distinguer trois échelles de temps relatifs à différentes dynamiques des états : lents, rapides et intermédiaires, et d'en déduire trois modèles réduits. Cependant, la comparaison des modèles réduits obtenus avec l'ADM1 a montré quelques contradictions en ce qui concerne la dynamique de certains états. Par exemple, des états considérés comme rapides par l'ADM1 se révèlent être lents dans les modèles réduits. A partir des différents résultats obtenus, nous pouvons dire que l'application de la méthode d'homotopie peut induire en erreur. Cette méthode peut en effet présenter aussi bien des résultats satisfaisants que des résultats contradictoires.

Cette technique exige donc une vérification a posteriori de la qualité des prédictions délivrées par les modèles réduits à travers leur comparaison avec la simulation du modèle initial car cela dépend du système considéré. Il se

peut que la technique ne soit pas du tout appropriée quand les états sont fortement couplés rendant l'utilisation de l'association valeur propre-état inappropriée.

Dans ce cas, il apparait naturel de s'orienter vers une méthode de réduction dite plus "robuste", où la comparaison du modèle réduit obtenu avec le modèle original suffit à s'assurer du bien fondé de la méthode de réduction utilisée. C'est ce que nous présentons dans le chapitre suivant.

Chapitre 3

Réduction de l'ADM1 par les réalisations équilibrées

Guide de lecture :

L'objet de ce chapitre est de présenter une technique de réduction de modèles dynamiques basée sur les réalisations équilibrées permettant d'obtenir des modèles réduits tout en conservant le comportement entrée−sortie du modèle d'origine.

Tout d'abord, nous présentons un état de l'art sur la réalisation équilibrée, puis nous passons à l'application de cette méthode afin de réduire l'ADM1 en débutant par la linéarisation de celui-ci. Le modèle réduit obtenu approxime d'une manière satisfaisante le modèle original en terme de réponses indicielle et impulsionnelle.

3.1 Introduction

Dans le cadre d'une production d'énergie sous forme de biogaz, il faut noter que les digesteurs anaérobies sont précisément conçus pour fonctionner autour d'un équilibre. Dans ce sens, la réduction de l'ADM1 par la méthode des réalisations équilibrées semble justifiée. Le concept de la réalisation équilibrée, introduite par B.C. Moore ([73]), est basé sur le fait que les états qui sont difficiles à atteindre i.e., ceux qui exigent une grande quantité d'énergie pour être atteints, sont dans l'espace engendré [1] des vecteurs propres du grammien de commandabilité P correspondant aux faibles valeurs propres. D'une manière similaire, les états qui sont difficiles à observer i.e., ceux qui génèrent de petites quantités d'énergie d'observation, sont ceux qui s'étalent dans l'espace engendré des vecteurs propres du grammien d'observabilité Q correspondant également aux faibles valeurs propres. Ceci suggère que les modèles d'ordre réduit peuvent être obtenus en éliminant les états qui sont difficiles à commander ou bien difficiles à observer. Cependant, les états qui sont difficiles à commander peuvent ne peut être difficiles à observer et vice−versa. Si l'on souhaite baser une procédure de réduction de modèle sur le degré des états difficiles à commander, ou difficiles à observer, il est nécessaire de chercher une base dans laquelle les états qui sont difficiles à commander sont simultanément difficiles à observer, et vice−versa. La transformation qui atteint ce but est appelée transformation équilibrée (Antoulas, [1]).

3.2 État de l'art sur les réalisations équilibrées des systèmes non linéaires

La réalisation équilibrée des systèmes non linéaires stables a été introduite par Scherpen ([91]). L'énergie d'entrée passée et l'énergie de sortie future sont définies comme des fonctions de commandabilité et d'observabilité, et jouent un rôle dominant dans la réalisation équilibrée non linéaire. Leurs caractéristiques sont étudiées et imposées afin de transformer le système non linéaire en forme équilibrée. Les fonctions des valeurs singulières de Hankel sont définies et jouent un rôle similaire aux valeurs singulières de Hankel dans le cas linéaire. Il est possible de décider si oui ou non une composante d'état influe sur le système d'une manière forte ou faible. Cette analyse aboutit à un outil de réduction de modèle. Cependant, le calcul de ces fonctions d'énergie est coûteux en calcul et le résultat est rarement une solution explicite. Pour ces raisons, il n'est pas très aisé d'appliquer cette méthode à des problèmes de grande dimension.

Hahn et Edgar ([49]), présentent une approche pour la réduction de modèle non linéaire, basée sur la réalisation équilibrée des grammiens empiriques de commandabilité et d'observabilité et la projection de Galerkin. La première étape consiste à trouver une réalisation équilibrée des grammiens empiriques d'observabilité et de commandabilité afin de déterminer les états qui ont le plus contribué au comportement entrées-sorties. La seconde étape consiste à effectuer une projection de Galerkin sur les états correspondant aux plus grandes valeurs singulières de la réalisation équilibrée. La projection de Galerkin est basée sur l'idée que la dynamique d'un système peut être remplacée par la dynamique basée sur un sous-espace du système original. Cette méthode a l'avantage de nécessiter que de simples calculs matricielles pour la réduction des modèles non linéaires.

1. Voir Annexe D

Dans les travaux de Lall et al. ([70]) une nouvelle méthode de réduction pour les systèmes de commande non linéaires est présentée. Cette méthode évite certaines difficultés rencontrées dans le calcul des fonctions énergétiques présentées par Sherpen ([91]). Cette dernière consiste à construire une réalisation approximativement équilibrée, qui nécessite seulement des calculs matriciels standards. L'approche utilise en premier des données de simulation ou d'expérimentation et identifie les états du système qui ne sont pas affectés par les actionneurs, et qui affectent le plus les capteurs. Ensuite, il s'agit de construire une réalisation équilibrée empirique pour les systèmes non linéaires, qui coïncide avec la réalisation équilibrée pour les systèmes linéaires. Enfin, une projection de Galerkin est appliquée à la réalisation équilibrée pour construire un modèle non linéaire de faible dimension.
Dans l'article de Fujimoto et Tsubakino ([39]), un algorithme de calcul de la réalisation équilibrée et la troncature basée sur le développement en série de Taylor est proposé, où deux ensembles d'équations aux dérivées partielles sont à résoudre. Le premier est un ensemble d'équations d'Hamilton-Jacobi-Bellman et une équation de Lyapunov pour obtenir les fonctions d'observabilité et de commandabilité. L'autre est une équation algébrique non linéaire par rapport aux fonctions de commandabilité et d'observabilité pour obtenir une transformation de coordonnées qui convertit le système non linéaire en réalisation équilibrée.
Krener ([60]) a présenté une méthode plus intrinsèque de la réduction de modèle non linéaire. Ce dernier a introduit la forme normale pour les fonctions de commandabilité et d'observabilité et a montré qu'un système non linéaire peut toujours être ramené à cette forme par des changements locaux. Les paramètres de cette forme normale indiquent l'importance relative des coordonnées de l'espace d'état du système. Ensuite, l'auteur a proposé une nouvelle interprétation de la réalisation équilibrée linéaire qui peut être étendue à un système non linéaire.
Bouvrie et Hamzi ([18]) ont introduit une nouvelle approche de réduction de modèle non linéaire, en s'appuyant sur les progrès récents dans l'apprentissage automatique et la réduction de dimensionnalité statistique. La méthode repose sur l'hypothèse que le système non linéaire se comporte linéairement lorsqu'il est plongé dans un espace caractéristique (feature space) de dimension élevée, où la réalisation équilibrée peut être effectuée. Cela conduit à une application non linéaire dans un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS) qui permet de générer un système dynamique réduit de faible dimension et qui garde les caractéristiques entrée−sortie essentielles du modèle original (Annexe D).

3.3 Réalisation équilibrée d'un système linéaire

Soit le système linéaire suivant :

$$\begin{cases} \dot{x} = Fx + Gu, \\ y = Hx, \end{cases} \tag{3.1}$$

où $F \in \mathbb{R}^{n*n}$, $\quad G \in \mathbb{R}^{n*p} \quad et \quad H \in \mathbb{R}^{p*n}$, avec : (F, G) commandable, (F, H) observable et F Hurwitz.

Définition 3.1 *Les fonctions de commandabilité et d'observabilité d'un système linéaire sont définies respective-*

ment comme : (Scherpen [91])

$$L_c(x_0) = \inf_{\substack{u \in L_2(-\infty,0) \\ x(-\infty)=0, x(0)=x_0}} \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{0} \|u(t)\|^2 dt, \tag{3.2}$$

définie comme l'énergie minimale requise pour atteindre x_0 à partir de 0 dans un temps infini,

et

$$L_o(x_0) = \frac{1}{2}\int_{0}^{\infty} \|y(t)\|^2 dt, \quad avec \quad x(0) = x_0 \quad et \quad u(t) = 0, \quad t \geq 0. \tag{3.3}$$

définie comme l'énergie de sortie générée en libérant le système de son état initial $x(t_0) = x_0$ et $u(t) = 0$ pour $t \geq 0$.

Théorème 3.1 *(Scherpen [91]) Soit le système (3.1). Alors $L_c(x_0) = \frac{1}{2}x_0^T W_c^{-1} x_0$, et $L_o(x_0) = \frac{1}{2}x_0^T W_o x_0$, où $W_c = \int_0^\infty e^{Ft} G G^T e^{F^T t} dt$ est le grammien de commandabilité et $W_o = \int_0^\infty e^{F^T t} H^T H e^{Ft} dt$ est le grammien d'observabilité. De plus, W_c et W_o sont symétriques, définis positifs et sont les uniques solutions des équations de Lyapunov :*

$$\begin{cases} FW_c + W_c F^T = -GG^T \\ F^T W_0 + W_0 F = -H^T H \end{cases} \tag{3.4}$$

Définition 3.2 *Un système dont les grammiens sont égaux et possèdent la forme suivante :*

$$\Sigma = \tilde{W}_c = \tilde{W}_0 = \begin{bmatrix} \sigma_1 & ... & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & ... & \sigma_n \end{bmatrix} \tag{3.5}$$

avec $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq ... \geq \sigma_n > 0$

et où les $\sigma_i, i = 1, ..., n$ sont les valeurs singulières de Hankel, est dit équilibré.

De plus, il existe une transformation $\tilde{x} = Tx$ tel que le système transformé donné par :

$$\begin{cases} \dot{\tilde{x}}(t) = TFT^{-1}\tilde{x}(t) + TGu(t) \\ y(t) = HT^{-1}\tilde{x}(t) \end{cases} \tag{3.6}$$

est sous forme équilibré. Le nouveau système donné par (3.6) est alors appelé réalisation équilibrée et les grammiens transformés sont donnés par :

$$\begin{cases} \tilde{W}_c = TW_cT^T = \tilde{W}_0 \\ \tilde{W}_0 = (T^{-1})^T W_0 T^{-1} \end{cases} \tag{3.7}$$

En observant les valeurs singulières $\{\sigma_i\}$ et s'il existe un k tel que $\sigma_k \gg \sigma_{k+1}$, alors les états qui gouvernent le plus la relation entrée-sortie du système sont $(x_1, ..., x_k)$ tandis que $(x_{k+1}, ..., x_n)$ auront une contribution né-

gligeable. Dans ce cas, l'ordre k est l'ordre du système réduit équilibré obtenu par troncature. On définit alors la limite d'erreur pour la réduction d'ordre du modèle.

Théorème 3.2 *(Zhou et Doyle [115]) Supposons que les valeurs singulières de Hankel vérifient :*

$$\sigma_1 > ...\sigma_k \gg \sigma_{k+1} > ... > \sigma_n$$

et $\tilde{K}(s)$ est obtenue par troncature à l'ordre k d'une réalisation équilibrée $K(s)$ (matrice de transfert), alors la borne d'erreur est donnée par :

$$\|K(s) - \tilde{K}(s)\|_\infty \leq 2 \sum_{i=k+1}^{n} \sigma_i \tag{3.8}$$

En éliminant les composantes $x_{k+1}, ..., x_n$ correspondants aux petites valeurs singulières de Hankel $\sigma_{k+1}, ..., \sigma_n$, il en résulte un modèle d'ordre réduit qui constitue une bonne approximation du système original. (Voir Annexe D pour quelques rappels).

3.4 Réduction de l'ADM1

3.4.1 Linéarisation de l'ADM1

L'ADM1 est un système non linéaire représenté sous la forme :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u), \\ y = h(x), \end{cases} \tag{3.9}$$

où : $f(x, u)$ correspond à l'ensemble des équations (A.1.1)-(A.2.3), $u = q_{in}$ et $h(x) = q_{gas}$. Les valeurs des concentrations d'entrées sont reportées en Annexe C.

Nous pouvons linéariser l'ADM1 autour d'un point d'équilibre (voir Chapitre I) menant à un système de la forme (3.1), avec :

$F = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{x=x_{eq}, u=u_{eq}}$, $G = \frac{\partial f}{\partial u}\Big|_{x=x_{eq}, u=u_{eq}}$, $H = \frac{\partial h}{\partial x}\Big|_{x=x_{eq}}$,

où $F \in \mathbb{R}^{35*35}$, $\quad G \in \mathbb{R}^{35*1}$, $\quad H \in \mathbb{R}^{1*35}$.

Pour le calcul des matrices F, G et H, nous utilisons Maple 12.

3.4.2 Réalisation équilibrée du modèle linéaire de l'ADM1

Matlab a été nécessaire pour le calcul des grammiens transformés $\tilde{W}_c$ et $\tilde{W}_o$ ainsi que la matrice de transformation linéaire T^{35*35}. De cette façon, nous avons obtenu une réalisation équilibrée du système ADM1 linéarisé qui se présente sous la forme (3.1) avec $q_{in} = 170\, m^3/jour$.

Le système linéaire étant sous une forme équilibrée, les valeurs singulières de Hankel procurent une mesure de l'importance des états. Nous utilisons cette propriété dans le but de réduire l'ADM1. Pour la réduction de modèle, les états contribuant le moins ou très faiblement au comportement entrée-sortie peuvent être éliminés.

Avant de passer à la réduction propre du modèle ADM1 linéarisé, il est intéressant d'analyser les caractéristiques importantes du modèle à partir de ses réponses fréquentielles (Figure 3.1).

Nous recherchons donc une réalisation qui préserve le comportement fréquentiel du système d'origine. Comme le

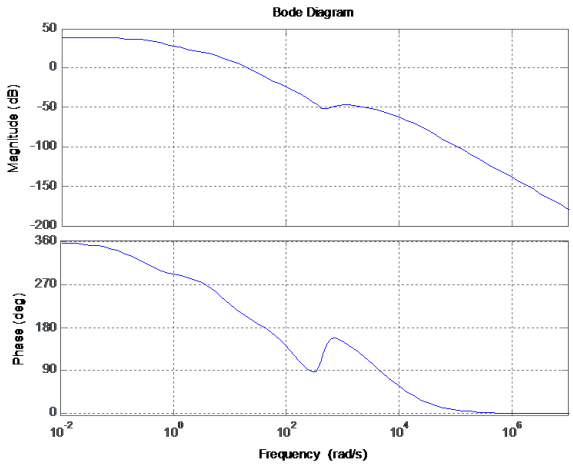

FIGURE 3.1 – Diagramme de Bode pour l'analyse de la réponse fréquentielle de l'ADM1, ($u = q_{in}$ et $h(x) = q_{gaz}$)

montre la Figure 3.2 les états qui sont faiblement ou très peu commandables et observables sont quantifiés par zéro ou sont proches de zéro à partir de l'ordre six.

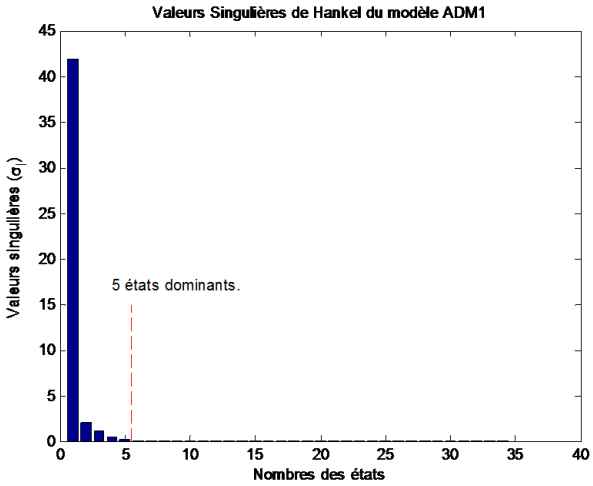

FIGURE 3.2 – Les valeurs singulières de Hankel de l'ADM1 linéarisé

La représentation des valeurs singulières de Hankel suggère qu'il y a un mode dominant dans ce système. Cependant, la contribution des modes restants reste significative. En traçant une ligne à 5 états et en écartant les autres, on trouve un modèle réduit d'ordre 5 qui approxime au mieux le modèle original.

Le problème qu'il est possible de rencontrer lors de l'application de cette méthode est le problème de la minimisation des erreurs. A cet effet, on distingue deux types de bornes d'erreur, l'une additive et l'autre multiplicative.

– *Réduction en utilisant une borne d'erreur additive :*

Dans plusieurs cas, la méthode d'erreur additive est suffisante pour fournir un bon modèle d'ordre réduit. Cette méthode essaie de garder l'erreur absolue d'approximation uniformément petite quelles que soient les fréquences.

Nous obtenons donc un modèle réduit d'ordre cinq dont nous comparons le tracé de Bode avec celui de l'ADM1 linéarisé. Le résultat est représenté sur la Figure 3.3. Comme nous pouvons le voir sur le diagramme de Bode, le

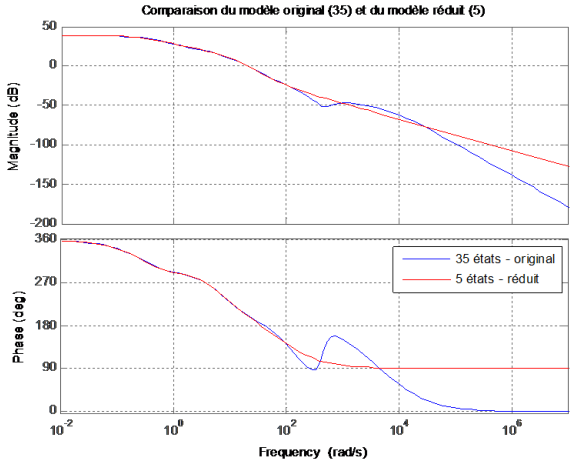

FIGURE 3.3 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit (Borne d'erreur additive)

modèle réduit réussit à bien capturer les résonances inférieurs à $10^2 rad/s$ mais l'approximation pour les plus grandes fréquences est assez faible. Pour contourner ce problème, nous faisons appel à la borne d'erreur multiplicative.

– *Réduction en utilisant une borne d'erreur multiplicative :*

Dans ce cas, la méthode d'erreur multiplicative, qui minimise l'erreur relative entre le modèle original et le modèle réduit, peut produire une meilleure approximation.

En fait, la différence entre les deux bornes d'erreur réside dans le fait que la borne d'erreur additive est basée sur les valeurs singulières de Hankel et s'intéresse à minimiser le pic de l'erreur absolue, sans se préoccuper des autres régions fréquentielles, tandis que la borne d'erreur multiplicative tend à limiter l'erreur relative à travers la gamme fréquentielle concernée, produisant une plus grande précision dans le modèle d'ordre réduit obtenu.

Les valeurs singulières obtenues dans ce cas sont représentées sur la figure 3.4.

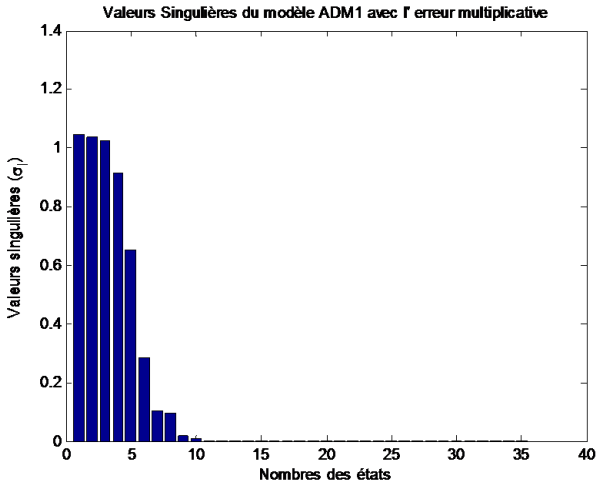

FIGURE 3.4 – Valeurs singulières du modèle ADM1 avec l'erreur multiplicative

Un modèle d'ordre huit peut être envisagé, mais nous optons, comme précédemment pour un modèle réduit d'ordre cinq. Nous comparons également dans ce cas le tracé de Bode des deux modèles (Figure 3.5). Il est clair que la correspondance entre le modèle réduit et le modèle original est meilleure avec la méthode de l'erreur multiplicative. Nous pouvons également comparer les réponses indicielle et impulsionnelle des deux modèles (3.6).

Dans ce cas, nous remarquons qu'il y a un certain décalage entre la réponse indicielle du modèle réduit et le modèle

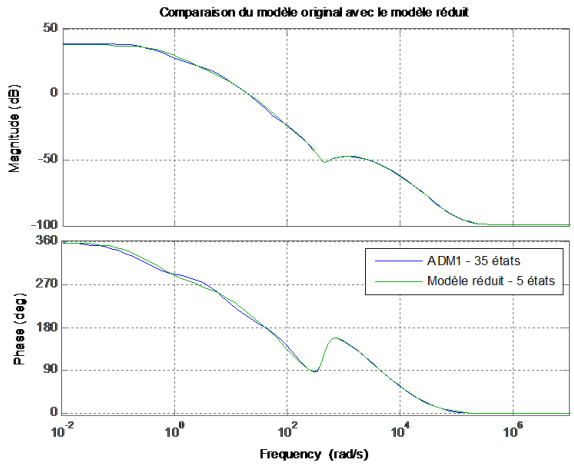

FIGURE 3.5 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit (Borne d'erreur multiplicative)

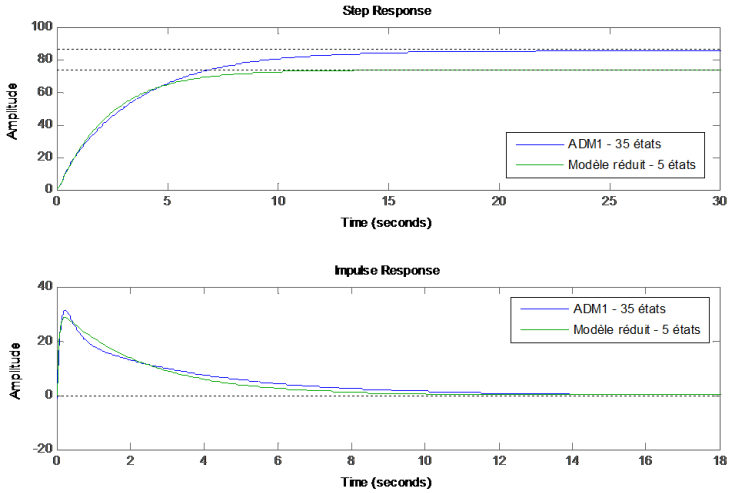

FIGURE 3.6 – Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit, (entrée $u = q_{in}$ et $sortie = q_{gaz}$)

original. Nous allons voir, dans ce qui suit, comment y remédier pour améliorer la qualité de l'approximation.

– *Calcul des bornes d'erreur*

Comme nous pouvons le voir sur le Tableau 3.1, la bonne approximation du modèle original s'est faite au dépend de l'erreur relative. En d'autres termes, le fait d'avoir choisi un modèle réduit d'ordre 5, ce qui est assez faible par rapport à l'ordre 35 du modèle original, a fait que la borne d'erreur multiplicative ne correspond pas à la meilleur approximation du modèle. Il est clair que si l'on désire augmenter la précision du modèle réduit il est nécessaire

	$\|G(s) - G(s)_{red}\|_\infty$	$2\sum_{i=6}^{35}\sigma_i$
Borne d'erreur additive	0.0346	0.1095
	$\|G(s)^{-1}(G(s) - G(s)_{red})\|_\infty$	$\prod_{i=6}^{35}(1 + 2\sigma_i(\sigma_i + \sqrt{1+\sigma_i^2})) - 1$
Borne d'erreur multiplicative	0.1868	1.1169

TABLE 3.1 – Bornes d'erreur

d'augmenter son ordre.

Si l'on désire, par exemple, atteindre une précision relative d'au moins 5 %, il est possible d'obtenir un modèle avec le plus petit ordre compatible avec notre choix de précision. Grâce à la "Robust Control Toolbox" de Matlab

nous avons obtenu le résultat d'un modèle réduit d'ordre sept avec comme borne d'erreur :

$$\|G(s)^{-1}(G(s) - G(s)_{red})\|_\infty = 0.0233$$
$$\prod_{i=8}^{35}(1 + 2\sigma_i(\sigma_i + \sqrt{1+\sigma_i^2})) - 1 = 0.0471$$

Comparons alors les tracés de Bode du modèle original et du modèle d'ordre sept que nous reportons sur la Figure 3.7. Comme nous pouvons le constater, les deux tracés sont pratiquement confondus.

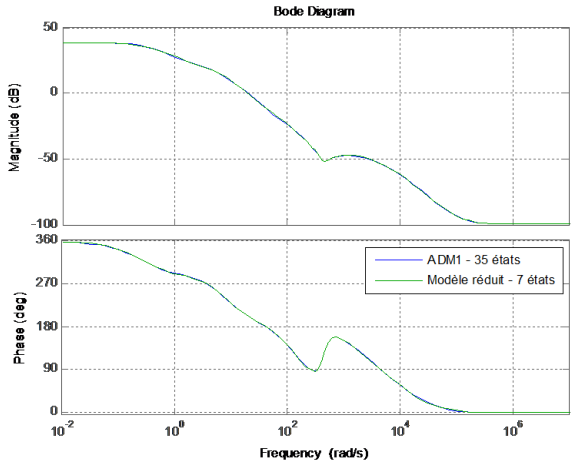

FIGURE 3.7 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7

Traçons finalement les réponses indicielle et impulsionnelle des deux modèles (Figure 3.8) où là également les deux réponses se confondent.

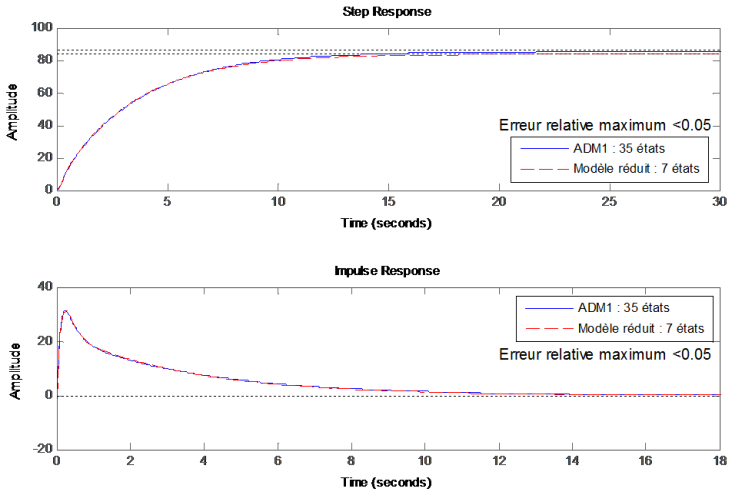

FIGURE 3.8 – Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit

Nous avons donc obtenu un système réduit d'ordre 7 de la forme :

$$\begin{cases} \dot{x}_r = F_r x_r + G_r u_r, \\ y_r = C_r x_r, \end{cases} \tag{3.10}$$

avec

$$F_r = \begin{pmatrix} -278.5 & -465.6 & 727.4 & -1240 & -991.7 & 243.3 & 766.3 \\ -420.1 & -709.8 & 1259 & -1989 & -1495 & 384.3 & 1148 \\ -271.3 & -516 & -937.6 & -111.9 & -259.5 & -200 & 562.8 \\ -519.1 & -818 & 2622 & -3189 & -2343 & 768.8 & 1538 \\ -1093 & -1784 & 2141 & -4375 & -4031 & 933.3 & 3109 \\ 92.88 & 154.7 & -470.6 & 583.2 & 370.9 & -154.3 & -231.5 \\ 1203 & 1961 & -2152 & 4672 & 4403 & -924 & -3472 \end{pmatrix}$$

$$G_r = \begin{pmatrix} -3.679 \\ 5.62 \\ 0.4656 \\ -4.708 \\ -1.429 \\ 0.9002 \\ 0.3482 \end{pmatrix}$$

$$H_r = \begin{pmatrix} -6.236 & -2.041 & 1.571 & 3.358 & -1.646 & 0.2133 & 3.031 \end{pmatrix}$$

3.4.3 La qualité de l'approximation dépend-elle du point d'équilibre du système ?

Après l'obtention d'un modèle réduit qui approxime au mieux le modèle d'origine, l'ADM1, il serait intéressant de voir si la qualité de cette approximation dépend ou pas du point d'équilibre du système d'origine. Pour cela il suffit d'appliquer la même procédure pour la réduction de l'ADM1 en modifiant, par exemple, le temps de rétention hydraulique (TRH) dont la relation avec le débit d'entrée q_{in} est la suivante :

$q_{in} = \dfrac{V_L}{TRH}$

où V_L représente le volume du liquide à l'intérieur du bioréacteur.

Nous avons appliqué la méthode de réduction pour un $TRH = 10$ jours, puis pour un $TRH = 30$ jours et enfin pour un $TRH = 60$ jours. Les points d'équilibre obtenus pour les différents HRT sont reportés en Annexe F. Les résultats obtenus sont les suivants :

TRH = 10 jours

En modifiant le TRH nous avons obtenu un point d'équilibre différent et en appliquant la méthode des réalisations équilibrées nous avons obtenu un modèle réduit d'ordre 9 (erreur relative maximum < 0.05). Les comparaisons de ce modèle réduit avec l'ADM1 en termes de diagramme de Bode et de réponses indicielle et impulsionnelles sont représentées sur les Figures 3.9 et 3.10.

TRH = 30 jours

Là aussi, en modifiant le TRH nous avons obtenu un point d'équilibre différent et en appliquant la méthode des réalisations équilibrées nous avons obtenu un modèle réduit d'ordre 9 également. Les comparaisons de ce modèle réduit avec l'ADM1 en termes de diagramme de Bode et de réponses indicielle et impulsionnelles sont représentées

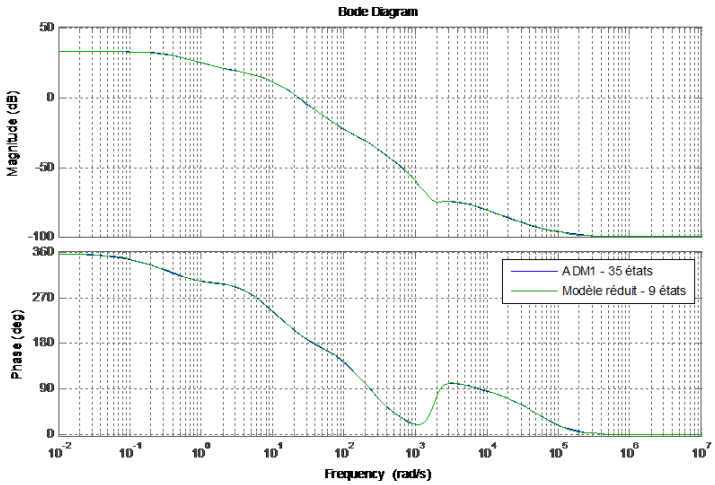

FIGURE 3.9 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (HRT=10 jours)

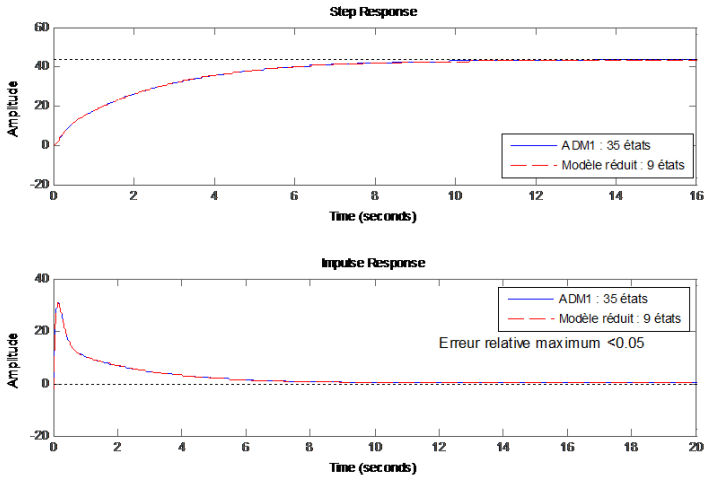

FIGURE 3.10 – Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (TRH=10 jours)

sur les Figures 3.11 et 3.12.

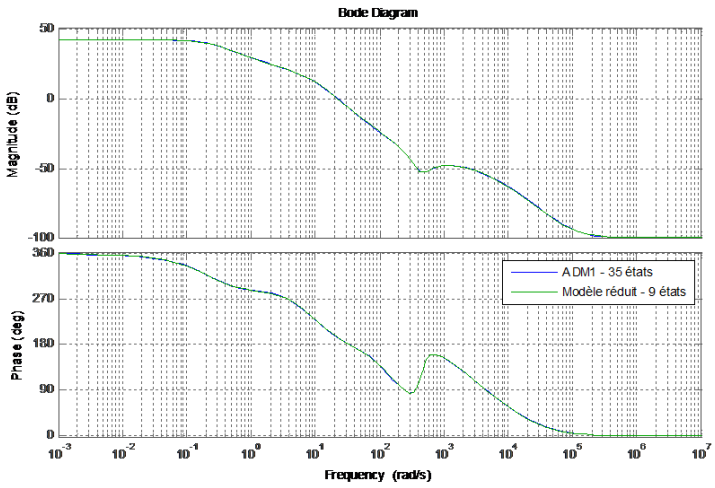

FIGURE 3.11 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (HRT=30 jours)

TRH = 60 jours

Cette fois-ci nous augmentons un peu plus le TRH et nous obtenons dans ce cas un modèle réduit d'ordre 7. Les

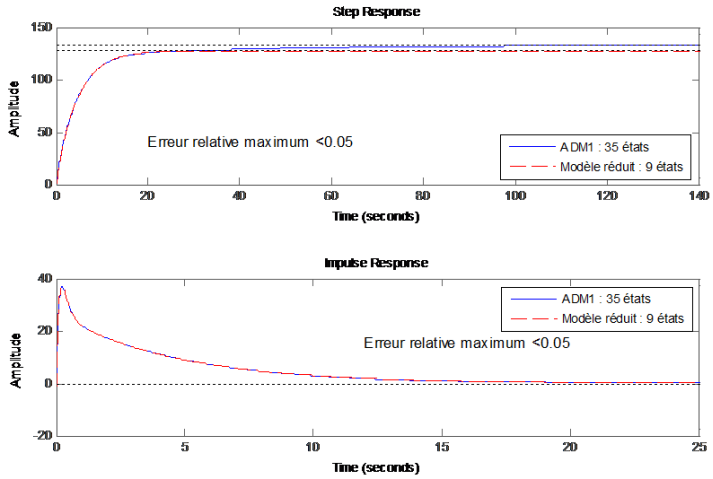

FIGURE 3.12 – Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 9 (TRH=30 jours)

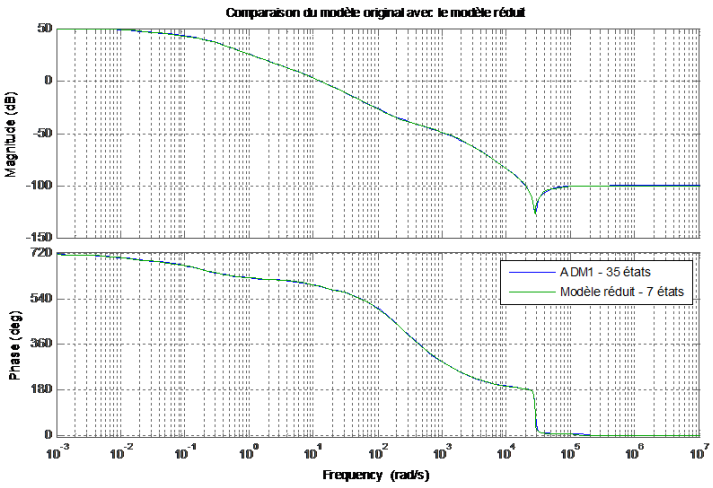

FIGURE 3.13 – Diagramme de Bode - Comparaison de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7 (HRT=60 jours)

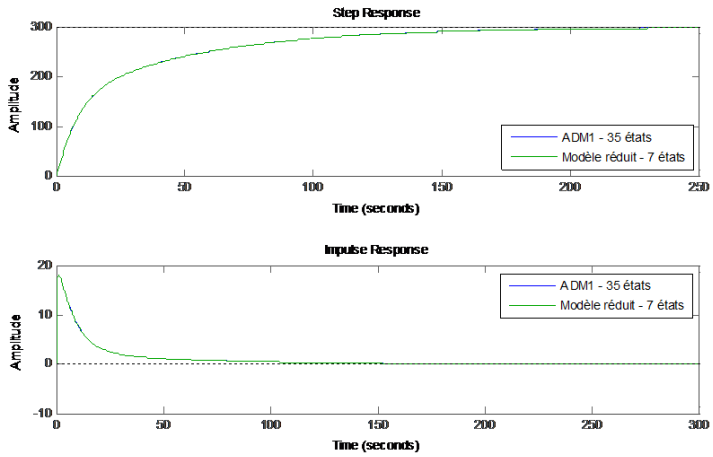

FIGURE 3.14 – Réponses indicielle et impulsionnelle de l'ADM1 et du modèle réduit d'ordre 7 (TRH=60 jours)

comparaisons du modèle réduit avec l'ADM1 sont représentées sur les Figures 3.13 et 3.14.

Ce que nous pouvons dire concernant les résultats obtenus est que la méthodologie appliquée dans le cas où le point d'équilibre du système original n'est plus le même, donne de bons résultats en ce qui concerne l'approximation du modèle réduit par rapport au modèle original. En effet, dans les trois cas nous avons obtenu un comportement

entrée/sortie pratiquement identique entre les modèles réduits et le modèle d'origine.
La qualité de l'approximation dépend non seulement de la valeur de la précision désirée, pour arriver à un compromis entre l'ordre du modèle et la qualité de l'approximation, mais également et surtout du choix de l'ordre du modèle réduit. En effet, dans le dernier exemple (HRT = 60 jours) nous avons choisis l'ordre 7 et nous avons obtenu un bon résultat en terme de qualité d'approximation, sans avoir besoin d'améliorer la qualité de l'approximation en fixant la précision relative, comme nous l'avons fais pour les deux exemples précédents.
Ainsi, pour répondre à la question abordée dans cette section, nous pouvons dire que la qualité de l'approximation dépend plus du choix de l'ordre du modèle réduit que du point d'équilibre du système.

3.5 Conclusion

La méthode de réduction utilisée dans ce chapitre pour réduire l'ADM1 est basée sur les réalisations équilibrées. Cette méthode présente un intérêt considérable pour la réduction d'ordre des systèmes linéaires. En effet, certains auteurs comme Sandberg et Rantzer ([89]) estiment que la réduction de systèmes linéaires est intéressante non seulement pour la modélisation des processus physiques variants dans le temps, mais également du fait que les systèmes non linéaires peuvent être bien approximés par des systèmes linéaires autour de trajectoires optimales.
L'application de la méthode des réalisations équilibrées pour réduire l'ADM1 nous a permis d'obtenir un modèle réduit de dimension 7 préservant le comportement entrée-sortie du système original. Cela a été vérifié grâce notamment à la comparaison des réponses indicielle et impulsionnelle des deux modèles.
De plus, en modifiant l'entrée du système d'origine et en appliquant cette méthodologie, nous avons remarqué que la qualité de l'approximation était conservée même si le point d'équilibre changeait. La qualité de l'approximation dépendant principalement du choix de l'ordre du système.
En effet, cette méthode, simple à exécuter, permet d'obtenir une bonne approximation du système original et peut être considérée comme un compromis optimal du point de vue de la commandabilité/observabilité des variables d'état, l'idée clé étant de négliger les états les moins commandables et observables du système.
Bien que cette méthode présente des résultats satisfaisants, le modèle réduit obtenu est un modèle linéaire. Ce qui nous amène, dans le chapitre qui suit, de proposer une méthode qui permet d'obtenir un modèle réduit qui conserve la non linéarité du modèle d'origine.

Chapitre 4

Réduction de l'ADM1 par association de variables

Guide de lecture :

L'objet de ce chapitre est double. Premièrement une version modifiée de l'AM2 dénommée « AM2HN » est proposée. Deuxièmement, nous proposons une procédure d'association d'état systématique et générique dans le but d'obtenir un tel modèle simplifié à partir d'un ADM1 validé. Les simulations et les comparaisons avec les prédictions de l'ADM1 pour un cas d'étude impliquant la digestion anaérobie de boues sont présentées accompagnées de résultats jugés satisfaisants.

4.1 Introduction

Des modèles réduits qui peuvent être utilisés pour le contrôle sont disponibles dans la littérature ; ils comprennent l'AM2 qui est un bon compromis entre la complexité d'un modèle et sa correspondance avec l'information expérimentale disponible. Étant donné que dans plusieurs applications de l'industrie le processus est non linéaire, il est important que cette caractéristique soit préservée. Dans ce sens, l'originalité de notre approche est d'utiliser le modèle AM2 et de conserver les caractéristiques non linéaires et les équations d'équilibre qui sont bien connues en biotechnologie pour arriver à un modèle réduit non linéaire simple.

Cette approche diffère évidement des approches systématiques que nous avons traitées jusqu'à présent. Cependant, elle présente des avantages que nous ne retrouvons pas systématiquement dans les autres méthodes, à savoir :

- Elle conserve le sens physique des variables ;
- Elle a une structure "bilan matière" et donc non linéaire. Ce qui est un avantage car les modèles non linéaires et les techniques de contrôle non linéaires sont indispensables pour atteindre des performances satisfaisantes.

Dans ce sens, un premier apport peut être décrit comme suit :

- Une modification de l'AM2 dans le but de prendre en considération des processus pertinents incluant l'hydrolyse et la libération de l'azote ammoniacal. Ceci conduit à un nouveau modèle que nous proposons de nommer " AM2HN " puisque ce dernier est basé sur le modèle existant AM2.

Aujourd'hui, l'ADM1 est reconnu comme un modèle standard par la plupart des personnes impliquées dans l'étude des déchets solides et liquides et un modèle ADM1 efficace a été proposé et validé pour une large gamme de cas (Blumensaat et Keller [14]), (Feng et al. [33]). Ainsi, proposer un nouveau modèle n'a pas vraiment de sens si ses liens avec l'ADM1 n'ont pas été clairement établis. Un deuxième apport est donc :

- Une procédure d'association est proposée comme une interface simple et systématique entre les variables d'état de l'ADM1 et celles du modèle simplifié de façon à ce que ce dernier puisse être facilement identifié à partir de valeurs simulées générées à partir de tout ADM1 disponible/validé.

4.2 Le modèle AM2

Le modèle AM2 a été développé dans le cadre du projet Européen AMOCO [1] et comme l'ADM1, est basé sur un bilan de matière. Ce modèle considère deux processus et deux populations bactériennes. Dans la première étape d'acidogenèse, la biomasse acidogènes X_1 consomme le substrat organique S_1 et produit les acides gras volatiles AGV (S_2) et le CO_2. Dans la deuxième étape de méthanisation, la biomasse méthanogènes X_2 consomme les AGV et produit du méthane et du dioxyde de carbone. Les réactions biologiques sont les suivantes :

Acidogenèse (avec un taux de réaction μ_1) :

$$k_1 S_1 \longrightarrow X_1 + k_2 S_2 + k_4 CO_2$$

Méthanogenèse (avec un taux de réaction μ_2) :

1. Acronyme pour Advanced MOnitoring and COntrol system for anaerobic processes, European FAIR project no. ERB-FAIR-CT96-1198

$$k_3 S_2 \longrightarrow X_2 + k_5 CO_2 + k_6 CH_4$$

où les k_i sont des coefficients stoechiométriques, homogènes à des coefficients de rendement.

Le taux de croissance bactériens $\mu_1(j^{-1})$ de la biomasse acidogène est de type Monod :

$$\mu_1(S_1) = \mu_{1,max} \frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} \tag{4.1}$$

où :

$\mu_{1,max}$ est le taux de croissance maximum de X_1 sur S_1,

K_{S1} est la constante de demi-saturation associée à la consommation de S_1.

La croissance de la biomasse méthanogène est décrite par une cinétique de Haldane $\mu_2(j^{-1})$:

$$\mu_2(S_2) = \mu_{2,max} \frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_I}} \tag{4.2}$$

où :

$\mu_{2,max}$ est le taux de croissance maximum de X_2 sur S_2,

K_{S2} est la constante de demi-saturation associée à la consommation de S_2,

K_I est la constante d'inhibition associée à la consommation de S_2, prenant en considération les effets inhibiteurs de l'accumulation des AGV.

Une variable d'état supplémentaire pour la modélisation de la dynamique du CO_2 et du bicarbonate B est la concentration en carbone inorganique C.

En supposant que les processus décris plus haut ont lieu dans un réacteur $CSTR$ avec un taux de dilution $D(j^{-1})$, les équations différentielles suivantes décrivent l'équilibre de masse pour les six variables d'état.

$$\dot{X}_1 = (\mu_1(S_1) - \alpha D) X_1 \tag{4.3}$$

$$\dot{X}_2 = (\mu_2(S_2) - \alpha D) X_2 \tag{4.4}$$

$$\dot{S}_1 = D(S_{1,in} - S_1) - k_1 \mu_1(S_1) X_1 \tag{4.5}$$

$$\dot{S}_2 = D(S_{2,in} - S_2) - k_2 \mu_1(S_1) X_1 - k_3 \mu_2(S_2) X_2 \tag{4.6}$$

$$\dot{Z} = D(Z_{in} - Z) \tag{4.7}$$

$$\dot{C} = D(C_{in} - C) - q_C + k_4 \mu_1(S_1) X_1 + k_5 \mu_2(S_2) X_2 \tag{4.8}$$

où les k_i sont les coefficients stoechiométriques, l'indice 'in' faisant référence aux concentrations d'entrée et q_C dans l'équation (4.8)) au débit du CO_2. Un paramètre α a été introduit par les auteurs (Bernard et al. [12]) dans le but de modéliser la rétention de biomasse : $\alpha = 0$ correspond à un réacteur à rétention totale de biomasse (par exemple, lit fixe) tandis que $\alpha = 1$ correspond à un réacteur continu idéal sans système de rétention de biomasse. Ce système a été largement étudié dans la littérature. En particulier, son comportement qualitatif (étudier ses points d'équilibre et leur stabilité) a été étudié par Sbarciog et al. [90] pour $\alpha = 1$ et a été étendu au cas $\alpha \neq 1$

par Benyahia et al. [10].

En ce qui concerne l'équilibre inorganique et le calcul du pH, les auteurs ont supposé que le carbone inorganique est composé principalement de dioxyde de carbone CO_2 dissout et de bicarbonate B, ignorant la quantité de carbonate dans des conditions de fonctionnement dites "normales" (définies par un pH entre 6 et 8 et une température entre 35 et 38° C). La présence de deux biomasses est régulée par l'équilibre chimique du CO_2 dans sa forme aqueuse.

L'alcalinité totale (Z) est définie comme la somme des acides dissociés dans la phase liquide, c'est-à-dire le bicarbonate et les AGV ; ces derniers étant considérés comme complètement dissociés dans la gamme de pH considérée.

Toutefois, le modèle original AM2 a été développé à l'origine pour décrire le processus de dégradation anaérobie appliqué à des eaux usées industrielles telles que les effluents de vinasse qui contiennent principalement des solubles, de la matière organique à base de glucides pour lesquelles la désintégration/hydrolyse est sans importance (Bernard et al. [12]).

Par conséquent, l'AM2 doit être modifié quand il est utilisé pour modéliser la dégradation de substrats complexes et protéiques tels que des boues.

Dans ce sens, nous trouvons dans la littérature des travaux traitant de la modification de l'AM2, en l'occurrence les travaux de Benyahia et al. [11]. Les auteurs ont proposé de modifier le schéma réactionnel de l'AM2 en ajoutant un nouveau composé afin de prendre en considération la production et la dégradation des produits microbiens solubles (SMP) dans un AMBR. Mairet et al. ([68]) ont précisé dans leur travaux que les nombreuses simulations numériques sur l'AM2 ont révélé que ce dernier ne pouvait pas décrire avec précision la digestion anaérobie de micro-algues et que cela nécessitait donc l'apport de modifications ultérieures du modèle.

4.3 Introduction de l'étape d'hydrolyse et de la libération de l'azote ammoniacal dans l'AM2

Pour élargir le champs d'applicabilité de l'AM2, la première modification est d'inclure l'étape de désintégration\hydrolyse qui décrit la dégradation en substances organiques solubles (acides aminés et acides gras) de la matière organique composée et des composés à grands poids moléculaires tels que les lipides, les polysaccarides et les protéines. De tels modèles à trois étapes ont été étudiés par Fekih Salem et al [32] qui ont présenté une version modifiée de l'AM2 où l'étape d'hydrolyse a été introduite, faisant apparaitre des points d'équilibre positifs et mettant en évidence de possibles bi-stabilités.

Lorsque la matière organique à convertir en méthane est particulaire, l'hydrolyse est souvent reconnue comme l'étape limitante dans le processus global de digestion (Vavilin et al. [106]). Cela est typiquement le cas de la digestion anaérobie des boues activées (WAS). Dans l'ADM1, la désintégration et l'hydrolyse sont décrits comme des processus convertissant les matières organiques particulaires sous forme soluble, et dont le taux est décrit par une cinétique du premier ordre :

$$\rho_H = k_{hyd}.X \tag{4.9}$$

où k_{hyd} est la constante d'hydrolyse (j^{-1}), X est la concentration du substrat particulaire ($kg\,m^{-3}$) et ρ est le taux d'hydrolyse du substrat ($kg\,m^{-3}\,j^{-1}$).

Dans la proposition de modification de l'AM2, la variable qui subira l'hydrolyse est représentée par le substrat particulaire total X_T, incluant les substrats particulaires relatifs aux matériel composite (X_C), glucides (X_{ch}), protéines (X_{pr}) et lipides (X_{li}). Pour préserver la simplicité du modèle, nous avons fait le choix de ne pas considérer séparément l'hydrolyse de chacun de ces éléments mais de les considérer comme un unique substrat particulaire.

L'hydrolyse de X_T dans l'AM2 peut être représentée par le schéma réactionnel suivant :

$$X_T \xrightarrow{\rho_H} S_1$$

Nous introduisons ainsi une variable d'état supplémentaire (X_T), i.e., une équation différentielle supplémentaire, et le système différentiel décrit précédemment (Eqs. (4.3)-(4.8)) nécessite une modification en ajoutant une équation différentielle décrivant l'équilibre de masse de X_T :

$$\dot{X_T} = D(X_{T,in} - X_T) - k_{hyd}X_T \tag{4.10}$$

et en modifiant l'équation (4.5) de la manière suivante :

$$\dot{S_1} = D(S_{1,in} - S_1) - k_1\mu_1(S_1)X_1 + k_{hyd}X_T \tag{4.11}$$

Par la suite, nous introduisons dans l'AM2 l'ammonium (NH_4^+) libéré de l'hydrolyse des protéines afin de prendre en considération sa contribution dans l'alcalinité de la solution. Dans l'AM2, trois espèces sont caractérisées par la teneur en azote : le substrat dégradable $S_1(N_{S1})$, la biomasse acidogène $X_1(N_{bac})$ et la biomasse méthanogène $X_2(N_{bac})$.

Une fois encore, dans le but de rester simple, l'azote ammoniacal n'a pas été inclut comme une variable d'état supplémentaire, mais la dynamique de la libération de N a été incluse dans l'équation différentielle de l'équilibre de masse de l'alcalinité Z :

$$\dot{Z} = D(Z_{in} - Z) + (k_1N_{S1} - N_{bac})\mu_1(S_1)X_1 - N_{bac}\mu_2(S_2)X_2 + k_{d,1}N_{bac}X_1 + k_{d,2}N_{bac}X_2 \tag{4.12}$$

où : N_{bac} et N_{S1} sont la teneur en azote des bactéries et du substrat S_1 respectivement et, $k_{d,1}$ et $k_{d,2}$ sont les taux de mortalité des biomasses X_1 et X_2 respectivement.

Cette modification rend l'alcalinité dépendante des espèces réactives alors que ce n'est pas le cas dans l'AM2 original. Pour mieux comprendre ce principe, nous rappelons, ci-dessous, quelques notions sur l'alcalinité.

Notions sur l'alcalinité

L'alcalinité est la somme stoechiométrique de toutes les bases dans la solution, i.e., toutes les espèces chimiques qui acceptent H^+.

Dans les digesteurs anaérobie, les espèces chimiques suivantes et l'équilibre correspondant contribuent à l'alcalinité

totale (Alc) :

Bicarbonate : $HCO_3^- + H^+ \longleftrightarrow H_2CO_3$

AGV : $Ac^- + H^+ \longleftrightarrow HAc$

Ions Hydroxyde : $OH^- + H^+ \longleftrightarrow H_2O$

Ammoniaque libre : $NH_3 + H^+ \longleftrightarrow NH_4^+$

En ignorant toute contribution de l'alcalinité, le bicarbonate et les AGV sont alors les principales espèces qui contribuent à l'alcalinité de façon à avoir :

$$[Alc] = [Cat] - [An] \tag{4.13}$$

où [Cat] et [An] sont les concentrations de ces ions (cations et anions) qui ne sont pas affectés par le processus de digestion anaérobie et est ainsi une espèce non réactive, i.e., ce qu'on appelle le "déséquilibre de charge" (Dochain et Vanrolleghem [26]). En effet, Mairet et al. [67] ne nomment pas 'z' "alcalinité" mais "déséquilibre de charge". De plus, "z" est appelé alcalinité lorsqu'il est supposé que l'ammoniaque ne contribue pas à l'alcalinité (comme supposé, par exemple, par Bernard et al. [12]) ce qui est une hypothèse raisonnable dans plusieurs cas (Par exemple, lors du traitement de déchets contenant des sucres).

Mais à chaque fois que les protéines sont impliquées, alors il est préférable de considérer que l'ammoniaque contribue à l'alcalinité. Ce concept est généralement accepté (Sialve et al. [94]). Effectivement, les équations 8 et 25 dans les travaux de Mairet et al. [67] font référence à une quantité qui correspond à l'alcalinité seulement si la contribution de l'ammoniaque dans l'alcalinité n'est pas prise en compte. Dans ce cas, il y a une différence entre le "déséquilibre de charge" et le "Z" que nous avons utilisé pour décrire l'alcalinité dans l'AM2HN. De fait, le "déséquilibre de charge" ne coïncide plus avec l'alcalinité.

4.4 Association des variables de l'ADM1 et de l'AM2HN

Dans la littérature, des procédures de regroupement de variables ont été proposées dans le but de lier et connecter des modèles existants qui ont été développés séparément et qui utilisent différents groupes de variables d'état. L'ADM1 a souvent été impliqué dans des procédures d'interface, notamment avec les modèles de boues activées ASM (Aerobic Sludge Models), parmi ceux-ci nous pouvons citer Copp et al. [24] et Nopens et al. [77]. Par ailleurs, Vanrolleghem et al. ([105]) ont présenté un cadre général pour rendre l'association de variables possible. Leur idée est basée sur des équations algébriques qui constituent des interfaces entre les modèles.

Afin de pouvoir utiliser les données simulées par l'ADM1 pour étalonner le modèle AM2 original ou le modèle modifié AM2HN, nous proposons une procédure d'interface établissant une correspondance entre le grand nombre de variables modélisées par l'ADM1 et les quelques variables de l'AM2 ou l'AM2HN.

L'explication de cette procédure d'association ainsi que le raisonnement menant au regroupement des variables sont présentés ci-après.

La concentration du substrat organique S_1 dans l'AM2 correspond aux substrats solubles dans l'ADM1. Ils in-

cluent les sucres, les acides aminés et gras et la DCO particulaire (composés, protéines, lipides et glucides) car ils représentent souvent un pourcentage non négligeable de la DCO totale et ne peuvent donc pas être ignorés.

La concentration du substrat organique S_1 dans l'AM2HN correspond seulement aux substrats solubles de l'ADM1 ; les composés particulaires du substrat de l'influent sont pris en compte dans la variable X_T de l'AM2HN.

Dans ce qui suit, l'association de variables est la même pour les modèles AM2 et AM2HN. La concentration totale des AGV, y compris les composés solubles valérique, butyrique, propionique et acide acétique, est représentée par S_2.

Dans l'AM2 et l'AM2HN, les sept différentes populations bactériennes de l'ADM1 appartiennent seulement à deux familles : l'une X_1, est responsable de l'acidogenèse, et l'autre X_2 est responsable de l'acétogenèse et de la méthanisation. Les micro-organismes responsables de la dégradation des sucres, acides aminés et gras sont groupés dans la première famille tandis que les autres, convertissant l'hydrogène et les acides volatiles en méthane, appartiennent à la seconde.

En ce qui concerne les espèces de carbone inorganique, rassembler les variables concernées n'est pas nécessaire car la correspondance entre les variables de l'ADM1 et les variables rassemblées de l'AM2 et de l'AM2HN est directe. Le carbone inorganique total C, le bicarbonate B et le dioxyde de carbone dissout CO_2 correspondent à S_{ic}, S_{CO_3} et S_{CO_2} respectivement (idem par rapport au pH). D'autre part, l'alcalinité Z doit être calculée à partir des espèces qui y contribuent : AGV, bicarbonate et azote ammoniacal.

Les débits de gaz, exprimés dans l'AM2HN comme des taux de production molaires ($mmol\, L^{-1}\, j^{-1}$), sont exprimés comme débit massique dans l'ADM1. Ainsi, ils correspondent correctement aux taux de transfert de gaz du méthane et du dioxyde de carbone. Le gaz hydrogène n'est pas pris en compte par l'AM2HN. La pression partielle du CO_2 (P_C) doit donc être calculée comme le rapport entre la pression partielle du CO_2 dans l'ADM1 (p_{gaz,CO_2}) et la somme des pressions partielles dues au méthane et au CO_2, l'unique constituant biogaz dans l'AM2HN.

Une description des correspondances décrites ci-dessus entre les deux groupes de variables est résumée dans le Tableau (4.1). Étant donné que les unités de mesure respectives ne correspondent pas toujours, un facteur de conversion a quelque fois été nécessaire.

TABLE 4.1 – Variables de l'AM2 et l'AM2HN et leur correspondance proposée avec les variables de l'ADM1

	Variable	Modèle	ADM1	Conversion
Variables d'état	$X_T\,[kgDCO\,m^{-3}]$	AM2	-	-
		AM2HN	X_C, X_{ch}, X_{pr}, $X_{li}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$X_C + X_{ch} + X_{pr} + X_{li}$
	$S_1\ [kgDCO\,m^{-3}]$	AM2	S_{su}, S_{aa}, S_{fa}, X_C, X_{ch}, X_{pr}, $X_{li}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$S_{su} + S_{aa} + S_{fa} + X_C + X_{ch} + X_{pr} + X_{li}$
		AM2HN	S_{su}, S_{aa}, $S_{fa}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$S_{su} + S_{aa} + S_{fa}$
	$S_2\ [mM]$	AM2, AM2HN	S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, $S_{ac}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$(\frac{S_{va}}{208} + \frac{S_{bu}}{160} + \frac{S_{pro}}{112} + \frac{S_{ac}}{64}).1000$
	$X_1\ [kgSV\,m^{-3}]$	AM2, AM2HN	X_{su}, X_{aa}, $X_{fa}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$(X_{su} + X_{aa} + X_{fa})/1.55$
	$X_2\ [kgSV\,m^{-3}]$	AM2, AM2HN	X_{ac}, X_{h2}, X_{c4}, $X_{pro}\,[kgDCO\,m^{-3}]$	$(X_{ac} + X_{h2} + X_{c4} + X_{pro})/1.55$
	$C[mM]$	AM2, AM2HN	$S_{ic}\,[M]$	$S_{ic}.1000$
	$Z[mM]$	AM2, AM2HN	S_{va}, S_{bu}, S_{pro}, $S_{ac}\,[kgDCO\,m^{-3}]$, $S_{hco3}\,[M]$	$(\frac{S_{va}}{208} + \frac{S_{bu}}{160} + \frac{S_{pro}}{112} + \frac{S_{ac}}{64} + S_{hco3}).1000$
Variables de calcul	$CO_2[mM]$	AM2, AM2HN	$S_{co_2}\,[M]$	$S_{co_2}.1000$
	$B[mM]$	AM2, AM2HN	$S_{hco_3}\,[M]$	$S_{hco_3}.1000$
	$pH[-]$	AM2, AM2HN	$pH\,[-]$	-
	$Z_0[mM]$	AM2, AM2HN	$S_{an}\,[M]$	$S_{an}.1000$
	$q_C[mM\,j^{-1}]$	AM2, AM2HN	$\rho_{T,10}\,[M\,j^{-1}]$	$\rho_{T,10}.1000$
	$q_{CH_4}[mM\,j^{-1}]$	AM2, AM2HN	$\rho_{T,9}\,[M\,j^{-1}]$	$\rho_{T,9}.1000$
	$P_C[atm]$	AM2, AM2HN	$P_{gaz,co2}\,[bar]$	$\frac{P_{gaz,co2}}{P_{gaz,co2}+P_{gaz,ch4}}$

4.5 Identification des paramètres de l'AM2 et l'AM2HN

4.5.1 Jeu de données

Dans le but de comparer les prédictions dynamiques des différents modèles, nous devons étalonner les paramètres de l'AM2 et de l'AM2HN.

Les paramètres de l'AM2 modifié sont identifiés à partir d'un jeu de données à l'équilibre obtenu après l'exécution des simulations de l'ADM1 de la digestion anaérobie mésophile à une seule étape de boues activées dans un CSTR sans rétention de biomasse ($\alpha = 1$). La caractérisation des boues activées en termes de variables d'état de l'ADM1 et les paramètres de l'ADM1 sont ceux proposés par Rosen et Jeppsson [87] ; les caractéristiques de l'entrée sont reportées en Annexe C.

Les temps de rétention hydraulique et solide sont des paramètres clés dans les processus anaérobies. Ils doivent être suffisamment élevés pour permettre aux populations actives de rester dans le réacteur, et ne pas limiter l'hydrolyse qui est généralement l'étape limitante lors de la conversion des substrats complexes en méthane. Dans le cas de polluants organiques complexes lentement dégradables, le TRH est un facteur décisif.

A cet effet, les jeux de données à l'équilibre sont obtenus en variant le temps de rétention hydraulique ($HRT = 1/D$) entre 5 et 90 jours.

Les simulations ont été obtenues en utilisant DYMOLA (DYnamic MOdeling LAboratory), une plateforme de simulation basée sur le langage Modelica ([103]). Le jeu de données synthétiques obtenu pour l'étalonnage est reporté en Tableau 4.2.

TABLE 4.2 – Jeu de données à l'équilibre généré par la simulation de l'ADM1 (digestion de boues activées) et utilisé pour étalonner le modèle original AM2 et la version améliorée AM2HN

TRH	$S_1\, kgDCO/m^3$		S_2	X_1	X_2	X_T	Z	C	CO_2	B	pH	q_C	P_c	q_{CH4}
jours	AM2	AM2HN	$kmol\, m^{-3}$	$kgSV\, m^{-3}$	$kgSV\, m^{-3}$	$kgSV\, m^{-3}$	$kmol\, m^{-3}$	$kmol\, m^{-3}$	$kmol\, m^{-3}$	$kmol\, m^{-3}$	-	$kmol\, m^{-3}\, j^{-1}$	atm	$kmol\, m^{-3}\, j^{-1}$
5	2.21	0.92	82.6	1.42	1.12	1.30	145	75	12.4	63	7.01	42.8	0.41	62.4
8	1.25	0.34	31.9	1.39	1.19	0.92	144	123	10.9	112	7.32	27.9	0.37	46.9
10	1.02	0.25	15.3	1.35	1.19	0.78	144	139	10.5	129	7.40	22.6	0.36	39.6
12	0.88	0.20	8.9	1.32	1.17	0.68	144	146	10.3	136	7.43	19.0	0.36	33.8
15	0.73	0.15	5.4	1.27	1.13	0.58	145	150	10.1	140	7.45	15.3	0.36	27.5
17	0.66	0.13	4.3	1.24	1.10	0.53	146	151	10.0	141	7.46	13.6	0.36	24.4
20	0.58	0.12	3.4	1.19	1.06	0.47	146	153	9.9	143	7.47	11.7	0.36	20.9
22	0.54	0.11	3.0	1.16	1.04	0.44	147	153	9.8	144	7.47	10.6	0.36	19.1
25	0.49	0.10	2.6	1.12	1.00	0.40	147	154	9.8	145	7.48	9.4	0.36	16.9
30	0.43	0.08	2.1	1.05	0.94	0.35	148	155	9.7	146	7.48	7.9	0.36	14.2
50	0.30	0.06	1.4	0.86	0.77	0.24	150	159	9.6	149	7.50	4.8	0.36	8.7
70	0.24	0.05	1.2	0.72	0.65	1.19	152	160	9.5	151	7.51	3.5	0.36	6.3
90	0.20	0.05	1.0	0.62	0.56	0.15	153	162	9.5	152	7.51	2.8	0.36	4.9

4.5.2 Procédure d'identification

La complexité et la particularité des processus de digestion anaérobie donnent lieu à certaines considérations lorsqu'il s'agit d'identifier les paramètres d'un modèle. Dans la littérature plusieurs travaux traitent de l'identification paramétrique. Parmi les plus connus nous pouvons citer Ljung ([61]) et Walter et Pronzato ([109]).

Dans la littérature on trouve souvent que les tests "Batch" sont utilisés pour déterminer les paramètres cinétiques dans la digestion anaérobie (Flotats et al. [36] ; Batstone et al. [8] ; Lopez et Borzacconi [64]) et où des méthodes d'estimation telle que la technique de recherche du gradient est utilisée. Cependant, l'inconvénient des tests Batch réside dans le manque d'excitation à l'entrée (vu que l'unique entrée est la condition initiale) ce qui peut mener à un manque de sensibilité des paramètres. Ceci peut être en partie atténué en utilisant différents jeux de conditions initiales (Flotats et al. [36], [37]).

Selon Donoso-Bravo et al. ([27]), une alternative aux tests Batch est la mesure du taux initial de réaction. La méthode d'estimation des paramètres utilisée dans les travaux de Donoso-Bravo et al. ([28]) repose sur la régression non linéaire en utilisant le critère des moindres carrés. Les systèmes "en continu" sont également considérés comme une plateforme pour l'analyse des cinétique (où des séries d'expériences peuvent être menées à différents taux de dilution D). L'inconvénient c'est que cela prend du temps. Une alternative proposée par certains auteurs (Batstone et al. [5] ; Kalfas et al. [55]) et consommant moins de temps est d'évaluer la réponse dynamique d'un réacteur continu après des impulsions de substrats spécifiques. Cette méthode permet l'estimation des paramètres cinétiques de composés spécifiques vu que les impulsions procurent un certain découplage des phénomènes biologiques et par conséquent, une faible corrélation des paramètres et donc une meilleur identifiabilité. Dans ce cas là, la méthode de la sécante est utilisée pour estimer les paramètres.

En ce qui concerne l'ADM1, l'identification paramétrique est basée généralement sur les connaissances des praticiens qui sélectionnent le jeu de paramètres selon leur expérience, sans aucune garantie qu'un autre jeu de paramètres pourrait en définitive prédire le même comportement dynamique.

Quand le modèle en question est simple, certaines modifications mathématiques peuvent être apportées dans le but d'éliminer les EDO, par exemple en travaillant à l'équilibre et d'exprimer les sorties des systèmes en fonction des autres variables. Une fois ces expressions obtenues, une simple régression linéaire peut être utilisée pour estimer les paramètres du modèle.

Une procédure d'identification systématique a été proposée par Bernard et al. ([12]) et appliquée à l'AM2. Cette procédure est basée sur le découplage des paramètres cinétiques ($\mu_{1,max}, \mu_{2,max}, K_{S1}, K_{S2}, K_I, \alpha$), du coefficient de transfert (k_{La}) et des coefficients de rendement (k_i, i=1 à 6) et la séparation de leur identification. Plus précisément, le modèle a été ré-écrit en utilisant un certain nombre de transformations de base de façon à ce que la forme du modèle résultant permette d'identifier certains paramètres en utilisant la régression linéaire.

4.5.3 Notions sur la régression linéaire

4.5.3.1 Définition de la régression

Quand on parle de régression, il s'agit en fait d'ajuster les paramètres d'une fonction pour qu'elle minimise ou maximise un critère sous une ou plusieurs contraintes. Une traduction graphique serait, par exemple, la suivante : ajuster les coefficients d'un polynôme (ou d'une autre fonction) de telle sorte que sa courbe représentative passe au plus près de points donnés.

4.5.3.2 La régression linéaire

Étant donné p fonctions : $F_1(x)$, $F_2(x)$, ..., $F_p(x)$, on considère la fonction $f(x)$ suivante :

$$f(x) = a_1F_1(x) + a_2F_2(x) + ... + a_pF_p(x) = \sum_{i=1}^{p} a_iF_i(x) \tag{4.14}$$

La fonction $f(x)$ comporte p paramètres (a_1, a_2, ..., a_p) qui doivent être ajustés afin que le graphe de f passe au plus près des n points (x_1, y_1), ..., (x_k, y_k), ..., (x_n, y_n).
Il s'agit d'une régression linéaire car les p paramètres apparaissent linéairement dans la formulation de la fonction, bien que les $F_1(x)$, $F_2(x)$, ..., $F_p(x)$ soient quelconques, donc généralement non linéaires en fonction de x.
Dans le cas d'une fonction $f(x\,;\, a_1,\, a_2,\, ...,\, a_p)$ où les paramètres n'interviennent pas linéairement, on parle de régression non linéaire.
Graphiquement, on représente cela dans un plan muni d'un repère orthogonal. L'axe des abscisses indique la variable qui explique et l'axe des ordonnées celle que l'on cherche à expliquer. L'ensemble des données figure sous forme de nuage de points (autant de points que d'observations différentes). Nous observons un nuage de forme plus ou moins rectiligne. Pour trouver l'équation de la droite qui le résume au mieux, il faut minimiser les distances qui la séparent des points. Généralement les distances sont les carrés des distances euclidiennes, d'où l'expression "droite des moindres carrés".
Les tableurs et les logiciels ayant une fonction statistique calculent l'équation de cette fameuse droite d'ajustement ($y = ax + b$), appelée droite de régression empirique ou droite des moindres carrés. Sur Excel, a correspond à la fonction PENTE et b à la fonction ORDONNEE.ORIGINE. On les obtient ensemble par la fonction DROITEREG qui reprend les principaux paramètres d'une régression. En fonction de la dispersion des points autour de la droite, l'ajustement peut être plus ou moins de bonne qualité. Il est mesuré par les coefficients de corrélation (r) et de détermination (R^2).

4.5.4 Procédure d'estimation modifiée

Supposons qu'un certain nombre de variables d'état d'un modèle sont disponibles à la mesure ; sur la base de la structure du modèle (identifiabilité structurelle) ou sur la base du type et de la qualité des données disponibles (identifiabilité pratique), on peut s'attendre à pouvoir attribuer une valeur unique à chaque paramètre du modèle

via l'estimation paramétrique.

Dans le cas de l'identifiabilité structurelle, on examine si, dans le cas de mesures idéales (mesures continues non bruitées qui s'ajustent parfaitement au modèle), tous les paramètres du modèle étudié sont identifiables. L'identifiabilité pratique est complémentaire de l'identifiabilité structurelle, en ce sens que l'on s'intéresse maintenant à l'impact de la qualité des données expérimentales disponibles sur l'identifiabilité des paramètres du modèle étudié (Dochain et Vanrolleghem [26]).

Afin de garantir l'identifiabilité des paramètres, l'approche de Bernard et al. [12] a été appliquée dans ce travail pour l'AM2HN.

Tout d'abord, le modèle AM2 a été calé. Cependant, en considérant les données de simulation obtenues avec des TRH élevés (plus de 12 jours) plusieurs paramètres étaient négatifs ou bien n'avaient pas de sens physique. Ceci peut être expliqué par l'absence d'un terme de mortalité dans le taux de croissance de la biomasse qui augmente d'une manière importante à des TRH élevés car le temps de séjour de la biomasse est assez grand pour rendre le processus de mortalité important.

Ainsi, un taux de mortalité, k_d, a été introduit pour les deux sortes de biomasse et a été fixé arbitrairement égal à 10% des taux maximum de croissance bactérienne $\mu_{1,max}$ et $\mu_{2,max}$ dans les équations (4.15) et (4.16) :

$$\mu_1(S_1) = \mu_{1,max}\frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} - k_{d,1} = \mu_{1,max}\frac{S_1}{S_1 + K_{S1}} - 0.1\mu_{1,max} \tag{4.15}$$

$$\mu_2(S_2) = \mu_{2,max}\frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_I}} - k_{d,2} = \mu_{2,max}\frac{S_2}{S_2 + K_{S2} + \frac{S_2^2}{K_I}} - 0.1\mu_{2,max} \tag{4.16}$$

En introduisant le processus de mortalité, la procédure de linéarisation décrite par Bernard et al. ([12]) n'est donc plus applicable. Par conséquent, une procédure modifiée a été développée comme cela est décrit ci-dessous.

Paramètres cinétiques

A l'équilibre, nous avons à partir des équations (4.3)) et (4.4) :

$$\mu_1(S_1) = \alpha D \tag{4.17}$$

$$\mu_2(S_2) = \alpha D \tag{4.18}$$

et à partir de l'équation (4.15), l'expression suivante :

$$\bar{S_1} = \frac{\alpha}{0.9\mu_{1,max}}D\bar{S_1} + \frac{\alpha K_{S1}}{0.9\mu_{1,max}}D + 0.11K_{S1} \tag{4.19}$$

L'expression (4.19) contient deux paramètres opérationnels, α et D, qui sont connus. La régression sur cette relation nous donne les valeurs de $\mu_{1,max}$ et K_{S1}.

Les équations (4.16) et (4.18) fournissent la relation :

$$\bar{S_2} = \frac{\alpha}{0.9\mu_{2,max}}D\bar{S_2} + \frac{\alpha K_{S2}}{0.9\mu_{2,max}}D + 0.11K_{S2} + \frac{\alpha}{0.9\mu_{2,max}K_I}D\bar{S_2}^2 + \frac{0.11}{K_I}\bar{S_2}^2 \tag{4.20}$$

La régression sur cette relation donne les valeurs de $\mu_{2,max}$, K_{S2} et K_I.

L'équilibre de X_T mène à l'équation équivalente suivante :

$$D(X_{T,in} - \bar{X_T}) = k_{hyd}\bar{X_T} \tag{4.21}$$

La régression sur cette relation donne la valeur de k_{hyd}.

Coefficient de transfert liquide-gaz

Pour estimer la valeur du coefficient de transfert liquide-gaz k_{La}, nous utilisons la même équation que celle utilisée par Bernard et al. [12] vu que l'introduction du terme de mortalité n'affecte pas l'équilibre physico-chimique.

D'après Bernard et al. [12], le débit du CO_2, q_C, est donné par l'équation suivante :

$$q_C = k_{La}(CO_2 - K_H P_C) \tag{4.22}$$

Et le carbone inorganique total dans la gamme de pH considérée est égal à :

$$C = CO_2 + B \tag{4.23}$$

A partir des mesures du pH, C et la pression partielle du dioxyde de carbone (P_C) à l'équilibre, la régression s'écrit :

$$\bar{q_C} = k_{La}[\bar{C}\frac{1}{1+10^{pH-pK_b}} - K_H\bar{P_C}] \tag{4.24}$$

où

$$pK_b = -log(K_b) \tag{4.25}$$

$$\bar{CO_2} = \frac{\bar{C}}{1+10^{pH-pK_b}} \tag{4.26}$$

où K_b indique la constante d'équilibre de la dissociation du bicarbonate, i.e., $K_b = \frac{[H^+]B}{CO_2}$

Coefficients stoechiométriques

A partir de l'équation (4.17) et en réécrivant l'expression de l'équilibre de S_1, l'équation (4.27) est déduite, menant à l'estimation de k_1 :

$$D(S_{1,in} - \bar{S_1}) + k_{hyd}\bar{X_T} = k_1\alpha D X_1 \tag{4.27}$$

En considérant l'expression du débit du méthane, la relation suivante est obtenue :

$$\frac{\bar{q_{ch4}}}{\bar{X_2}} = \alpha k_6 D \tag{4.28}$$

La régression de la relation ci-dessus donne l'estimation de k_6.

Les paramètres k_2 et k_3 sont identifiés à partir de l'expression de l'équilibre de S_2, obtenant l'estimation représentée dans l'équation (4.29) :

$$D(S_{2,in} - \bar{S}_2) = k_3 \alpha D \bar{X}_2 - k_2 \alpha D \bar{X}_1 \tag{4.29}$$

Les deux derniers coefficients de rendement k_4 et k_5 sont identifiés à partir de la régression suivante obtenue à partir de l'expression de l'équilibre du carbone inorganique total C :

$$q_C - D(C_{in} - \bar{C}) = k_4 \alpha D \bar{X}_1 + k_5 \alpha D \bar{X}_2 \tag{4.30}$$

Les taux de croissance maximum ($\mu_{1,max}$ et $\mu_{1,max}$) de l'AM2 et l'AM2HN correspondent aux taux de croissance spécifiques de l'ADM1 (i.e. $k_{m,i}$) multipliés par les coefficients de rendement respectifs (i.e. Y_i).

Étant donné que plusieurs groupes bactériens sont considérés dans l'ADM1, les paramètres de l'AM2 et l'AM2HN sont comparés aux valeurs moyennes de l'ADM1 pour le taux de croissance maximum, les constantes de demi-saturation et les coefficients de rendement. Ces considérations peuvent se traduire de la manière suivante :

$$\mu_{1,max} = \frac{1}{3}(k_{m,su} Y_{su} + k_{m,aa} Y_{aa} + k_{m,fa} Y_{fa}) \tag{4.31}$$

$$\mu_{2,max} = \frac{1}{4}(k_{m,c4} Y_{c4} + k_{m,pro} Y_{pro} + k_{m,ac} Y_{ac} + k_{m,h2} Y_{h2}) \tag{4.32}$$

Les coefficients stoechiométriques dans l'AM2 et l'AM2HN (i.e. k_i) correspondent à l'inverse des coefficients de rendement de l'ADM1 (i.e. Y_i). Là aussi, les valeurs moyennes de rendement prises en considération dans l'ADM1 sont utilisées pour la comparaison avec les paramètres étalonnés de l'AM2 et l'AM2HN, comme cela est montré dans les Tableaux 4.3 et 4.4.

TABLE 4.3 – Comparaison entre les coefficients de rendement de l'AM2, l'AM2HN et les valeurs moyennes de l'ADM1

Coefficients de rendement	Unité	ADM1	AM2		AM2HN	
			Moyenne	Dev. St.	Moyenne	Dev. St.
Y_1	$kgDCO_X(kgDCO_S)^{-1}$	0.08				
$1/k_1$	$kgSV_X(kgDCO_S)^{-1}$		0.07	0.00	0.08	0.00
Y_2	$kgDCO_X(kgDCO_S)^{-1}$	0.052				
$1/k_3$	$kgSV_X(molDCO_S)^{-1}$		0.003	0.00	0.003	0.00

Où :

$$Y_1 = \frac{1}{3}(Y_{su} + Y_{aa} + Y_{fa}) \tag{4.33}$$

$$Y_2 = \frac{1}{4}(Y_{c4} + Y_{pro} + Y_{ac} + Y_{h2}) \tag{4.34}$$

Table 4.4 – Comparaison entre les paramètres cinétiques de l'AM2, l'AM2HN et les valeurs moyennes de l'ADM1

Paramètres	Unité	ADM1	AM2		AM2HN	
			Moyenne	Dev. St.	Moyenne	Dev. St.
$\mu_{1,max}$	$[d^{-1}]$	2.45	0.25	0.10	0.33	0.07
K_{S1}	$[gDCO\,L^{-1}]$	0.40	0.22	0.08	0.40	0.09
$\mu_{2,max}$	$[d^{-1}]$	1.06	0.13	0.16	0.13	0.16
K_{S2}	$[mmol\,L^{-1}]$	1.76	2.93	3.62	2.93	3.62
k_{hyd}	$[d^{-1}]$	10	-	-	5	0
k_{La}	$[d^{-1}]$	200	24	0	24	0

Il faut souligner ici qu'un facteur de conversion est utilisé pour prendre en compte le changement dans les unités de mesure.

Les coefficients de rendement de l'AM2HN et de l'AM2 sont assez similaires à ceux de l'ADM1. Les taux de croissance maximum de l'AM2 et l'AM2HN sont plus faibles que celui de l'ADM1, mais les paramètres de l'AM2 et l'AM2HN font références à seulement deux familles bactériennes dans lesquelles les souches bactériennes hétérogènes sont regroupées, ce qui peut expliquer la différence. Le coefficient de transfert liquide-gaz (k_{La}) dans l'ADM1 est beaucoup plus grand que celui de l'AM2 ou de l'AM2HN. C'est une conséquence de la structure du modèle due aux simplifications appliquées à l'AM2 et l'AM2HN.

4.6 Réponses dynamiques

La capacité de l'AM2 et du modèle proposé AM2HN à prédire le comportement dynamique d'un digesteur anaérobie alimenté en boues activées est étudié en simulant les réponses dynamiques à des perturbations de type échelon dans la composition de l'influent et en comparant de telles réponses à celles attendues en utilisant l'ADM1 comme référence.

Nous avons choisi d'appliquer les perturbations au digesteur anaérobie en augmentant et diminuant la concentration de la DCO en entrée, principalement à travers les composés particulaires X_C, X_{ch}, X_{pr}, X_{li} dont les concentrations ont été augmentées de 20%. La perturbation est un échelon de +20%, suivie d'une diminution vers la valeur d'entrée initiale. Cette perturbation commence au jour 20 et se termine au jour 100. Le temps de rétention hydraulique (TRH) est fixé à 20 jours comme proposé par Rosen et Jeppsson [87].

Les simulations dynamiques ont été encore une fois effectuées en utilisant DYMOLA (DYnamic MOdeling LAboratory).

La comparaison des sorties des modèles ADM1, AM2 et AM2HN est effectuée en utilisant des variables sans dimension (dyn X_i) obtenues en normalisant les valeurs dynamiques ($X_i(t)$) selon leurs valeurs à l'équilibre avant la variation ($\bar{X}_i$), comme suit :

$$dynX_i = \frac{X_i(t)}{\bar{X}_i} \tag{4.35}$$

La comparaison de la sortie des modèles est effectuée de cette manière car, en terme de contrôle, nous sommes intéressés principalement aux dynamiques transitoires des variables.

Les simulations commencent à l'équilibre ce qui veux dire que les valeurs initiales sont égales aux valeurs à l'équilibres de façon à ce que la valeur des variables sans dimension soit égale à 1.

Une attention particulière doit être accordée à la réponse dynamique de S_1 (Figure 4.1).

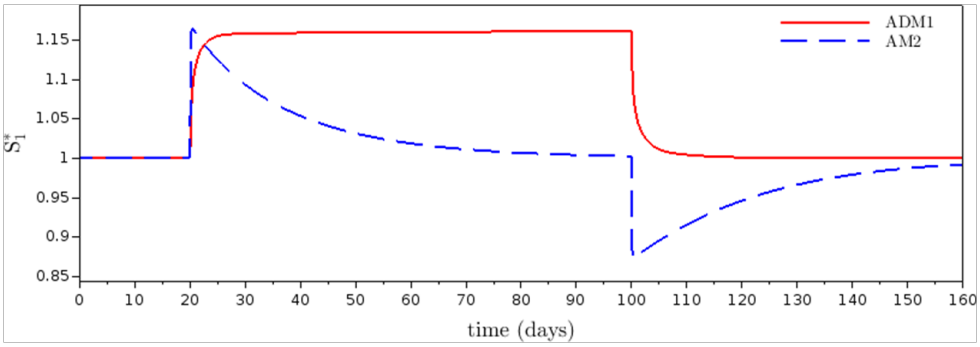

FIGURE 4.1 – Réponse de S_1^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés

Il faut noter que le substrat de boues activées (Rosen et Jeppsson [87]) est composé principalement de DCO particulaire qui, selon le modèle ADM1, subit l'étape d'hydrolyse ; ainsi sa dynamique suit la réponse typique à une entrée de systèmes de premier ordre. D'autre part, dans le modèle AM2, S_1 est dégradée selon la cinétique enzymatique de Michaelis-Menten, ainsi sa réponse dynamique montre un comportement très différent.

Concernant les réponses des AGV (Figure 4.2 (a)), la dynamique ADM1 de S_2 est complètement différente de celle simulée par l'AM2. La dynamique de l'ADM1 montre une grande augmentation de la variable sans dimension,

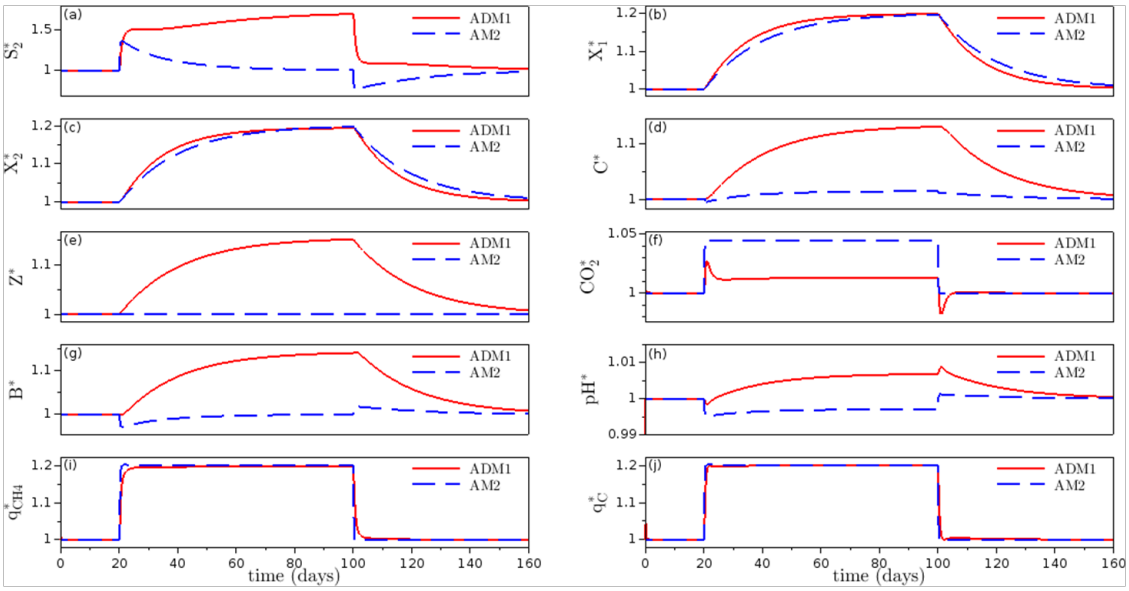

FIGURE 4.2 – Réponse de (a) S_2^* (b), X_1^* (c) X_2^* (d) C^* (e) Z^* (f) CO_2^* (g) B^* (h) pH^* (i) q_{CH4}^* (j) q_C^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés

avec un profil révélant une réponse non linéaire ; de plus, une telle augmentation apparait malgré le fait que la concentration d'AGV dans l'influent n'est pas perturbée. En analysant la composition des AGV dans l'ADM1, qui ont été regroupé dans S_2, il a été découvert que la dynamique dominante était celle de l'acétate (i.e. S_{ac} dans l'ADM1) et que la raison d'une telle augmentation repose dans l'effet inhibiteur de l'ammoniaque libre (NH_3) sur

les méthanogènes générées dans le réacteur. Cet effet inhibiteur n'est pas pris en compte dans l'AM2 car l'équilibre de l'ammonium n'a pas été intégré. Un autre commentaire important concernant S_1 et S_2 (Figures 4.1 et 4.2 (a)) est qu'au jour 100 la concentration de l'influent change ce qui entraine un changement dans S_1 et S_2 différent pour l'ADM1 et l'AM2. Pour l'AM2, la concentration devient faible car pendant la première augmentation la concentration de la biomasse augmente et donc l'équilibre au jour 100 est différent du jour initial ; ainsi, après la diminution au jour 100, S_1 et S_2 reprennent leur valeur d'équilibre précédente qui est atteinte à la fin de la réponse transitoire.

La concentration de la biomasse des deux groupes trophiques est bien simulée (Figure 4.2 (b), (c)) dans le cas de l'AM2 où l'alcalinité Z (Figure 4.2 (e)) semble rester non affectée par la variation de l'influent, révélant sa non-réactivité. Ceci est dû au fait que l'AM2 considère l'alcalinité Z comme associé à des espèces non-réactives. Par conséquent, les réponses de B, C, pH et CO_2 (Figures 4.2 (g), (d), (h), (f)) sont loin de reproduire les dynamiques originales de l'ADM1.

Les résultats montrent une très bonne prédiction des dynamiques des débits du dioxyde de carbone et du méthane. (Figure 4.2 (i), (j)).

Il faut noter que toutes ces simulations ont été répétées avec 20% de diminution dans la DCO de l'entrée (-20%). Les résultats obtenus sont symétriques avec les résultats initiaux (Figures 4.3 et 4.4).

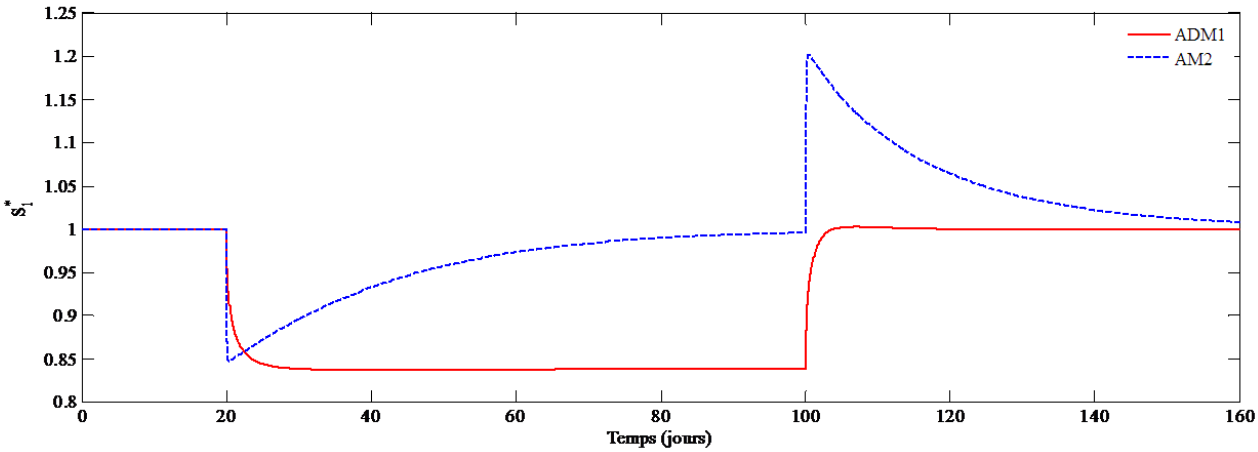

FIGURE 4.3 – Réponse de S_1^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés

Les écarts sont dus principalement au fait que l'alcalinité est modélisée comme associée à des espèces non réactives dans la mesure où l'AM2 ne peut pas décrire la libération de l'ammoniaque due à l'hydrolyse des amino-acides. Par conséquent, la simulation du pH reste insatisfaisante et donc, tous les équilibres associés avec les acides faibles aussi.

En utilisant l'AM2HN, la comparaison des sorties par les variables normalisées sans dimension montre une grande amélioration dans la modélisation des espèces inorganiques. Avec l'introduction de l'étape d'hydrolyse (Figure 4.5), le substrat S_1 inclut seulement des composés solubles alors que les composés particulaires impliqués sont exprimés dans la variable associée X_T (voir Tableau 4.1). Donc, la dynamique de S_1 à partir de l'ADM1 dans ce cas n'est plus de type premier ordre. Ainsi, l'introduction de X_T permet une bien meilleure description du processus de

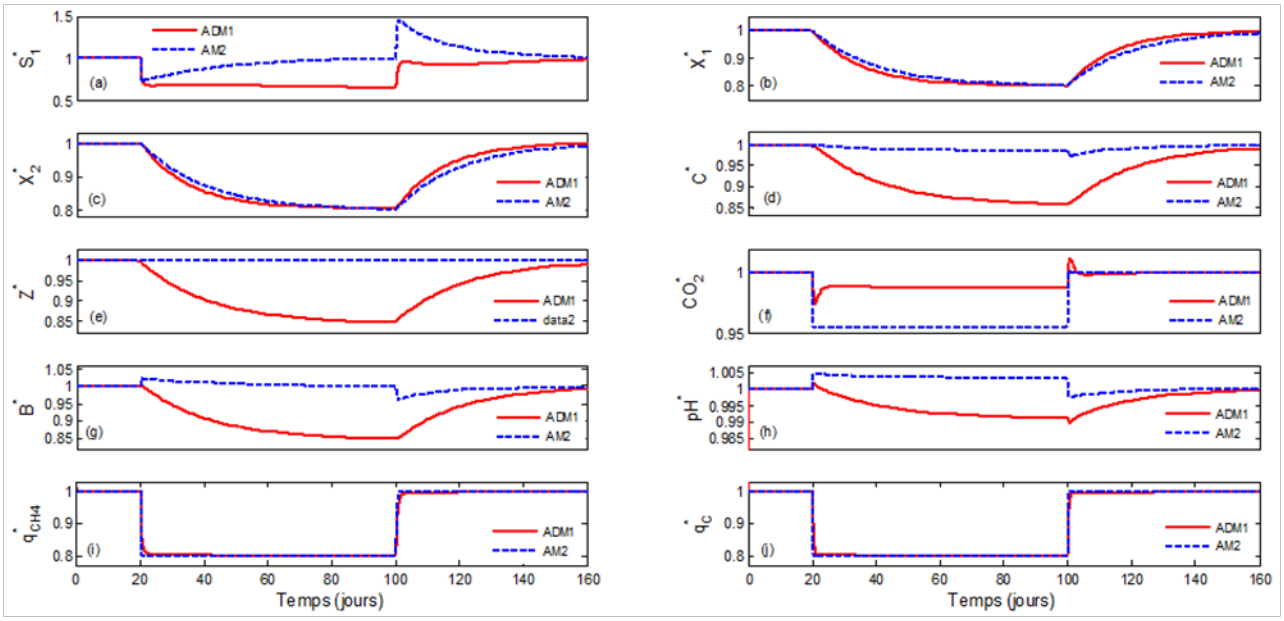

FIGURE 4.4 – Réponse de (a) S_2^* (b) X_1^* (c) X_2^* (d) C^* (e) Z^* (f) CO_2^* (g) B^* (h) pH^* (i) q_{CH4}^* (j) q_C^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2 : pointillés

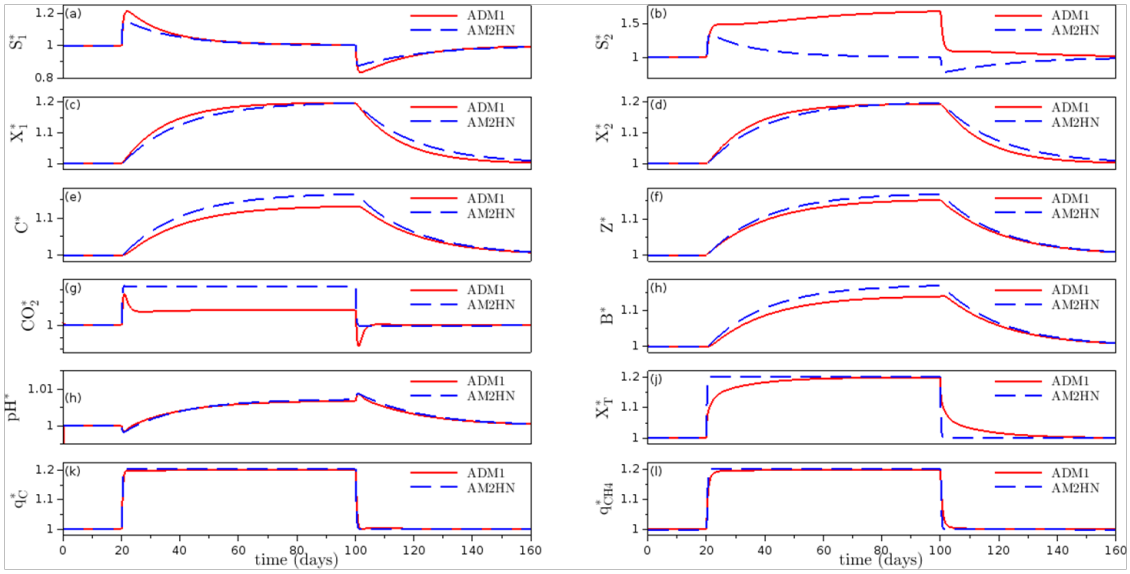

FIGURE 4.5 – Réponse de (a) S_1^* (b) S_2^* (c)X_1^* (d) X_2^* (e) C^* (f) Z^* (g) CO_2^* (h) B^* (i) pH^* (j) X_T^* (k) q_C^* (l) q_{CH4}^* à 20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés

la digestion anaérobie de la matière organique particulaire comme simulé par l'ADM1. En effet, l'AM2HN décrit correctement la dynamique de premier ordre de l'étape d'hydrolyse (Figure 4.5 (j)) et la dégradation enzymatique des composés solubles inclus dans S_1 (Figure 4.5 (a)).

Les dynamiques de l'alcalinité Z sont parfaitement modélisées (Figure 4.5 (f)) ce qui n'était pas le cas dans l'AM2. Il y a une amélioration considérable dans la prédiction du pH (Figure 4.5 (i)) ainsi que les prédictions de C et B (Figure 4.5 (e) et (h)) qui montrent une bonne corrélation avec les simulations. En ce qui concerne les espèces gazeuses, les résultats de simulation montrent de bonnes prédictions du débit de gaz du dioxyde de carbone et du méthane (Figure 4.5 (k) et (l)).

Ces mêmes simulations ont été refaites avec une perturbation de -20% dans la concentration de la DCO en entrée. Les résultats sont présentés ci-dessous.

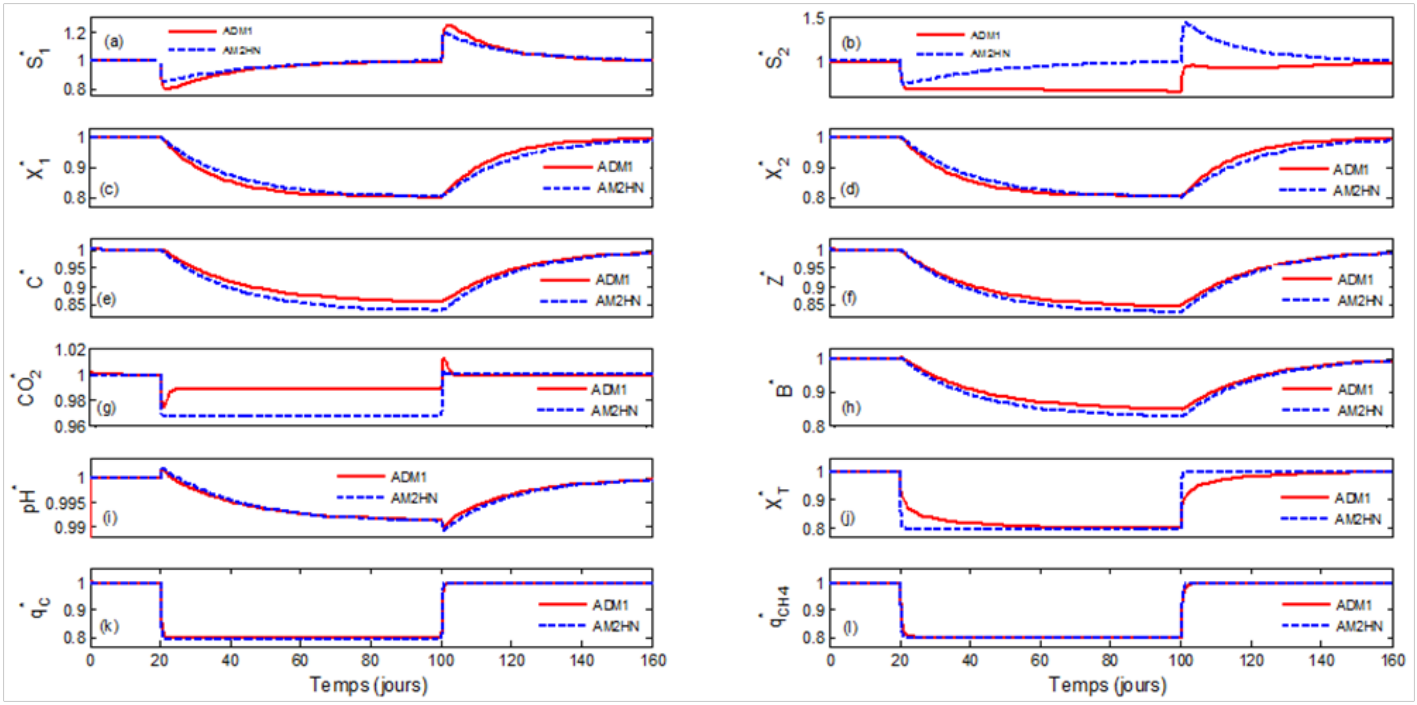

FIGURE 4.6 – Réponse de (a) S_1^* (b) S_2^* (c)X_1^* (d) X_2^* (e) C^* (f) Z^* (g) CO_2^* (h) B^* (i) pH^* (j) X_T^* (k) q_C^* (l) q_{CH4}^* à -20% de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée. ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés

4.7 Robustesse de l'AM2HN

Nous avons étudié la robustesse de l'AM2HN par rapport à la variabilité de l'entrée. Nous devons préciser ici que l'ADM1 que nous avons utilisé comme cas d'étude a été identifié sur des boues comme alimentation typique. Ainsi, nous avons effectué de faibles changements dans la composition de l'alimentation (pourcentage des protéines, glucides et lipides) pour éviter :

- de se déplacer vers des conditions pour lesquelles l'ADM1 lui-même pourrait ne plus être applicable ;
- de simuler des conditions qui ne sont plus réalistes (si les boues sont l'alimentation type, il n'est pas réaliste de s'attendre à de grandes variations dans la composition chimique en entrée).

Pour ces raisons nous limitons le pourcentage de variation des composés individuels X_{ch}, X_{pr} et X_{li} de $X_{T,in}$ à 10% en plus des 20% de variation dans la DCO d'entrée totale. En d'autres termes, ceci mène aux trois cas suivants :

- Cas 1 : $X_{T,in} = 1.2(X_{c,in} + 1.1X_{ch,in} + X_{pr,in} + X_{li,in})$ menant à un changement total de 21.88%
- Cas 2 : $X_{T,in} = 1.2(X_{c,in} + X_{ch,in} + 1.1X_{pr,in} + X_{li,in})$ menant à un changement total de 27.5%
- Cas 3 : $X_{T,in} = 1.2(X_{c,in} + X_{ch,in} + X_{pr,in} + 1.1X_{li,in})$ menant à un changement total de 21.88%

ce qui veut dire que nous explorons le cas d'une augmentation dans la charge totale plus une modification "raisonnable" dans la qualité de l'alimentation [2]. Les résultats de ces nouvelles simulations sont reportés sur les Figures 4.7, 4.8 et 4.9 où l'on peut voir que les résultats sont très similaires à ceux obtenus précédemment (Figure 4.5) montrant les mêmes dynamiques. Il est clair qu'en introduisant des variations dans les quantités des constituants de la concentration d'entrée, cela n'a pas changé d'une manière significative les prédictions concernant les dynamiques de l'AM2HN, laissant suggérer une robustesse satisfaisante de ce modèle par rapport à la composition d'entrée, i.e.

2. Nous avons obtenu des valeurs similaires dans le pourcentage de changement des cas 1 et 3 car les valeurs d'entrée $X_{ch,in}$ et $X_{li,in}$ sont égales (voir Annexe C)

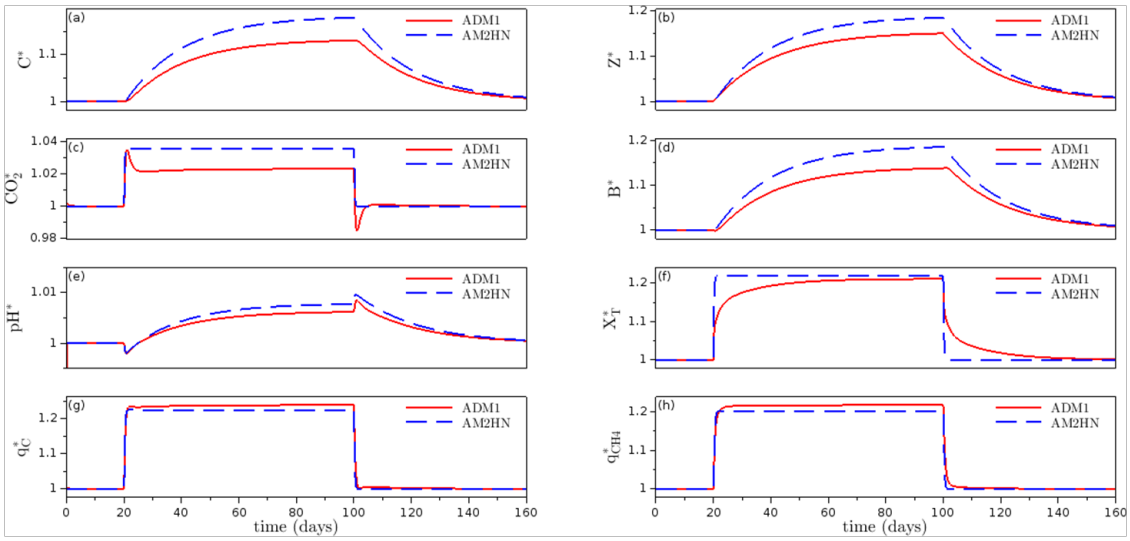

FIGURE 4.7 – Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 1 (+21.88 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés

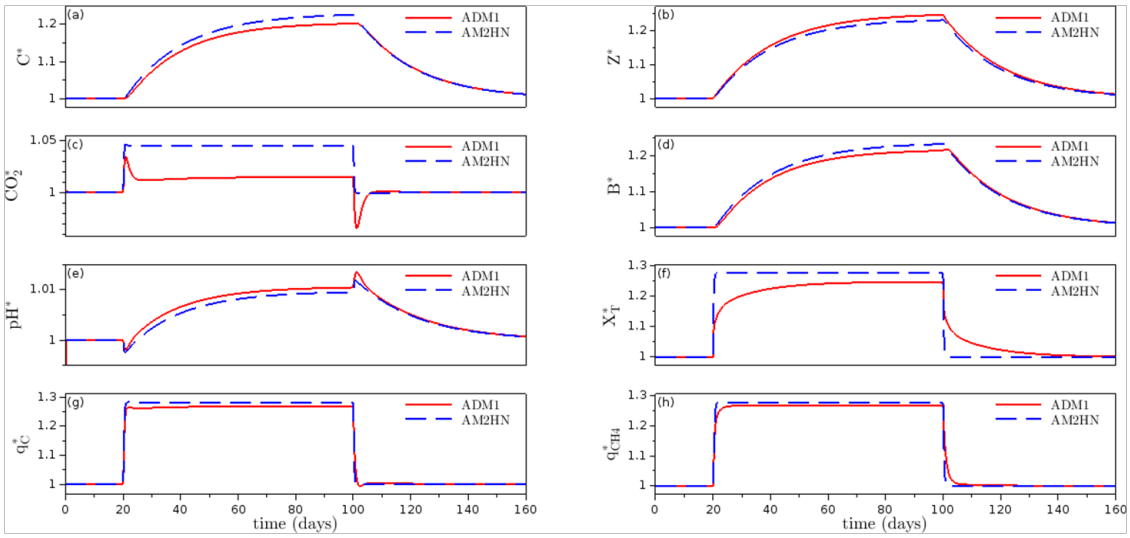

FIGURE 4.8 – Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 2 (+27.5 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés

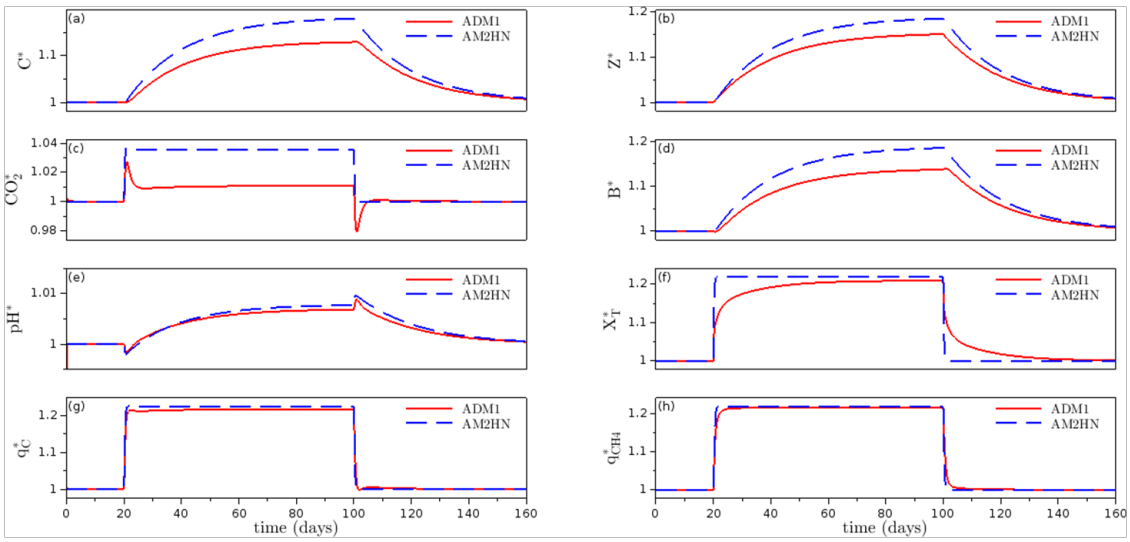

FIGURE 4.9 – Réponse de (a) C^* (b) Z^* (c) CO_2^* (d) B^* (e) pH^* (f) X_T^* (g) q_C^* (h) q_{CH4}^* au cas 3 (+21.88 % de perturbation dans la concentration de la DCO en entrée). ADM1 : trait gras, AM2HN : pointillés

dans la composition chimique de la matière organique avec laquelle le digesteur est alimenté.

4.8 Estimation de la sensibilité

L'analyse de sensibilité a été largement appliquée pour réduire la complexité des modèles, déterminer l'importance des paramètres des modèles et identifier les paramètres dominants.
Dans notre cas, il est important d'évaluer la sensibilité de l'AM2HN par rapport au paramètre de l'hydrolyse k_{hyd} et de la comparer par la suite à celle de l'ADM1 par rapport au même paramètre. Pour cela, nous utilisons la méthode d'analyse de la sensibilité locale relative (Dochain et Vanrolleghem [26]). Si nous prenons une déviation Δp_i pour le paramètre p_i, nous pouvons estimer la sensibilité d'un état par rapport au paramètre correspondant en utilisant l'indice de sensibilité comme suit :

$$\delta_{ij} = \frac{p_i}{y_j(p_i)} \frac{y_j(p_i + \Delta p_i) - y_j(p_i)}{\Delta p_i} 100 \tag{4.36}$$

Pour chaque paramètre p_i, est appliquée une variation absolue Δp_i de 20% de la valeur par défaut. L'indice de sensibilité est alors classifié de la manière suivante :

$1 = \delta_{ij} < 30\%$

$2 = 30\% \leq \delta_{ij} \leq 60\%$

$3 = \delta_{ij} > 60\%$

Les résultats de l'étude de la sensibilité de l'ADM1 et de l'AM2HN par rapport au paramètre d'hydrolyse (Tableau 4.5) montrent que les sensibilités des états impliquant le paramètre d'hydrolyse, i.e., S_1 et X_T sont les mêmes : dans la gamme 3 pour les deux modèles, révélant ainsi le fait que les sensibilités des états impliquant le paramètre d'hydrolyse par rapport à ce dernier sont les mêmes dans les deux modèles.

TABLE 4.5 – Résultats de l'étude de sensibilité de l'ADM1 et de l'AM2HN par rapport au paramètre d'hydrolyse k_{hyd}

Modèle	Variable	Indice de sensibilité
ADM1	S_1	3
AM2HN	S_1	3
ADM1	X_T	3
AM2HN	X_T	3

4.9 Conclusion

La version originale de l'AM2 proposée par Bernard et al. ([12]) reproduit assez fidèlement le processus biologique de la digestion anaérobie, comme simulé par l'ADM1, en supposant que la majeure partie de la matière organique est soluble. Cependant l'AM2 comporte certaines limites car il ne décrit pas la libération de l'ammoniaque

due à l'hydrolyse des amino-acides, ce qui se reflète négativement sur la capacité de reproduire le comportement des espèces inorganiques. En modifiant l'AM2 original et en utilisant une procédure d'association de variables, nous avons obtenu un modèle réduit qui reproduit étroitement le comportement de l'ADM1 avec bien moins de variables, processus et paramètres. En effet, l'AM2HN a donné une description précise des dynamiques de l'ADM1, notamment pour les espèces inorganiques. De plus, les débits de gaz ont été parfaitement reproduits, établissant la cohérence de l'AM2HN dans sa prédiction de la réponse dynamique du biogaz et de ses composants.

Par ailleurs, l'étude de la sensibilité a montré que les variables d'état considérées pour l'ADM1 et l'AM2HN ont la même sensibilité par rapport au paramètre d'hydrolyse, indiquant que l'introduction de nouveaux processus au niveau de l'AM2 a préservé la sensibilité des états. L'AM2HN a également révélé sa robustesse par rapport à des variations modérées dans la composition chimique de l'influent.

Cette étude a été réussie pour des boues activées comme l'alimentation de la DA. Cependant, une procédure similaire peut être appliquée pour d'autres cas d'études étant donné qu'un ADM1 calé est rendu disponible.

Conclusions générales et perspectives

La digestion anaérobie est un procédé de traitement biologique de l'eau et des déchets qui utilise des micro-organismes anaérobies pour dégrader la matière organique qui est un conglomérat de substrats organiques de natures très diverses. C'est en fait un procédé complexe, dans lequel un grand nombre de populations microbiennes interviennent.

De nombreux modèles de la digestion anaérobie ont été proposés dans la littérature. En général, ils sont considérés comme des modèles de connaissance. Si notre objectif est de contrôler un écosystème, le modèle utilisé devra être relativement simple. Ce n'est pas le cas du modèle ADM1 proposé par l'IWA en 2002. En effet, ce modèle contient plusieurs processus et paramètres qui lui permettent de reproduire de manière satisfaisante la réalité. C'est pour cela que nous avons choisi dans cette thèse d'utiliser le modèle ADM1, qui est considéré comme un modèle de référence, pour faire de la réduction de modèle.

La réduction de modèle est un outil puissant qui peut être appliqué dans des disciplines très variées (automatique, électronique, dynamique des fluides, ...). L'idéal est d'obtenir un modèle simple avec un nombre réduit de variables d'état et qui puisse en même temps reproduire d'une manière assez fidèle, les dynamiques du modèle d'origine.

Plusieurs méthodes de réduction existent dans la littérature. Elles peuvent être classifiées selon le domaine d'application et le but de la réduction. Ces méthodes de réduction peuvent être appliquées sur des modèles linéaires ou bien non linéaires.

Dans le cadre de cette thèse, nous avons abordé au premier chapitre la modélisation de la digestion anaérobie avec la présentation du modèle ADM1 et présenté ses limites, notamment en ce qui concerne son application à des fins de contrôle et d'optimisation. Nous avons conclu le chapitre avec un état de l'art sur les méthodes de réduction.

Le deuxième chapitre de cette thèse concerne la réduction de l'ADM1 en utilisant une méthode simple et intuitive appellée Homotopie. Elle est basée sur l'association valeur propre-état et permet de classer les dynamiques du ou des modèles réduits selon différentes échelles de temps. Nonobstant le fait qu'elle ait donné de bons résultats lorsqu'elle a été appliquée sur le modèle ASM1, cette méthode a présenté quelques imprécisions lors de la comparaison des dynamiques de certaines variables des modèles réduits obtenus avec celles du modèle original. En outre, ces résultats nous on permis de mettre le doigt sur les limites de cette méthode qui a été et qui est encore largement utilisée. Ces résultats nous on amenés à choisir une méthode de réduction plus "robuste" pour pouvoir réduire le modèle ADM1.

Le troisième chapitre de cette thèse concerne l'application d'une méthode largement utilisée dans l'ingénierie du contrôle : la méthode des *réalisations équilibrées* qui minimise la différence du modèle réduit avec le modèle original

sur toutes les fréquences. Avec cette méthode nous avons la garantie d'obtenir un modèle réduit stable à partir d'un système initial stable. Après avoir linéarisé le modèle ADM1 autour d'un point de fonctionnement et appliqué cette méthode, nous avons obtenu un modèle réduit d'ordre 7 dont les réponses fréquentielles approximent d'une manière satisfaisante celles du modèle original. Ceci nous a permis de conclure que dans ce cas, le comportement entrée-sortie du modèle d'origine est conservé dans le modèle réduit.

C'est un fait que les résultats obtenus en termes de simplicité du modèle réduit sont des résultats satisfaisants. Cela n'exclut pas le fait d'être à la recherche d'une méthode de réduction qui permette d'obtenir un modèle réduit possédant certaines caractéristiques que nous estimons importantes lorsqu'il s'agit de la modélisation des sciences du vivant : la non linéarité et la signification physique des variables d'état. Dans ce cadre, nous avons présenté dans le chapitre 4 une méthode de réduction de l'ADM1 par association de variables. A partir du modèle AM2 dans lequel nous avons introduit l'étape d'hydrolyse et la libération de l'azote ammoniacal, nous avons obtenu un modèle simple (AM2HN), non linéaire, robuste par rapport à une modification des concentrations d'entrée, présentant la même sensibilité par rapport aux paramètres importants du modèle d'origine et dont les variables d'état peuvent être associées à celles de l'ADM1 de manière systématique.

Perspectives

Parmi les perspectives ouvertes à la suite des travaux de cette thèse, il serait intéressant d'essayer d'appliquer la méthode des réalisations équilibrées sur le modèle ADM1 (non linéaire) et voir ainsi, s'il est possible de réduire un modèle de grande dimension tel que l'ADM1 dans l'espace fonctionnel RKHS en sachant que les auteurs Bouvrie et Hamzi ([18]) ont utilisé cette méthode pour réduire un modèle non linéaire de dimension 7.

Une perspective possible serait également d'utiliser le modèle réduit d'ordre 7 obtenu avec la méthode des réalisations équilibrés pour synthétiser un contrôleur PID pour pouvoir ensuite l'appliquer directement à l'ADM1.

Dans la mesure où la réduction par association de variables a donné de bons résultats pour des boues activées comme l'alimentation de la digestion anaérobie (modèle AM2HN), une perspective intéressante serait d'appliquer une procédure similaire pour d'autres cas d'études, vu que l'ADM1 étalonné est disponible.

Une autre voie intéressante serait l'utilisation effective de l'AM2HN dans des buts de synthèses de commandes et l'étude de ce modèle d'un point de vue mathématique, notamment pour progresser dans l'étude des propriétés qualitatives de l'ADM1 qui n'est pas encore bien compris.

Il serait également possible d'améliorer le modèle AM2HN en introduisant, par exemple, des termes d'inhibitions adéquats dans les équations du modèle pour le rapprocher encore de l'ADM1 mais sans le compliquer d'avantage. Une perspective importante concernant l'AM2HN est sa confrontation aux données expérimentales et d'envisager la synthèse d'observateurs.

Une analyse numérique de l'ADM1 a été effectuée par Bornhoft ([15]). Tirer partie de cette analyse pourrait être considéré comme une perspective afin d'essayer de se rapprocher au mieux du modèle ADM1 à partir des modèles réduits obtenus dans cette thèse.

Bibliographie

[1] A.C. Antoulas. *Approximation of Large-Scale Dynamical Systems.* SIAM, 2005.

[2] A.C. Antoulas and D.C. Sorensen. Approximation of large-scale dynamical systems: an overview. *Int. J. Appl. Math. Comput. Sci.*, 11(5) :1093–1121, 2001.

[3] S. Astals, M. Ariso, A. Gali, and J. Mata-Alvarez. Co-digestion of pig manure and glycerine: Experimental and modelling study. *Journal of Environmental Management*, 92(4) :1091–1096, April 2011.

[4] G. Bastin and D. Dochain. *Online estimation and adaptive control of bioreactors.* Process Measurement and Control, Amsterdam, 1990.

[5] D.J. Batstone and J. Keller. Industrial applications of the IWA anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). *Water Science Technology*, 47(12) :199–206, 2003.

[6] D.J. Batstone, J. Keller, I. Angledaki, S.V. Kalyuzhnyi, S.G. Pavlostathis, A. Rozzi, W.T.M. Sanders, H. Siegrist, and V.A. Vavilin. *Anaerobic Digestion Model No. 1.* IWA Publishing, London, UK, 2002.

[7] D.J. Batstone, J. Keller, and J.P. Steyer. A review of ADM1 extensions, applications, and analysis. *Water Science Technology*, 54(4) :1–10, 2006.

[8] D.J. Batstone, S. Tait, and D. Starrenburg. Estimation of hydrolysis parameters in full-scale anerobic digesters. *Biotechnology and bioengineering*, 102(5) :1513–1520, April 2009.

[9] D.J. Batstone, M. Torrijos, C. Ruiz, and J.E. Schmidt. Use of an anaerobic sequencing batch reactor for parameter estimation in modelling of anaerobic digestion. *Water Science Technology*, 50(10), 2004.

[10] B. Benyahia, T. Sari, B. Cherki, and J. Harmand. Bifurcation and stability analysis of a two step model for monitoring anaerobic digestion processes. *Journal of Process Control*, 22(6) :1008–1019, 2012.

[11] B. Benyahia, T. Sari, B. Cherki, and J. Harmand. Anaerobic membrane bioreactor modeling in the presence of soluble microbial products (SMP) - The Anaerobic Model AM2b. *Chemical Engineering Journal*, 228 :1011–1022, 2013.

[12] 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.

[13] Olivier Bernard. *La modélisation des systmes biologiques : Aller-retours le long des fleuves qui circulent entre l'océan du réel et le lac des modéles.* HDR, Université de Nice-Sophia-Antipolis, 2004.

[14] F. Blumensaat and J. Keller. Modelling of two-stage anaerobic digestion using the IWA Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1). *Water Research*, 39(1) :171–183, 2005.

[15] A. Bornhöft, R. Hanke-Rauschenbach, and K. Sundmacher. Steady-state analysis of the anaerobic digestion model no. 1 (ADM1). *Nonlinear Dynamics*, 73(1-2) :535–549, 2013.

[16] F. Boubaker and B.C. Ridha. Modelling of the mesophilic anaerobic co-digestion of olive mill wastewater with olive mill solid waste using anaerobic digestion model No. 1 (ADM1). *Bioresource Technology*, 99(14) :6565–6577, 2008.

[17] N. Bouleau. *Philosophies des mathématiques et de la modélisation : Du chercheur à l'ingénieur*. L'Harmattan, Paris, 1999.

[18] J. Bouvrie and B. Hamzi. Model reduction for nonlinear control systems using kernel subspace methods. In *48th Annual Allerton Conference on Communication, Control, and Computing*. SIAM, August 2011.

[19] J.D. Bryers. Structured modelling of the anaerobic digestion of biomass particulates. *Biotechnology and Bioengineering*, 27(5) :638–649, May 1985.

[20] R.A. De Carlo and R. Saeks. *Interconnected Dynamical Systems*. New York : Marcel Dekker, 1981.

[21] B. Chachuat. *Méthodologie d'optimisation dynamique et de commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Lorraine, Ecole doctorale RP2E, Décembre 2001.

[22] B. Chachuat, N. Roche, and M.A. Latifi. Réduction du modèle ASM1 pour la commande optimale des petites stations d'épuration à boues activées. *Revue des sciences de l'eau*, 16(1) :5–26, 2003.

[23] A. Chorin. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. *Journal of Computational Physics*, 2 :12–26, 1967.

[24] J.B. Copp, U. Jeppsson, and C. Rosen. Towards an ASM1 - ADM1 state variable interface for plant-wide wastewater treatment modeling. In *Proceedings of the water environment federation*, pages 498–510. WEFTEC, Water Environment Federation, 2003.

[25] D.J. Costello, P.F. Greenfield, and P.L. Lee. Dynamic modelling of a single-state high-rate anaerobic reactor-I. Model derivation. *Water research*, 25(7) :847–858, July 1991.

[26] D. Dochain and P. Vanrolleghem. *Dynamical modelling and estimation in wastewater treatment processes*. IWA Publishing, December 2001.

[27] A. Donoso-Bravo, J. Mailier, C. Martin, J. Rodriguez, C.A. Aceves-Lara, and A. Wande Wouwer. Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: a review. *Water Research*, 45 :5347–5364, 2011.

[28] A. Donoso-Bravo, C. Retamal, M. Carballa, G. Ruiz-Filippi, and Chamy R. Influence of temperature on the hydrolysis, acidogenesis and methanogenesis in mesophilic anaerobic digestion : parameter identification and modeling application. *Water science and technology*, 60(1) :9–17, 2009.

[29] G. Esposito, L. Frunzo, A. Panico, and G. d'Antonio. Mathematical modelling of disintegration-limited co-digestion of OFMSW and sewage sludge. *Water Science Technology*, 58(7) :1513–1519, 2008.

[30] Energie Air et Climat. Disponible sur : http ://www.developpement-durable.gouv.fr/-Energies,198.html.

[31] V. Federovich, P. Lens, and S. Kalyuzehnyi. Extension of Anaerobic Digestion Model No. 1 with processes of sulfate reduction. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 109(1-3) :33–45, April-June 2003.

[32] R. Fekih-Salem, N. Abdellatif, T. Sari, and J. Harmand. Analyse mathématique dąŕun modèle de digestion anaérobie à trois étape. In *ARIMA Journal*, volume 17, pages 53–71. CARI'12, 2014.

[33] Y. Feng, J. Behrendt, C. Wendland, and R. Otterpohl. Implementation of the IWA anaerobic digestion model No.1 (ADM1) for simulating digestion of blackwater from vacuum toilets. *Water Science and Technology*, 53(9) :253–263, 2006.

[34] B. Fezzani and R. Ben Cheikh. 2007. Implementation of IWA anaerobic digestion model no.1 (ADM1) for simulating the thermophilic anaerobic co-digestion of olive mill wastewater with olive mill solid waste in a semi-continuous tubular digester. *Chemical Engineering Journal*, 132(1-3) :195–203, 2007.

[35] B. Fezzani and R. Ben Cheikh. Extension of the anaerobic digestion model no. 1 (ADM1) to include phenolic compounds biodegradation processes for the simulation of anaerobic co−digestion of olive mill wastes at thermophilic temperature. *Journal of Hazardous Materials*, 162(2-3) :1563–1570, 2009.

[36] X. Flotats, B.K. Ahring, and I. Angelidaki. Parameter identification of thermophilic anaerobic degradation of valerate. *Applied biochemistry and biotechnology*, 109(1-3) :47–62, 2003.

[37] X. Flotats, J. Palatsi, B.K. Ahring, and I. Angelidaki. Identifiability study of the proteins degradation model, based on ADM1, using simultaneous batch experiments. *Water science and technology*, 54(4) :31–39, 2006.

[38] Society for Industrial and Applied Mathematics, editors. *Homotopy Method For The Large, Sparse, Real Nonsymmetric Eigenvalue Problem*, volume 18. SIAM J. MATRIX ANAL. APPL, April 1997.

[39] K. Fujimoto and D. Tsubakino. On computation of nonlinear balanced realization and model reduction. In *American Control Conference IEEE*, pages 460–465, Minneapolis, USA, 2006.

[40] S.B. Gadewar, M.F. Doherty, and M.F. Malone. A systematic method for reaction invariants and mole balances for complex chemistries. *Computers and Chemical Engineering*, 25 :1199–1217, 2001.

[41] D. Gaida, C. Wolf, M. Bongards, and T. Back. MATLAB toolbox for biogas plant modelling and optimization. Stuttgart−Hohenheim, International Congress: Progress in Biogas II, April 2011.

[42] A. Galí, T. Benabdallah, S. Astals, and J. Mata−Alvarez. Modified version of ADM1 model for agro-waste application. *Bioresource Technology*, 100(11) :2783–2790, 2009.

[43] C. Garneau, D. Batstone, F.H.A. Claeys, and P.A. Vanrolleghem. Stiffness reduction of complex non-linear models and procedure to maintain solution quality. In *18th World IMACS / MODSIM Congress*, Cairns, Australia, July 2009.

[44] R. Girault, G. Bridoux, F. Nauleau, C. Poullain, J. Buffet, J.P. Steyer, A.G. Sadowski, and F. Béline. A waste characterization procedure for ADM1 implementation based on degradation kinetics. *Water Research*, 46(13) :4099–4110, 2012.

[45] R. Girault, P. Rousseau, J.P. Steyer, N. Bernet, and F. Béline. Combination of batch experiments with continuous reactor data for ADM1 calibration: application to anaerobic digestion of pig slurry. *Water Science Technology*, 63(11) :2575–2582, 2011.

[46] M. De Gracia, P. Grau, E. Huete, J. Gómez, J.L. Garcia−Heras, and E. Ayesa. New generic mathematical model for WWTP sludge digesters operating under aerobic and anaerobic conditions: model building and experimental verification. *Water Research*, 43(18) :4626–4642, 2009.

[47] M. De Gracia, L. Sancho, J. Garcia-Heras, P. Vanrolleghem, and E. Ayesa. Mass and charge conservation check in dynamic models: application to the new ADM1 model. *Water Science Technology*, 53(1) :225–240, 2006.

[48] S.P. Graef and J.F. Andrews. Stability and control of anaerobic digestion. *Water Pollution Control Federation*, 46(4) :667–682, April 1974.

[49] J. Hahn and T.F. Edgar. Reduction of nonlinear models using balancing of empirical gramians and galerkin projections. In *Proceedings of the American Control Conference*, pages 2864–2868, 2000.

[50] M. Henze, CPL. Grady, W. Gujer, GVR. Marais, and T. Matsuo. A general model for single sludge wastewater treatment systems. *Water Research*, 21(5) :505–515, 1987.

[51] R. Herbrich, B. Scholkopf, and A.J. Smola. A generalized representer theorem. pages 416–426. proceedings 14th Annual conference on computational learning theory, 2001.

[52] D.T. Hill and C.L. Barth. A dynamic model for simulation of animal waste digestion. *Journal of Water Pollution Control Federation*, 49(10) :2129–2143, 1977.

[53] E. Huete, M. de Gracia, E. Ayesa, and J.L. Garcia−Heras. ADM1-based methodology for the characterisation of the influent sludge in anaerobic reactors. *Water Science Technology*, 54(4) :157–166, 2006.

[54] J. Jimenez, E. Gonidec, J.A.C. Rivero, E. Latrille, F. Vedrenne, and J.P. Steyer. Prediction of anaerobic biodegradability and bioaccessibility of municipal sludge by coupling sequential extractions with fluorescence spectroscopy: Towards ADM1 variables characterization. *Water Research*, 50 :359–372, March 2014.

[55] H. Kalfas, I.V. Skiadas, H.N. Gavala, K. Stamatelatou, and G. Lyberatos. Application of ADM1 for the simulation of anaerobic digestion of olive pulp under mesophilic and thermophilic conditions. *Water Science and Technology*, 54(4) :149–156, 2006.

[56] G. Kiely, G. Tayfur, C. Dolan, and K. Tanji. Physical and mathematical modelling of anaerobic digestion of organic wastes. *Water research*, 31(3) :534–540, March 1997.

[57] R. Kleerebezem and M.C.M. van Loosdrecht. Critical analysis of some concepts proposed in ADM1. *Water Science and Technology*, 54(4) :51–57, 2006.

[58] C. Kleinstruer and T. Powegha. Dynamic simulator for anaerobic digestion process. *Biotechnology and Bioengineering*, 24(9) :1942–1951, Septembre 1982.

[59] K. Koch, M. Lübken, T. Gehring, M. Wichern, and H. Horn. Biogas from grass silage - Measurements and modeling with ADM1. *Bioresource Technology*, 101(21) :8158–8165, 2010.

[60] A.J. Krener. *Reduced order modeling of nonlinear control systems*, pages 41–62. Springer Berlin Heidelberg, 2008.

[61] Ljung L. *System Identification.* Wiley Encyclopedia of Electrical and Electronics Engineering, 2007.

[62] Libenergy. Produits et Services - Prod. méthane. Disponible sur : http ://www.libenergy.com/index.php ?

[63] L.Y. Lokshina and V.A. Vavilin. Kinetic analysis of the key stages of low temperature methanogenesis. *Ecological modelling*, 117(2) :285–303, May 1999.

[64] I. Lopez and L. Borzacconi. Modelling of slaughterhouse solid waste anaerobic digestion: Determination of parameters and continuous reactor simulation. *Waste management*, 30(10) :1813–1821, 2010.

[65] M. Lübken, M. Wichern, M. Schlattmann, A. Gronauer, and H. Horn. Modelling the energy balance of an anaerobic digester fed with cattle manure and renewable energy crops. *Water Research*, 41 :4085–4096, 2007.

[66] A. Mackiewicz and W. Ratajczak. Principal components analysis. *Computers and Geosciences*, 19(3) :303–342, March 1993.

[67] F. Mairet, O. Bernard, E. Cameron, M. Ras, L. Lardon, Steyer J.P., and B. Chachuat. Three-reaction model for the anaerobic digestion of microalgae. *Biotechnology and Bioengineering*, 109(2) :415–425, February 2012.

[68] F. Mairet, O. Bernard, M. Ras, L. Lardon, and J.P. Steyer. Modeling anaerobic digestion of microalgae using ADM1. *Bioresource Technology*, 102(13) :6823–6829, 2011.

[69] W. Marquardt. Nonlinear model reduction for optimization based control of transient chemical processes. Technical report, Technical report, 2001.

[70] J. Marsden, S. Lall, and S. Glavaski. A subspace approach to balanced truncation for model reduction of nonlinear control systems. *International Journal on Robust and Nonlinear Control*, 12(5) :519–535, 2002.

[71] J. Mata−Alvarez, J. Dosta, S. Macé, and S. Astals. Codigestion of solid wastes: A review of its uses and perspectives including modeling. *Critical Reviews in Biotechnology*, 31(2) :99–111, 2011.

[72] R. Moletta, D. Verrier, and G. Albagnac. Dynamic modelling of anaerobic digestion. *Water Research*, 20(4) :427–434, April 1986.

[73] B.C. Moore. Principal component analysis in linear systems: controllability, observability, and model reduction. *IEEE Transaction on Automatic Control*, 26(1) :17–32, February 1981.

[74] F.E. Mosey. Mathematical modelling of the anaerobic digestion process: regulatory mechanisms for the formation of short-chain volatile acids from glucose. *Water Science Technology*, 15(8-9) :209–232, 1983.

[75] J.E. Nash and J.V. Sutcliffe. River flow forecasting through conceptual models part I- A discussion of principles. *Journal of hydrology*, 10 :282–290, 1970.

[76] A.H. Nayfeh. *Perturbation methods*. 1973.

[77] I. Nopens, D.J. Batstone, J.B. Copp, U. Jeppsson, E. Volcke, J. Alex, and P.A. Vanrolleghem. An ASM/ADM model interface for dynamic plant-wide simulation. *Water Research*, 43 :1913–1923, 2009.

[78] A. Nopharatana, P.C. Pullammanappallil, and W.P. Clark. Kinetics and dynamic modelling of batch anaerobic digestion of municipal solid waste in a stirred reactor. *Waste Management*, 27(5) :595–603, 2007.

[79] W.J. Parker. Application of the ADM1 model to advanced anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 96(16) :1832–1842, November 2005.

[80] B.K.V. Penumathsa, G.C. Premier, G. Kyazze, R. Dinsdale, A.J. Guwy, S. Esteves, and J. Rodríguez. ADM1 can be applied to continuous bio-hydrogen production using a variable stoichiometry approach. *Water Research*, 42(16) :4379–4385, 2008.

[81] R.F.F. Pontes and J.M. Pinto. Analysis of integrated kinetic and flow models for anaerobic digesters. *Chemical Engineering Journal*, 122(1) :65–80, September 2006.

[82] I. Ramirez, A. Mottet, H. Carrère, S. Déléris, F. Vedrenne, and J.P. Steyer. Modified ADM1 disintegration/hydrolysis structures for modeling batch thermophilic anaerobic digestion of thermally pretreated waste activated sludge. *Water Research*, 43(14) :3479–3492, 2009.

[83] I. Ramirez and J.P. Steyer. Modeling microbial diversity in anaerobic digestion. *Water Science Technology*, 57(2) :265–270, 2008.

[84] I. Ramirez, E.I.P. Volcke, R. Rajinikanth, and J.P. Steyer. Modeling microbial diversity in anaerobic digestion through an extended ADM1 model. *Water Research*, 43 :2787–2800, 2009.

[85] R.M. Rifkin. *Everything OLD is New Again: A Fresh Look at Historical Approches in Machine Learning*. PhD thesis, MASSACHUSETTS INSTITUTE OF TECHNOLOGY, 2002.

[86] G.A. Robertson and I.T. Cameron. Analysis of dynamic process models for structural insight and model reduction: Part 1. Structural identification measures. *Computers and Chemical Engineering*, 21(5) :455–473, 1997.

[87] C. Rosen and U. Jeppsson. Aspects on ADM1 implementation within the BSM2 framework. Technical report, Dept. of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University, Box 118, SE-221 00 Lund, Sweden, November 2006.

[88] C. Rosen, D. Vrecko, K.V. Gernaey, M.N. Pons, and U. Jeppsson. Implementing ADM1 for plant-wide benchmark simulations in matlab/simulink. *Water Science Technology*, 54(4) :11–19, 2006.

[89] H. Sandberg and A. Rantzer. Balanced truncation of linear time-varying systems. *IEEE TRANSACTIONS ON AUTOMATIC CONTROL*, 49(2) :217–229, February 2004.

[90] M. Sbarciog, M. Loccufier, and E. Noldus. Determination of appropriate operating strategies for anaerobic digestion systems. *Biochemical Engineering Journal*, 51(3) :180–188, 2010.

[91] J.M.A. Scherpen. *Balancing for Nonlinear Systems*. PhD thesis, University of Twente, 1994.

[92] B. Schölkopf and A. Smola. *Learning with Kernels.* M.I.T Press, 2002.

[93] B. Schölkopf, A. Smola, and Müller K. R. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem. *Neural Computation*, 10(5) :1299–1319, 1998.

[94] B. Sialve, N. Bernet, and O. Bernard. Anaerobic digestion of microalgae as a necessary step to make microalgal biodiesel sustainable. *Biotechnology Advances*, 27(4) :409–416, 2009.

[95] H. Siegrist, D. Renggli, and W. Gujer. Mathematical-modelling of anaerobic mesophilic sewage-sludge treatment. *Water Science and Technology*, 27(2) :25–36, 1993.

[96] H. Siegrist, D. Vogt, J.L. Garcia-Heras, and W. Gujer.

[97] Sierterm. Digestion anaérobie. Disponible sur : http ://www.sierterm.es/tiki-index.php ?page=digestion anaérobie.

[98] P.H. Smith, F.M. Bordeaux, M. Goto, A. Shiralipour, A. Wilke, and J.F. Andrews. Biological production of methane from biomass. In J. R. Frank W. H. Smith, editor, *Methane from biomass. A treatment approach*, pages 291–334, London, 1988. Elsevier.

[99] S.W. Sötemann, N.E. Ristow, M.C. Wentzel, and G.A. Ekama. A steady state model for anaerobic digestion of sewage sludges. *Water SA*, 31(4) :511–528, 2005.

[100] T.S.O. Souza, A. Carvajal, A. Donoso-Bravo, M. Pe na, and F. Fdz-Polanco. ADM1 calibration using BMP tests for modeling the effect of autohydrolysis pretreatment on the performance of continuous sludge digesters. *Water Research*, 47 :3244–3254, 2013.

[101] K. Stamatelatou, L. Sirou, C. Kravaris, and G. Lyberatos. An invariant manifold approach for CSTR model reduction in the presence of multi-step biochemical reaction schemes. Application to anaerobic digestion. *Chemical Engineering Journal*, 150(2-3) :462–475, 2009.

[102] M.A. Steffens, P.A. Lant, and R.B. Newell. A systematic approach for reducing complex biological wastewater treatment models. *Water Research*, 31(3) :590–606, 1997.

[103] Dassault Systèmes. Dymola. http ://www.3ds.com/products-services/catia/products/dymola/.

[104] B. Tartakovsky, S.J. Mu, Y. Zeng, S.J. Lou, S.R. Guiot, and Wu P. Anaerobic digestion model No. 1-based distributed parameter model of an anaerobic reactor: II. Model validation. *Bioresource Technology*, 99(9) :3676–3684, 2008.

[105] P.A. Vanrolleghem, C. Rosen, U. Zaher, J. Copp, L. Benedetti, E. Ayesa, and U. Jeppsson. Continuity-based interfacing of models for wastewater systems described by Petersen matrices. *Water Science and Technology*, 52(1-2) :493–500, 2005.

[106] V.A. Vavilin, S.V. Rytov, L.Y. Lokshina, J.A. Rintala, and G. Lyberatos. Simplified hydrolysis models for the optimal design of two-stage anaerobic digestion. *Water Research*, 35(17) :4247–4251, December 2001.

[107] Veolia. Water2energy. Disponible sur : http ://www.veoliawater2energy.com/fr/mieux-recuperer-l-energie-du-biogaz.

[108] K.V. Waller and P.M. Makila. Chemical reaction invariants and variants and their use in reactor modeling, simulation, and control. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev*, 20(1) :1–11, 1981.

[109] E. Walter and E. Pronzato. *Identification of parametric models from experimental data.* Springer, 1997.

[110] O. Wasynczuk and R.A. Decarlo. The component connection model and structure preserving model order reduction. *Automatica*, 4 :619–626, July 1981.

[111] M. Wichern, T. Gehring, K. Fischer, D. Andrade, M. Lübken, K. Koch, A. Gronauer, and H. Horn. Monofermentation of grass silage under mesophilic conditions: Measurements and mathematical modeling with ADM1. *Bioresource Technology*, 100 :1675–1681, 2009.

[112] U. Zaher, P. Buffiere, J.P. Steyer, and S. Chen. A procedure to estimate proximate analysis of mixed organic wastes. *Water Environment Research*, 81(4) :407–415, 2009.

[113] U. Zaher, J. Rodríguez, A. Franco, and P. A. Vanrolleghem. Application of the IWA ADM1 model to simulate anaerobic digester dynamics using a concise set of practical measurements. Kuala Lumpur, Malaysia, 9th-10th December 2003. IWA Conference on ENVIRONMENTAL BIOTECHNOLOGY, Advancement on Water and Wastewater Applications in the Tropics.

[114] U. Zaher, J. Rodríguez, A. Franco, and P.A. Vanrolleghem. Conceptual approach for ADM1 application. In *Selected proceeding of the IWA international conference*, Water and Environment Managment Series (WEMS), Kuala Lumpur, Malaysia, 2004.

[115] K. Zhou and J.C. Doyle. *Essential of robust control.* May 1999.

Annexe A

Les équations de l'ADM1

A.1 Équations de la phase aqueuse

Équations différentielles des composés solubles

$$\frac{dS_{su}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{su,in} - S_{su}) + \rho_2 + (1 - f_{fa,li})\rho_4 - \rho_5 \tag{A.1.1}$$

$$\frac{dS_{aa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{aa,in} - S_{aa}) + \rho_3 - \rho_6 \tag{A.1.2}$$

$$\frac{dS_{fa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{fa,in} - S_{fa}) + f_{fa,li}\rho_4 - \rho_7 \tag{A.1.3}$$

$$\frac{dS_{va}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{va,in} - S_{va}) + (1 - Y_{aa})f_{va,aa}\rho_6 - \rho_8 \tag{A.1.4}$$

$$\frac{dS_{bu}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{bu,in} - S_{bu}) + (1 - Y_{su})f_{bu,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{bu,aa}\rho_6 - \rho_9 \tag{A.1.5}$$

$$\frac{dS_{pro}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{pro,in} - S_{pro}) + (1 - Y_{su})f_{pro,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{pro,aa}\rho_6 + (1 - Y_{c4})0.54\rho_8 - \rho_{10} \tag{A.1.6}$$

$$\frac{dS_{ac}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{ac,in} - S_{ac}) + (1 - Y_{su})f_{ac,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{ac,aa}\rho_6 + (1 - Y_{fa})0.7\rho_7 + (1 - Y_{c4})0.31\rho_8 \tag{A.1.7}$$

$$+ (1 - Y_{c4})0.8\rho_9 + (1 - Y_{pro})0.57\rho_{10} - \rho_{11}$$

$$\frac{dS_{h2}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{h2,in} - S_{h2}) + (1 - Y_{su})f_{h2,su}\rho_5 + (1 - Y_{aa})f_{h2,aa}\rho_6 + (1 - Y_{fa})0.3\rho_7 + (1 - Y_{c4})0.15\rho_8 \tag{A.1.8}$$

$$+ (1 - Y_{c4})0.2\rho_9 + (1 - Y_{pro})0.43\rho_{10} - \rho_{12} - \rho_{T,8}$$

$$\frac{dS_{ch4}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{ch4,in} - S_{ch4}) + (1 - Y_{ac})\rho_{11} + (1 - Y_{h2})\rho_{12} - \rho_{T,9} \tag{A.1.9}$$

$$\frac{dS_{ic}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{ic,in} - S_{ic}) - \sum_{j=1}^{19}(\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,j}\rho_j) - \rho_{T,10} \tag{A.1.10}$$

$$\frac{dS_{in}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{in,in} - S_{in}) - Y_{su}N_{bac}\rho_5 + (N_{aa} - Y_{aa}N_{bac})\rho_6 - Y_{fa}N_{bac}\rho_7 - Y_{c4}N_{bac}\rho_8 - Y_{c4}N_{bac}\rho_9 \tag{A.1.11}$$

$$- Y_{pro}N_{bac}\rho_{10} - Y_{ac}N_{bac}\rho_{11} - Y_{h2}N_{bac}\rho_{12} + (N_{bac} - N_{xc})\sum_{i=13}^{19}\rho_i$$

$$+ (N_{xc} - f_{xi,xc}N_i - f_{si,xc}N_i - f_{pr,xc}N_{aa})\rho_1$$

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{i,in} - S_i) + f_{si,xc}\rho_1 \tag{A.1.12}$$

Équations différentielles des composés particulaires

$$\frac{dX_c}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{c,in} - X_c) - \rho_1 + \sum_{i=13}^{19}\rho_i \tag{A.1.13}$$

$$\frac{dX_{ch}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{ch,in} - X_{ch}) + f_{ch,xc}\rho_1 - \rho_2 \tag{A.1.14}$$

$$\frac{dX_{pr}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{pr,in} - X_{pr}) + f_{pr,xc}\rho_1 - \rho_3 \tag{A.1.15}$$

$$\frac{dX_{li}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{li,in} - X_{li}) + f_{li,xc}\rho_1 - \rho_4 \tag{A.1.16}$$

$$\frac{dX_{su}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{su,in} - X_{su}) + Y_{su}\rho_5 - \rho_{13} \tag{A.1.17}$$

$$\frac{dX_{aa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{aa,in} - X_{aa}) + Y_{aa}\rho_6 - \rho_{14} \tag{A.1.18}$$

$$\frac{dX_{fa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{fa,in} - X_{fa}) + Y_{fa}\rho_7 - \rho_{15} \tag{A.1.19}$$

$$\frac{dX_{c4}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{c4,in} - X_{c4}) + Y_{c4}\rho_8 + Y_{c4}\rho_9 - \rho_{16} \tag{A.1.20}$$

$$\frac{dX_{pro}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{pro,in} - X_{pro}) + Y_{pro}\rho_{10} - \rho_{17} \tag{A.1.21}$$

$$\frac{dX_{ac}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{ac,in} - X_{pro}) + Y_{ac}\rho_{11} - \rho_{18} \tag{A.1.22}$$

$$\frac{dX_{h2}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{h2,in} - X_{h2}) + Y_{h2}\rho_{12} - \rho_{19} \tag{A.1.23}$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{i,in} - X_i) + f_{xi,xc}\rho_1 \tag{A.1.24}$$

Équations différentielles des cations et anions

$$\frac{dS_{cat}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{cat,in} - S_{cat}) \tag{A.1.25}$$

$$\frac{dS_{an}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{an,in} - S_{an}) \tag{A.1.26}$$

Équations différentielles des ions

$$\frac{dS_{vam}}{dt} = -\rho_{a,4} \tag{A.1.27}$$

$$\frac{dS_{bum}}{dt} = -\rho_{a,5} \tag{A.1.28}$$

$$\frac{dS_{prom}}{dt} = -\rho_{a,6} \tag{A.1.29}$$

$$\frac{dS_{acm}}{dt} = -\rho_{a,7} \tag{A.1.30}$$

$$\frac{dS_{hco3}}{dt} = -\rho_{a,10} \tag{A.1.31}$$

$$\frac{dS_{nh3}}{dt} = -\rho_{a,11} \tag{A.1.32}$$

Équation algébrique

$S_{nh4} = S_{in} - S_{nh3}$

$S_{co2} = S_{ic} - S_{hco3}$

A.2 Équations de la phase gazeuse

Équations différentielles

$$\frac{dS_{gas,h2}}{dt} = -\frac{S_{gas,h2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,8}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{A.2.1}$$

$$\frac{dS_{gas,ch4}}{dt} = -\frac{S_{gas,ch4}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,9}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{A.2.2}$$

$$\frac{dS_{gas,co2}}{dt} = -\frac{S_{gas,co2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,10}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{A.2.3}$$

Équations algébriques

$$p_{gas,h2} = S_{gas,h2}\frac{RT_{op}}{16}$$
$$p_{gas,ch4} = S_{gas,ch4}\frac{RT_{op}}{64}$$
$$p_{gas,co2} = S_{gas,co2}RT_{op}$$

Le débit de gaz est donné par :

$$q_{gas} = k_p(P_{gas} - P_{atm})\frac{P_{gas}}{P_{atm}}$$

La somme dans l'équation (1.19) est donnée par :

$$\sum_{j=1}^{19}(\sum_{i=1-9,11-24} C_i v_{i,j}\rho_j) = \sum_{k=1}^{12} s_k\rho_k + s_{13}(\rho_{13} + \rho_{14} + \rho_{15} + \rho_{16} + \rho_{17} + \rho_{18} + \rho_{19})$$

où

$$s_1 = -C_{xc} + f_{si,xc}C_{si} + f_{ch,xc}C_{ch} + f_{pr,xc}C_{pr} + f_{li,xc}C_{li} + f_{xi,xc}C_{xi}$$

$$s_2 = -C_{ch} + C_{su}$$

$$s_3 = -C_{pr} + C_{aa}$$

$$s_4 = -C_{li} + (1 - f_{fa,li}C_{su} + f_{fa,li}C_{fa}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$s_{13} = -C_{bac} + C_{xc}$$

Le détail des processus est exprimé dans ce qui suit :

Taux des processus biochimiques

$$\rho_1 = k_{dis} X_c$$

$$\rho_2 = k_{hyd,ch} X_{ch}$$

$$\rho_3 = k_{hyd,pr} X_{pr}$$

$$\rho_4 = k_{hyd,li} X_{li}$$

$$\rho_5 = k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_{s,su} + S_{su}} X_{su} I_5$$

$$\rho_6 = k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_{s,aa} + S_{aa}} X_{aa} I_6$$

$$\rho_7 = k_{m,fa} \frac{S_{fa}}{K_{s,fa} + S_{fa}} X_{fa} I_7$$

$$\rho_8 = k_{m,c4} \frac{S_{va}}{K_{s,c4} + S_{va}} X_{c4} \frac{S_{va}}{S_{bu} + S_{va} + 1e-6} I_8$$

$$\rho_9 = k_{m,c4} \frac{S_{bu}}{K_{s,c4} + S_{bu}} X_{c4} \frac{S_{bu}}{S_{va} + S_{bu} + 1e-6} I_9$$

$$\rho_{10} = k_{m,pro} \frac{S_{pro}}{K_{s,pro} + S_{pro}} X_{pro} I_{10}$$

$$\rho_{11} = k_{m,ac} \frac{S_{ac}}{K_{s,ac} + S_{ac}} X_{ac} I_{11}$$

$$\rho_{12} = k_{m,h2} \frac{S_{h2}}{K_{s,h2} + S_{h2}} X_{h2} I_{12}$$

$$\rho_{13} = k_{dec,Xsu} X_{su}$$

$$\rho_{14} = k_{dec,Xaa} X_{aa}$$

$$\rho_{15} = k_{dec,Xfa} X_{fa}$$

$$\rho_{16} = k_{dec,Xc4} X_{c4}$$

$$\rho_{17} = k_{dec,Xpro} X_{pro}$$

$$\rho_{18} = k_{dec,Xac} X_{ac}$$

$$\rho_{19} = k_{dec,Xh2} X_{h2}$$

Cinétiques d'équilibre acide-base

$$\rho_{a,4} = k_{a,Bva}(S_{vam}(K_{a,va} + S_{H^+}) - K_{a,va} S_{va})$$

$$\rho_{a,5} = k_{a,Bbu}(S_{bum}(K_{a,bu} + S_{H^+}) - K_{a,bu} S_{bu})$$

$$\rho_{a,6} = k_{a,Bpro}(S_{prom}(K_{a,pro} + S_{H^+} - K_{a,pro} S_{pro})$$

$$\rho_{a,7} = k_{a,Bac}(S_{acm}(K_{a,ac} + S_{H^+}) - K_{a,ac} S_{ac})$$

$$\rho_{a,10} = k_{a,Bco2}(S_{hco3}(K_{a,co2} + S_{H^+}) - K_{a,co2} S_{ic})$$

$$\rho_{a,11} = k_{a,Bin}(S_{nh3}(K_{a,in} + S_{H^+}) - K_{a,in} S_{in})$$

Taux de transfert des gaz

$$\rho_{T,8} = k_{La}(S_{h2} - 16K_{H,h2}p_{gas,h2})$$

$$\rho_{T,9} = k_{La}(S_{ch4} - 64K_{H,ch4}p_{gas,ch4})$$

$$\rho_{T,10} = k_{La}(S_{co2} - K_{H,co2}p_{gas,co2})$$

Inhibitions

$$I_{5,6} = I_{ph,aa}I_{IN,lim}$$

$$I_7 = I_{ph,aa}I_{IN,lim}I_{h2,fa}$$

$$I_{8,9} = I_{ph,aa}I_{IN,lim}I_{h2,c4}$$

$$I_{10} = I_{ph,aa}I_{IN,lim}I_{h2,pro}$$

$$I_{11} = I_{ph,ac}I_{IN,lim}I_{nh3}$$

$$I_{12} = I_{ph,h2}I_{IN,lim}$$

$$I_{pH,aa} = \begin{cases} \exp(-3(\frac{pH-pH_{UL,aa}}{pH_{UL,aa}-pH_{LL,aa}})^2) & : pH < pH_{UL,aa} \\ 1 & : pH > pH_{UL,aa} \end{cases}$$

$$I_{pH,ac} = \begin{cases} \exp(-3(\frac{pH-pH_{UL,ac}}{pH_{UL,ac}-pH_{LL,ac}})^2) & : pH < pH_{UL,ac} \\ 1 & : pH > pH_{UL,ac} \end{cases}$$

$$I_{IN,lim} = \frac{1}{1+\frac{K_{s,in}}{S_{in}}}$$

$$I_{h2,fa} = \frac{1}{1+\frac{S_{h2}}{K_{I,h2,fa}}}$$

$$I_{h2,c4} = \frac{1}{1+\frac{S_{h2}}{K_{I,h2,c4}}}$$

$$I_{h2,pro} = \frac{1}{1+\frac{S_{h2}}{K_{I,h2,pro}}}$$

$$I_{nh3} = \frac{1}{1+\frac{S_{nh3}}{K_{I,nh3}}}$$

Annexe B

Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés solubles (B.1) et particulaires (B.2)

TABLE 3.2: Biochimical rate coefficients (Vi,)and kinetic rate equations (Pj) for particulate component (i=13-24, j1-19)

Component	i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	Rate kg cod m-3 .d-1)
j	Process	Ssu	Saa	Sfa	Sva	Sbu	Spro	Sac	Sh2	Sch4	Sic	SIN	SI	
1	Desintegration												$f_{SI,XC}$	$k_{dis}.X_c$
2	Hydrolysis carbohydrates	1												$k_{hyd,ch}.X_{ch}$
3	Hydrolysis of Proteins		1											$k_{hyd,pr}.X_{pr}$
4	Hydrolysis of Lipids	$1-f_{fa,li}$		$f_{fa,li}$										$k_{hyd,li}.X_{li}$
5	Uptake of Sugar	-1				$(1-Y_{su}).f_{bu,su}$	$(1-Y_{su}).f_{pro,su}$	$(1-Y_{su}).f_{ac,su}$	$(1-Y_{su}).f_{h2,su}$		$-\sum_{i=5-9,13-24} C_i v_{i,5}$	$-(Y_{su})N_{bac}$		$k_{m,su}\frac{S_{su}}{K_S+S_{su}}X_{su}I_1$
6	Uptake of Aminos Acids		-1		$(1-Y_{aa}).f_{va,aa}$	$(1-Y_{aa}).f_{bu,aa}$	$(1-Y_{aa}).f_{pro,aa}$	$(1-Y_{aa}).f_{ac,aa}$	$(1-Y_{aa}).f_{h2,aa}$		$-\sum_{i=5-9,13-24} C_i v_{i,6}$	$Y_{aa}-(Y_{aa})N_{bac}$		$k_{m,aa}\frac{S_{aa}}{K_S+S_{aa}}X_{aa}I_1$
7	Uptake of LCFA			-1				$(1-Y_{fa}).0.7$	$(1-Y_{fa}).0.3$			$-(Y_{fa})N_{bac}$		$k_{m,fa}\frac{S_{fa}}{K_S+S_{fa}}X_{fa}I_1$
8	Uptake of Valerate				-1		$(1-Y_{c4}).0.54$	$(1-Y_{c4}).0.31$	$(1-Y_{c4}).0.15$			$-(Y_{c4})N_{bac}$		$k_{m,va}\frac{S_{va}}{K_S+S_{va}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{bu}/S_{va}}I_2$
9	Uptake of Butyrate					-1		$(1-Y_{c4}).0.8$	$(1-Y_{c4}).0.2$			$-(Y_{c4})N_{bac}$		$k_{m,bu}\frac{S_{bu}}{K_S+S_{bu}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{va}/S_{bu}}I_2$
10	Uptake of Propionate						-1	$(1-Y_{pro}).0.57$	$(1-Y_{pro}).0.43$		$-\sum_{i=5,13-24} C_i v_{i,10}$	$-(Y_{pro})N_{bac}$		$k_{m,pro}\frac{S_{pro}}{K_S+S_{pro}}X_{pro}I_1$
11	Uptake of Acetate							-1		$(1-Y_{ac})$	$-\sum_{i=5-9,13-24} C_i v_{i,11}$	$-(Y_{ac})N_{bac}$		$k_{m,ac}\frac{S_{ac}}{K_S+S_{ac}}X_{ac}I_3$
12	Uptake of Hydrogen								-1	$(1-Y_{h2})$	$-\sum_{i=5-9,13-24} C_i v_{i,12}$	$-(Y_{h2})N_{bac}$		$k_{m,h2}\frac{S_{h2}}{K_S+S_{h2}}X_{h2}I_1$
13	Decay of Xsu													$k_{dec,Xsu}.X_{su}$
14	Decay of Xaa													$k_{dec,Xaa}.X_{aa}$
15	Decay of Xta													$k_{dec,Xfa}.X_{fa}$
16	Decay of Xc4													$k_{dec,Xc4}.X_{c4}$
17	Decay of Xpro													$k_{dec,Xpro}.X_{pro}$
18	Decay of Xac													$k_{dec,Xac}.X_{ac}$
19	Decay of Xh2													$k_{dec,Xh2}.X_{h2}$
		Monosaccharides (kg COD-m-3)	Amino Acids (kg COD-m-3)	Long chain fatty acids (kg COD-m-3)	Total valerate (kg COD-m 3)	Total butyrate (kg COD-m-3)	Total propionate (kg COD-m-3)	total acetate (kg COD-m-3)	Hydrogen gas (kg COD-m-3)	methane gas (kg COD-m-3)	inorganic carbon (kg COD-m-3)	Inorganic nitrogen (kg COD-m-3)	Soluble inerts (kg COD-m-3)	Inhibition factors(3,7) : $I_1=I_{pH}\, I_{IN,im}$. $I_2=I_{pH}\, I_{IN,im} I_{h2}$. $I_3=I_{pH} I_{IN,im} I_{NH3,XAc}$

FIGURE B.1 – Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés solubles (Batstone et al., [6])

TABLE 3.2: Biochimical rate coefficients (V_{ij}) and kinetic rate equations (ρ_j) for particulate component (i=13-24, j1-19)

Component j	Process i	13 X_c	14 X_{ch}	15 X_{pr}	16 X_{li}	17 X_{su}	18 X_{aa}	19 X_{fa}	20 X_{c4}	21 X_{pro}	22 X_{ac}	23 X_{h2}	24 X_I	Rate kg cod m_{-3} d_{-1}
1	Desintegration	-1	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$								$f_{I,xc}$	$k_{dis}.X_c$
2	Hydrolysis carbohydrates		-1											$k_{hyd,ch}.X_{ch}$
3	Hydrolysis of Proteins			-1										$k_{hyd,pr}.X_{pr}$
4	Hydrolysis of Lipids				-1									$k_{hyd,li}.X_{li}$
5	Uptake of Sugar					Y_{su}								$k_{m,su}\frac{S_{su}}{K_s+S_{su}}X_{su}I_1$
6	Uptake of Aminos Acids						Y_{aa}							$k_{m,aa}\frac{S_{aa}}{K_s+S_{aa}}X_{aa}I_1$
7	Uptake of LCFA							Y_{fa}						$k_{m,fa}\frac{S_{fa}}{K_s+S_{fa}}X_{fa}I_1$
8	Uptake of Valerate								Y_{c4}					$k_{m,c4}\frac{S_{c4}}{K_s+S_{c4}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{bu}/S_{c4}}I_1$
9	Uptake of Butyrate									Y_{c4}				$k_{m,c4}\frac{S_{bu}}{K_s+S_{bu}}X_{c4}\frac{1}{1+S_{c4}/S_{bu}}I_1$
10	Uptake of Propionate										Y_{pro}			$k_{m,pro}\frac{S_{pro}}{K_s+S_{pro}}X_{pro}I_1$
11	Uptake of Acetate											Y_{ac}		$k_{m,ac}\frac{S_{ac}}{K_s+S_{ac}}X_{ac}I_1$
12	Uptake of Hydrogen												Y_{h2}	$k_{m,h2}\frac{S_{h2}}{K_s+S_{h2}}X_{h2}I_1$
13	Decay of X_{su}	1				-1								$k_{dec}.X_{su}.X_{su}$
14	Decay of X_{aa}	1					-1							$k_{dec}.X_{aa}.X_{aa}$
15	Decay of X_{fa}	1						-1						$k_{dec}.X_{fa}.X_{fa}$
16	Decay of X_{c4}	1							-1					$k_{dec}.X_{c4}.X_{c4}$
17	Decay of X_{pro}	1								-1				$k_{dec}.X_{pro}.X_{pro}$
18	Decay of X_{ac}	1									-1			$k_{dec}.X_{ac}.X_{ac}$
19	Decay of X_{h2}	1										-1		$k_{dec}.X_{h2}.X_{h2}$

Inhibition factors(3,7) :
$I_1 = I_{pH}.I_{IN,lim}$.
$I_2 = I_{pH}.I_{IN,lim}.I_{h2}$.
$I_{-3} = I_{pH}.I_{IN,lim}.I_{NH3,XAC}$

Composites (kg COD-m_{-3})
Carbohydrates (kg COD-m_{-3})
Proteins (kg COD-m_{-3})
Lipids (kg COD-m_{-3})
Sugars degraders
Amino acid degraders
LCFA degraders (kg COD-m_{-3})
Valerate and Butyrates
Propionates degraders
Acetate degraders (kg COD-m_{-3})
Hydrogene degraders
Particulate inert (kg COD-m_{-3})

FIGURE B.2 – Processus et taux du modèle ADM1 pour les composés particulaires (Batstone et al., [6])

Annexe C

Valeurs d'entrée, conditions initiales et valeurs d'équilibre considérées dans l'ADM1

Composés	Concentrations d'entrée	Conditions initiales	Point d'équilibre
S_{su}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.009 kgCODm^{-3}$	0.01195
S_{aa}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.0053
S_{fa}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.0986
S_{va}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.0116
S_{bu}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.0132
S_{pro}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.01578
S_{ac}	$0.001 kgCODm^{-3}$	$0.0009 kgCODm^{-3}$	0.2914
S_{h2}	$1.0E-8 kgCODm^{-3}$	$2.3594E-09 kgCODm^{-3}$	$2.359E-07$
S_{ch4}	$1.0E-5 kgCODm^{-3}$	$2.3594E-06 kgCODm^{-3}$	0.0557
S_{ic}	$0.04 kmolm^{-3}$	$0.039 kmolm^{-3}$	0.1636
S_{in}	$0.01 kmolm^{-3}$	$0.13023 kmolm^{-3}$	0.1440
S_i	$0.02 kgCODm^{-3}$	$0.009 kgCODm^{-3}$	0.3250
X_c	$2 kgCODm^{-3}$	$0.3087 kgCODm^{-3}$	0.3085
X_{ch}	$5 kgCODm^{-3}$	$0.02795 kgCODm^{-3}$	0.0279
X_{pr}	$20 kgCODm^{-3}$	$0.1026 kgCODm^{-3}$	0.10257
X_{li}	$5 kgCODm^{-3}$	$0.02948 kgCODm^{-3}$	0.02948
X_{su}	$0 kgCODm^{-3}$	$0.42016 kgCODm^{-3}$	0.4201
X_{aa}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$1.17917 kgCODm^{-3}$	1.1791
X_{fa}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.24303 kgCODm^{-3}$	0.2430
X_{c4}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.43192 kgCODm^{-3}$	0.4319
X_{pro}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.1373 kgCODm^{-3}$	0.1373
X_{ac}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.76056 kgCODm^{-3}$	0.75727
X_{h2}	$0.01 kgCODm^{-3}$	$0.31702 kgCODm^{-3}$	0.3170
X_i	$25 kgCODm^{-3}$	$25.61739 kgCODm^{-3}$	25.6170
S_{cat}	$0.04 kmolm^{-3}$	$0.04 kmolm^{-3}$	0.04
S_{an}	$0.02 kmolm^{-3}$	$0.02 kmolm^{-3}$	0.02
S_{vam}	–	$0.0116 kgCODm^{-3}$	0.01159
S_{bum}	–	$0.01322 kgCODm^{-3}$	0.0132
S_{prom}	–	$0.01574 kgCODm^{-3}$	0.0157
S_{acm}	–	$0.19724 kgCODm^{-3}$	0.2909
S_{hco3}	–	$0.14278 kgCODm^{-3}$	0.1541
S_{nh3}	–	$0.00409 kgCODm^{-3}$	0.0050
$S_{gas,h2}$	–	$0.00001023 kmolm^{-3}$	$1.0273E-05$
$S_{gas,ch4}$	–	$1.62125 kmolm^{-3}$	1.6495
$S_{gas,co2}$	–	$0.01411 kgCODm^{-3}$	0.0136

TABLE C.1 – Valeurs d'entrée ($q_{in} = 170 m^3/jour$, Rosen and Jeppsson, [87]), conditions initiales et valeurs d'équilibre considérées dans l'ADM1

Annexe D

Réalisation équilibrée de systèmes non linéaires

D.1 Quelques définitions

D.1.1 Espaces vectoriels

Définition D.1 *(Espace vectoriel)*

V est appelé $\mathbb{R}-$espace vectoriel si V vérifie les conditions suivantes :

1. $\forall u, v \in V$, *on a* $u + v \in V$.
2. $\forall u, v \in V$, *on a* $u + v = v + u$.
3. $\forall u, v, w \in V$, *on a* $(u + v) + w = u + (v + w)$.
4. *Il existe un élément* $0 \in V$, *tel que* $u + 0 = u, \forall u \in V$.
5. $\forall u \in V$, *il existe un élément* $-u \in V$, *tel que* $u + (-u) = 0$.
6. $\forall c \in \mathbb{R}, \forall u \in V$, *on a* $cu \in V$.
7. $\forall c \in \mathbb{R}, \forall u, v \in V$, *on a* $c(u + v) = cu + cv$.
8. $\forall c, d \in \mathbb{R}, \forall u \in V$, *on a* $(c + d)u = cu + du$.
9. $\forall c, d \in \mathbb{R}, \forall u \in V$, *on a* $c(du) = (cd)u$.
10. $1u = u$.

D.1.2 Sous-espaces vectoriels

Définition D.2 *(Sous-espace vectoriel)*

Soit V un $\mathbb{R}-$espace vectoriel et $E \subset V$ un sous-ensemble. On dit que E est un sous-espace vectoriel de V si :

1. $0 \in E$ *(en particulier* $E \neq \emptyset$*).*
2. $\forall u, v \in E$, *on a* $u + v \in E$.
3. $\forall c \in \mathbb{R}, \forall u \in E$, *on a* $cu \in E$.

D.1.3 Familles génératrices, Span

Dans ce qui suit V désigne un $\mathbb{R}-$ espace vectoriel.

Définition D.3 *(Famille génératrice)*
Soit $(v_1, ..., v_n)$ une famille de vecteurs de V. On appelle $Span(v_1, ..., v_n)$ l'ensemble de toutes les combinaisons linéaires des vecteurs $(v_1, ..., v_n)$. En français, on dit que $Span(v_1, ..., v_n)$ est le sous-espace vectoriel de V engendré par la famille $(v_1, ..., v_n)$. De manière plus mathématique,
$u \in Span(v_1, ..., v_n) = \langle v_1, ..., v_n \rangle$ si $\exists \alpha_1, ..., \alpha_n \in \mathbb{R}$ tel que

$$u = \alpha_1 v_1 + ... + \alpha_n v_n.$$

Proriété D.1 *Si $(v_1, ..., v_n) \in V$ alors $Span(v_1, ..., v_n)$ est un sous-espace vectoriel de V.*

D.1.4 Matrice de transfert et Norme infinie

$\rightarrow$ La matrice de transfert est définie par la relation $Y(s) = K(s)U(s)$, avec $x(t_0) = 0$ et où $Y(s)$ représente la fonction de transfert de la sortie et $U(s)$, celle de l'entrée. La matrice de transfert est donnée par :

$$K(s) = H(sI_u - F)^{-1}G + I$$

I_u représente la matrice unitaire.
$\rightarrow$ La norme $\mathbb{H}_\infty$ est définie, dans le domaine fréquentiel pour une matrice de transfert stable $K(s)$, comme suit :

$$\| K \|_\infty = \sup_\omega \sigma_{max}[K(j\omega)]$$

σ_{max} = la plus grande valeur singulière.

D.2 Réalisation équilibrée d'un système non linéaire

L'approche de la réalisation équilibrée d'un système non linéaire est basée sur les travaux de Bouvrie et Hamzi ([18]) qui consiste tout d'abord à supposer que le système non linéaire se comporte linéairement lorsqu'il est plongé dans un espace caractéristique de dimension élevée. Plus précisément, les auteurs appliquent une méthode similaire à l'analyse par composante principale (Kernel Principal Component Analysis - KPCA) ainsi qu'une fonction « learning » dans les espaces de Hilbert à noyau reproduisant (Reproducing Kernel Hilbert Spaces - RKHS) pour la réduction équilibrée de modèle.

D.2.1 Analyse par composante principale (PCA)

L'idée centrale de l'analyse par composantes principales (Mackiewics et Ratajczak, [66]) est de réduire la dimension d'un ensemble de données composé d'un grand nombre de variables, tout en conservant autant que possible la variation présente entre eux.

– *Le principe*

Pour n individus observés sur p variables quantitatives, l'ACP permet d'explorer les liaisons entre les variables et la ressemblance entre les individus. L'objectif étant de chercher une représentation des n individus, dans un sous espace F_K de $\mathbb{R}^p$ de dimension k. Autrement dit, on cherche à définir k nouvelles variables de combinaison linéaire des p variables initiales qui feront perdre le moins d'information possible. Ces variables sont appelées "composantes principales".

– *Les données*

L'analyse en composantes principales s'applique à un tableau de n lignes et p colonnes, que l'on stocke sous la forme d'une matrice X de taille $n * p$. Chaque ligne $(x_i^1 \ldots x_i^p)$ de X représente les valeurs prises par l'individu i sur les p variables. Chaque colonne $(x_i^j \ldots x_n^j)$ de X représente les valeurs de la variable j pour les n individus.

– *La méthode*

La méthode consiste à chercher des combinaisons linéaires des variables appelées composantes principales. Tout d'abord, il faut noter que le centrage des variables d'un tableau doit être considéré en ACP, i.e., on retranche à chaque observation la moyenne de la variable correspondante. Il est plus pratique de travailler avec des données centrées car les expressions manipulées sont plus simples à écrire.

Considérant un ensemble d'observation centrée $x_i \in \mathbb{R}^n, i = 1 \ldots m$, $\sum_{x=1}^{n} x_i = 0$. L'ACP trouve les axes principaux en diagonalisant la matrice de covariance :

$$C = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^{m} x_j x_j^T \tag{D.2.1}$$

C est définie positive et peut être diagonalisée avec des valeurs propres non négatives $\lambda \geq 0$. Pour cela, il faut résoudre le problème suivant :

$$\lambda v = Cv \tag{D.2.2}$$

S'il existe un $\lambda_k \gg \lambda_{k+1}$ et en supposant les valeurs propres ordonnées, alors les composantes principales correspondants aux plus grandes valeurs propres sont $\{v_1, \ldots, v_k\}$.

D.2.2 Espace de Hilbert

Définition D.4 *: Soit H un espace vectoriel réel ou complexe, on appelle produit scalaire sur H notée $\langle x, y \rangle$ des vecteurs x et $y \in H$ s'il vérifie :*

1. *La linéarité par rapport à une variable ;*
2. *La symétrie*

$$\begin{aligned} \langle x, y \rangle &= \langle y, x \rangle \quad \textit{si l'espace est réel,} \\ \langle x, y \rangle &= \overline{\langle y, x \rangle} \quad \textit{si l'espace est complexe;} \end{aligned}$$

3. *Pour tout $x \in \mathbb{H}$, on a : $\langle x, x \rangle \geq 0$ et $\langle x, x \rangle = 0$ si et seulement $x = 0$.*

Définition D.5 *: Si l'espace $\mathbb{H}$ est muni d'un produit scalaire, on dit que c'est un espace pré-hilbertien.*

Proriété D.2 *: Étant donné que $\langle x, x\rangle \geq 0$ il est possible de poser $\|x\| = \sqrt{\langle x, x\rangle}$. Cette expression définit une norme sur $\mathbb{H}$ appelée norme Hilbertienne.*

Définition D.6 *: Un espace de Hilbert est un espace pré-hilbertien complet pour sa norme Hilbertienne.*

Quelques exemples d'espaces de Hilbert :

- Un espace Euclidien $\mathbb{R}^n$ de dimension finie muni d'un produit scalaire.
- Un espace Hermitien $\mathbb{C}^n$ de dimension finie muni d'un produit Hermitien.
- L'espace $L^2(X)$ muni d'un produit scalaire $\langle f, g\rangle = \int_X f(x)\overline{g(x)}dx$.

D.2.3 Espace de Hilbert à noyau reproduisant

Définition D.7 *: Soit $\mathbb{H}$ un espace de Hilbert sur un ensemble $\mathcal{X}$. Notons $\langle f, g\rangle$ le produit scalaire dans $\mathbb{H}$ et soit : $\|f\| = \langle f, g\rangle^{\frac{1}{2}}$ la norme dans $\mathbb{H}$, pour f et $g \in \mathbb{H}$. $\mathbb{H}$ est appelée un espace de Hilbert à noyau reproduisant (RKHS) s'il existe un $\mathcal{K} : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \longrightarrow \mathbb{H}$ de sorte que :*

1. *$\mathcal{K}$ a la propriété de reproduction, c-à-d : $\forall f \in \mathbb{H}, f(x) = \langle f(.), \mathcal{K}(., x)\rangle$.*
2. *$\mathcal{K}(., x) \in \mathbb{H}$ pour tout $x \in \mathcal{X}$.*

$\mathcal{K}$ est appelé un noyau reproduisant de $\mathbb{H}$. $\mathbb{H}_K(X)$ sera notée $RKHS$ $\mathbb{H}$ avec le noyau reproduisant $\mathcal{K}$.

Définition D.8 *: (Mercer Kernel map) Une fonction $\mathcal{K} : \mathcal{X} \times \mathcal{X} \longrightarrow \mathbb{H}$ est appelée noyau de Mercer si elle est continue, symétrique et définie positive.*

Proriété D.3 *: Si $\mathcal{K}$ est un noyau reproduisant d'un espace de Hilbert $\mathbb{H}$, alors :*

1. *$\mathcal{K}(x, y)$ est unique.*
2. *$\forall x, y \in \mathcal{X}, \mathcal{K}(x, y) = \mathcal{K}(y, x)$ (Symétrie).*
3. *$\sum_{i,j=1}^{m} \alpha_i\alpha_j\mathcal{K}(x_i, x_j) \geq 0$ pour $\alpha_i \in \mathbb{R}$ et $x_i \in \mathcal{X}$ (noyau défini positif).*
4. *$\langle \mathcal{K}(x, .), \mathcal{K}(y, .)\rangle_{\mathbb{H}} = \mathcal{K}(x, y)$.*
5. *Les noyaux suivants définis dans un domaine compact $\mathcal{X} \in \mathbb{R}^n$, sont des noyaux de Mercer :*
   $\mathcal{K}(x, y) = (1 + x^T y)^d, d \in \mathbb{N}$ (polynomiale), $\mathcal{K}(x, y) = e^{-\frac{\|x-y\|^2}{\sigma^2}}$, $\sigma > 0$ (Gaussien).

Théorème D.1 *(Bouvrie et Hamzi [18]) : Soit $\mathcal{K}(x, y)$ un noyau défini positif dans un domaine compact ou sur une variété $\mathcal{X}$. Alors il existe un espace de Hilbert $\mathcal{F}$ et une fonction $\Phi : \mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{F}$ de sorte que :*

$$\mathcal{K}(x, y) = \langle \Phi(x), \Phi(y)\rangle \text{ pour } x, y \in \mathcal{X}$$

Φ est appelée un application caractéristique (feature map) et $\mathcal{F}$ un espace caractéristique (feature space).

Théorème D.2 *(Herbrich et al. [51]) : Supposons que nous ayons un ensemble $\mathcal{X}$ non vide, un noyau k définit positif dans $\mathcal{X} \times \mathcal{X}$, les échantillons $(x_1, y_1)...(x_m, y_m) \in \mathcal{X} \times \mathbb{R}$, une fonction réelle strictement monotone croissante g dans $[0, \infty]$, une fonction de coût arbitraire $c : (\mathcal{X} \times \mathbb{R}^2)^m \longrightarrow \mathbb{R} \cup \infty$, et une classe de fonctions :*

$$\mathcal{F} = \{f \in \mathbb{R}^{\mathcal{X}} \mid f(.) = \sum_{i=1}^{\infty} \beta_i k(., z_i), \beta_i \in \mathbb{R}, z_i \in \mathcal{X}, ||f|| < \infty\}$$

Ici $\| . \|$ *est la norme dans RKHS* $\mathcal{X}_k$ *associée à* k. *Alors pour* $f \in \mathcal{F}$

$$c(x_1, y_1, f(x_1)...x_m, y_m, f(x_m)) + g(||f||)$$

admet une représentation de la forme :

$$f(.) = \sum_{i=1}^{m} \alpha_i k(., x_i)$$

avec une moyenne de moindre carré, la forme originale de :

$$c(x_1, y_1, f(x_1)...x_m, y_m, f(x_m)) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (y_i - f(x_i))^2$$

et

$$g(||f||) = \lambda ||f|| \quad \lambda > 0.$$

D.2.4 Les grammiens empiriques dans RKHS

Soit le système non linéaire suivant :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, u), \\ y = h(x), \end{cases} \tag{D.2.3}$$

où $x \in \mathbb{R}^n$, $u \in \mathbb{R}^m$, $y \in \mathbb{R}^p$, $f(0,0) = 0$ et $h(0) = 0$. De plus, la linéarisation autour de l'origine du système (D.2.3) est commandable, observable et $F = \frac{\partial f}{\partial x}\Big|_{x=0}$ est asymptotiquement stable.
Le grammien de commandabilité W_c est estimé en excitant chaque coordonnée de l'entrée avec des impulsions tout en plaçant $x_0 = 0$. Soit $u^i(t) = \delta(t)e_i$, le $i^{ème}$ signal d'excitation, et soit $x^i(t)$ la réponse correspondante du système. La matrice $X(t) = [x^1(t)...x^m(t)] \in \mathbb{R}^{n*m}$, est formée de sorte que $X(t)$ soit considérée comme une matrice de données. Alors $W_c \in \mathbb{R}^{n*n}$ est donnée par :

$$W_c = \frac{1}{m} \int_0^{\infty} X(t) X^T(t) dt$$

Il est possible d'approximer cette intégrale en échantillonnant la matrice de données $X(t)$ dans un intervalle fini $[0, T]$, cela conduit au grammien empirique de commandabilité :

$$\hat{W}_c = \frac{T}{mN} \sum_{i=1}^{N} X(t_i) X(t_i)^T dt$$

Le grammien d'observabilité W_o est estimé en fixant $u(t) = 0$, en mettant $x_0 = e_i$ pour $i = 1, ..., n$, et en mesurant les réponses du système correspondant $y^i(t)$. Les réponses sont assemblées dans une matrice $Y(t) = [y^1(t)...y^n(t)] \in \mathbb{R}^{p*n}$. Le grammien d'observabilité $W_o \in \mathbb{R}^{n*n}$ est définit par :

$$W_o = \frac{1}{p} \int_0^{\infty} Y(t) Y^T(t) dt$$

De même, en échantillonnant la matrice de fonction $Y(t)$ sur un intervalle $[0, T]$, le grammien empirique d'observabilité est donné par :

$$\hat{W}_o = \frac{T}{pN} \sum_{i=1}^{N} \tilde{Y}(t_i)\tilde{Y}(t_i)^T dt$$

où $\tilde{Y}(t_i) = Y^T(t)$, la matrice $\tilde{Y}(t_i) \in \mathbb{R}^{n*p}$ peut être considérée comme une matrice de données avec les observations :

$$d_j(t_i) = (y_1^1(t_i), ..., y_j^n(t_i)^T \in \mathbb{R}^n \quad j = 1, ..., p, \quad i = 1, ..., N,$$

de sorte que $d_j(t_i)$ corresponde à la réponse à l'instant (t_i) de la sortie de coordonnée j, pour chacune des conditions initiales $x_0 = e_k, \quad k = 1, ..., n$.

D.2.5 Analyse par composante principale à noyau (Kernel PCA)

L'analyse par composante principale à noyau (Scholkopf et al. [93], Scholkopf et Smola [92]) est une extension du PCA aux distributions non linéaires, dans laquelle les points de données d'origine sont plongés dans un espace caractéristique (feature space) de dimension élevée défini par une application caractéristique (feature map) : $\Phi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathcal{F}$. Le PCA dans l'espace caractéristique conduit à un algorithme appelé Kernel PCA. Compte tenu de l'ensemble des données $x := \{x_i\}_{i=1}^N \in \mathbb{R}^n$, l'objectif est de trouver les vecteurs propres v et les valeurs propres λ de la matrice de covariance C dans l'espace caractéristique, où :

$$C_x = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{N} \Phi(x_i) \otimes \Phi(x_i)$$

avec $\Phi(x_i) \otimes \Phi(x_i) = \langle \Phi(x_i), . \rangle \Phi(x_i)$ désigne le produit tensoriel entre deux vecteurs en $\mathcal{H}$, avec l'hypothèse que les données sont centrées dans l'espace caractéristique afin que $\sum_{i=1}^{m} \Phi(x_i) = 0$. Les sous espaces principaux sont calculés par diagonalisation de C_x, mais comme cela est montré dans Scholkopf et al. ([93]), il est possible de former la matrice $(K)_{ij} = K(x_i, x_j), \quad i = 1, ..., N$ et résoudre le problème des valeurs propres :

$$K\alpha = N\lambda\alpha.$$

Si

$$C_x v_i = \lambda v_i,$$

il existe des coefficients $\alpha_i ... \alpha_m$ de sorte que :

$$v_i = \sum_{i=1}^{N} \alpha_i \Phi(x_i).$$

Les valeurs propres α_i de K sont alors normalisées, de sorte que les vecteurs propres v_i de C_x ont une norme unité dans l'espace caractéristique.

Ceci permet de trier les vecteurs propres selon les amplitudes des valeurs propres correspondantes dans l'ordre décroissant et former la matrice $V_q = [v_1 ... v_q], 1 \leq q \leq n$. Les premières composantes principales q du vecteur $x = \Phi(\tilde{x})$ dans l'espace caractéristique sont données par $V_q^T x$.

Par similitude, il se forme la matrice :

$$A_q = [\alpha_1 ... \alpha_q] \quad 1 \leq q \leq min(n, N)$$

Les composantes principales dans l'espace caractéristique peuvent être calculées dans l'espace d'origine avec les noyaux en utilisant l'application :

$$\Pi(x) = A_q^T k(x)$$

où $k(x) = (K(x, x_1), ..., K(x, x_n))^T$

D.2.6 La réduction d'ordre de modèle dans l'application

On considère le système non linéaire de l'équation (D.2.3). D'après [92], l'approche proposée commence par la construction d'estimation empirique du grammien de commandabilité et d'observabilité dans l'espace caractéristique. Notons d'abord que le grammien empirique de commandabilité peut être considéré comme covariance d'un ensemble d'échantillons de $N.m$ vecteurs mis à l'échelle par T :

$$\hat{W}_c = \frac{T}{mN} \sum_{i=1}^{N} X(t_i)X(t_i)^T = \frac{T}{mN} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{m} x^j(t_i)x^j(t_i)^T$$

Le grammien empirique d'observabilité peut être considéré de même, comme covariance d'un ensemble d'échantillons de $N.p$ vecteurs :

$$\hat{W}_o = \frac{T}{pN} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{p} d_j(t_i)d_j(t_i)^T$$

On peut donc considérer trois quantités importantes :

- Le noyau de commandabilité $K_c \in \mathbb{R}^{Nm*Nm}$

$$(K_c)_{\mu v} = k(x_\mu, x_v) = \langle \Phi(x_\mu), \Phi(x_v) \rangle_F$$

pour $\mu, v = 1...Nm$

- Le noyau d'observabilité $K_o \in \mathbb{R}^{Np*Np}$

$$(K_o)_{\mu v} = k(d_\mu, d_v) = \langle \Phi(d_\mu), \Phi(d_v) \rangle_F$$

pour $\mu, v = 1...Np$

- Le noyau de Hankel $K_{oc} \in \mathbb{R}^{Np*Nm}$

$$(K_{oc})_{\mu v} = k(d_\mu, x_v) = \langle \Phi(d_\mu), \Phi(x_v) \rangle_F$$

pour $\mu = 1...Np, v = 1...Nm$.

Les racines carrées des valeurs propres non nulles de la matrice $K_{oc}K_{oc}^T$ sont les valeurs singulières empiriques de Hankel du système plongé dans l'espace caractéristique, pour cela K_{oc} est appelé noyau de Hankel par analogie avec le cas linéaire.

Dans l'analyse par composante principale (PCA) et celle à noyau (KPCA) les données sont centrées, dans ce cas il existe deux ensembles distincts de données :

– Les échantillons de commandabilité : soit Φ la matrice construite à partir de la matrice de fonction $X(t)$;

– Les échantillons d'observabilité : soit Ψ la matrice dont les colonnes sont les échantillons d'observabilité plongée dans l'espace caractéristique.

Alors :

$$K_c = \Phi^T\Phi, \quad K_o = \Psi^T\Psi, \quad et \quad K_{oc} = \Psi^T\Phi$$

En supposons l_N et 1_M la longueur des N et M vecteurs qui représentent respectivement N échantillons de données de commandabilité et M échantillons de données d'observabilité, il est possible de définir les versions centrées des matrices Φ et Ψ dans l'espace caractéristique :

$$\tilde{\Phi} = \Phi - \mu_c l_N^T, \quad \tilde{\Psi} = \Psi - \mu_o l_M^T$$

Puisqu'il n'est pas possible de calculer μ_c et μ_o explicitement à partir des données, il est possible de calculer $\tilde{K}_{oc} = \tilde{\Psi}\tilde{\Phi}^T$, en remplaçant $\mu_c := N^{-1}\Phi 1_N$ et $\mu_o := M^{-1}\Phi 1_M$, et nous obtenons :

$$\begin{aligned} \tilde{K}_{oc} &= (\Phi - \mu_c 1_N^T)^T(\Psi - \mu_o 1_M^T) \\ &= K_{oc} - \frac{1}{N}K_{oc}l_N l_N^T - \frac{1}{M}l_M l_M^T K_{oc} + \frac{1}{NM}l_M l_M^T K_{oc} l_N l_N^T \end{aligned} \tag{D.2.4}$$

Il est également intéressant d'avoir la version centrée d'observabilité empirique en l'espace caractéristique :

$$k_o(x) := \Psi^T\Phi(x) = (K(x, d_1), ..., K(x, d_M))^T \tag{D.2.5}$$

La version centrée d'observabilité empirique en l'espace caractéristique suit le même raisonnement que celui du noyau de Hankel.

$$\begin{aligned} \tilde{k}_o(x) &= (\Psi - \mu_o 1_M^T)^T(\Phi(x) - \mu_c) \\ &= k_o(x) - \frac{1}{N}K_{oc}l_N - \frac{1}{M}l_M l_M^T k_o(x) + \frac{1}{NM}l_M l_M^T K_{oc} l_N \end{aligned} \tag{D.2.6}$$

Pour la suite nous considérons que les notations K_{oc} et $k_o(x)$ sont les versions centrées.

Avec les quantités définies ci-dessus, il est possible de co-diagonaliser les grammiens empiriques (réalisation équilibrée) et réduire la dimension des variables d'états (troncature) dans l'espace caractéristique où il a été supposé que le système se comporte de façon linéaire. L'ordre du modèle peut être réduit en éliminant les petites valeurs singulières de Hankel $\{\sum_{ii}\}_{i=q+1}^n$. La réalisation équilibrée dans l'espace caractéristique est définie d'après [18] de la façon suivante :

Théorème D.3 *: La réalisation équilibrée dans l'espace caractéristique peut être effectuée par l'application de la réduction de l'espace d'état* $\Pi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^q$ *qui est donnée par :*

$$\Pi(x) = T_q^T k_o(x), \quad x \in \mathbb{R}^n \tag{D.2.7}$$

D.2.7 Les dynamiques du système réduit

Compte tenu de l'application de réduction de l'espace d'état non linéaire $\Pi : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^q$, il reste à construire un système dynamique réduit correspondant sur l'espace d'état réduit qui approxime de manière convenable le comportement entrée−sortie du système original. Posant $x_r = \Pi(x)$ et en appliquant :

$$\dot{x}_r = (J_\Pi(x) f(x,u)) \mid_{x=\Pi^\dagger(x_r)}$$

où $\Pi^\dagger$ fait référence à l'inverse de Π, et J_Π est le jacobien de Π. L'approche consiste à approximer la dynamique f et la sortie h de RKHS définit dans l'espace d'état réduit. Il est également nécessaire d'approximer $J_\Pi(\Pi^\dagger(x_r))$ avec la méthode des moindres carrés.

D.2.8 Représentation de la dynamique dans RKHS

L'application vectorielle $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^m$ peut être approximé par une composition d'un ensemble de n régressions (une pour chaque coordonnée), $\hat{f}_i : \mathbb{R}^{q\times m} \longrightarrow \mathbb{R}$ dans RKHS avec la réduction Π.
Soit $\tilde{x} = \Pi(x_j) \in \mathbb{R}^q, u_j \in \mathbb{R}^m$ de sorte que $z_j = (\tilde{x}, u_j)$. Il faut chercher la fonction $\hat{f}_i \in H$ qui minimise :

$$\sum_{j=1}^{l} (\hat{f}_i(z_j) - f_i(x_j, u_j))^2 + \lambda_i \parallel \hat{f}_i \parallel_H^2 \tag{D.2.8}$$

où $\lambda_i > 0$ est un paramètre de régularisation. f_i qui minimise l'équation (D.2.8)) est : (voir le théorème D.2),

$$\hat{f}_i(z) = \textstyle\sum_{j=1}^{l} C_j^i K^f(z, z_j) \quad i = 1...n$$

K^f définit le RKHS H_f. Ici le C_j^i comprend un ensemble de coefficients calculés en utilisant l'algorithme des moindres carrés régularisés, cité dans Rifkin [85]. Pour simplifier la notation, on définit l'application vectorielle empirique :

$$(k^f(\tilde{x}, u))_i := K^f((\tilde{x}, u), z_i) \quad i = 1...l$$

Dans cette notation :

$$\hat{f}_i(\Pi(x), u) = c_i^T k^f(\tilde{x}, u)$$

où $(c_i)_j = c_j^i$.

D.2.9 L'approximation de la Jacobienne

Pour approximer la jacobienne $J_\Pi(\Pi^\dagger(x_r))$, il est nécessaire de calculer le développement de Taylor d'ordre faible de Π pour obtenir l'approximation :

$$\Pi(x) \approx \Pi(a) + J_\Pi(a)(x - a),$$

et ensuite inverser à l'aide de la pseudo−inverse pour obtenir :

$$\hat{\Pi}^\dagger(x_r) := (J_\Pi(a))^\dagger (x_r - \Pi(a)) + a.$$

Il est possible de calculer $J_\Pi(x)$, étant donné que les noyaux les plus couramment utilisés sont différentiables.

$$J_\Pi = \frac{\partial \Pi}{\partial x} = T_q^T (I - \frac{1}{m} 1_m 1_m^T) \frac{\partial k_0(x)}{\partial x}$$

où 1_m est la longueur du vecteur unitaire.

D.2.10 Le système dynamique réduit

Étant donnée une estimation $\hat{f}(\Pi(x), u)$ de $f(x, u)$ dans le RKHS H_f et $J_\Pi(\Pi^\dagger(x_r))$ vue ci−dessus, il est possible d'écrire un système dynamique dans l'espace d'état réduit :

$$\begin{aligned} \dot{x}_r &\approx (J_\Pi(x) \hat{f}(\Pi(x), u)) \mid_{x=\Pi^\dagger(x_r)} \\ &\approx (J_\Pi(x)) \mid_{x=\Pi^\dagger(x_r)} C^T k^f(x_r, u) \\ &\approx T_q^T J_k(\Pi^\dagger(x_r)) C^T k^f(x_r, u) \end{aligned} \tag{D.2.9}$$

Il résulte de l'équation (D.2.9) un système non linéaire exprimé en fonction de $x_r \in \mathbb{R}^q$:

$$\begin{cases} \dot{x}_r = T_q^T J_k(\Pi^\dagger(x_r)) C^T k^f(x_r, u) \\ y = \hat{h}(x_r) \end{cases} \tag{D.2.10}$$

où C est la matrice de vecteurs lignes c_i et J_k la jacobienne d'observabilité empirique dans l'application caractéristique définit dans l'équation (D.2.5). La fonction de sortie h est estimée comme cela est décrit dans ce qui suit.

D.2.11 Sortie du système réduit

Pour estimer la sortie du système réduit, il suffit de procéder de la même manière que pour l'approximation de $\hat{f}(\Pi(x), u))$. Étant donné un ensemble d'échantillons $\{\Pi(x_j), y_j\}_{j=1}^l$, chaque coordonnée de la fonction $(\hat{h}_i)_{i=1}^p$ est donnée sous la forme :

$$\hat{h}_i(\Pi(x)) = \sum_{j=1}^l b_j^i K^h(\Pi(x), \Pi(x_j)) \quad i = 1...n$$

où K^h est le noyau choisi pour définir le RKHS.

Annexe E

Équations des modèles réduits

E.1 Équations du modèle #1

$$\frac{dS_{in}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{in,in} - S_{in}) - Y_{su}N_{bac}\rho_5 + (N_{aa} - Y_{aa}N_{bac})\rho_6 - Y_{fa}N_{bac}\rho_7 - Y_{c4}N_{bac}\rho_8 - Y_{c4}N_{bac}\rho_9 - Y_{pro}N_{bac}\rho_{10}$$
$$- Y_{ac}N_{bac}\rho_{11} - Y_{h2}N_{bac}\rho_{12} + (N_{bac} - N_{xc})\sum_{i=13}^{19}\rho_i + (N_{xc} - f_{xi,xc}N_i - f_{si,xc}N_i - f_{pr,xc}N_{aa})\rho_1 \quad \text{(E.1.1)}$$

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{i,in} - S_i) + f_{si,xc}\rho_1 \quad \text{(E.1.2)}$$
$$\frac{dX_c}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{c,in} - X_c) - \rho_1 + \sum_{i=13}^{19}\rho_i \quad \text{(E.1.3)}$$
$$\frac{dX_{ch}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{ch,in} - X_{ch}) + f_{ch,xc}\rho_1 - \rho_2 \quad \text{(E.1.4)}$$
$$\frac{dX_{pr}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{pr,in} - X_{pr}) + f_{pr,xc}\rho_1 - \rho_3 \quad \text{(E.1.5)}$$

avec :

$\rho_1 = k_{dis}X_c$

$\rho_2 = k_{hyd,ch}X_{ch}$

$\rho_3 = k_{hyd,pr}X_{pr}$

$\rho_5 = k_{m,su}\frac{S^0_{su}}{K_{s,su}+S^0_{su}}X^0_{su}I_5$

$\rho_6 = k_{m,aa}\frac{S^0_{aa}}{K_{s,aa}+S^0_{aa}}X^0_{aa}I_6$

$\rho_7 = k_{m,fa}\frac{S^*_{fa}}{K_{s,fa}+S^*_{fa}}X^0_{fa}I_7$

$\rho_8 = k_{m,c4}\frac{S^*_{va}}{K_{s,c4}+S^*_{va}}X^0_{c4}\frac{S^*_{va}}{S^*_{bu}+S^*_{va}+1e-6}I_8$

$\rho_9 = k_{m,c4}\frac{S^*_{bu}}{K_{s,c4}+S^*_{bu}}X^0_{c4}\frac{S^*_{bu}}{S^*_{va}+S^*_{bu}+1e-6}I_9$

$\rho_{10} = k_{m,pro}\frac{S^*_{pro}}{K_{s,pro}+S^*_{pro}}X^0_{pro}I_{10}$

$\rho_{11} = k_{m,ac}\frac{S^*_{ac}}{K_{s,ac}+S^*_{ac}}X^0_{ac}I_{11}$

$\rho_{12} = k_{m,h2}\frac{S^*_{h2}}{K_{s,h2}+S^*_{h2}}X^0_{h2}I_{12}$

$\rho_{13} = k_{dec,Xsu} X^0_{su}$

$\rho_{14} = k_{dec,Xaa} X^0_{aa}$

$\rho_{15} = k_{dec,Xfa} X^0_{fa}$

$\rho_{16} = k_{dec,Xc4} X^0_{c4}$

$\rho_{17} = k_{dec,Xpro} X^0_{pro}$

$\rho_{18} = k_{dec,Xac} X^0_{ac}$

$\rho_{19} = k_{dec,Xh2} X^0_{h2}$

$I_{5,6} = I_{ph,aa} I_{IN,lim}$

$I_7 = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,fa}$

$I_{8,9} = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,c4}$

$I_{10} = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,pro}$

$I_{11} = I_{ph,ac} I_{IN,lim} I_{nh3}$

$I_{12} = I_{ph,h2} I_{IN,lim}$

$I_{IN,lim} = \frac{1}{1+\frac{K_{s,in}}{S_{in}}}$

E.2 Équations du modèle #2

$$\frac{dX_{su}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{su,in} - X_{su}) + Y_{su}\rho_5 - \rho_{13} \tag{E.2.1}$$

$$\frac{dX_{li}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{li,in} - X_{li}) + f_{li,xc}\rho_1 - \rho_4 \tag{E.2.2}$$

$$\frac{dX_{h2}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{h2,in} - X_{h2}) + Y_{h2}\rho_{12} - \rho_{19} \tag{E.2.3}$$

$$\frac{dX_i}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{i,in} - X_i) + f_{xi,xc}\rho_1 \tag{E.2.4}$$

$$\frac{dS_{cat}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{cat,in} - S_{cat}) \tag{E.2.5}$$

$$\frac{dX_{aa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{aa,in} - X_{aa}) + Y_{aa}\rho_6 - \rho_{14} \tag{E.2.6}$$

$$\frac{dX_{c4}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{c4,in} - X_{c4}) + Y_{c4}\rho_8 + Y_{c4}\rho_9 - \rho_{16} \tag{E.2.7}$$

$$\frac{dX_{fa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{fa,in} - X_{fa}) + Y_{fa}\rho_7 - \rho_{15} \tag{E.2.8}$$

avec :

$\rho_1 = k_{dis} X^*_c$

$\rho_4 = k_{hyd,li} X_{li}$

$\rho_5 = k_{m,su} \frac{S^0_{su}}{K_{s,su}+S^0_{su}} X_{su} I_5$

$\rho_6 = k_{m,aa} \frac{S^0_{aa}}{K_{s,aa}+S^0_{aa}} X_{aa} I_6$

$\rho_7 = k_{m,fa} \frac{S^*_{fa}}{K_{s,fa}+S^*_{fa}} X_{fa} I_7$

$\rho_8 = k_{m,c4} \frac{S^*_{va}}{K_{s,c4}+S^*_{va}} X_{c4} \frac{S^*_{va}}{S^*_{bu}+S^*_{va}+1e-6} I_8$

$\rho_9 = k_{m,c4} \frac{S^*_{bu}}{K_{s,c4}+S^*_{bu}} X_{c4} \frac{S^*_{bu}}{S^*_{va}+S^*_{bu}+1e-6} I_9$

$\rho_{12} = k_{m,h2} \frac{S^*_{h2}}{K_{s,h2}+S^*_{h2}} X_{h2} I_{12}$

$\rho_{13} = k_{dec,Xsu} X_{su}$

$\rho_{14} = k_{dec,Xaa} X_{aa}$

$\rho_{15} = k_{dec,Xfa} X_{fa}$

$\rho_{16} = k_{dec,Xc4} X_{c4}$

$I_{5,6} = I_{ph,aa} I_{IN,lim}$

$I_7 = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,fa}$

$I_{8,9} = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,c4}$

$I_{12} = I_{ph,h2} I_{IN,lim}$

$I_{IN,lim} = \frac{1}{1+\frac{K_{s,in}}{S^*_{in}}}$

E.3 Équations du modèle #3

$$\frac{dX_{pro}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{pro,in} - X_{pro}) + Y_{pro}\rho_{10} - \rho_{17} \tag{E.3.1}$$

$$\frac{dX_{ac}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(X_{ac,in} - X_{pro}) + Y_{ac}\rho_{11} - \rho_{18} \tag{E.3.2}$$

$$\frac{dS_{bum}}{dt} = -\rho_{a,5} \tag{E.3.3}$$

$$\frac{dS_{prom}}{dt} = -\rho_{a,6} \tag{E.3.4}$$

$$\frac{dS_{acm}}{dt} = -\rho_{a,7} \tag{E.3.5}$$

$$\frac{dS_{hco3}}{dt} = -\rho_{a,10} \tag{E.3.6}$$

$$\frac{dS_{gas,h2}}{dt} = -\frac{S_{gas,h2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,8}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{E.3.7}$$

$$\frac{dS_{nh3}}{dt} = -\rho_{a,11} \tag{E.3.8}$$

$$\frac{dS_{vam}}{dt} = -\rho_{a,4} \tag{E.3.9}$$

$$\frac{dS_{an}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{an,in} - S_{an}) \tag{E.3.10}$$

$$\frac{dS_{su}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{su,in} - S_{su}) + \rho_2 + (1 - f_{fa,li})\rho_4 - \rho_5 \tag{E.3.11}$$

$$\frac{dS_{aa}}{dt} = \frac{q_{in}}{V_{liq}}(S_{aa,in} - S_{aa}) + \rho_3 - \rho_6 \tag{E.3.12}$$

$$\frac{dS_{gas,ch4}}{dt} = -\frac{S_{gas,ch4}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,9}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{E.3.13}$$

$$\frac{dS_{gas,co2}}{dt} = -\frac{S_{gas,co2}q_{gas}}{V_{gas}} + \rho_{T,10}\frac{V_{liq}}{V_{gas}} \tag{E.3.14}$$

avec :

$\rho_2 = k_{hyd,ch} X^*_{ch}$

$\rho_3 = k_{hyd,pr} X^*_{pr}$

$\rho_4 = k_{hyd,li} X^*_{li}$

$\rho_5 = k_{m,su} \frac{S_{su}}{K_{s,su}+S_{su}} X^*_{su} I_5$

$\rho_6 = k_{m,aa} \frac{S_{aa}}{K_{s,aa}+S_{aa}} X^*_{aa} I_6$

$\rho_{10} = k_{m,pro} \frac{S^*_{pro}}{K_{s,pro}+S^*_{pro}} X_{pro} I_{10}$

$\rho_{11} = k_{m,ac} \frac{S^*_{ac}}{K_{s,ac}+S^*_{ac}} X_{ac} I_{11}$

$\rho_{17} = k_{dec,Xpro} X_{pro}$

$\rho_{18} = k_{dec,Xac} X_{ac}$

$I_{5,6} = I_{ph,aa} I_{IN,lim}$

$I_{10} = I_{ph,aa} I_{IN,lim} I_{h2,pro}$

$I_{11} = I_{ph,ac} I_{IN,lim} I_{nh3}$

$I_{IN,lim} = \frac{1}{1+\frac{K_{s,in}}{S^*_{in}}}$

$\rho_{a,4} = k_{a,Bva}(S_{vam}(K_{a,va} + S_{H^+}) - K_{a,va} S^*_{va})$

$\rho_{a,5} = k_{a,Bbu}(S_{bum}(K_{a,bu} + S_{H^+}) - K_{a,bu} S^*_{bu})$

$\rho_{a,6} = k_{a,Bpro}(S_{prom}(K_{a,pro} + S_{H^+} - K_{a,pro} S^*_{pro})$

$\rho_{a,7} = k_{a,Bac}(S_{acm}(K_{a,ac} + S_{H^+}) - K_{a,ac} S^*_{ac})$

$\rho_{a,10} = k_{a,Bco2}(S_{hco3}(K_{a,co2} + S_{H^+}) - K_{a,co2} S^*_{ic})$

$\rho_{a,11} = k_{a,Bin}(S_{nh3}(K_{a,in} + S_{H^+}) - K_{a,in} S^*_{in})$

$\rho_{T,8} = k_{La}(S^*_{h2} - 16 K_{H,h2} p_{gas,h2})$

$\rho_{T,9} = k_{La}(S^*_{ch4} - 64 K_{H,ch4} p_{gas,ch4})$

$\rho_{T,10} = k_{La}(S_{co2} - K_{H,co2} p_{gas,co2})$

$S_{H^+} = -\frac{\theta}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\theta^2 + 4K_W}$

$\theta = S^*_{cat} + S_{nh4} - S_{hco3} - \frac{S_{acm}}{64} - \frac{S_{prom}}{112} - \frac{S_{bum}}{160} - \frac{S_{vam}}{208} - S_{an}$

$S_{nh4} = S^*_{in} - S_{nh3}$

$S_{co2} = S^*_{ic} - S_{hco3}$

$q_{gas} = k_p(P_{gas} - P_{atm}) \frac{P_{gas}}{P_{atm}}$

$p_{gas,h2} = S_{gas,h2} \frac{RT_{op}}{16}$

$p_{gas,ch4} = S_{gas,ch4} \frac{RT_{op}}{64}$

$p_{gas,co2} = S_{gas,co2} RT_{op}$

Annexe F

Valeurs des points d'équilibres obtenus pour les différents HRT

Composés	HRT = 10 jours	HRT = 30 jours	HRT = 60 jours
S_{su}	0.0211	0.00868	0.0050
S_{aa}	0.0093	0.0038	0.00218
S_{fa}	0.22099	0.0675	0.03666
S_{va}	0.02157	0.00827	0.00459
S_{bu}	0.0246	0.0094	0.0052
S_{pro}	0.0330	0.0108	0.0058
S_{ac}	1.1780	0.1176	2.98649
S_{h2}	$4.202E-07$	$1.711E-07$	$0.9779E-07$
S_{ch4}	0.0629	0.0537	0.06889
S_{ic}	0.1358	0.1540	0.0998
S_{in}	0.1277	0.1315	0.1340
S_i	0.21398	0.19738	0.1774
X_c	0.4621	0.24716	0.17369
X_{ch}	0.05408	0.01907	0.0100
X_{pr}	0.20259	0.0689	0.0350
X_{li}	0.05636	0.0203	0.0109
X_{su}	0.46736	0.39238	0.3560
X_{aa}	1.3408	1.0888	0.9703
X_{fa}	0.2612	0.22749	0.20847
X_{c4}	0.48926	0.39896	0.35606
X_{pro}	0.15438	0.12709	0.1139
X_{ac}	0.8175	0.72978	0.52179
X_{h2}	0.3537	0.29428	0.2650
X_i	25.4745	25.6830	25.7730
S_{cat}	0.04	0.04	0.04
S_{an}	0.02	0.02	0.02
S_{vam}	0.0215	0.0082	0.00459
S_{bum}	0.02456	0.0094	0.0052
S_{prom}	0.0329	0.0108	0.0058
S_{acm}	1.1752	0.11739	2.98417
S_{hco3}	0.1254	0.1449	0.0971
S_{nh3}	0.00337	0.0045	0.01016
$S_{gas,h2}$	$1.582E-05$	$0.7879E-05$	$0.4772E-05$
$S_{gas,ch4}$	1.6824	1.6511	2.19885
$S_{gas,co2}$	0.01477	0.01299	0.0038