

Conception optimale des réacteurs biologiques continus - Etat de l'art et questions ouvertes

Jérôme Harmand

March 2020

1 Introduction

La conception optimale des réacteurs est la recherche de la configuration de réacteurs idéaux - type, mode de fonctionnement, volumes - que l'on se permet de connecter entre eux pour optimiser, en principe à l'équilibre mais on peut également imaginer des questions faisant intervenir de la dynamique, une performance donnée. La principale motivation derrière cette question est économique. Sans parler des coûts de fonctionnement qui relèvent d'une autre problématique, elle provient du fait que plus la configuration est complexe et les volumes requis importants, plus le coût d'une installation va être élevé. Bien entendu, en pratique la question sera plus compliquée : par exemple un réacteur parfaitement mélangé - qui ne demande que la réalisation d'une cuve, généralement en béton - semble être le plus simple à réaliser. Ce serait toutefois oublier que si cette cuve est particulièrement volumineuse, alors des effets de spatialisation vont se poser... Il n'empêche : il apparaît tout de même qu'il s'agit là de la configuration la plus simple à construire! C'est la raison pour laquelle, dans la quasi totalité des études, on cherche à comparer les performances obtenues avec certaines configurations de systèmes idéaux avec celles obtenues avec un seul réacteur : le chemostat apparaît donc comme un modèle de référence. D'emblée, on peut se poser la question du type de performances qu'il est intéressant de considérer. Bien qu'il existe de nombreux critères permettant de mesurer l'optimalité d'une configuration donnée, la littérature s'est surtout intéressé à deux critères de base importants d'un point de vue pratique : la productivité de la biomasse qui se mesure en quantité de biomasse produite par unité de temps et par volume de réacteur et le rendement de conversion d'un substrat qui est le rapport entre la concentration du substrat en sortie de système et sa concentration d'entrée. Sous certaines conditions, d'autres critères comme la maximisation de la production de biogaz (notamment un système anaérobie) ou de la productivité d'un produit peuvent se ramener à ces deux cas de base.

2 Les réacteurs idéaux

2.1 Définitions

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

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

Dans ce cours, nous limiterons notre intérêt à la conception de systèmes continus. Nous considérerons donc d'éventuelles interconnexions entre des 'CSTRs' et des 'PFRs'. En outre, pour rester dans des configurations d'une 'complexité limitée', nous nous limiterons à des configurations dans lesquelles les différents réacteurs sont essentiellement connectés en série (on parle également de cascade) sans recirculation.

Pour la suite du cours, il est essentiel de comprendre que lors de la conception de systèmes continus, on s'intéresse essentiellement au comportement du système à l'équilibre. On dira souvent 'son comportement en phase stationnaire'.

2.2 Modélisation des réacteurs idéaux

L'hypothèse fondamentale qui sous-tend le modèle du chemostat est que le milieu est homogène. Le modèle du chemostat que nous allons considérer est donné par :

$$\begin{cases} \dot{X} &= (X_{in} - X)D + \mu(S)X \\ \dot{S} &= (S_{in} - S)D - \frac{1}{Y}\mu(S)X \end{cases} \quad (1)$$

Remarque : on sait que l'on peut se rapporter à un système 'équivalent sur le plan mathématique' dans lequel on a $Y = 1$. Dans tous les cas, une première hypothèse est que ce coefficient de rendement est constant. Par simplicité, et sans perte de généralité, on considérera donc par la suite le système 1 avec $Y = 1$:

$$\begin{cases} \dot{X} &= (X_{in} - X)D + \mu(S)X \\ \dot{S} &= (S_{in} - S)D - \mu(S)X \end{cases} \quad (2)$$

Par rapport au modèle dit 'minimal' du chemostat normalement considéré, il intègre une concentration X_{in} d'alimentation en biomasse qui sera par la suite supposée non nulle. Nous verrons que c'est important afin de pouvoir comparer ses performances avec celles d'un réacteur piston.

Un réacteur piston est un système dans lequel le fluide qui entre dans le réacteur va se déplacer par ‘tranches’ le long du réacteur, chaque tranche n’influençant ni celle qui la précède ni celle qui lui succède : elle vit donc pour elle-même le long du réacteur dans le volume de la tranche. En faisant l’hypothèse que la vitesse du fluide v est constante à l’intérieur du système - puisque l’on considère le réacteur en phase stationnaire et avec un diamètre constant - on peut se représenter ce type de réacteur comme un tube de faible diamètre afin de minimiser les échanges axiaux tout en supposant que les concentrations sont homogènes sur le plan radial. On trouvera ainsi très souvent dans la littérature des références aux réacteurs dits ‘tubulaires’. Si l’on suppose qu’une concentration X_{in} est injectée en même temps qu’une concentration S_{in} en entrée de système, la réaction biologique qui va avoir lieu dans la petite tranche de réacteur et va ‘vivre pour elle-même’ le temps qu’elle traverse le réacteur à la vitesse v . A noter que si l’on connaît les dimensions du système, on peut facilement en déduire la vitesse du fluide et établir une équivalence entre l’avancement d’une réaction et la position de la tranche dans le réacteur : cette équivalence permet aux experts du génie des procédés de parler de ‘temps spatial’.

Le modèle d’un PFR est donné par le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial S}{\partial t}(t, z) = q \frac{\partial S}{\partial z}(t, z) - \mu(S)X \\ \frac{\partial X}{\partial t}(t, z) = q \frac{\partial X}{\partial z}(t, z) + \mu(S)X \\ X(0, z) = X_0(z) ; X(t, 0) = X_{in} \\ S(0, z) = S_0(z) ; S(t, 0) = S_{in} \end{array} \right. \quad 0 \leq z \leq l \quad (3)$$

avec q la vitesse axiale du fluide que l’on peut déterminer si l’on connaît le rayon R , supposé constant, du réacteur comme $q = \frac{Q_{in}}{\pi R^2}$.

Comme déjà mentionné, on considère une concentration X_{in} en entrée de réacteur. La raison est très simple : si ce n’est pas le cas, il ne rentre dans le réacteur qu’une concentration S_{in} de substrat et la réaction biologique ne peut pas démarrer. S’il n’est pas possible d’inoculer continuellement le réacteur, on l’inocule à l’instant initial (on joue donc sur la grandeur $X(0, 0)$) et on considère une recirculation de la sortie du réacteur vers l’entrée. On a alors une condition aux limites du type $X(t, 0) = \frac{X_{in} + X(t, L)}{1 + \beta}$ où β est le taux de recirculation.

3 La Distribution des Temps De Séjour

La détermination de la Distribution des Temps de Séjour ou DTS est une méthode du génie des procédés pour caractériser les propriétés hydrodynamiques entrée-sortie d’un réacteur. C’est une fonction du temps qui représente une ‘distribution de fréquences’ notée généralement $E(t)$. Elle va guider un modélisateur dans le choix du modèle de réacteur idéal ou de l’interconnexion de réacteurs

idéaux le plus adapté pour reproduire la DTS expérimentale. La détermination expérimentale de la DTS consiste à exciter le système par l'injection d'un traceur dont on peut suivre l'évolution en sortie de système. En pratique, il s'agit d'une substance - par exemple le substrat S - dont on peut mesurer la concentration en sortie au cours du temps suite à son introduction en entrée à un instant connu. Cette expérience correspond ni plus ni moins qu'à l'excitation d'un système que l'on réaliserait en automatique en vue de son identification. Et comme en automatique, il y a plusieurs manières de procéder. L'expérience la plus courante est de procéder à une 'impulsion' mais on peut également appliquer un échelon ou un signal plus complexe mais l'analyse peut s'avérer alors plus délicate. S'agissant d'une caractérisation de l'hydrodynamique du système, cette expérience se fait en l'absence de biomasse : on parlera d'une expérience 'à froid'. Pratiquement on injecte, par exemple à l'aide d'une seringue, une quantité donnée de traceur sur un intervalle de temps considéré comme négligeable. Voyons ce qui se passe dans un chimostat d'un litre dans lequel on injecte 1 g de substrat à un instant initial donné dans l'alimentation. Une infiniment petite fraction de temps suivant l'injection, ce gramme de substrat auront diffusé de manière parfaitement homogène, de sorte que la concentration sera instantanément passée de 0 à 1 g/l en tous points du chimostat, et donc également dans sa sortie. A la suite de cette impulsion, le débit d'alimentation étant appliqué de manière continue, le flux entrant - dans lequel il n'y a pas de substrat - va diluer ce dernier en l'entraînant hors du système avec le même débit, faisant par là-même tendre, après un temps suffisamment long, sa concentration vers 0.

Considérons le modèle 2 sans biomasse, avec $S_{in} = 0$ et $S(0) = S_0$ la concentration initiale de traceur et plaçons une petite fraction de temps après l'injection du traceur : comme expliqué ci-dessus, la concentration du substrat en tous points du réacteur sera donc $S(0)$. A partir de cet instant initial, le système va subir une dynamique exponentielle, solution de l'équation $\dot{S} = -DS$ avec $S(0) = S_0$ soit la courbe définie par $S(t) = S(0)e^{-Dt}$.

Par définition, on appelle 'Temps de Séjour Hydraulique' ou TSH le temps moyen nécessaire pour renouveler le contenu d'un réacteur. Le taux de dilution D étant le rapport entre le débit d'alimentation Q_{in} appliqué (en volume par unité de temps) et le volume du réacteur, le temps moyen pour renouveler le volume V est donné par l'inverse du taux de dilution, soit $1/D$. Au bout d'1 temps de séjour, la concentration du traceur dans le réacteur sera donc de $S(1/D) = S(0)e^{-1}$ soit $0,37 * S(0)$. Au bout de 2 TSH, la concentration sera de $S(2/D) = S(0)e^{-2}$ soit $0,13 * S(0)$ et au bout de 3 TSH, elle sera de $S(3/D) = S(0)e^{-3}$ soit $0,05 * S(0)$ (95% de la réponse). On retrouve ici très exactement la notion de 'Temps De Réponse' des systèmes, bien connue en automatique. A noter que c'est pour cette raison - alors même que l'on néglige ici la réaction biologique - que les biologistes affirment souvent, à tort, qu'une réaction biologique atteint son équilibre au bout d'environ 3 TDS.

Appliquons maintenant ce concept à un chimostat à l'équilibre alimenté en biomasse et en substrat (X_{in} et $S_{in} \neq 0$) mais au préalable, introduisons une notation qui nous sera bien utile. Plus loin dans le document, nous allons comparer des 'performances' de réacteurs idéaux qui seront éventuellement interconnectés.

Afin de comparer sans équivoque les sorties de ces différents systèmes, quel que soit le nombre de réacteurs interconnectés considéré, on notera la concentration de sortie de l'ensemble du système S_{out} . Dans le cas d'un chémostat, on gardera bien entendu en tête que $S_{out} = S$. A noter que dans la suite, par convention, nous considérerons toujours une concentration souhaitée en sortie S_{out} strictement inférieure à la concentration d'entrée S_{in} .

A l'équilibre, on établit facilement à partir de 2 que l'on a $S_{in} + X_{in} = M = S + X$. Par définition, le temps de séjour étant $1/D$, nous établissons en outre que le temps de séjour, noté τ_{CSTR} , est donné par l'expression:

$$\tau_{CSTR} = \frac{S_{in} - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})} \quad (4)$$

L'inverse du temps de séjour étant le taux de dilution D (rappelons-nous que $D = Q_{in}/V$), si Q_{in} est connu, on en déduit le volume nécessaire pour que, avec S_{in} et X_{in} en entrée d'un chémostat, on ait, à l'équilibre, S_{out} en sortie.

Pour le réacteur piston, à partir du système 3, et en remarquant qu'à l'équilibre on a $M(z) = S(z) + X(z)$ pour tout z , on peut calculer le temps de séjour en intégrant l'inverse de la vitesse par rapport à l'espace (ce qui, en passant, illustre parfaitement la notion de temps spatial déjà évoquée!) :

$$\tau_{PFR} = \int_0^l \frac{\pi R^2 d\xi}{Q_{in}} = \int_{S_{out}}^{S_{in}} \frac{d\xi}{\mu(\xi)(M - \xi)} \quad (5)$$

Si l'on connaît le débit appliqué et le diamètre du réacteur, on en déduit la longueur du réacteur tubulaire nécessaire pour que l'on ait, à l'équilibre, S_{out} en sortie. Mais que l'on s'intéresse au chémostat ou au réacteur piston, on peut noter ici que les questions que l'on peut se poser dépassent à partir de ces expressions des temps de séjour sont plurielles. En effet, dans le cas du réacteur piston, par exemple, on peut tout autant fixer la longueur du réacteur et en déduire la concentration de sortie, ou fixer la longueur, les concentrations d'entrée et de sortie et déterminer quel débit on doit appliquer pour obtenir le comportement entrée-sortie spécifié ou encore fixer le tout et déterminer M ... Aussi, l'acception 'conception optimale' doit-elle être prise en son sens le plus large et recouvre toutes sortes de problèmes qui peuvent trouver leur application pratique.

4 Questions de 'conception'

4.1 Performances des systèmes biologiques

Les différentes combinaisons de cas que nous venons d'évoquer illustrent la diversité des questions de 'conception' que l'on peut se poser. Il semble que Herbert *et coll.*, 1956 ([4]) soient les premiers à introduire le fait que les questions de conception ne se limitent pas à la minimisation de TDS des systèmes mais qu'ils peuvent faire intervenir des critères différents. Plus précisément, ils remarquent

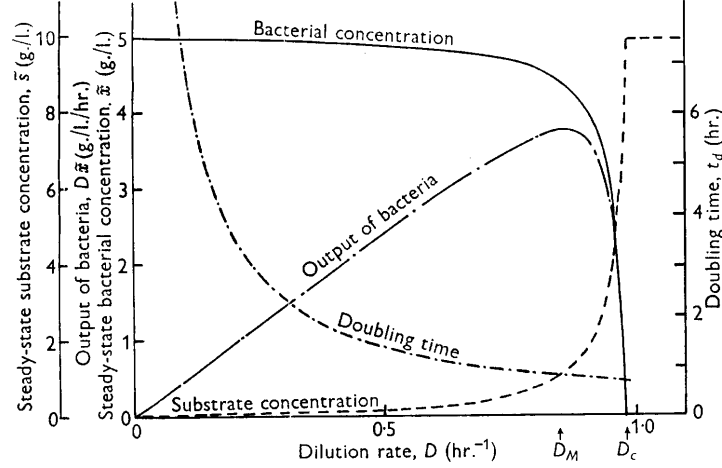


Figure 1: Steady state of a CSTR as a function of the dilution rate : biomass concentration, substrate concentration and DX .

que le maximum de productivité n'est pas atteint pour le taux de conversion le plus grand (cf. Figure 1).

En pratique, le concepteur est toutefois plutôt confronté à trois questions récurrentes selon qu'il est intéressé par minimiser le temps de séjour du système, ou maximiser un rendement de conversion ou une productivité. Ces problèmes se posent en les termes suivants :

- Pb1 : Etant donnés $\mu(S)$, les caractéristiques d'entrée et de sortie du système (souvent fixées par des normes, par exemple de traitement ou des demandes de production), d'un débit à traiter, quel est le volume le plus faible possible (pour minimiser les coûts) du système pour obtenir une concentration donnée S_{out} en sortie ?
- Pb2 : Etant donnés $\mu(S)$, les caractéristiques d'entrée du système (souvent fixées par des normes, par exemple de traitement ou des demandes de production), d'un débit à traiter, et du volume du système, quelle est la configuration - éventuellement l'interconnexion de réacteurs idéaux et leurs volumes respectifs - pour que la concentration en sortie soit la plus petite possible (ou la concentration en biomasse ou en produit la plus

grande possible puisqu'à l'équilibre, dans tous les systèmes considérés on a $M = S + X$ et qu'un éventuel produit sera toujours lié à la quantité de substrat dégradé via des coefficients de stoechiométrie, si tant est que ces derniers soient bien des constantes) ?

- Pb3 : Enfin, on peut être intéressé par des questions dites de 'productivité'. Par exemple, si on travaille avec des systèmes produisant des biogaz (hydrogène, méthane), on peut souhaiter connaître la configuration nous permettant de maximiser le débit de biogaz ou encore la quantité de biomasse produite par unité de volume du réacteur et par unité de temps... De même que précédemment, on va généralement connaître la cinétique du système et les concentrations des ressources en entrée de système à partir desquels on veut déterminer quel est le taux de dilution ou le débit d'entrée à appliquer pour maximiser le débit de biogaz ?

Nous allons voir dans la section suivante que pour une très vaste gamme de cinétiques, les problèmes de type Pb1 peuvent être totalement résolus par une très élégante approche graphique initialement proposée dans le domaine du génie chimique par Aris en 1962 pour la conception des systèmes chimiques adiabatiques [1].

4.2 Résolution graphique du problème Pb1

Pour traiter les problèmes de minimisation du temps de séjour (de type Pb1), l'idée est de comparer les temps de séjour nécessaires avec plusieurs configurations de réacteurs idéaux et de retenir celle qui permet d'obtenir les contraintes entre-sortie spécifiées avec le système de plus faible volume. Avant d'aller plus loin, il est essentiel d'écrire le temps de séjour de deux CSTR de volumes respectifs V_1 et V_2 que l'on mettrait en série. Si l'on note par des indices les concentrations dans chacun des réacteurs, on comprend aisément que la concentration de sortie des variables du premier réacteurs sont les concentrations d'entrée de ces mêmes variables dans le second réacteur. On montre alors facilement que le TDS de deux réacteurs en série est donné par :

$$\tau_{2CSTR} = \frac{S_{in} - S_1}{\mu(S_1)(M - S_1)} + \frac{S_1 - S_{out}}{\mu(S_{out})(M - S_{out})} \quad (6)$$

Considérons les 3 équations (4), (6) et (5). Dans chacune des expressions des TDS, on voit apparaître la fonction bien particulière $f(S) = \frac{1}{\mu(S)(M-S)}$. Sans l'avoir précisé jusqu'à maintenant, les fonctions de croissance usuelles (notamment les fonctions de croissance de Monod, de Haldane et de Contois¹ ont une propriété quasi-systématique qui est que $\mu(0) = 0$ (il n'y a généralement pas de croissance en l'absence d'une ressource). On établit donc immédiatement que $\lim_{S \rightarrow 0} f(S) = 0$ et $\lim_{S \rightarrow M} f(S) = 0$. En outre, on montre que pour ces

¹La fonction de Contois est une fonction de S et de X qui, à l'équilibre se ramène à une fonction d'une seule variable S en remarquant que l'équation $M = S_{in} + X_{in} = S + X$ reste valide

mêmes fonctions usuelles, f admet un seul minimum positif que nous noterons \bar{S} . Considérons l'expressions du TDS du chémostat donné par (4). Au numérateur de cette expression, on voit apparaître le terme $S_{in} - S_{out}$. Sur le graphe de $f(S)$, le TDS du chémostat est donc proportionnel à la surface du rectangle défini par le segment $[S_{out}, S_{in}]$ sur l'axe des abscisses et par le segment $[0, fS_{out}]$ sur l'axe des ordonnées. De même, le TDS de deux réacteurs en série est proportionnel à la somme de deux rectangles définis par le segment $[S_1, S_{in}]$ (resp. $[S_{out}, S_1]$) sur l'axe des abscisses et par le segment $[0, f(S_1)]$ (resp. $[0, fS_{out}]$) sur l'axe des ordonnées. Enfin, de l'expression du TDS d'une PFR, on établit que le TDS est proportionnel à la surface sous la courbe entre les bornes S_{in} et S_{out} . comme le terme de proportionnalité est le débit Q_{in} qui est une donnée du problème et qui est identique dans tous les cas, on peut comparer les performances de ces différentes configurations.

Avec cette méthode, on remarque tout de suite que si S_{out} se trouve à droite de \bar{S} (par hypothèse, S_{in} s'y trouve donc également), on fera manifestement toujours mieux avec un CSTR qu'avec un PFR. En revanche, si S_{out} et S_{in} sont à gauche de \bar{S} , aucune configuration de CSTR ne peut faire mieux qu'un PFR : remarquons au passage que multiplier le nombre de CSTR en série de volumes éventuellement différents, permet d'approximer le comportement entrée-sortie d'un PFR. Enfin, lorsque S_{out} et S_{in} se trouvent de part à d'autre de \bar{S} , le volume le plus faible du système se trouve être la combinaison d'un CSTR et d'un PFR.

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

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

Un résultat important à retenir de ce raisonnement est qu'un nombre fini ($N > 1$) de chémostats en série n'est jamais optimal. Un autre résultat à garder en tête est que si $X_{in} = 0$, alors la solution optimale est donnée par i) un CSTR tant que $\bar{S} \leq S_{out}$ et ii) un CSTR suivi d'un PFR dès que $S_{out} < \bar{S}$ [2].

Dans le cas où S_{out} n'est pas fixée mais le résultat du processus d'optimisation réalisé, les problème de type Pb2 se résolvent assez facilement avec les mêmes outils.

La très grande force de cette approche est que les résultats restent valides quelle que soit la cinétique considérée à partir du moment où cette dernière est telle que la fonction f admet un seul minimum. Par exemple, nous avons mentionné dans la liste des problèmes ci-dessus le cas de cinétiques impliquant la concentration en produit P . A partir du moment où, à l'équilibre, la concentration de produit peut être exprimée comme une fonction du substrat, on

a bien $f = f(S)$ et ce sont les propriétés de cette fonction, et notamment le fait qu'elle possède un seul minimum, qui impliquent que l'approche graphique proposée donne la solution optimale. Le lecteur pourra par exemple vérifier que les résultats restent valides pour les cinétiques avec inhibition $\mu_{max} \frac{S}{S+K_S} (1 - \frac{P}{K_P})$ et $\mu_{max} \frac{S}{S+K_S} \frac{1}{\frac{P}{K_P}}$, respectivement dénommées 'cinétique à inhibition non létale par le produit' et 'cinétique à inhibition létale par le produit'. [5].

4.3 Généralisation

Les dernières remarques formulées dans la section précédente nous amènent dans cette section à nous poser la question de savoir ce qui pourrait se passer si la fonction f présentait plusieurs minima. Bien que les fonctions usuelles que nous avons testées ne présente pas cette propriété, nous pouvons tout à fait appliquer la méthode proposée ci-dessus et examiner ce qui se passerait si c'était le cas...

4.4 Résolution du Pb3

Par rapport à des problèmes de type Pb3, la première remarque que l'on peut faire est que, pour le modèle (2) la productivité du réacteur en biomasse est quantifiée par la grandeur $Q_{in}X$ (c'est la quantité de biomasse produite par unité de temps). En outre, en chémostat, le débit de biogaz d'un système, quant à lui, est supposé être proportionnel à 'l'activité' des microorganismes : le débit de biogaz est donc modélisé par l'expression $V\mu(S)X$ (ce sera une intégrale de l'activité des microorganismes sur la longueur du réacteur pour un PFR). Comme, à l'équilibre, on a $\mu(S) = D = \frac{Q_{in}}{V}$, maximiser un débit de gaz est équivalent à maximiser la productivité du réacteur en biomasse. Ceci reste vrai lorsque l'on considère deux réacteurs en série à partir du moment où la productivité de la biomasse est définie comme la productivité du second réacteur (c'est-à-dire définie par $Q_{in}X_2$) et le débit de gaz comme la somme de ce que produisent les deux réacteurs. La seconde remarque est qu'il n'existe pas d'approche équivalente à l'approche graphique présentée précédemment pour résoudre ce type de problème. Si l'on peut imaginer comparer les performances d'un PFR et d'un CSTR, il n'apparaît pas évident de comparer de manière systématique des configurations plus complexes qui feraient intervenir une combinaison des deux. Le fait est que nous n'avons pas trouvé, dans la littérature, d'étude comparant les performances des modèles (4) et (4) ci-dessus. En revanche, ce que l'on trouve, ce sont des comparaisons numériques entre la productivité d'1 CSTR et de 2 CSTR en série ([3]) qui ont établi qu'un CSTR dont le débit d'alimentation peut être réglé est la configuration permettant de délivrer une productivité maximale. Récemment, Dali Youcef *et coll.* ont formellement établi ce résultat pour une cinétique de type Monod (nulle en zéro et croissante) [7]. En outre, un second résultat intéressant est que cette configuration peut ne plus être optimale dès lors que le modèle inclut un terme de mortalité [6].

5 Extensions

Sans mortalité on sait (cf. par exemple Bastin) que la productivité est toujours meilleure en chemostat. Avec mortalité, ça reste vrai SAUF si on introduit des contraintes sur Q ou V (qui est constant) où il peut arriver - selon S_{in} et la mortalité - qu'une spatialisation (deux réacteurs) soit plus performante, [6]. Attention, dans ces derniers travaux, les auteurs ont comparé les performances d'un CSTR avec celles de deux CSTR en série. La question fondamentale étant de déterminer si la spatialisation est optimale, il faudrait, comme précédemment, comparer plutôt les performances obtenues avec un CSTR et celles obtenues avec un PFR. Revenons aux Problèmes de type Pb1. Pourrait-on imaginer une fonction $f(S) = \frac{1}{\mu(S)(M-S)}$ sur laquelle le raisonnement graphique présenté amènerait à une optimisation dans laquelle l'utilisation de deux CSTR en série serait optimale?

Pour cela, considérons une fonction $f(S)$ qui présenterait deux minima. Appelons \bar{S}_3 , \bar{S}_2 et \bar{S}_1 les trois extrema de f avec $\bar{S}_3 < \bar{S}_2 < \bar{S}_1$ (\bar{S}_3 et \bar{S}_1 sont donc des minimums locaux et \bar{S}_2 un maximum local). Deux cas peuvent se présenter selon que \bar{S}_3 est plus petit ou plus grand que \bar{S}_1 . Pour les traiter, introduisons les concentrations suivantes : S_1^* la valeur de S telle que $f(S_1^*) = f(\bar{S}_1)$ (si cette valeur existe, elle est telle que $\bar{S}_3 < S_1^* < \bar{S}_2$), S_3^* la valeur de S telle que $f(S_3^*) = f(\bar{S}_3)$ (si elle existe, elle est telle que $\bar{S}_2 < S_3^* < \bar{S}_1$) et finalement S_{out}^* où $\bar{S}_3 < S_{out}^* < \bar{S}_1$ la valeur de S telle que $f(S_{out}^*) = f(\bar{S}_1)$.

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

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

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

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

5.2 $f(\bar{S}_1) < f(\bar{S}_3)$

Pour ce cas, introduisons . Supposons en outre que $\bar{S}_1 < S_{in}$. On montre que :

- 1 CSTR est optimal si $\bar{S}_1 < S_{out}$;
- 1 CSTR amenant la concentration intermédiaire à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR est optimal si $\bar{S}_2 < S_{out} < \bar{S}_1$;
- 1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR amenant la concentration à S_{out}^* , lui-même suivi d'un CSTR si $\bar{S}_3 < S_{out} < \bar{S}_2$;
- 1 CSTR amenant d'abord la concentration à \bar{S}_1 , suivi d'1 PFR amenant la concentration à S_3^* , lui-même suivi d'un CSTR amenant la concentration à S_3^* , lui-même suivi d'un PFR si $S_{out} < \bar{S}_3$.

5.3 Conclusion

De ces cas, on conclut en premier lieu que la configuration de deux CSTR en série n'est jamais optimale. On établit également que la configuration optimale est obtenue avec un nombre de réacteurs idéaux au plus égal à deux fois le nombre de minima de la fonction f .

References

- [1] R. Aris. On optimal adiabatic reactors of combined types. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 40:87–92, 1962.
- [2] C. D. de Gooijer, W. A.M. Bakker, H. H. Beftink, and J. Tramper. Bioreactors in series: An overview of design procedures and practical applications. *Enzyme and Microbial Technology*, 18(3):202–219, 1996.
- [3] D. Herbert. *In Continuous Cultivation of Microorganisms, Proc. 2nd symposium on the Continuous Culture of Microorganisms, 18-23 June 1962, Prague, CSSR*. Academic Press, I. Málek, K. Beran and J. Hospodka, 1964.
- [4] D. Herbert, R. Elsworth, and R. C. Telling. The continuous culture of bacteria; a theoretical and experimental study. *J. gen. Microbiol.*, 14:601–622, 1956.
- [5] Gordon A. Hill and Campbell W. Robinson. Minimum tank volumes for cfsr bioreactors in series. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 67(5):818–824, 1989.
- [6] M. D. Youcef, A. Rapaport, and T. Sari. Performance study of two serial interconnected chemostats with mortality. *Bull Math Biol*, 84(110), 2022.
- [7] M. D. Youcef, A. Rapaport, and T. Sari. Study of performance criteria of serial configuration of two chemostats. *Math Biosci Eng.*, 17(6):6278–6309, 2022.