

UNIVERSITÉ LIBRE DE BRUXELLES



# **BING-F525 - Modélisation des écosystèmes aquatiques**

**Travaux Pratiques**

## **Degradation de la matière organique par les bactéries et de reminéralisation**

*Nicolas Piret*

*Master en bioingénieur : sciences et technologies de  
l'environnement*

*Yann Spöri*

*Master en bioinformatique et modélisation*

cours donné par  
Nathalie Gypens

11 décembre 2016

## TABLE DES MATIÈRES

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>2</b>
<b>2</b>	<b>Modèle à un seul pool de MO</b>	<b>2</b>
2.1	Description du modèle . . . . .	2
2.2	Simulation de référence . . . . .	2
2.3	Tests de sensibilité . . . . .	4
2.3.1	Test 1 . . . . .	4
2.3.2	Test 2 . . . . .	4
2.3.3	Test 3 . . . . .	4
2.3.4	Test 4 . . . . .	4
2.3.5	Test 5 . . . . .	4
2.3.6	Test 6 . . . . .	5
2.4	Conclusion . . . . .	5
<b>3</b>	<b>Modèle à un plusieurs pools de MO</b>	<b>11</b>
3.1	Description du modèle . . . . .	11
3.2	Simulation de référence . . . . .	11
3.3	Tests de sensibilité . . . . .	13
3.3.1	Test 1 . . . . .	13
3.3.2	Test 2 . . . . .	14
3.3.3	Test 3 . . . . .	15
3.3.4	Test 4 . . . . .	15
3.3.5	Test 5 . . . . .	16
3.4	Conclusion . . . . .	17

## 1 INTRODUCTION

INTRO

## 2 MODÈLE À UN SEUL POOL DE MO

### 2.1 Description du modèle

$$\frac{d[BC]}{dt} = (Y_{BC}u_{BC} - kd_{BC}) [BC] \quad (1)$$

$$\frac{d[TOC]}{dt} = -ec[BC] \quad (2)$$

$$\frac{d[SBC]}{dt} = ec[BC] - u_{BC}[BC] \quad (3)$$

$$\frac{d[SNH_4]}{dt} = vNH_4 - nitri \quad (4)$$

Avec

$$ec = e_{1mx} \frac{[TOC]}{k_{1h} + [TOC]} \quad (5)$$

$$vNH_4 = u_{BC}[BC](NC)_{TOC} - Y_{BC}u_{BC}[BC](NC)_{BC} \quad (6)$$

$$nitri = n_{imax} \frac{[NH_4]}{k_{NH_4ni} + [NH_4]} \quad (7)$$

### 2.2 Simulation de référence

Sur le graphique de l'évolution de la concentration du TOC en fonction du temps, nous pouvons observer que la concentration décroît de 0 à 6 jours et atteint une valeur nulle après 6 jours. En effet, ce TOC est hydrolysé en SBC, qui dépend de la concentration en bactéries et de la concentration en TOC. Ainsi, au début de la simulation, la décroissance du TOC est due à la grande concentration en TOC (car la valeur de  $ec$  est grande). Ensuite, la décroissance de la concentration de TOC est due à une augmentation de la concentration en bactéries.

Sur le graphique de l'évolution de la concentration en SBC, on peut voir que sa concentration augmente de 0 à 4 jours, ou elle atteint une valeur maximale de 4,8 mmolC.m-3, puis décroît de 4 à 6 jours, jusqu'à atteindre une valeur nulle. En effet, l'évolution de la concentration en SBC est due à la concentration en TOC et en SBC. Ainsi, au début

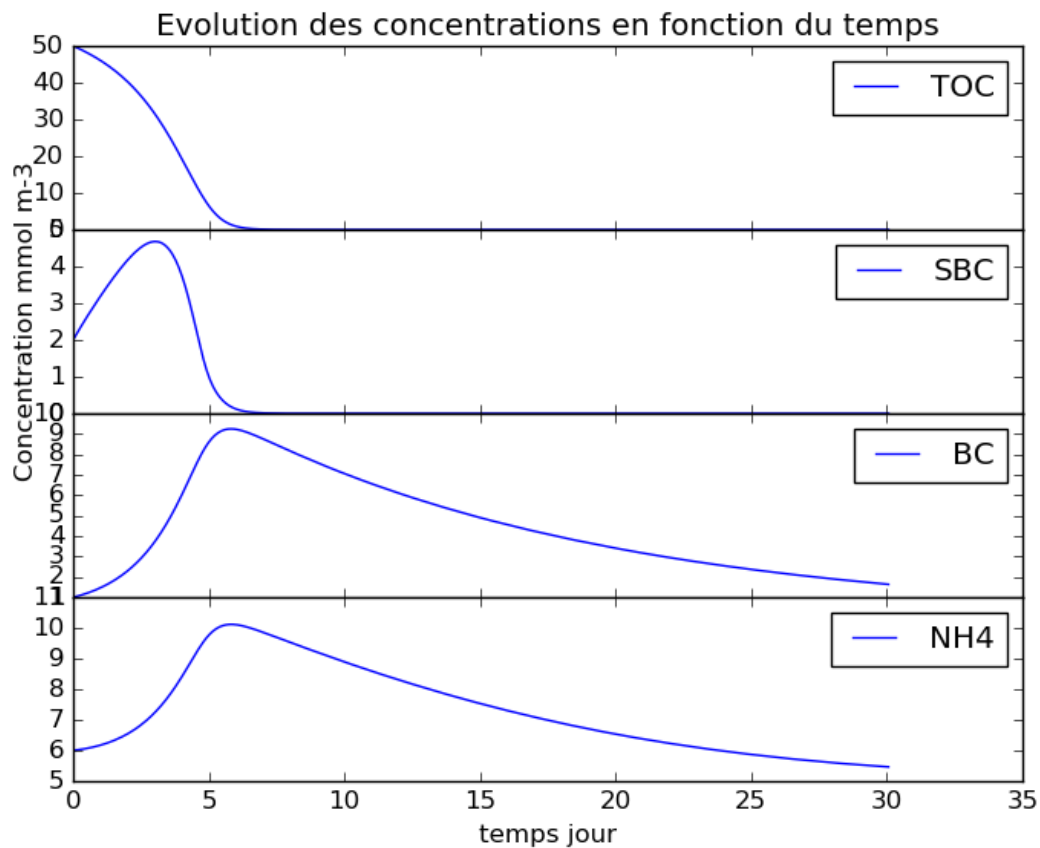


FIGURE 1: Simulation de référence, pour un modèle à un seul pool de matière organique

de la simulation, la concentration en TOC est importante, et celle en SBC est faible, et donc, le terme d'augmentation de la concentration est supérieur au terme de diminution. A 4 jours, les deux termes s'égalisent, car la concentration en TOC diminue et car la concentration en SBC augmente. Finalement, après 4 jours, le terme de diminution de la concentration en SBC diminue jusqu'à atteindre une valeur nulle, un peu après que le TOC atteigne une valeur nulle.

Sur le graphe de l'évolution de la concentration en bactéries, on peut observer que celle-ci augmente de 0 à 6 jours, atteint une valeur maximale de 9 mmolC.m<sup>-3</sup>, puis décroît. En effet, l'évolution de cette concentration dépend de la concentration en SBC. Ainsi, au début de la simulation la concentration en SBC augmente, et donc la concentration en bactéries augmentent aussi, car le terme de croissance l'emporte sur le terme de mortalité. Au maximum de concentration, les deux termes se compensent, car la concentration en SBC diminue. Finalement, la concentration en SBC devient nulle, et donc seul le terme de mortalité influence l'évolution de la concentration en bactéries.

Sur le graphe de l'évolution de la concentration en NH<sub>4</sub>, celle-ci augmente de 0 à 6 jours,

pour atteindre un maximum de  $10 \text{ mmolC.m}^{-3}$ , puis décroître ensuite. En effet, l'évolution de la concentration dépend de deux termes : un terme dépendant de ce qu'utilisent les bactéries, par rapport à ce dont elles ont besoins ( $v_{\text{NH}_4}$ , dépendant de la concentration en bactéries et de la concentration en SBC), et un terme de nitrification, dépendant de la concentration en  $\text{NH}_4$ . Au début de la simulation, la concentration en  $\text{NH}_4$  augmente, ce qui veut dire que la valeur de  $v_{\text{NH}_4}$  est supérieur au terme de nitrification. Ainsi, le terme  $v_{\text{NH}_4}$  est toujours positif, ce qui signifie que ce qu'utilisent les bactéries est toujours supérieur à ce qu'elles ont besoin, et donc qu'elles rejettent du  $\text{NH}_4$  dans leur environnement. Au maximum de concentration en  $\text{NH}_4$ , les deux termes se compensent, car la concentration en SBC diminue. Finalement, lorsque la concentration en SBC devient nulle, l'évolution de  $\text{NH}_4$  ne dépend plus que de la nitrification.

## **2.3 Tests de sensibilité**

### **2.3.1 Test 1**

### **2.3.2 Test 2**

### **2.3.3 Test 3**

### **2.3.4 Test 4**

### **2.3.5 Test 5**

Dans cette simulation, seul le rapport N :C de TOC est modifié, et est bien inférieur à celui de la référence. Ainsi, le terme  $v_{\text{NH}_4}$  devient négatif, ce qui veut dire que les bactéries puisent du  $\text{NH}_4$  dans leur environnement, et donc que la concentration en  $\text{NH}_4$  diminue. Il y a deux types de décroissance de la concentration en  $\text{NH}_4$  dans cette simulation. Au début et jusque 6 jours, la décroissance de la concentration en  $\text{NH}_4$  est due à l'utilisation du  $\text{NH}_4$  par les bactéries, et à la nitrification. Après 6 jours, la concentration en SBC devient nulle, et donc la diminution de la concentration de  $\text{NH}_4$  n'est plus due qu'à la nitrification. C'est pourquoi, la décroissance est moins rapide qu'au début de la simulation. On peut noter que la concentration en  $\text{NH}_4$  va plafonner autour d'une valeur de  $5 \text{ mmolC.m}^{-3}$ . En effet, la nitrification est décrite par une fonction de type Michaelis-Menten avec seuil. Ce seuil correspond à la constante de demi-saturation, qui a une valeur de  $5 \text{ mmolC.m}^{-3}$ . Comme le rapport N :C de TOC n'a pas d'influence sur les autres processus, seul l'évolution de la concentration en  $\text{NH}_4$  est modifiée dans cette simulation.

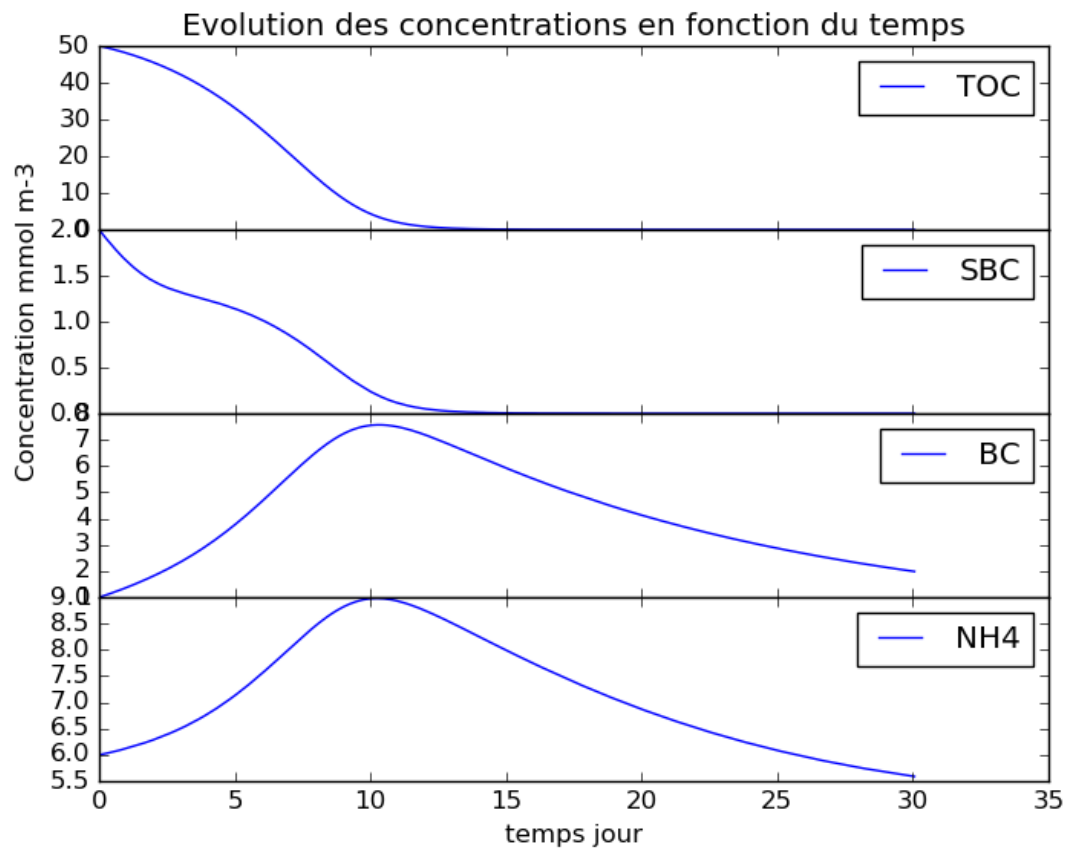


FIGURE 2: Simulation en divisant par deux la valeur de la constante d'ectohydrolyse de TOC à température optimale

### 2.3.6 Test 6

Dans cette simulation, le terme de nitrification est nul. Ainsi, seul le terme  $v_{NH4}$  influence l'évolution de la concentration en  $NH4$ . Or, ce terme est ici positif, ce qui signifie que les bactéries relâchent du  $NH4$  dans leur environnement. Ainsi, au début de la simulation, la concentration en  $NH4$  augmente jusqu'à atteindre un plafond. Celui-ci est atteint lorsque la concentration en SBC devient nulle. En effet, si la concentration en SBC devient nulle, alors le terme  $v_{NH4}$  le devient aussi, et donc la concentration en  $NH4$  n'évolue plus. Ici aussi, le terme de nitrification n'influence que l'évolution de la concentration en  $NH4$ , et donc seul ce processus est différent, par rapport à la référence.

## 2.4 Conclusion

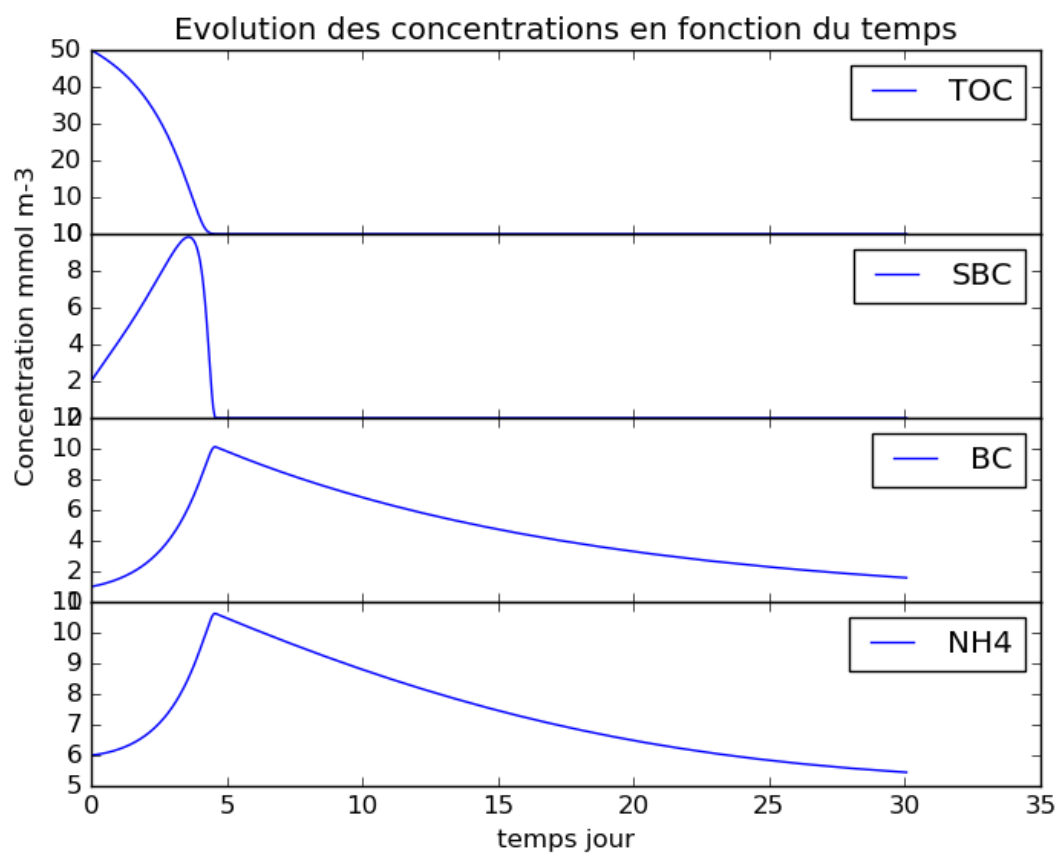


FIGURE 3: Simulation en réduisant la valeur de la constante d'hydrolyse de TOC

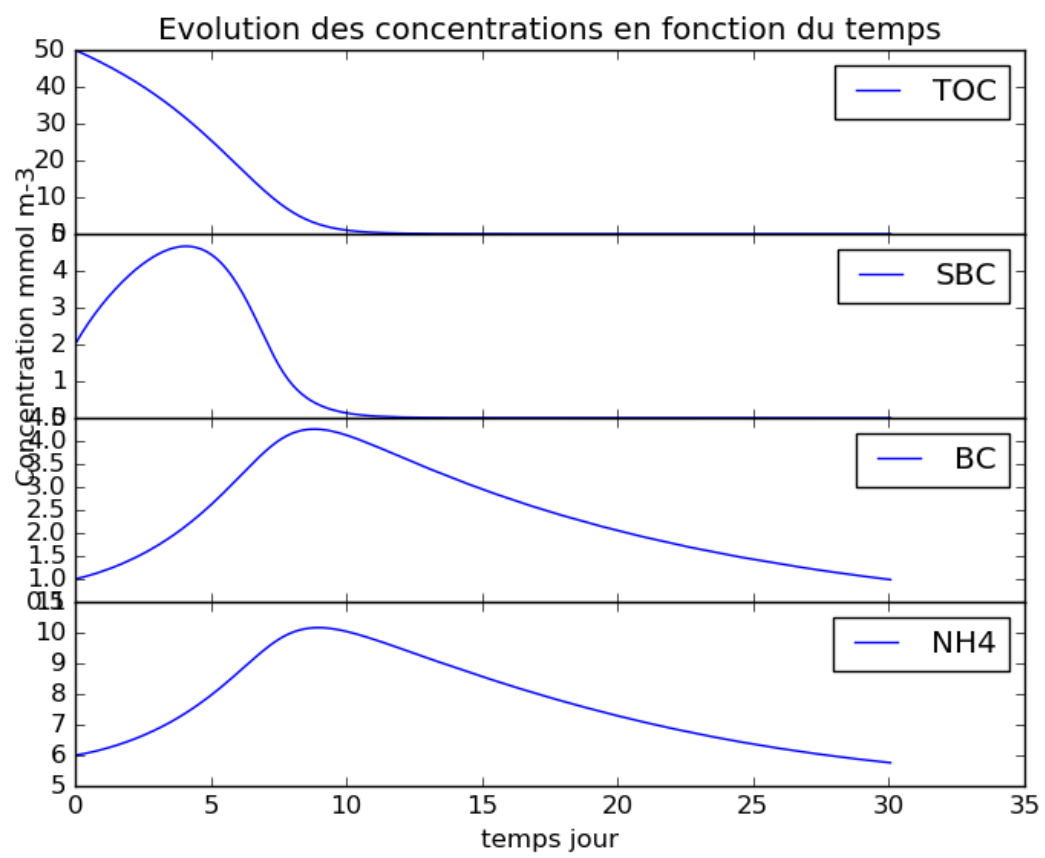


FIGURE 4: Simulation en réduisant la valeur du taux de croissance des bactéries



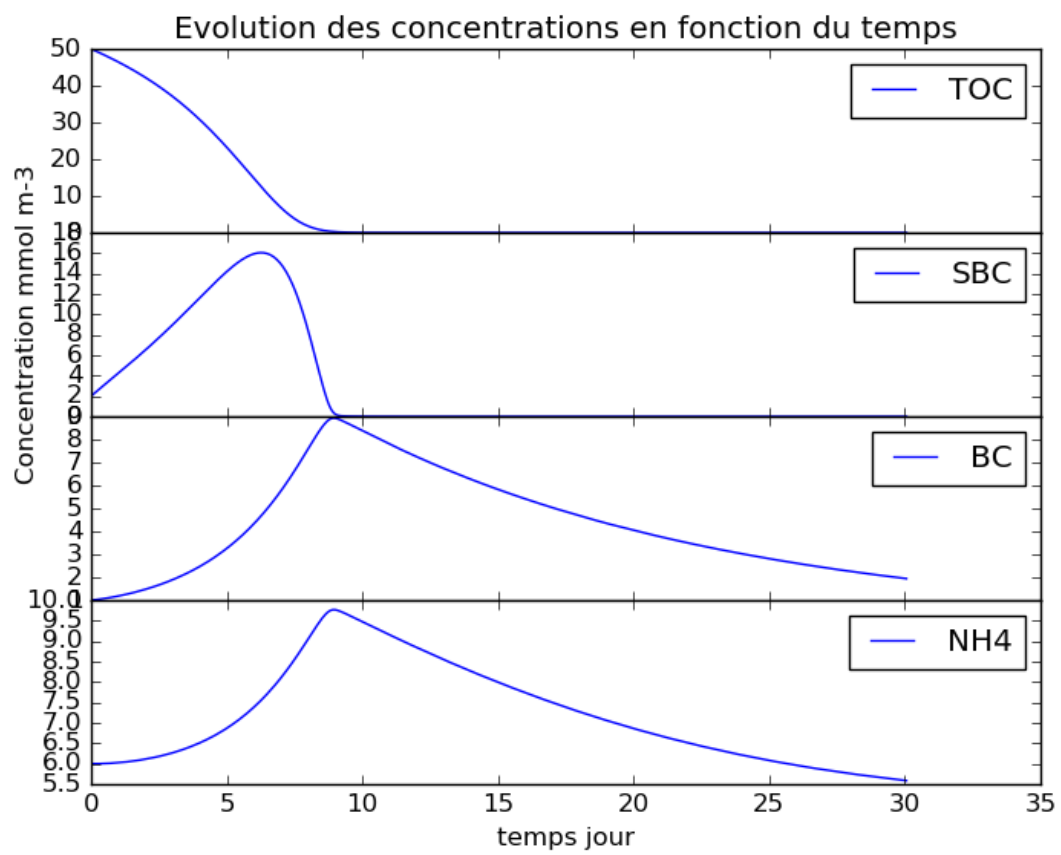


FIGURE 5: Simulation en réduisant la valeur de la constante d'uptake de SBC à température optimale

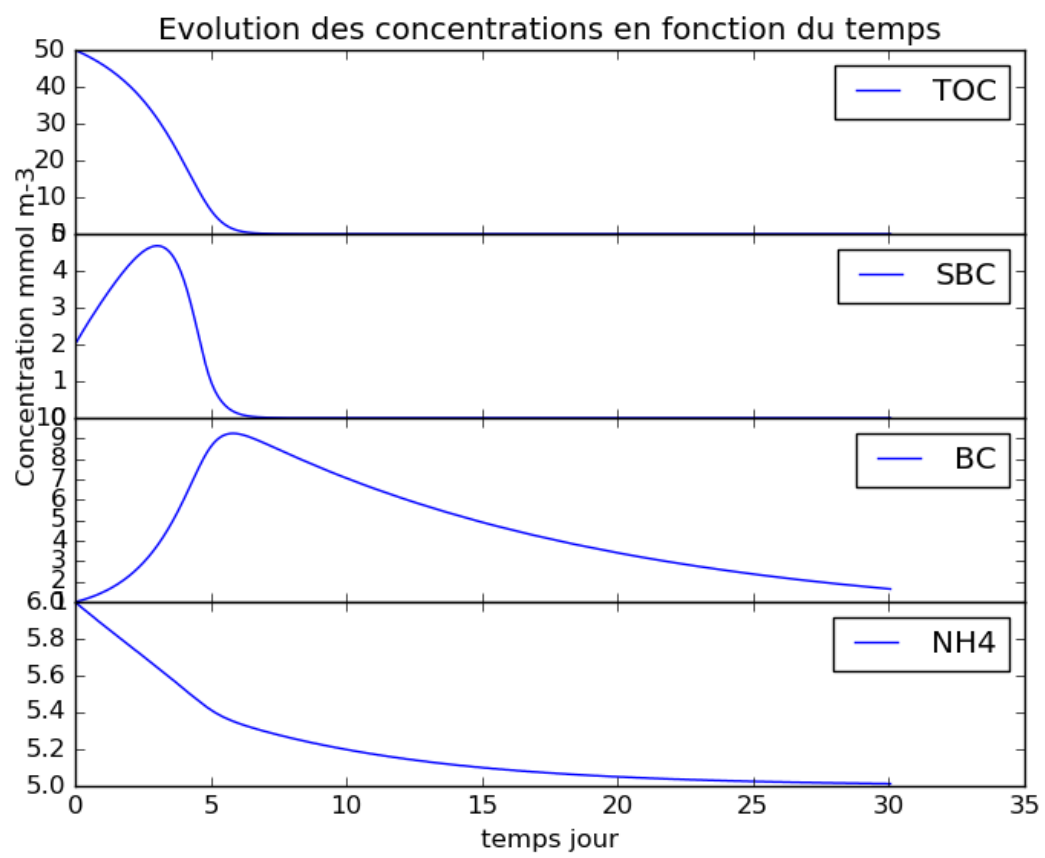


FIGURE 6: Simulation en réduisant la valeur du rapport NC du TOC

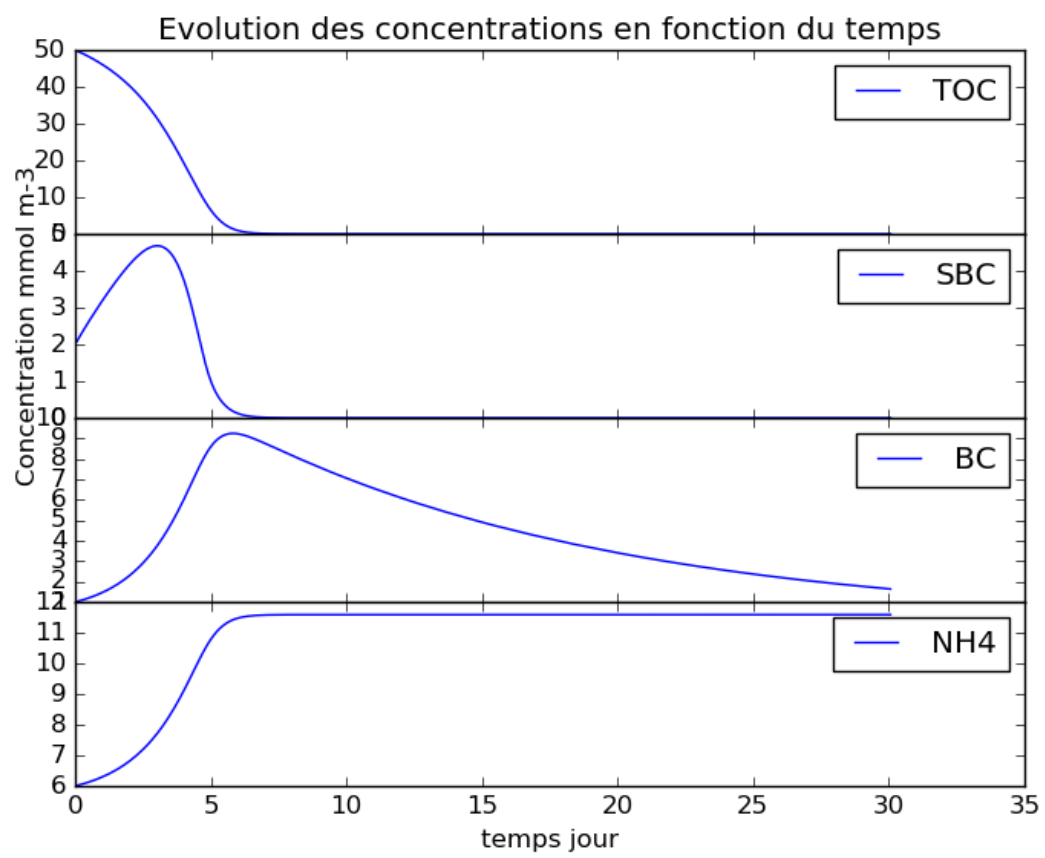


FIGURE 7: Simulation en supprimant l'effet de la nitrification

### 3 MODÈLE À UN PLUSIEURS POOLS DE MO

#### 3.1 Description du modèle

#### 3.2 Simulation de référence

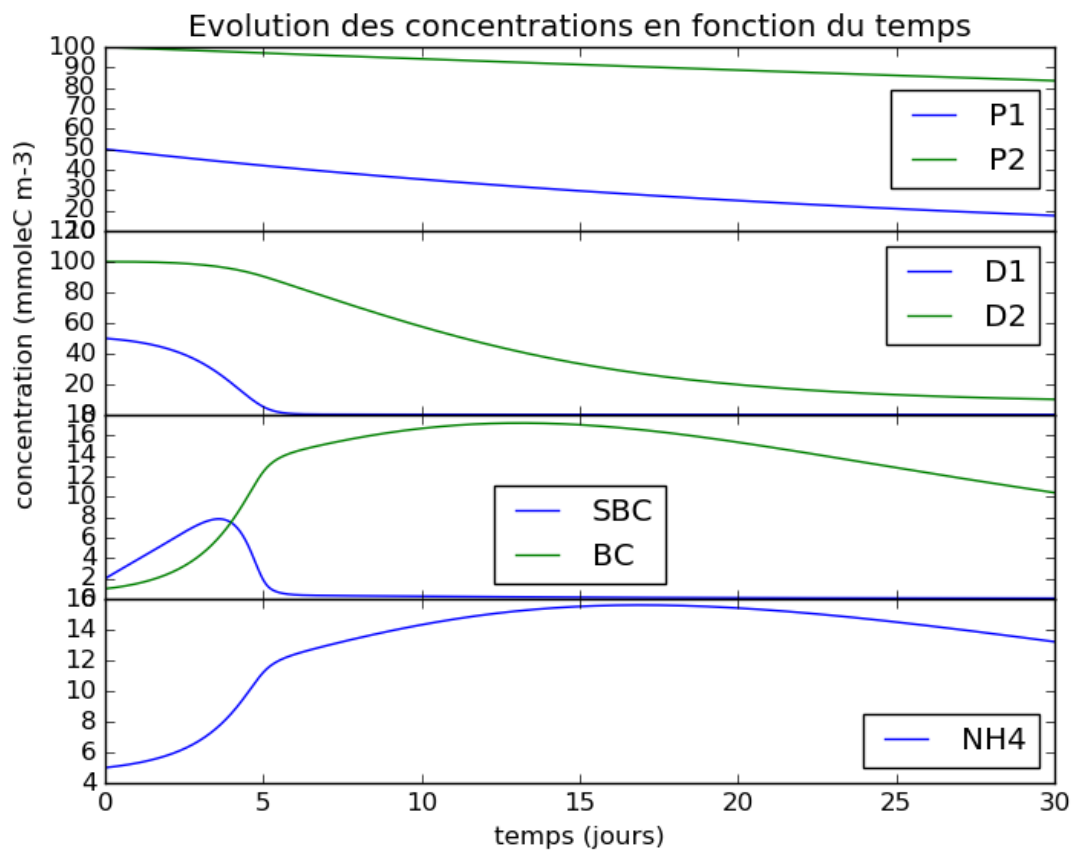


FIGURE 8: Simulation de référence, pour un modèle à plusieurs pools de matière organique

Les concentration en P1 et P2 diminuent selon une cinétique d'ordre 1. En effet, les équations de l'évolution de ces deux paramètres sont toutes les deux dépendante d'une constante multipliée par la concentration en P1 ou P2 (réf aux équations). Cependant, nous pouvons constater que la concentration en P1 diminue plus rapidement que celle de P2 (la pente de la courbe est plus grande). Ceci s'explique par le fait que la constante dans l'équation de P1 est supérieure à celle dans l'équation de P2. Donc, P1 est plus rapidement transformé en D1 que P2 est transformé en D2.

L'évolution des concentrations de D1 et D2 dépendent toutes les deux de deux termes, un correspondant à un apport depuis P1 ou P2, et un correspondant à leur hydrolyse en SBC. Les deux termes contribuent à l'évolution des concentrations en D1 et D2. Cependant, le terme d'hydrolyse en SBC est toujours plus important que le terme d'apport depuis P1 et P2, et c'est pourquoi, les concentrations en D1 et D2 décroissent tout le temps. De plus, nous pouvons constater que la concentration en D1 décroît plus rapidement que celle en D2. En effet, bien que la concentration initiale en D1 soit deux fois inférieure à la concentration en D2, D1 est plus facilement biodégradable que D2 ( $emxD1 > emxD2$  et  $khD1 < khD2$ ). Ainsi, D1 est préférentiellement hydrolysé en SBC pendant les premiers jours (jusque 3 jours environ), puis, lorsque la concentration en D1 devient très faible, les bactéries commencent à consommer D2. Lorsque D1 tombe à une concentration proche de 0 après 6 jours, D2 est plus rapidement hydrolysé en SBC qu'au début de la simulation.

Pour ce qui est de l'évolution de la concentration en bactéries, celle-ci augmente rapidement jusque 5 jours, puis augmente plus lentement jusque 13 jours, atteignant alors un maximum de  $17 \text{ mmolC.m}^{-3}$ , pour enfin diminuer relativement lentement. En effet, au début de la simulation, la concentration en SBC croît rapidement de 0 à 4 jours, atteignant un maximum de  $8 \text{ mmolC.m}^{-3}$ , ce qui permet une croissance rapide des bactéries. Cette croissance rapide de la concentration en SBC est due à la concentration assez élevée en D1 au début de la simulation, bien que D2 contribue aussi au terme de croissance de la concentration en SBC. Lorsque la concentration en D1 se rapproche de 0, le terme d'évolution positive de la concentration en SBC n'est plus du qu'à D2, et c'est pourquoi la concentration en SBC diminue, jusqu'à se rapprocher de 0, ce qui entraîne un ralentissement de la croissance bactérienne. Finalement, après 13 jours, il n'y a plus assez de SBC pour permettre une croissance bactérienne supérieure à la mortalité, et c'est pourquoi la concentration en bactérie diminue.

Pour l'évolution de la concentration en  $\text{NH}_4$ , celle-ci augmente rapidement au début de la simulation, de 0 à 5 jours. La vitesse de croissance de  $\text{NH}_4$  va ensuite diminuer, pour atteindre un maximum de concentration de  $14 \text{ mmolC.m}^{-3}$  après 17 jours, pour enfin diminuer. Ainsi, ceci veut dire que le terme positif dans l'équation de l'évolution du  $\text{NH}_4$  est positif et supérieur au terme de nitrification. Cela veut aussi dire que  $v_{\text{NH}_4}$  est positif, et que donc les bactéries relarguent du  $\text{NH}_4$  dans leur environnement. Au début de la simulation, la concentration en  $\text{NH}_4$  augmente rapidement car relativement beaucoup de bactéries sont présentes, et car la concentration en  $\text{NH}_4$  est faible, ce qui entraîne une valeur de nitrification faible. Ainsi, l'évolution de la concentration en  $\text{NH}_4$  va suivre l'évolution de la concentration en bactéries. Puis, la concentration va devenir relativement plus faible que celle en  $\text{NH}_4$ , entraînant une diminution de la vitesse de croissance de la concentration en  $\text{NH}_4$ . Finalement, la concentration en  $\text{NH}_4$  sera telle que l'évolution de cette concentration va devenir négative.

### 3.3 Tests de sensibilité

#### 3.3.1 Test 1

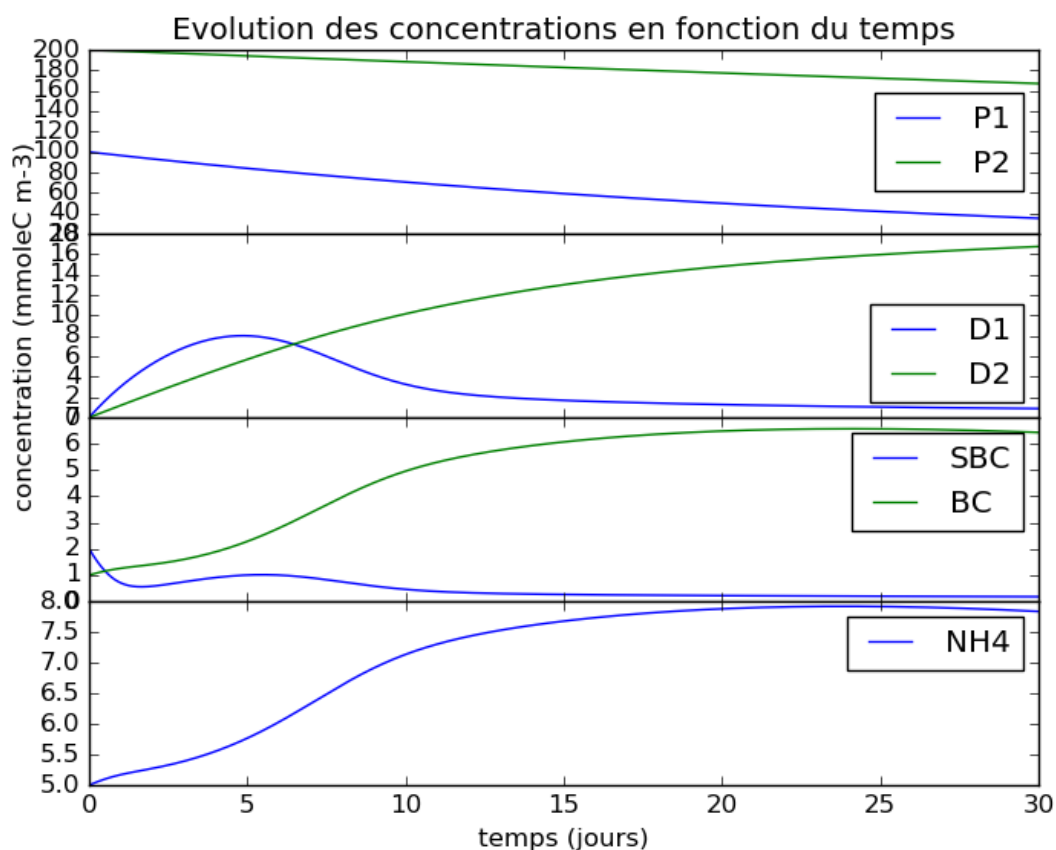


FIGURE 9: Simulation en doublant les concentrations initiales de P1 et P2, et en rendant celles de D1 et D2 nulles

Contrairement à la simulation de référence, les concentrations initiales en P sont suffisantes pour permettre une augmentation de la concentration en D, de 0 à 5 jours pour D1 et tout le long de la simulation pour D2. En effet, après 5 jours, la concentration en P1 devient trop faible, couplé à l'augmentation de la biomasse bactérienne, entraînant ainsi la diminution de la concentration en D1. Pour D2, le terme d'augmentation de la concentration est toujours supérieur au terme de diminution.

En début de simulation, nous pouvons observer une diminution de la concentration en SBC. En effet, celle-ci est principalement due à l'hydrolyse de D1. Or, la concentration initiale de D1 est nulle, ne permettant pas de croissance de SBC. Ainsi, la croissance des bactéries est lente. Après 1 jour, la concentration en SBC va augmenter, car l'hydrolyse

de D1 et D2 est supérieur à la consommation de SBC par les bactéries. Ceci va permettre aux bactéries de présenter une vitesse de croissance plus rapide. Ainsi, cette augmentation de la concentration en bactéries va devenir telle qu'elle va entraîner une diminution de la concentration en SBC. Cependant, contrairement à la simulation de référence, la concentration de SBC rester suffisante pour permettre une croissance bactérienne jusque 25 jours.

De la même manière que pour la simulation de référence, l'évolution de la concentration en  $\text{NH}_4$  va suivre une tendance semblable à l'évolution de la concentration en bactéries.

### 3.3.2 Test 2

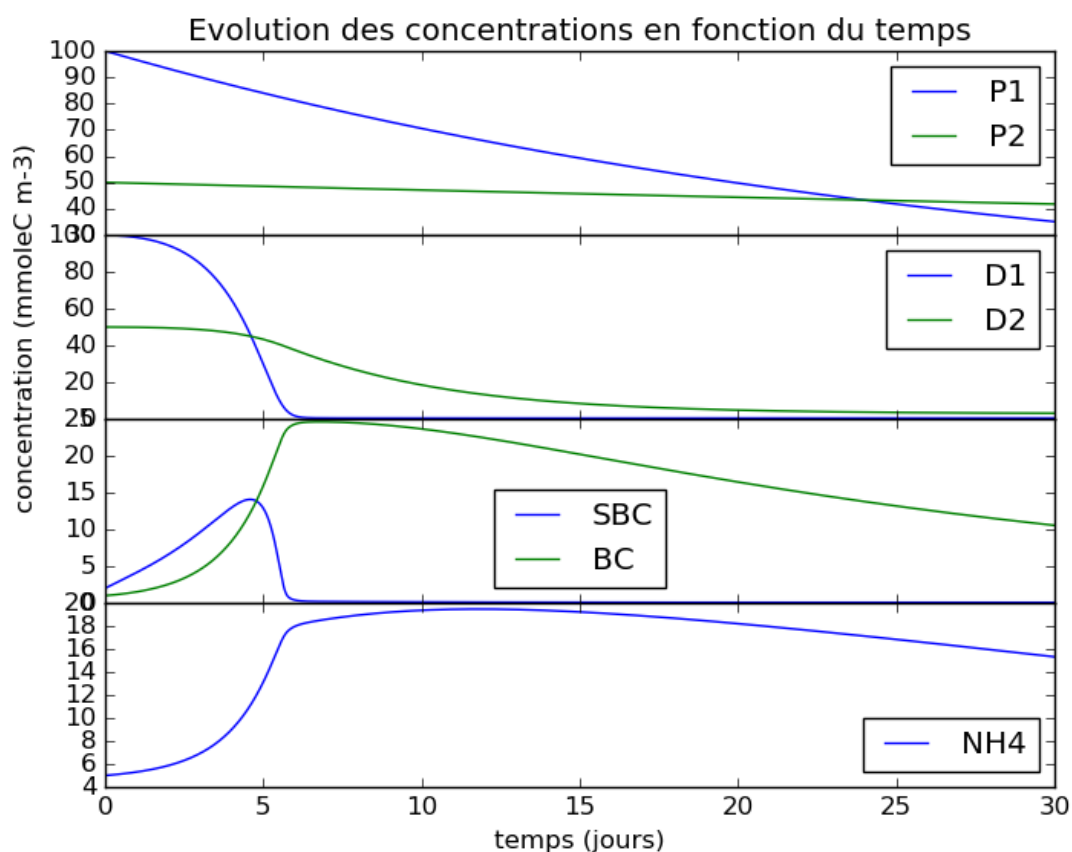


FIGURE 10: Simulation en doublant les concentrations initiales de P1 et D1, et en divisant par deux celles de P2 et D2

La concentration en P1 diminue relativement plus que P2, que dans le cas de la référence. En effet, l'évolution de la concentration en P1 est directement proportionnelle à

la concentration en P1, qui est ici initialement deux fois plus élevée que dans le cas de la référence. Comme la concentration en P1 est élevée et que P1 est préférentiellement hydrolysé en D1 puis en SBC que P2 en D2 puis en SBC, la concentration en P2 diminue très peu.

Bien que la concentration en P1 soit importante en début de simulation, elle ne permet pas une croissance de D1. En effet, la concentration initiale en D1 est elle aussi plus importante que dans le cas de la simulation de référence, ce qui augmente le terme négatif dans l'équation de l'évolution de D1. Ainsi, D1 va décroître rapidement pour atteindre une valeur proche de 0 après 6 jours. L'évolution de la concentration en D2 est quant à elle semblable à la simulation de référence, bien que les concentrations initiales en P2 et D2 soient plus faibles.

La concentration en SBC va augmenter en début de simulation, lorsque les concentrations en D1 et D2 sont importantes. Puis, puisque l'hydrolyse de D1 contribue de manière plus importante à l'augmentation de SBC, la concentration en SBC va diminuer lorsque celle en D1 atteint une valeur proche de 0. Ainsi, les bactéries vont croître lorsque la concentration en SBC augmente, et contrairement à la simulation de référence, vont décroître lorsque la concentration en SBC tombe proche de 0, car la concentration en D2 n'est plus suffisante pour maintenir une augmentation de la concentration en bactéries.

### **3.3.3 Test 3**

Nous avons augmenté la biodégradabilité de D1 par rapport à D2. Ainsi, la concentration en D1 va diminuer plus rapidement que dans le cas de la référence, ce qui va entraîner un maximum de SBC plus grand, mais atteint plus rapidement. Puisque la concentration en SBC augmente plus rapidement que dans le cas de la simulation de référence, la limite entre les deux types d'évolution positives des bactéries a lieu plus tôt aussi.

### **3.3.4 Test 4**

Contrairement au test précédent, nous avons augmenté la biodégradabilité de D2 par rapport à D1. Ainsi, nous pouvons constater que l'évolution des concentrations de D1 et D2 sont plus semblables que dans le cas de la simulation de référence. En effet, la concentration en D1 va diminuer plus rapidement, et va atteindre une concentration proche de 0 après 13 jours. Puisque D2 est mieux hydrolysé que lors de la référence, il va contribuer de manière plus importante à l'augmentation de la concentration de SBC. Ainsi, bien que la concentration maximale en SBC soit atteinte en même temps que dans le cas de la référence, car l'évolution de D1 est la même, la valeur de cette concentration maximale sera plus importante que dans le cas de la référence. De la même manière, la concentration maximale en bactéries sera plus importante, mais atteinte plus rapide-



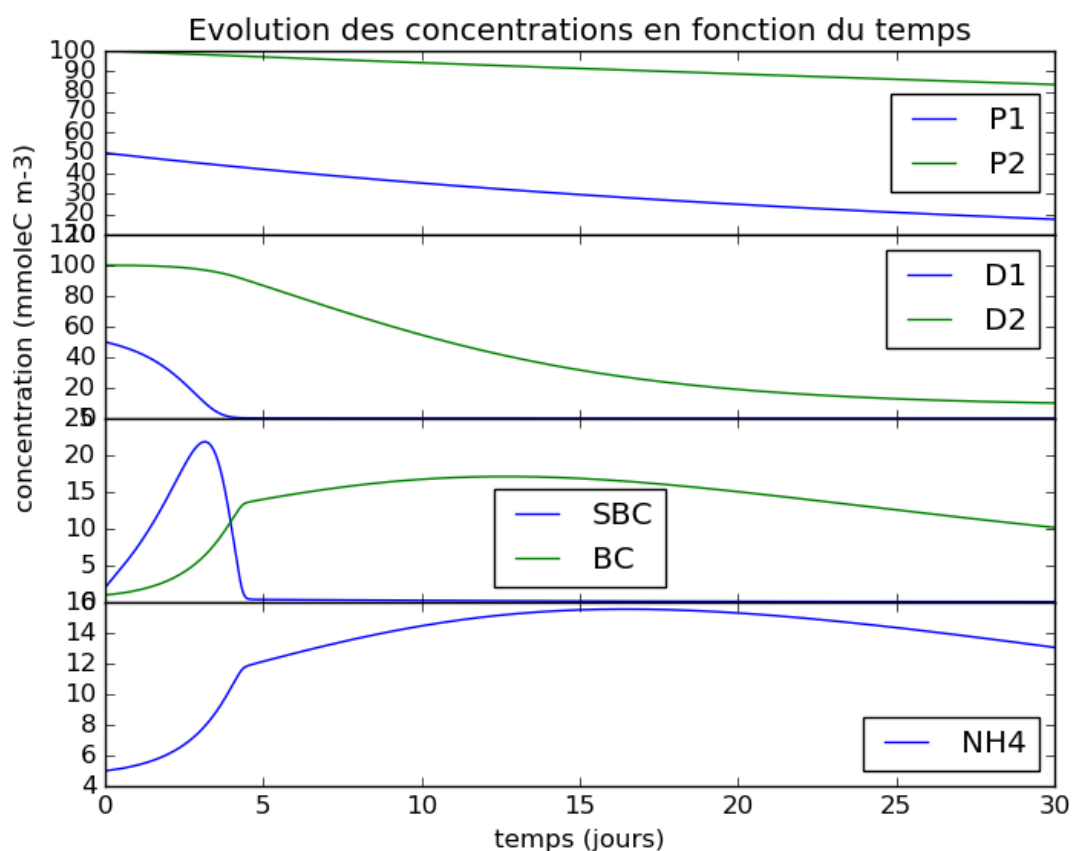


FIGURE 11: Simulation en doublant la valeur du paramètre d'ectohydrolyse de D1 à température optimale

ment que dans le cas de la simulation de référence.

### 3.3.5 Test 5

Lors de cette simulation, nous avons augmenté la vitesse d'hydrolyse de P1 en D1. Ainsi, nous pouvons constater que la concentration en P1 diminue plus rapidement que dans le cas de la référence. En effet, dans la simulation de référence, la diminution de la concentration en P1 était presque linéaire, tandis qu'elle ne l'est plus dans ce test. Bien que les courbes de l'évolution de la concentration en D1 soient semblables entre ce test et la simulation de référence, on peut constater que dans ce test, au tout début de la simulation, la concentration en D1 diminue moins rapidement que dans le cas de la référence. Ceci s'explique par le fait que l'hydrolyse de P1 en D1 est plus importante dans ce test, alors que l'hydrolyse de D1 en SBC se fait de la même manière que dans

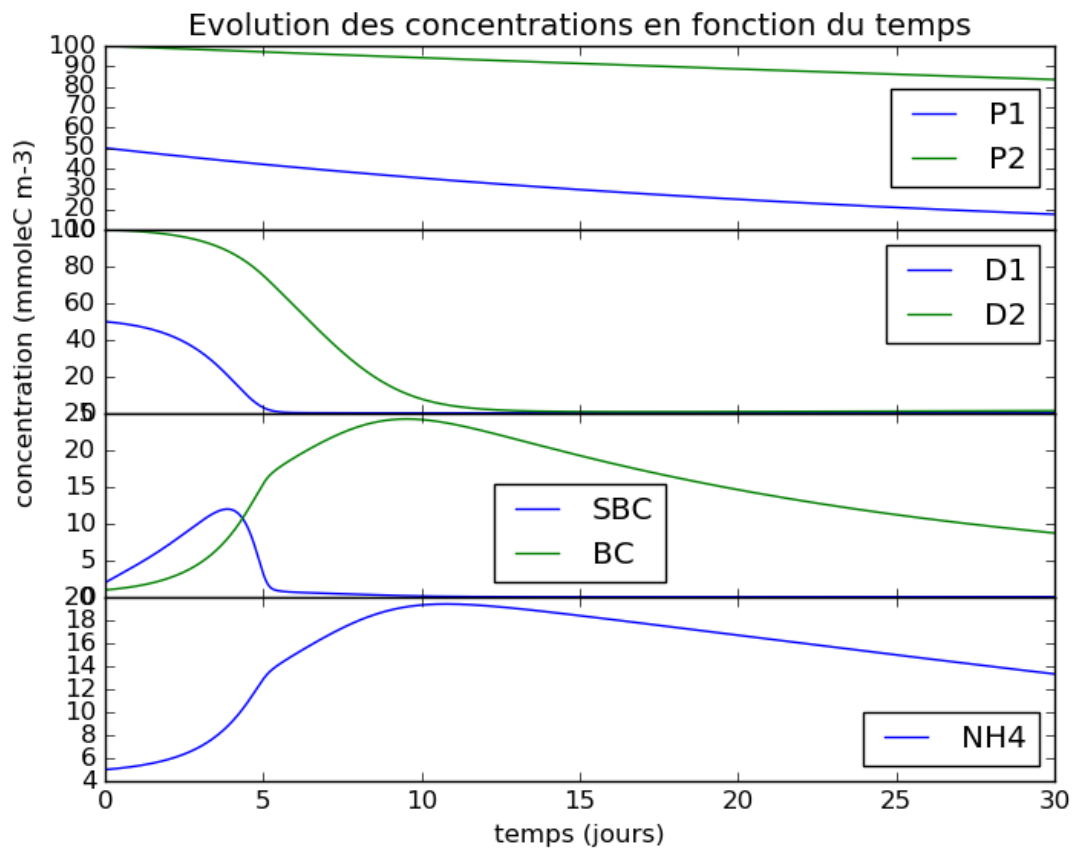


FIGURE 12: Simulation en réduisant la valeur de la constante d'hydrolyse de D2

le cas de la référence. Ainsi, le terme positif de l'évolution de la concentration de D1 est plus important que dans le cas de la simulation de référence.

Puisque la concentration en D1 est plus importante en début de simulation, la concentration en SBC l'est aussi. Ceci peut se remarquer sur le graphique de l'évolution de la concentration en SBC, sur lequel le maximum de concentration est supérieur au cas de la référence. Ainsi, la concentration maximale en bactéries est aussi supérieure.

### 3.4 Conclusion

Qu'est ce qui contrôle la vitesse de croissance de BC (éléments les plus biodégradables) et qu'est ce qui contrôle le max de BC (lentement biodégradable) ?

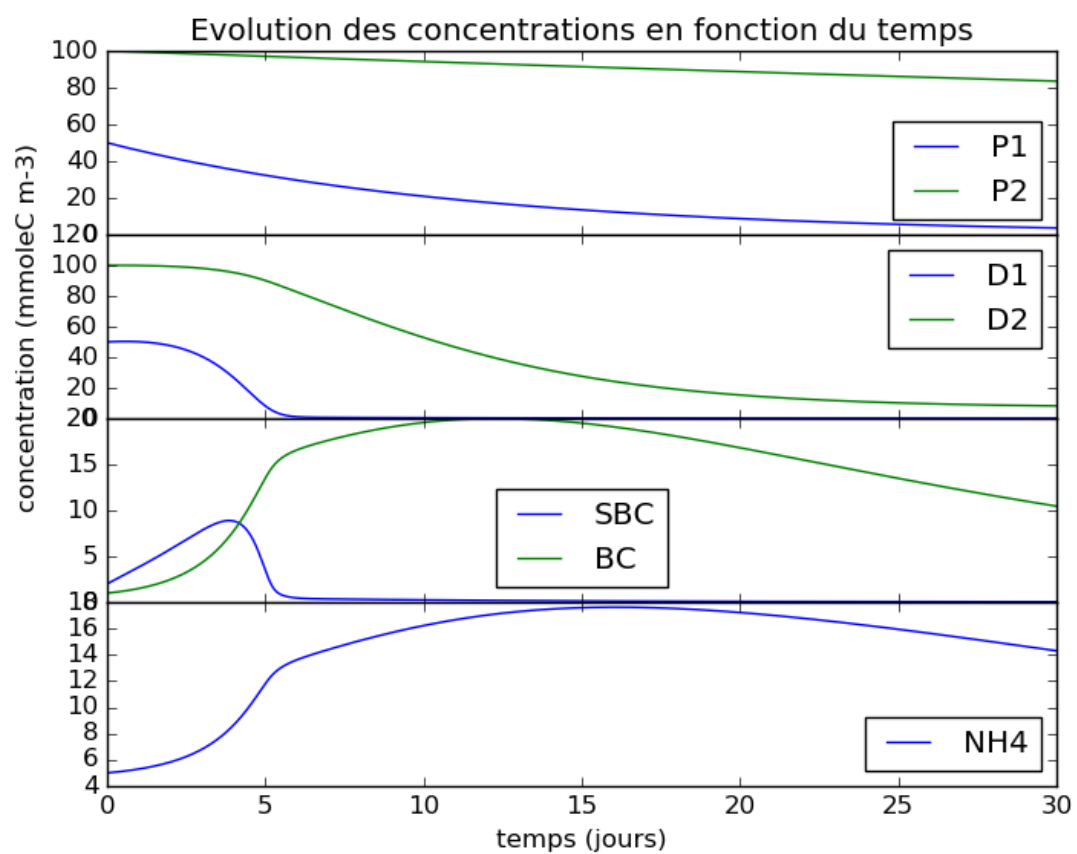


FIGURE 13: Simulation en augmentant la valeur de la constante d'endohydrolyse de P1 à température optimale