



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
جامعة عبد الحميد ابن باديس مستغانم  
Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem  
كلية العلوم و التكنولوجيا  
Faculté des Sciences et de la Technologie



N° d'ordre : M2...../GC/2018

## MEMOIRE DE FIN D'ETUDES DE MASTER ACADEMIQUE

Filière : Génie des Procédés

Spécialité : Génie Chimique

### *Thème*

Production du bioéthanol. Analyse et modélisation par la loi de  
Mechaelis-Menten

Présenté par :

FAROUK Chaa

*Soutenu le 21/07/2019 devant le jury composé de :*

Président :	Dr. H. BOUZID	Université de Mostaganem
Examineur :	Pr. M R. GHEZZAR	Université de Mostaganem
Encadreur :	Dr. B. SMAIL	Université de Mostaganem

Année Universitaire : 2018/2019

# *Remerciements*

*Tout d'abord je tiens à remercier ALLAH le tout puissant de m'avoir donné la foi et de M'avoir permis d'en arriver là.*

*Je tiens à remercier Dr. **Smail bentaiba** pour son encadrement et son soutien.*

*Mes remerciements vont aux membres du jury d'avoir honoré ma soutenance et pour l'effort fourni afin de juger ce modeste travail. EN l'occurrence Dr. BOUZID Habib Et Pr. GHEZZAR Mouffok Rédouane Pour avoir accepté d'examiner le présent manuscrit.*

*J'exprime ma reconnaissance à tous les enseignants qui ont contribué de près ou de loin à ce travail*

## DÉDICACES

JE DÉDIER CE MODESTE TRAVAILLE À TOUS CEUX QUI NOUS

ONT INONDÉS DE COURAGE D'ESTIME ET DE PATIENCE, ET

POUR CEUX QUI ONT CRUE ONT NOUS ET POUR CEUX QU'ON

PORTE ENVERS EUX UN GRAND AMOURET SINCÈRE

RECONNAISSANCE.

À MES CHERS PARENTS POUR TOUS LES SACRIFICES QU'ILS ONT

CONSENTIS POUR QUE JE RÉUSSISSE. QUE DIEU ME LES GARDE.

## Sommaire

Introduction générale.....	1
<b>Chapitre I: Production de bioéthanol</b>	
I.1 Introduction.....	2
I.2 Généralités.....	2
I.2.1 Propriétés physiques .....	3
I.2.2 Propriétés chimiques .....	4
I.3 Les générations de bioéthanol.....	4
I.3.1 Le bioéthanol de première génération.....	5
I.3.2 Le bioéthanol de deuxième génération .....	6
I.3.3 Le bioéthanol de troisième génération .....	7
I.4 Potentiel de production mondiale en bioénergies .....	7
I.4.1 Répartition de la production de bioéthanol dans le monde .....	8
I.4.2 Répartition de la production de bioéthanol à l'échelle continentale.....	9
I.4.3 Projets de production de bioéthanol à l'échelle nationale .....	10
I.5 Les avantages et les inconvénients du bioéthanol.....	10
I.6 Domaines d'utilisation du bioéthanol.....	12
I.7 le procédé de production de bioéthanol .....	13
I.7.1 la fermentation alcoolique.....	13
I.7.2 la levure boulangère type ( <i>saccharomyces cerevisiae</i> ).....	14
I.8 Cinétique de la fermentation .....	17
I.8.1 la catalyse enzymatique .....	17
I.8.2 Cinétique d'une réaction catalytique enzymatique .....	17
I.8.3 Equations cinétiques. Recours à la résolution numérique .....	18
<b>Chapitre II : Outil Matlab et résolution numérique</b>	
II.1 Aperçu sur les méthodes numériques utilisées dans la résolution des équations différentielles.....	19
II.2 Utilisation de l'outil Matlab .....	20
II.2.1 Introduction .....	20
II.2.2 Lancer Matlab .....	21
II.2.3 Langage interprété .....	22
II.2.4 Variables .....	23
II.2.5 Variables complexes .....	23
II.2.6 Vecteurs, matrices et leur manipulation.....	23
II.2.7 L'opérateur " : ".....	25
II.2 Affichages graphiques et alphanumériques .....	26
II.2.1 Affichage alphanumérique.....	26
II.2.2 Affichages graphiques de courbes 1D .....	27
II.2.3 Affichages graphiques de courbes 2D.....	27
II.2.4 Affichage de plusieurs courbes.....	27
II.3 Environnement de travail, scripts et fonctions.....	29
II.3.1 Répertoire de travail.....	29
II.3.2 Sauvegarde et chargement de variables .....	29
II.3.3 Scripts.....	30
II.3.4 Fonctions.....	30
II.4 Boucles et contrôles .....	31
II.4.1 Contrôles : 'if' .....	31
II.4.2 Boucle : 'for' .....	32

## Chapitre III : Analyse et modélisation

III.1 Base théorique de l'établissement de la loi de Michaelis-Menten.....	34
III.2 Etude de la réaction de production de bioéthanol en réacteur fermé .....	37
III.3 Ajustement des paramètres de Michaelis-Menten par des résultats expérimentaux relevés de la littérature .....	39
III.3.1 Résultats de production de bioéthanol à partir de biomasse lignocellulosique.....	40
III.3.2 Résultats de production de bioéthanol à partir des déchets de l'industrie..... de transformation de pomme de terre	42
III.2 Etude de la réaction de production de bioéthanol en réacteur ouvert en régime transitoire	43
Conclusion.....	47
Références	48
Annexes .....	51

## Liste des tableaux :

### Chapitre I

Tableau I.1 : Propriétés physiques de l'éthanol

Tableau I.2 : Le bioéthanol de première génération

Tableau I.3 : le bioéthanol de deuxième génération

Tableau I.4 : Le bioéthanol de troisième génération

Tableau I.5. La production mondiale de bioéthanol par matière première utilisée

Tableau I.6 : Pays africains producteurs de bioéthanol

Tableau I.7. Avantages et les inconvénients du bioéthanol

Tableau I.8.les éléments nutritifs consommé par le (*saccharomyce cerevisiae*) lors de sont métabolisme fermentaire

### Chapitre III

Tableau III.1 : concentration en glucose durant la fermentation expérience 1

Tableau III.2 : concentration en glucose durant la fermentation expérience 2

## Liste des figures :

### Chapitre I

Figure I.1: Structure de la molécule d'éthanol

Figure I.2: Procédé de production de bioéthanol

Figure I.3 : Production de bioéthanol à partir de la biomasse de première génération

Figure I.4 : Production de bioéthanol à partir de ressources lignocellulosiques

Figure I.5: Distribution de la production mondiale de bioéthanol (2006)

Figure I.6: Domaines d'utilisation du bioéthanol

Figure I.7 : Principe de la fermentation alcoolique du glucose par la levure (SC)

Figure I.8 : La structure morphologique et les constituants de la levure type (*saccharomyces cerevisiae*)

### Chapitre II

Figure II.1: L'interface graphique de l'environnement MATLAB (version R2010b)

Figure II.2 : Liste des fonctions graphiques 2D

### Chapitre III

Figure III.1: influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur fermé

Figure III.2 : ajustement des courbes théorique et expérimentale

Figure III.3 : ajustement des courbes théorique et expérimentale

Figure III.5 : influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur (méthode d'Euler)

Figure III.6 : influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur (méthode de Runge-kutta4)

Figure III.7 : influence de  $\tau$  sur la performance du réacteur



# **Introduction générale**

# Introduction générale

---

## Introduction générale :

Les bioénergies constituent une réelle opportunité pour répondre à nos besoins énergétiques qui ne cessent de croître. Elles sont considérées comme une voie prometteuse pour les énergies renouvelables surtout que les énergies fossiles commencent à se raréfier.

Le bioéthanol qui appartient à cette famille d'énergies renouvelables, serait un bon substitut aux énergies fossiles s'il peut être produit conformément aux données industrielles et économiques exigées par les populations et sociétés contemporaines.

Le bioéthanol est un alcool très pur obtenu par la fermentation de matières agricoles riches en sucres provenant de plantes saccharifères (betterave, canne à sucre), amylacées (céréales, pomme de terre) ou lignocellulosiques. Il peut être employé de deux façons, en addition à l'essence sous la forme d'un alcool anhydre qui ne modifie pas les performances des moteurs ou comme carburant unique dans des moteurs adaptés, en général à injection.

### • Objectif du travail

La réaction biologique de production du bioéthanol (fermentation alcoolisée) est exclusivement mise en œuvre dans des cuves agitées. C'est le cas de toute réaction enzymatique. Le réacteur agité peut fonctionner en discontinu (mode fermé) lorsque les quantités de produit recherché sont faibles. Le fonctionnement continu (mode ouvert) est nécessaire pour les productions de gros tonnage.

Dans le présent travail, une étude de modélisation est menée pour prévoir la performance en production de bioéthanol lorsque la réaction de fermentation est mise en œuvre dans une cuve agitée fermée. Un ajustement des paramètres du modèle obtenu est recherché. Enfin et pour compléter le travail, le cas de la fermentation en continu est également étudié. L'utilisation de l'outil Matlab, qui constitue le volet motivant de ce travail, est prévue pour la résolution numérique des équations obtenues.

# **Chapitre I: Production de bioéthanol**

## Chapitre I: Production de bioéthanol

### I.1 Introduction :

Les bioénergies constituent une réelle opportunité pour répondre à nos besoins énergétiques qui ne cessent de croître. Elles sont considérées comme une voie prometteuse pour les énergies renouvelables surtout que les énergies fossiles commencent à se raréfier.

Le bioéthanol qui appartient à cette famille d'énergies renouvelables, serait un bon substitut aux énergies fossiles s'il peut être produit conformément aux données industrielles et économiques exigées par les populations et sociétés contemporaines

Le bioéthanol est l'éthanol d'origine biologique et agricole obtenu par fermentation du sucre extrait de la plante sucrière ou par hydrolyse enzymatique de l'amidon contenu dans les céréales. Il est utilisé comme biocarburant dans les « moteurs à essence ».

Les végétaux contenant du saccharose (betterave, canne à sucre...) ou de l'amidon (blé, maïs...) peuvent être transformés pour donner du bioéthanol, On parle généralement de filière "sucre" pour désigner cette filière de production du bioéthanol.

Cet éthanol d'origine végétale n'est rien d'autre que de l'alcool éthylique, le même que celui que l'on trouve dans toutes les boissons alcoolisées. Il peut être mélangé à l'essence en des proportions allant de 5 à 85 %, on parle alors de carburant E5 (éthanol 5%) à E85. Au-delà de 10 %, des adaptations aux moteurs de voitures sont souvent nécessaires.

### I.2 Généralités

L'éthanol ou encore alcool éthylique, molécule de formule chimique  $C_2H_5OH$  comporte deux atomes de carbone liés (C), l'un portant trois atomes d'hydrogène (H), l'autre deux atomes d'hydrogène et une fonction hydroxyle (OH) [1]. Sa formule développée est :

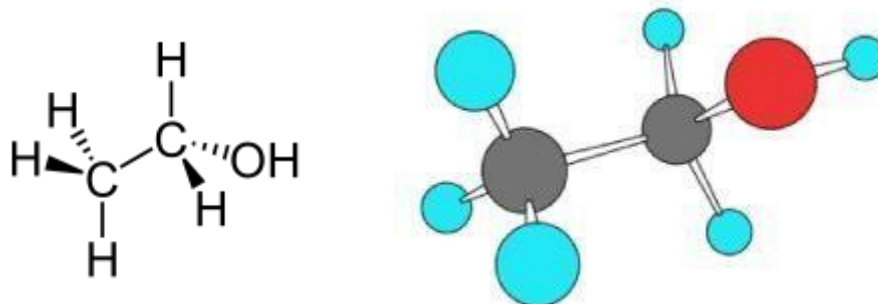


Figure I.1: Structure de la molécule d'éthanol [2]

## I.2.1 Propriétés physiques

L'éthanol est un liquide mobile, incolore, volatil, d'odeur plutôt agréable, décelable dès 84 ppm.

L'éthanol est miscible à l'eau, le mélange se faisant avec dégagement de chaleur et contraction du liquide [3].

Par contre il y a expansion du liquide lorsque l'éthanol est mélangé à de l'essence.

L'éthanol est également miscible à la plupart des solvants usuels. C'est un bon solvant des graisses.

Le titre d'un mélange eau/éthanol est le rapport entre le volume d'alcool absolu contenu dans ce mélange et le volume de celui-ci à 15 °C ; il est exprimé en % en volume [3].

L'éthanol peut être commercialisé sous forme anhydre (éthanol à 100 % en volume appelé aussi **alcool absolu**) ou à différentes concentrations dans l'eau, principalement à 95 % et, pour des usages antiseptiques, à 70 %.

Pour les usages autres qu'alimentaires, des dénaturants sont ajoutés. L'éthanol dénaturé, que l'on trouve également dans le commerce sous le nom d'**alcool à brûler**, est de l'éthanol dans lequel on a dissous divers produits pour le rendre impropre à la consommation.

**Tableau I.1** : Propriétés physiques de l'éthanol [4]

NOM SUBSTANCE	DÉTAILS	
Éthanol	N° CAS	64-17-5
	Etat Physique	Liquide
	Masse molaire	46,07
	Point de fusion	-114°C
	Point d'ébullition	78 à 78,5 °C
	Densité	0,789
	Densité gaz / vapeur	1,59
	Pression de vapeur	5,9 kPa à 20 °C 10 kPa à 30 °C 29,3 kPa à 50 °C
	Indice d'évaporation	8,3 (oxyde de diéthyle = 1), 2,4 (acétate de n-butyle = 1)
	Point d'éclair	13 °C (éthanol pur) ; 17 °C (éthanol à 95 % vol.) ; 21 °C (éthanol à 70 % vol.) ; 49 °C (éthanol à 10 % vol.) ; 62 °C (éthanol à 5 % vol.) (coupelle fermée)
	Température d'auto-inflammation	423 - 425 °C ; 363 °C (selon les sources)
	Limites d'explosivité ou d'inflammabilité (en volume % dans l'air)	limite inférieure : 3,3 % limite supérieure : 19 %
	Coefficient de partage n-octanol / eau (log Pow)	- 0,31

## I.2.2 Propriétés chimiques

Dans les conditions normales, l'éthanol est un produit stable. Il possède les propriétés générales des alcools primaires (réactions d'oxydation, déshydrogénation, déshydratation et estérification).

Il peut réagir vivement avec les oxydants puissants : acide nitrique, acide perchlorique, perchlorates, peroxydes, permanganates, trioxyde de chrome...

La réaction avec les métaux alcalins conduit à la formation d'éthylate et à un dégagement d'hydrogène ; elle peut être brutale sauf si elle est réalisée en l'absence d'air pour éviter la formation de mélanges explosifs air-hydrogène.

Le magnésium et l'aluminium peuvent également former des éthylates, la plupart des autres métaux usuels étant insensibles à l'éthanol.

## I.3 Les générations de bioéthanol

La production de bioéthanol (fig. I.2) à base de biomasse est plus durable et largement distribuée. À l'heure actuelle, il existe trois générations de bioéthanol qui ont été fondées sur différentes matières premières comme :

- De substrats riches en saccharose (canne à sucre, betterave sucrière, etc.), en amidon (maïs, orge, blé, pomme de terre, etc.),
- De substrats celluloseux tels que les résidus agricoles (la paille ou les cannes de maïs), les résidus forestiers, cultures énergétiques (le panic érigé ou des arbres à courte rotation),
- Des algues.

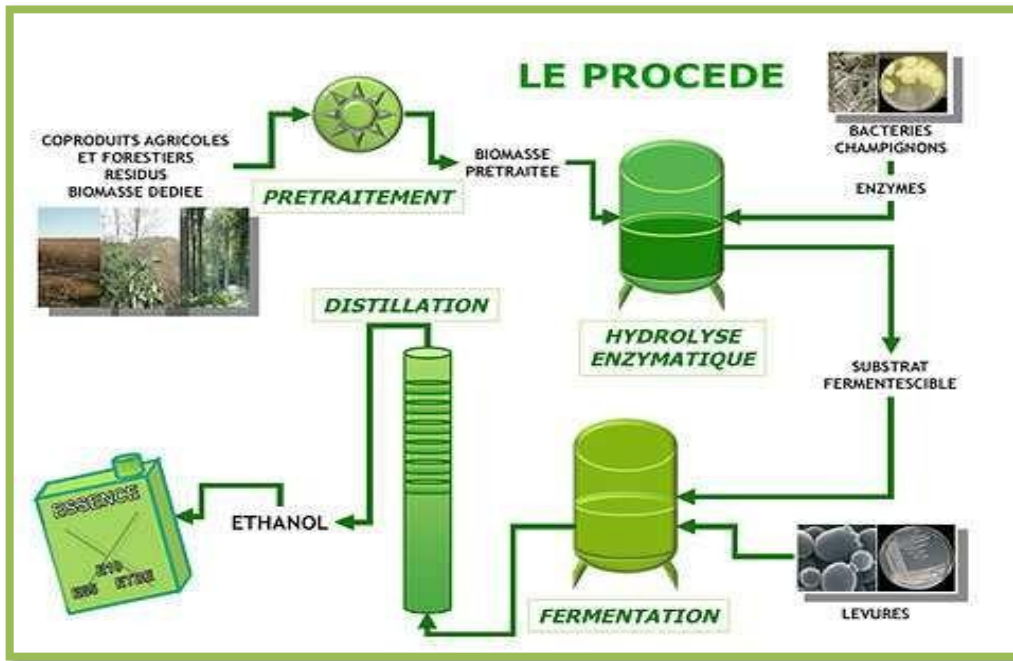


Figure I.2: Procédé de production de bioéthanol [5]

## I.3.1 Le bioéthanol de première génération

Le bioéthanol de première génération est obtenu par fermentation alcoolique de sucres fermentescibles (glucose, saccharose, etc.) [6]. Ces sucres sont soit directement présents dans la plante (canne à sucre, betterave sucrière), soit obtenus après hydrolyse enzymatique de l'amidon contenu dans les grains de blé ou de maïs [7].

Cependant, le principal inconvénient du bioéthanol de première génération est la menace de limitation de l'approvisionnement alimentaire qui peut affecter la population mondiale humaine car les matières premières sont dérivées de sources alimentaires. En outre, l'utilisation des ressources alimentaires pour le carburant peut entraîner une augmentation des prix des denrées alimentaires. D'un autre côté, il est important de préciser que la première génération de bioéthanol est économiquement déraisonnable, car les teneurs en carbone des plantes sont principalement perdues au cours du processus de conversion [8].

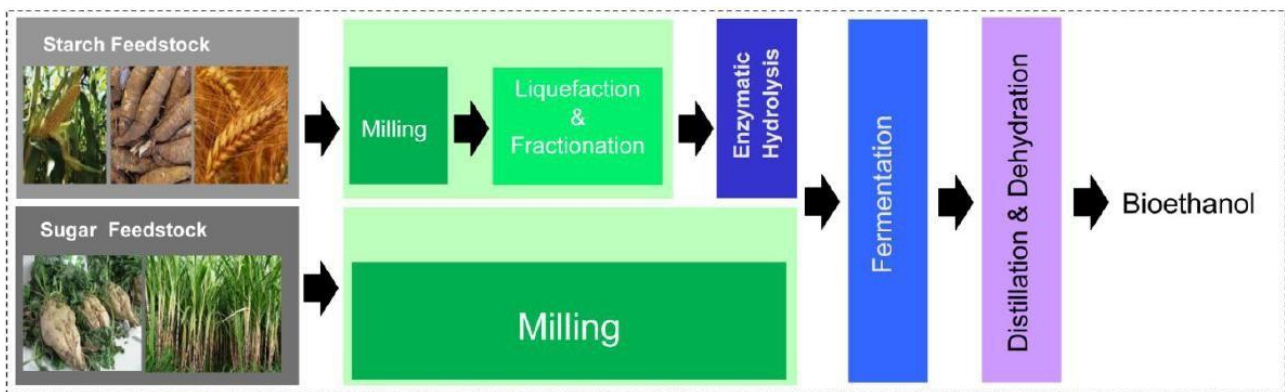


Figure I.3 : Production de bioéthanol à partir de la biomasse de première génération [22]

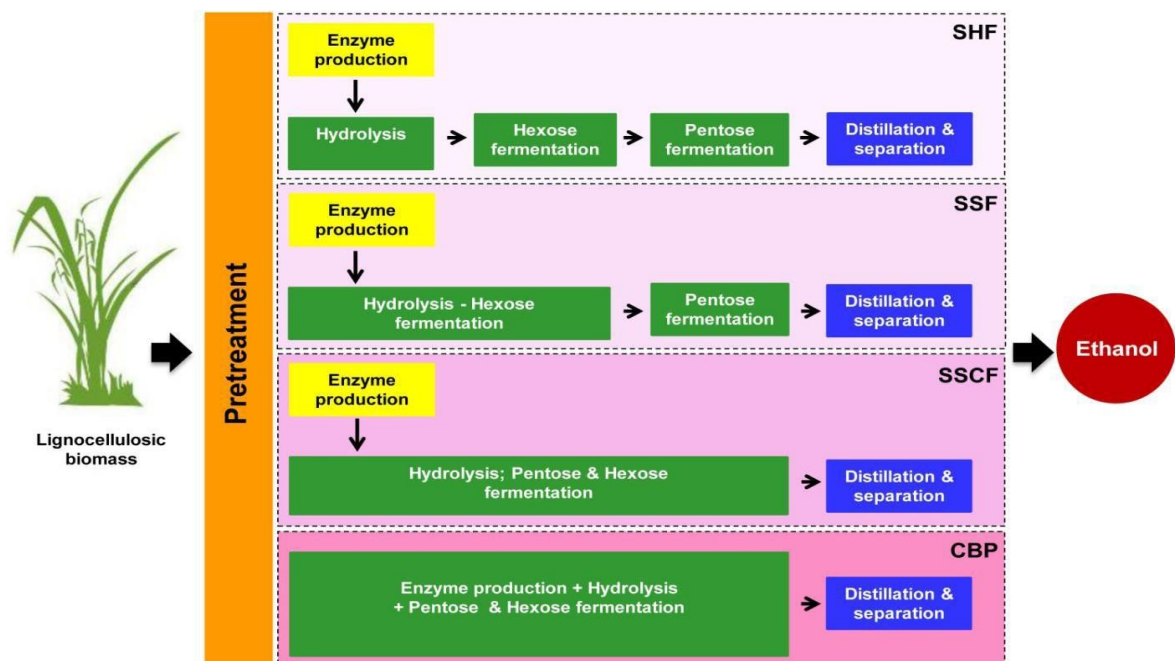
# Chapitre I : Production de bioéthanol

**Tableau I.2 :** Le bioéthanol de première génération [9]

Génération de bioéthanol	Première génération
Source de matière première	Culture comestible (canne à sucre, maïs, betterave)
Utilisation des terres pour la culture	Croque sur les terres arables
Technologie de conversion	Extraction de sucre fermentation et distillation
Rendement en bioéthanol	Faible
Impact sur l'environnement	Faible apport à l'atténuation de CO <sub>2</sub>
Avantages ou inconvénients	Processus de conversion relativement simple

## I.3.2 Le bioéthanol de deuxième génération

Le bioéthanol de deuxième génération, également appelé «biocarburant avancé», est produit par des matières premières lignocellulosique et des résidus de forêts agricoles. Les avantages de ces matières premières sont la facilité de disponibilité. Toutefois, l'expansion industrielle du bioéthanol de deuxième génération a connu l'obstacle dû à certains problèmes technologiques. Il s'agit du coût élevé et du rendement moyen du bioéthanol en raison de sa composition de lignine. D'autres problèmes principaux liés à la production de bioéthanol de deuxième génération sont l'exigence de technologies et d'installations de pointe [10].



Separate Hydrolysis & Fermentation (SHF); Simultaneous Saccharification & Fermentation (SSF); Simultaneous Saccharification & Co-Fermentation (SSCF); Consolidated Bioprocessing (CBP)

**Figure I.4 :** Production de bioéthanol à partir de ressources lignocellulosiques [23]

# Chapitre I : Production de bioéthanol

**Tableau I.3 :** le bioéthanol de deuxième génération [9]

Génération de bioéthanol	Deuxième génération
Source de matière première	Culture non comestible (résidus agricoles et forestiers)
Utilisation des terres pour la culture	Croque sur les terres arables et marginales
Technologie de conversion	Prétraitement, hydrolyse, fermentation et distillation
Rendement en bioéthanol	moyen
Impact sur l'environnement	Contribution élevée à l'atténuation du CO <sub>2</sub>
Avantages ou inconvénients	Pas de concurrence avec la ressource alimentaire

## I.3.3 Le bioéthanol de troisième génération

Les algues sont considérées comme la matière première potentielle pour la production de bioéthanol de troisième génération car la biomasse peut être convertie directement en énergie. Généralement, l'utilisation de cette matière première pour la production de bioéthanol dépend de facteurs tels que la technologie et l'environnement marin [10].

**Tableau I.4 :** Le bioéthanol de troisième génération [9]

Génération de bioéthanol	Troisième génération
Source de matière première	Biomasse algale
Utilisation des terres pour la culture	Eau de mer ,eau douces et eau usées
Technologie de conversion	Distillation et fermentation
Rendement en bioéthanol	Elevé
Impact sur l'environnement	Contribution élevée à l'atténuation du CO <sub>2</sub>
Avantages ou inconvénients	Investissements limités et difficultés dans la conception des processus

## I.4 Potentiel de production mondiale en bioénergies

L'offre potentielle en biocarburants n'est pas une donnée absolue et statique, mais une estimation dynamique, qui dépend de scénarios géographiques, économiques et politiques évolutifs, et aussi de technologies de production et de transformation, nombre d'entre elles encore en développement. Par exemple, si les propositions de production de biodiesel à base d'algues marines se concrétisent, comment estimer leur potentiel de production? De plus, les ressources naturelles consacrées aux cultures énergétiques, comme les terres et l'eau, sont nécessairement limitées et doivent aussi être partagées avec la production d'aliments pour les personnes et les animaux, les intrants industriels (fibres textiles, bois pour la cellulose et autres finalités, etc.), la protection de la nature, parmi tant d'autres usages variés. En particulier, la complexité de cette thématique amplifie sa relation propre avec l'offre

## Chapitre I : Production de bioéthanol

d'aliments, d'où l'importance de connaître le potentiel durable de la production, de la transformation et de l'utilisation de biocarburants. Etablir des limites à la production de biocarburants et surtout, prendre en considération les critères de durabilité, sont donc des entreprises complexes. Le secteur bioénergétique en expansion et les autres utilisations de la terre, comme la production d'aliments, la protection de la biodiversité, la conservation du sol et de la nature et la séquestration de carbone, ont été évaluées récemment par quelques études [10].

**Tableau I.5.** La production mondiale de bioéthanol par matière première utilisée [11]

<b>Matières premières</b>	<b>Production (Millions de litres)</b>	<b>Part en %</b>
<b>Betterave sucrière</b>	2	<b>1,86</b>
<b>Canne à sucre</b>	27	<b>29,18</b>
<b>Blé</b>	2	<b>2,29</b>
<b>Mélasse</b>	4	<b>4,03</b>
<b>Céréales secondaires</b>	47,07	<b>51,28</b>
<b>Autre</b>	7	<b>8,06</b>
<b>Matières premières non agricoles</b>	3	<b>3,27</b>

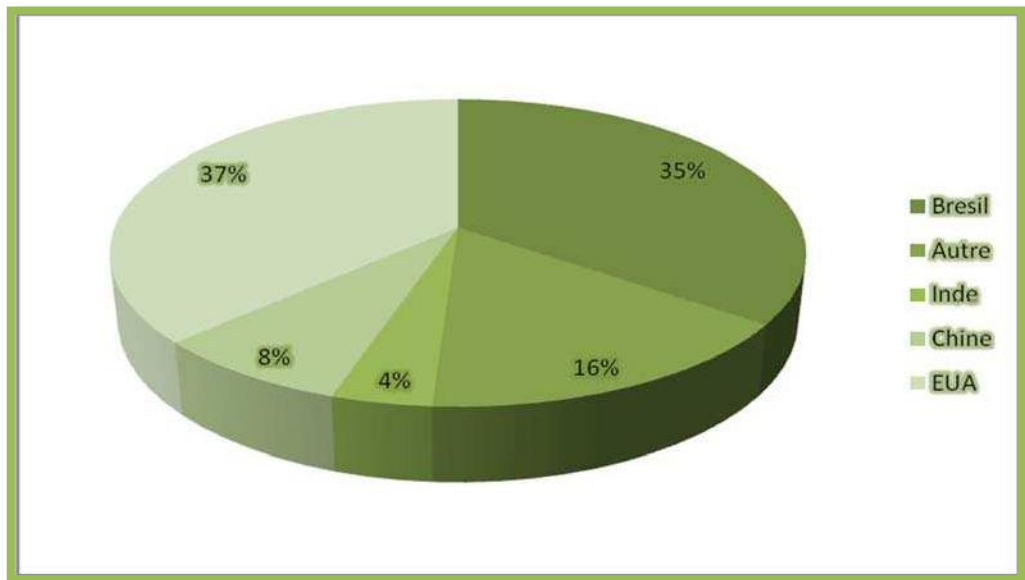
La production mondiale en bioénergies a débuté vers les années 1970 avec la crise du pétrole ; l'avènement de la production du bioéthanol a donc vu le jour avec utilisation de matières premières riches en amidon **Tableau I.5.** Ainsi, 47 millions de litres de bioéthanol ont été produits à partir de céréales secondaires. La canne à sucre a pris part avec 29% de la production mondiale. Désormais, Les matières premières concurrentielles de l'alimentation humaine et animale sont de plus en plus remplacées par les algues à partir desquelles le bioéthanol de 3<sup>ème</sup> génération est produit.

### I.4.1 Répartition de la production de bioéthanol dans le monde

Actuellement, les plus grands producteurs mondiaux de bioéthanol se concentrent dans trois régions. En tête : les Etats Unis avec une part de 48 % de la production mondiale de biocarburants (bioéthanol) ; le Brésil avec 22 % ; l'Union Européenne avec 16 % (2012). Ces trois régions produisent, à elles seules, plus de 86 % de la production mondiale des biocarburants **Fig I.5** Ainsi, les Etats-Unis se fixent un objectif de 36 milliards de gallons

# Chapitre I : Production de bioéthanol

(136,27 milliards de litres) de biocarburants, dont 79,5 milliards de litres provenant de carburants de nouvelle génération. En avril 2009, le Conseil Européen a adopté la Directive 2009/28/CE16 relative à la promotion et l'utilisation des énergies renouvelables, portant ainsi l'objectif de consommation d'énergie renouvelable dans le secteur des transports à 10%. Par ailleurs, de nombreux pays prévoient d'accroître leur consommation de carburants renouvelables. D'après les projections faites par le FAO et l'OCDE, la production annuelle mondiale en 2020 devrait pratiquement doubler par rapport à la production de 2008 pour atteindre 196,87 milliards de litres [12].



**Figure I.5:** Distribution de la production mondiale de bioéthanol (2006) [10]

## I.4.2 Répartition de la production de bioéthanol à l'échelle continentale

L'Afrique peut devenir un gros producteur d'éthanol, obtenu à partir de biomasse **Tableau I.6.** Les résidus des végétaux contenant du saccharose comme la canne à sucre, l'amidon, le maïs, le sorgho ou le manioc peuvent être transformés pour donner du bioéthanol, obtenu par fermentation du sucre extrait de la plante sucrière. Cet éthanol d'origine biologique n'est rien d'autre que de l'alcool éthylique, le même que celui que l'on trouve dans toutes les boissons alcoolisées. Il peut être mélangé à l'essence en des proportions allant de 5 à 85%. Au-delà de 20% des adaptations aux moteurs de voitures sont nécessaires. C'est la raison pour laquelle les pétroliers européens préfèrent transformer l'éthanol en ETBE (éthyle tertio butyle éther) qui peut être incorporé à l'essence jusqu'à hauteur de 15%. L'ETBE aurait l'avantage d'être mieux adapté aux moteurs. En effet, l'incorporation directe de l'éthanol à l'essence pose certaines difficultés techniques : le mélange essence/éthanol a une pression de vapeur plus élevée et tolère mal la présence de traces d'eau [9].

**Tableau I.6 : Pays africains producteurs de bioéthanol**

Pays	Million (gallon)
<b>Sud d'Afrique</b>	<b>110</b>
soudan	26
<b>Zimbabwe</b>	<b>6</b>
<b>Kenya</b>	<b>3</b>

### **I.4.3 Projets de production de bioéthanol à l'échelle nationale**

A l'instar d'autres pays américains et européens qui ont développé des programmes industriels intégrés pour la production d'éthanol à partir de biomasse végétale, l'Algérie, possède un potentiel considérable en déchets et sous-produits de dattes ce qui pourrait lancer un pareil programme. La production d'éthanol à partir des déchets de dattes constitue une solution intéressante sur le plan économique. Cet alcool peut remplacer avantageusement celui obtenu par voie chimique à partir des produits pétroliers et peut remplacer le pétrole léger comme carburant. En outre, l'intérêt de produire de l'éthanol vient du fait que c'est une substance énergétique et son utilisation couvre un champ étendu d'activités industrielles: fabrication d'intermédiaires chimiques (produits de beauté, parfums, cosmétiques, produits pharmaceutiques, de solvants, de détergents, etc. Enfin, il est utile de signaler, selon la Régie des Alcools, que notre pays importe entre 30 000 et 50 000 hectolitres d'alcool éthylique par an afin de couvrir ses différents besoins. En considérant les conditions climatiques, la disponibilité de la matière première, les exigences technologiques et la demande nationale en alcool, un programme expérimental au niveau des laboratoires et à l'échelle pilote a été entrepris et les résultats obtenus ont démontré la faisabilité du procédé aussi bien sur le plan technique qu'économique [13].

### **I.5 Les avantages et les inconvénients du bioéthanol**

Le bioéthanol présente de nombreuses dualités comme résumé dans le **Tableau I.7** Sa formule chimique étant  $C_2H_5OH$ , il est qualifié de carburant oxygéné, il peut améliorer, dans le cas d'un mélange, les performances de l'essence en diminuant les problèmes de combustion à hauts régimes. L'oxygène contenu dans l'éthanol améliore la combustion du carburant, en diminuant la production de monoxyde de carbone, les quantités d'hydrocarbures non brûlés qui participent à la formation de l'ozone dans les couches inférieures de l'atmosphère et les particules émises responsables de nombreux troubles respiratoires et du noircissement des bâtiments.

# Chapitre I : Production de bioéthanol

**Tableau I.7.** Avantages et les inconvénients du bioéthanol [14]

Avantages	Inconvénients
Diminution des émissions de dioxyde de carbone et meilleur rendement énergétique des moteurs à explosion	Les véhicules utilisant l'E85 produisent des émissions plus élevées d'oxyde d'azote, d'éthylène et d'acétaldéhyde que les véhicules à essence
Indice d'octane* élevé permettant une meilleure efficacité des moteurs à explosions	Indice de cétane** faible ne permettant pas son utilisation dans les moteurs à combustion interne sans l'ajout d'un accélérateur d'ignition
Diminution des émissions de particules, de soufre, de benzène et de butadiène 1-3	Augmentation des émissions d'hydrocarbures par évaporation nécessitant un réglage de la pression de vapeur du carburant
Risque moins élevé de formation d'ozone que l'essence et le diesel	Emission d'acide acétique en cas de réaction entre le catalyseur et le carburant résiduel à l'échappement
Biodégradable	Corrosion des pièces en contact avec l'éthanol
Capacité énergétique inférieure à celle de l'essence (21285 kJ kg <sup>-1</sup> pour l'éthanol contre 32020 kJ kg <sup>-1</sup> pour l'essence)	Augmentation de la consommation volumique de carburant
Diminution de la dépendance au pays producteurs de pétrole	Prix encore élevé
Stimulation du milieu rural	Concurrence entre alimentation et énergie

- L'indice d'octane est : exprime les caractéristiques antidétonantes d'un carburant. Il correspond au pourcentage d'isooctane contenu dans un mélange d'isooctane et d'heptane normal qui lorsqu'il est utilisé pour alimenter un moteur CFR (Coopérative Fuel Research) fonctionnant dans des conditions normalisées, provoque la même intensité de détonation que l'essence testée.

- L'indice de cétane est : correspond à la capacité qu'a un carburant à s'enflammer. Il est particulièrement important pour les moteurs diesel où le carburant doit s'auto-enflammer sous l'effet de la compression. Un indice de cétane élevé facilite donc l'auto-combustion d'un carburant.

## I.6 Domaines d'utilisation du bioéthanol

Le bioéthanol peut être utilisé, sous certaines conditions, comme carburant dans les moteurs à essence, soit de 5 à 20% dans les moteurs à essence sans modification et/ou de 85 à 100% dans des moteurs à essence spécifiquement adaptés. En outre, l'éthanol peut être converti en divers produits de base de l'industrie chimique tels que, l'éthylène, l'éther et l'éthyle tertio butyle (ETBE), conventionnellement, produits à partir du pétrole figI.4. Il est à signaler que le plastique résulte de la polymérisation de l'éthylène et de l'ETBE mélangé à raison de 15% à l'essence, permet d'augmenter l'indice d'octane du carburant, contrairement à l'éthanol, il ne favorise pas l'évaporation des carburants et n'absorbe pas l'humidité de l'air [15].

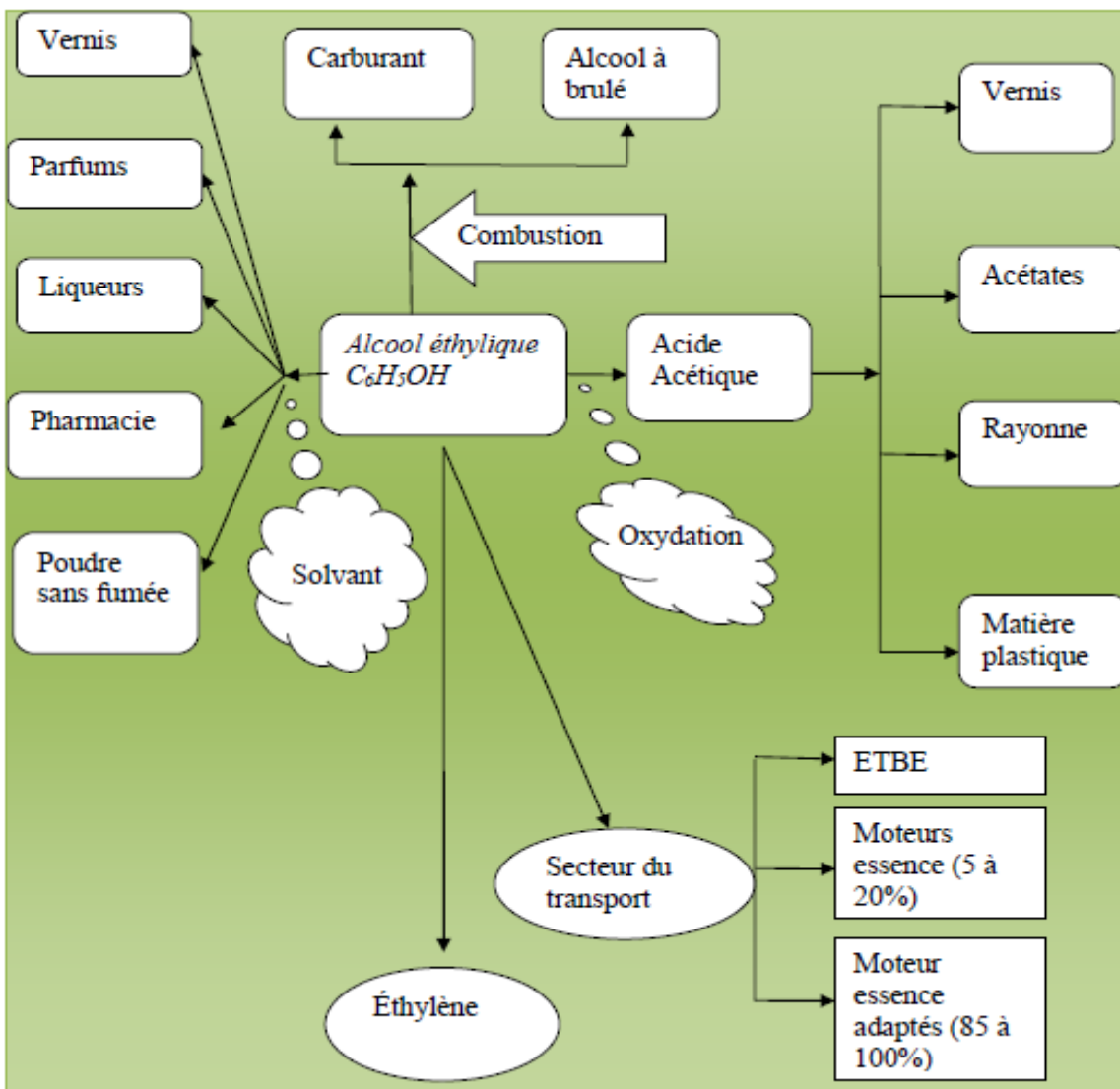


Figure I.6: Domaines d'utilisation du bioéthanol [15,16]

## I.7 le procédé de production de bioéthanol

La fermentation est une opération connue depuis les anciens temps. Elle a été utilisée par divers peuples (égyptiens, sumériens, Babyloniens, ....) pour la préparation de produits alimentaires comme le pain, les fromages, les boissons alcoolisées, etc. Actuellement, la fermentation est utilisée industriellement pour la fabrication de produits d'intérêt alimentaire (yaourts, bière), pharmaceutique (antibiotiques, vitamines, anticorps, etc.) et chimique (bioéthanol, acides gras, etc.).[14]

### I.7.1 la fermentation alcoolique

La fermentation alcoolique consiste à transformer les sucres fermentescibles en anaérobiose par des levures en alcool et gaz carbonique avec dégagement de calories selon la réaction suivante :



La fermentation alcoolique **FigI.7** est réalisée dans un milieu riche en sucres. Le moût est introduit dans le fermenteur puis inoculé avec le milieu de pré-fermentation. La fermentation dure de 40 à 72 heures et la température est fixée ente 28 et 30 °C [19]. Les sucres les plus abondants sont le glucose et le fructose. L'espèce de levures principalement responsable de la fermentation alcoolique est *Saccharomyces cerevisiae*. La voie métabolique utilisée pour la consommation de sucres, en condition anaérobie, qui comporte la glycolyse, produit dans cette étape deux molécules d'ATP pour une molécule de sucre consommé. Durant cette réaction, deux molécules de cofacteur NAD<sup>+</sup> sont réduits en NADH. La production d'éthanol à partir du pyruvate de la glycolyse est la conséquence de la réoxydation de ces cofacteurs. Lors de la fermentation alcoolique, la macération provoque l'extraction de la couleur. La fermentation se déroule en milieu non renouvelé. La croissance de *Saccharomyces cerevisia* peut être limitée par l'accumulation de substances toxiques. Signale que les acides gras (l'acide octanoïque, decanoïque, formés par les levures, deviennent toxiques pour elle. Pour remédier à ce phénomène, une pincée de charbon était additionnée aux moûts avant ensemencement pour faciliter la reprise de la fermentation [20].

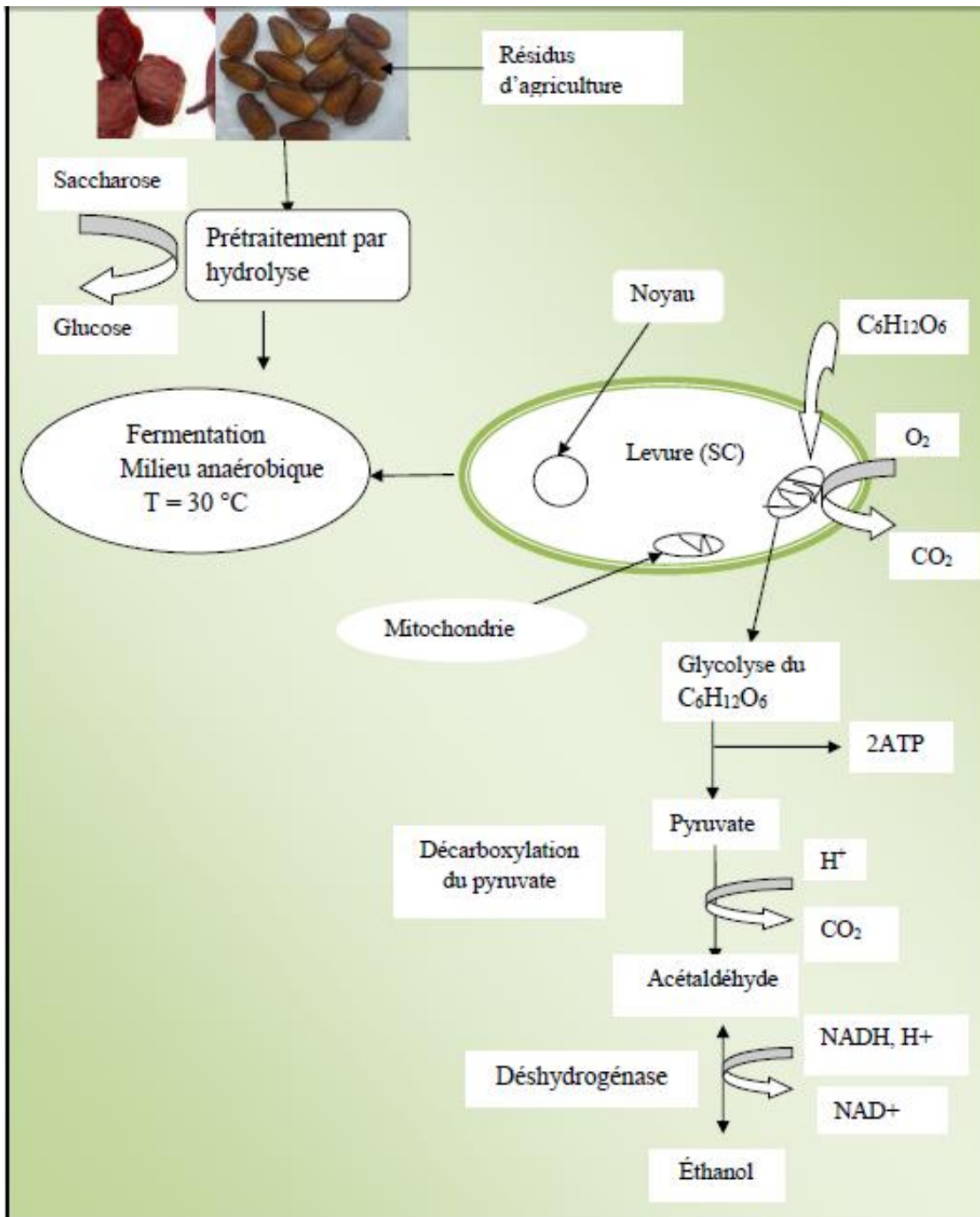


Figure I.7 : Principe de la fermentation alcoolique du glucose par la levure (SC)

## I.7.2 la levure boulangère type (*saccharomyces cerevisiae*)

Les levures peuvent être définies comme des eucaryotes microscopiques. Elles sont des Hétérotrophes faisant partie du groupe des champignons dont on les distingue par leur caractère Unicellulaire et l'absence de vrai mycélium (au moins dans la plus grande partie de leur cycle biologique) largement distribuées dans la nature. Elle a été découverte, isolée et

# Chapitre I : Production de bioéthanol

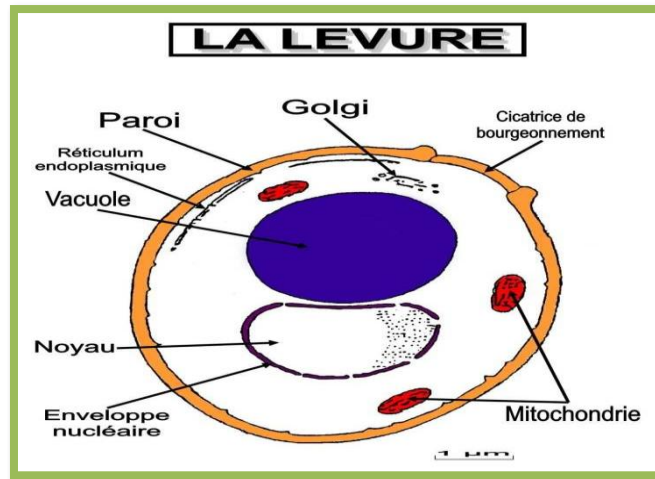
identifiée au milieu du XIX<sup>ème</sup> siècle. Ce champignon, capable de métaboliser des sucres, (saccharo-) responsable de la fermentation fut appelé *Saccharomyces cerevisiae* par Mayen en 1837 [19].

## a) Morphology et Structure

Les levures se caractérisent par la présence d'un :

- Noyau.
- Mitochondrie.
- Appareil de Golgi.
- Chromosomes.

Les cellules végétatives sont généralement ovoïdes ou sphériques. Leur taille cellulaire varie de quelques microns jusqu' à 25 à 30 microns [14].



**Figure I.8 :** La structure morphologique et les constituants de la levure type (*saccharomyces cerevisiae*)

## b) Le métabolisme fermentaire des (*saccharomyces cerevisiae*)

En absence totale d'oxygène, (*Saccharomyces cerevisiae*) présente un métabolisme fermentaire. L'oxygène n'est plus l'accepteur final d'électrons, ce rôle est joué par des molécules organiques comme l'acétaldéhyde. Comme pour le métabolisme oxydatif, le glucose est dégradé par la voie de la glycolyse jusqu'au pyruvate. A ce niveau là, le pyruvate n'est plus dirigé vers le cycle de Krebs mais est converti en éthanol et CO<sub>2</sub>. La première étape est la décarboxylation du pyruvate en acétaldéhyde par la pyruvate décarboxylase, puis la réduction finale de l'acétaldéhyde en éthanol est catalysée par l'alcool déshydrogénase utilisant le NADH, H<sup>+</sup> comme coenzyme [21]. Le métabolisme fermentaire produit beaucoup moins d'énergie que le catabolisme aérobie et le cycle de Krebs n'a qu'un rôle anabolique (synthèse de précurseurs), seule la synthèse d'éthanol permet la production d'énergie nécessaire aux besoins de la cellule et la ré-oxydation du NADH produit lors de la glycolyse [21].

# Chapitre I : Production de bioéthanol

## c) Les besoins nutritionnels de la levure

Le milieu de culture doit apporter tous les éléments nécessaires à la croissance et aux besoins énergétiques de la levure. La biomasse est composée principalement d'eau et des éléments CHON (carbone, hydrogène, oxygène, azote) ; le milieu doit donc fournir ces éléments pour permettre la croissance. Les besoins des levures pour leur croissance sont les suivants :

**Tableau I.8.** les éléments nutritifs consommé par le (*saccharomyce cerevisiae*) lors de sont métabolisme fermentaire [21].

Les elements nutritives	exemples
L'eau	<b>Les levures sont constituées de 75% d'eau et 25% de matière sèche</b>
Une source de Carbone	<b>représente environ 50% du poids sec de la levure</b>
une source d'azote	<b>Les levures contiennent 10% environ d'azote, entrant dans la composition des acides aminés, des acides nucléiques et de certaines vitamines. Il est apporté par le milieu de culture sous la forme de sels d'ammonium (phosphate, sulfate, chlorure et nitrate)</b>
une source des vitamines	<b>des régulateurs et des cofacteurs importants des voies métaboliques. Elles agissent généralement comme coenzymes ou précurseurs d'enzymes. Saccharomyces cerevisiae est auxotrophe pour les vitamines suivantes qui seront ajoutées au milieu de culture</b>
des oligo-éléments (ions inorganiques)	<b>les macroéléments : K<sup>+</sup>, Mg<sup>2+</sup>, Ca<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> , Fe<sup>2+</sup>, Fe<sup>3+</sup>, Mn<sup>2+</sup>, Cl<sup>-</sup> dont la concentration nécessaire varie entre 0,1 et 1 mm.</b>
	<b>les micro-éléments : Co<sup>2+</sup>, B<sup>2+</sup>, Cd<sup>2+</sup>, Cr<sup>+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, I<sup>-</sup> , Mo<sup>+</sup>, Ni<sup>2+</sup> pour lesquels une concentration de 0,1 à 100 µM est suffisante</b>

## I.8 Cinétique de la fermentation

Les réactions de fermentation sont généralement catalysées par des substances particulières appelées enzymes. C'est la raison pour laquelle elles sont appelées réactions enzymatiques. Les enzymes sont des catalyseurs biologiques appartenant à la classe des protéines qui sont des macromolécules résultant de la polycondensation d'acides aminés.

### I.8.1 la catalyse enzymatique

Les étapes de la catalyse enzymatique sont :

1. Association de l'enzyme (E) et du substrat (réactif) (S)

L'association se produit en une région bien précise de l'enzyme appelée site actif.

Le site est une entité tridimensionnelle correspondant à une petite région de la protéine.

2. Stabilisation du complexe enzyme-substrat (ES)

Le complexe formé est stabilisé grâce à des liaisons de faibles énergie : liaisons hydrogène, interactions hydrophobes, liaisons ioniques.

3. Formation du produit (P)

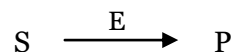
Le complexe (ES) subit un réarrangement interne qui va permettre la transformation du substrat en produit (P).

4. Libération du produit (P)

L'enzyme libère le produit de la réaction et retrouve son état initial.

### I.8.2 Cinétique d'une réaction catalytique enzymatique

Soit la réaction catalysée par l'enzyme E qui transforme le substrat S en produit P :



La vitesse instantanée de réaction est la quantité de S consommée (ou la quantité de P formée) par unité de temps et par unité de volume de mélange réactionnel :

$$r = -\frac{1}{V} \frac{dn_S}{dt} = \frac{1}{V} \frac{dn_P}{dt} \quad (\text{I.1})$$

La vitesse de réaction est une *fonction d'état* qui dépend de la composition locale et instantanée et des variables telles que la pression et la température. On l'appelle loi cinétique de la réaction. Elle s'exprime généralement sous la forme d'un produit d'une constante  $k$  fois une fonction des concentrations des réactifs :

## Chapitre I : Production de bioéthanol

---

$$r = k F(C_i) \quad (\text{I.2})$$

Dans le cas d'une réaction enzymatique,  $C_i$  représente la concentration du substrat  $C_S$ .

### I.8.3 Equations cinétiques. Recours à la résolution numérique

Les équations cinétiques traduisant le modèle de Michaelis-Menten forment un système de quatre équations différentielles non linéaires :

$$\frac{dC_S}{dt} = -k_1 C_S C_E + k_2 C_{ES}$$

$$\frac{dC_E}{dt} = -k_1 C_S C_E + (k_2 + k_3) C_{ES}$$

$$\frac{dC_{ES}}{dt} = k_1 C_S C_E - (k_2 + k_3) C_{ES}$$

$$\frac{dP}{dt} = k_3 C_{ES}$$

A ce système sont associées les conditions initiales :

$$C_S(0) = (C_S)_0$$

$$C_E(0) = (C_E)_0$$

On ne connaît pas de solution analytique exacte à ce système d'équations différentielles non linéaires. On doit donc recourir au traitement numérique. A cet effet, l'outil MATLAB peut s'avérer très utile. [24]

# **Chapitre II : Outil Matlab et résolution** **numérique**

### Chapitre II : Outil Matlab et résolution numérique

#### II.1 Aperçu sur les méthodes numériques utilisées dans la résolution des équations différentielles:

##### II.1.1 principe générale : [27]

il s'agit de méthodes de résolution numérique d'équations différentielles du premier ordre avec condition initiale. Pour un système de deux équations différentielles :

$$\mathbf{x}'(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t)) \quad , \quad \mathbf{y}'(t) = \mathbf{G}(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t))$$

Et des conditions initiales

$$\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{y}(0) = \mathbf{y}_0$$

On choisit l'intervalle de longueur  $T$  sur lequel on veut approcher  $(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t))$  et un nombre de pas  $n \geq 1$ , on subdivise l'intervalle  $[0, T]$  en  $n \geq 1$  sous-intervalles de longueur  $h = \frac{T}{n}$ , et on approche la solution  $(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t))$  de l'équation différentielle sur l'intervalle  $[0, T] = [0, nh]$  par des vecteurs

$$(\mathbf{X}_K)_{0 \leq k \leq n}, \quad (\mathbf{Y}_K)_{0 \leq k \leq n}$$

Avec l'idée que, pour tout  $K$ ,

$$\mathbf{X}_K \approx \mathbf{x}(Kh), \quad \mathbf{Y}_K \approx \mathbf{y}(Kh)$$

**II.1.2 méthode d'Euler** : appelée aussi « méthode de la tangente », c'est la plus simple des méthodes de résolution numérique des équations différentielles, on considère que,  $h$  étant petit,

$$\mathbf{x}(t+h) \approx \mathbf{x}(t) + h\mathbf{x}'(t) = \mathbf{x}(t) + h\mathbf{F}(\mathbf{x}(t), \mathbf{y}(t))$$

Et de même pour  $\mathbf{y}(t+h)$ . On considère donc le schéma

$$\mathbf{X}_0 = \mathbf{x}_0, \quad \mathbf{Y}_0 = \mathbf{y}_0,$$

$$\mathbf{X}_{K+1} = \mathbf{X}_K + h\mathbf{F}(\mathbf{X}_K, \mathbf{Y}_K), \quad \mathbf{Y}_{K+1} = \mathbf{Y}_K + h\mathbf{G}(\mathbf{X}_K, \mathbf{Y}_K).$$

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

**II.1.3 méthode de Runge-kutta d'ordre 4 (RK4) :** la méthode d'Euler n'utilise que la dérivée au début de chaque intervalle  $[Kh, (k+1)]$  pour déduire les valeurs  $X_{K+1}$  et  $Y_{K+1}$  on va calculer des valeurs de la dérivé en 4 points de l'intervalle, afin d'atteindre une plus grande précision.

Dans le détail, on modifie seulement l'étape itérative de la méthode d'Euler, qui devient

$$X_{K+1} = X_K + \frac{1}{6}h(K_1 + 2K_2 + 2K_3 + 2K_4),$$

$$Y_{K+1} = Y_K + \frac{1}{6}h(L_1 + 2L_2 + 2L_3 + 2L_4)$$

Avec  $K_1 = F(X_K, Y_K), \quad L_1 = G(X_K, Y_K)$

Puis

$$K_2 = F\left(X_K + \frac{1}{6}hk_1, Y_K + \frac{1}{2}hL_1\right), \quad L_2 = G\left(X_K + \frac{1}{6}hk_1, Y_K + \frac{1}{2}hL_1\right),$$

$$K_3 = F\left(X_K + \frac{1}{6}hk_2, Y_K + \frac{1}{2}hL_2\right), \quad L_3 = G\left(X_K + \frac{1}{6}hk_2, Y_K + \frac{1}{2}hL_2\right),$$

Et enfin

$$K_4 = F(X_K + hk_3, Y_K + hL_3), \quad L_4 = G(X_K + hk_3, Y_K + hL_3).$$

## II.2 Utilisation de l'outil Matlab

### II.2.1 Introduction

Matlab (abréviation de " **Matrix Laboratory** "), est un environnement informatique conçu pour le calcul matriciel. L'élément de base est une matrice dont la dimension n'a pas à être fixée.

Matlab est un outil puissant qui permet la résolution de nombreux problèmes en beaucoup moins de temps qu'il n'en faudrait pour les formuler en C ou en Pascal.

S'il est parfaitement adapté à l'Automatique et au Traitement du Signal, sa facilité d'emploi avec des nombres complexes et ses possibilités d'affichages graphiques en font un outil intéressant pour bien d'autres types d'applications. De plus, des " **toolboxes** " (boîtes à outils) sont disponibles dans de nombreux domaines (traitement du signal, traitement d'image, optimisation, contrôle ...).

Matlab peut être considéré comme un langage de programmation au même titre que C, Pascal ou Basic. C'est un langage interprété, c'est-à-dire que les instructions sont exécutées immédiatement après avoir été tapées. [25]

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

### II.1.2 Lancer Matlab

Lorsque vous lancez MATLAB pour la première fois, l'écran ressemble à celui de la Fig II.1.

Le 'bureau' MATLAB est une fenêtre contenant d'autres sous-fenêtres. Les principaux outils disponibles depuis ce bureau sont :

-COMMAND WINDOW: invite de commande permettant de taper des instructions, d'appeler des scripts, d'exécuter des fonctions MATLAB.

-COMMAND HISTORY : historique des commandes lancées depuis l'invite de commande.

-WORKSPACE : il liste les variables en mémoire, il permet également de parcourir graphiquement le contenu des variables

-CURRENT DIRECTORY : un navigateur de fichier intégré à MATLAB pour visualiser le répertoire de travail courant et y effectuer les opérations classiques tel que renommer ou supprimer un fichier.

-le HELP BROWSER : un navigateur permettant de parcourir l'aide de MATLAB. L'aide est un outil précieux pour trouver les fonctions et apprendre leur fonctionnement (notamment le format des données à fournir en entrée ainsi que les valeurs renvoyées par la fonction).

Par la suite, il est conseillé de tester toutes les instructions précédées de >> dans la command window.

Lorsque vous obtenez une erreur, essayez d'en comprendre la signification. Avec un peu de pratique, vous verrez que les messages d'erreur sont en général explicites. [26]

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

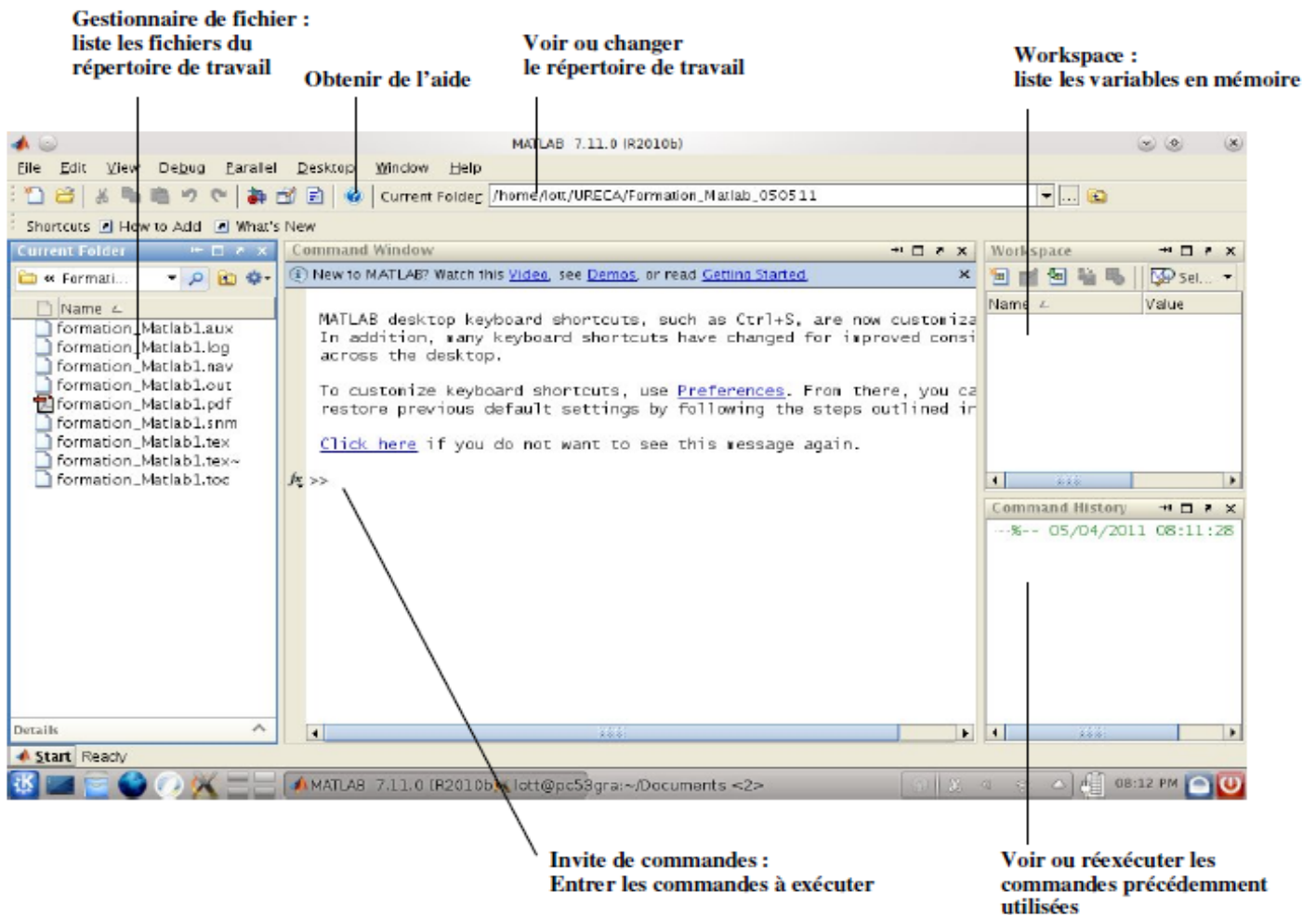


Figure II.1: L'interface graphique de l'environnement MATLAB (version R2010b) [26]

### II.1.3 Langage interprété

Matlab est un langage interprété. Il n'est pas nécessaire de compiler un programme avant de l'exécuter et toute commande tapée dans la fenêtre de commande est immédiatement exécutée (après la frappe de return).

```
>> 2+2
```

```
ans = 4
```

```
>> 5^2
```

```
ans = 25
```

La réponse est affichée et stockée dans la variable ans.

La plupart des fonctions mathématiques usuelles sont définies dans Matlab, et ceci sous une forme naturelle (sin, cos, exp, ...). de même que certaines constantes (pi...).

```
>> 2*sin(pi/4)
```

```
ans = 1.4142
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

### II.1.4 Variables

On peut indiquer le nom de la variable dans laquelle le résultat doit être stocké (commence par une lettre, moins de 19 caractères).

Attention, Matlab prend en considération les majuscules (xest différent de X).

```
>> x = pi/4  
x = 0.7854
```

Le nom de cette variable ainsi que le résultat sont affichés.

Un point virgule à la fin de la ligne permet de ne pas afficher ce résultat. On peut taper plusieurs commandes par ligne, séparées par un point virgule.

```
>> x = pi/2; y = sin(x);
```

Lorsqu'une ligne de commande est trop longue on peut l'interrompre par trois points (...) et la poursuivre à la ligne suivante, on peut aussi mettre des commentaires dans une ligne de commande à l'aide du signe "%".

### II.1.5 Variables complexes

Matlab travaille indifféremment avec des nombres réels et complexes. Par défaut les variables `i` et `j` sont initialisées à la valeur complexe  $i$ . Naturellement si vous redéfinissez la variable `i` ou `j` avec une autre valeur elle n'aura plus la même signification.

```
>> z = 3 + 2*i  
z = 3.0000 + 2.0000i
```

Les fonctions usuelles de manipulation des nombres complexes sont prédéfinies dans Matlab :

`real`, `imag`, `abs`, `angle`(en radian), `conj`.

```
>> r = abs(z);  
>> theta = angle(z);  
>> y = r*exp(i*theta);
```

### II.1.6 Vecteurs, matrices et leur manipulation

En fait, toute variable de Matlab est une matrice (scalaire : matrice 1x1, vecteur : matrice 1xN ou N x 1). On peut spécifier directement une matrice sous la forme d'un tableau, l'espace ou la virgule sépare deux éléments d'une même ligne, les points virgules séparent les éléments de lignes distinctes.

```
>> A = [1, 2, 3 ; 4, 5, 6 ; 7, 8, 9 ]  
A = 1 2 3
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

```
4 5 6
```

```
7 8 9
```

Les éléments d'une matrice peuvent être n'importe quelle expression de Matlab :

```
>> x = [-1.3, sqrt(3), (1+2+3)*4/5]
```

```
x = -1.3000  1.7321  4.8000
```

Les éléments d'une matrice peuvent être référencés par leurs indices :

```
>>x(2)
```

```
ans = 1.7321
```

```
>>x(5) = abs(x(1))
```

```
x = -1.3000  1.7321  4.8000  0.0000  1.3000
```

On peut remarquer que la taille du vecteur x a été ajustée en remplissant les éléments non précisés par 0.

On peut aussi créer des matrices avec les fonctions zeros, ones et eye, ces fonctions créent des matrices de la taille précisée, respectivement remplies de zéros, de un, et de un sur la diagonale et des zéros ailleurs (eye = prononciation anglaise de I comme identité).

```
>> eye(2,3)
```

```
ans = 1 0 0
```

```
0 1 0
```

```
>> ones(1,5)
```

```
ans = 1 1 1 1 1
```

On peut avoir des informations sur la taille d'une matrice :

```
>> size(x) ans = 1 5
```

```
>> length(x) ans = 5
```

On peut ajouter des lignes et des colonnes à des matrices déjà existantes.

```
>> r1 = [10, 11, 12];
```

```
>> A = [A; r1]
```

```
A = 1 2 3
```

```
4 5 6
```

```
7 8 9
```

```
10 11 12
```

```
>> r2 = zeros (4, 1);
```

```
>> A = [A; r2]
```

```
A = 1 2 3 0
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

```
4 5 6 0
7 8 9 0
10 11 12 0
```

On peut avoir le transposé ou le transposé conjugué d'une matrice :

```
>> A' % Transposée conjuguée de A
```

```
>> A.' % Transposée de A
```

Mais aussi des retournements horizontaux (flipud : Up/Down), verticaux (fliplr : Left/Right), ou des rotations de matrices :

```
>> flipud(A) % Retournement vertical de A
```

```
>> fliplr(A) % Retournement horizontal de A
```

```
>> rot90(A) % Rotation de A de 90 degrés
```

On peut également remettre en forme des matrices et vecteurs sur un nombre de lignes et de colonnes donnés (à condition que le nombre total d'éléments corresponde) :

```
>> B = [ 1 2 3 4 5 6 ];
```

```
>> B = reshape(B,2,3) % Remise en forme avec 2 lignes et % 3 colonnes
```

```
B = 1 3 5
     2 4 6
```

### II.1.7 L'opérateur " : "

L'opérateur " : ", sous Matlab, peut être considéré comme l'opérateur d'énumération.

Sa syntaxe usuelle est :

```
deb:pas:fin
```

Il construit un vecteur dont le premier élément est *deb* puis *deb+pas*, *deb+2\*pas*... jusqu'à

*deb+n\*pas* tel que  $deb+n*pas \leq fin < deb+(n+1)*pas$ .

```
>> x = 0.5:0.1:0.85
```

```
x = 0.5000 0.6000 0.7000 0.8000
```

Le pas d'incrémentation peut être omis, 1 est alors pris par défaut :

```
>> x = 1:5
```

```
x = 1 2 3 4 5
```

On peut aussi utiliser le " : " pour sélectionner des éléments d'un vecteur ou d'une matrice :

```
>> A(1,3) % Troisième élément de la première ligne de A
```

```
>> A(1,1:3) % Premier, deuxième et troisième éléments de % la première ligne de
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

A

```
>> A(1,:) % Tous les éléments de la première ligne
```

```
>> A(:,3) % Tous les éléments de la troisième colonne
```

```
>> A(:) % Vecteur colonne contenant tous les éléments % de A lus colonne par  
colonne.
```

Si l'on a :

```
>> A = [ 1, 2, 3 ; 4, 5, 6 ; 7, 8, 9 ];
```

```
>> indi = [3, 2, 1];
```

```
>> indj = [1, 3];
```

Alors

```
>> A(indi,indj)
```

```
ans = 7  9  
      4  6  
      1  3
```

Nous donnera les premiers et troisièmes éléments des lignes 3, 2 et 1 de A. Mais il faut cependant remarquer que si l'on a :

```
>> indi = [ 3, 0, 2 ];
```

alors

```
>> A(indi,:)
```

```
ans = 1 2 3  
      7 8 9
```

Nous donne les lignes de A dont l'élément de indi est non nul (c'est-à-dire ici la première et la troisième ligne).

En effet, lorsqu'un vecteur contenant un zéro est pris comme indice, les éléments du vecteur sont considérés comme des booléens, leur valeur n'est alors plus prise en compte, mais uniquement le fait qu'ils soient nuls ou non.

## II.2 Affichages graphiques et alphanumériques

### II.2.1 Affichage alphanumérique

On peut afficher des chaînes de caractères dans la fenêtre de commande :

```
>> disp(message) pi vaut 3.142
```

Les fonctions sprintf et fprintf existe également (même syntaxe qu'en langage C).

```
>> fprintf('pi vaut %f\n',pi) pi vaut 3.141593
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

On peut aussi demander des valeurs à l'utilisateur :

```
>> rep = input('Nombre d"itération de l"algorithme : ');
```

Matlab affichera la chaîne de caractère entrée en paramètre et attendra une réponse de l'utilisateur.

### II.2.2 Affichages graphiques de courbes 1D

Matlab permet un grand nombre de types d'affichage 1D et 2D, seuls les plus courant seront décrits ici.

La commande plot permet l'affichage d'une courbe 1D :

```
>> x = 0:0.1:2; y = sin(x*pi);  
>> plot(x*pi,y) % plot(abscisse,ordonnée)
```

On aurait pu tracer la courbe en semilog ou en log avec les fonctions semilogx, semilogy et

loglog.

On peut ajouter un titre aux figures ainsi que des labels aux axes avec les commandes title, xlabel, ylabel:

```
>> title('Courbe y = sinus(pi*x)')  
>> xlabel('x'); ylabel('y')
```

### II.2.3 Affichages graphiques de courbes 2D

Avec la commande mesh on peut aisément avoir une représentation d'une fonction 2D. Cependant il faut construire la grille des coordonnées des points en lesquels on a les valeurs de la fonction à l'aide de la fonction meshgrid.

```
>> x = 1:0.1:2;y = -1:0.1:1;  
>> [X,Y] = meshgrid(x,y);  
>> mesh(X,Y,cos(pi*X).*sin(pi*Y)) % Coordonnées en x et en y et % valeurs de la  
fonction : Z  
>> xlabel('x');ylabel('y');zlabel('z');  
>> title('z=cos(pi*x)*sin(pi*y)')
```

Mais on peut aussi visualiser les matrices avec les fonctions image, meshc,

### II.2.4 Affichage de plusieurs courbes

On peut bien évidemment vouloir afficher plusieurs courbes à l'écran. Pour cela deux solutions s'offrent à nous :

On peut effectuer plusieurs affichages sur une même figure en utilisant la

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

commande subplot

qui subdivise la fenêtre graphique. Sa syntaxe est :

```
subplot(nombre_lignes,nombre_colonnes,numéro_subdivision)
```

Les subdivisions sont numérotés de 1 à nombre\_lignes\*nombre\_colonnes, de la gauche vers la droite puis de haut en bas.

Exemple :

```
>> subplot(3,2,1)
```

```
>> plot(x,y)
```

```
>> subplot(3,2,2)
```

```
>> plot(x,y.^2)
```

123456 On peut aussi ouvrir une deuxième fenêtre graphique à l'aide de la commande figure. Le passage d'une fenêtre graphique à une autre pourra alors se faire à la souris ou en précisant le numéro correspondant dans la commande figure(n). [25]

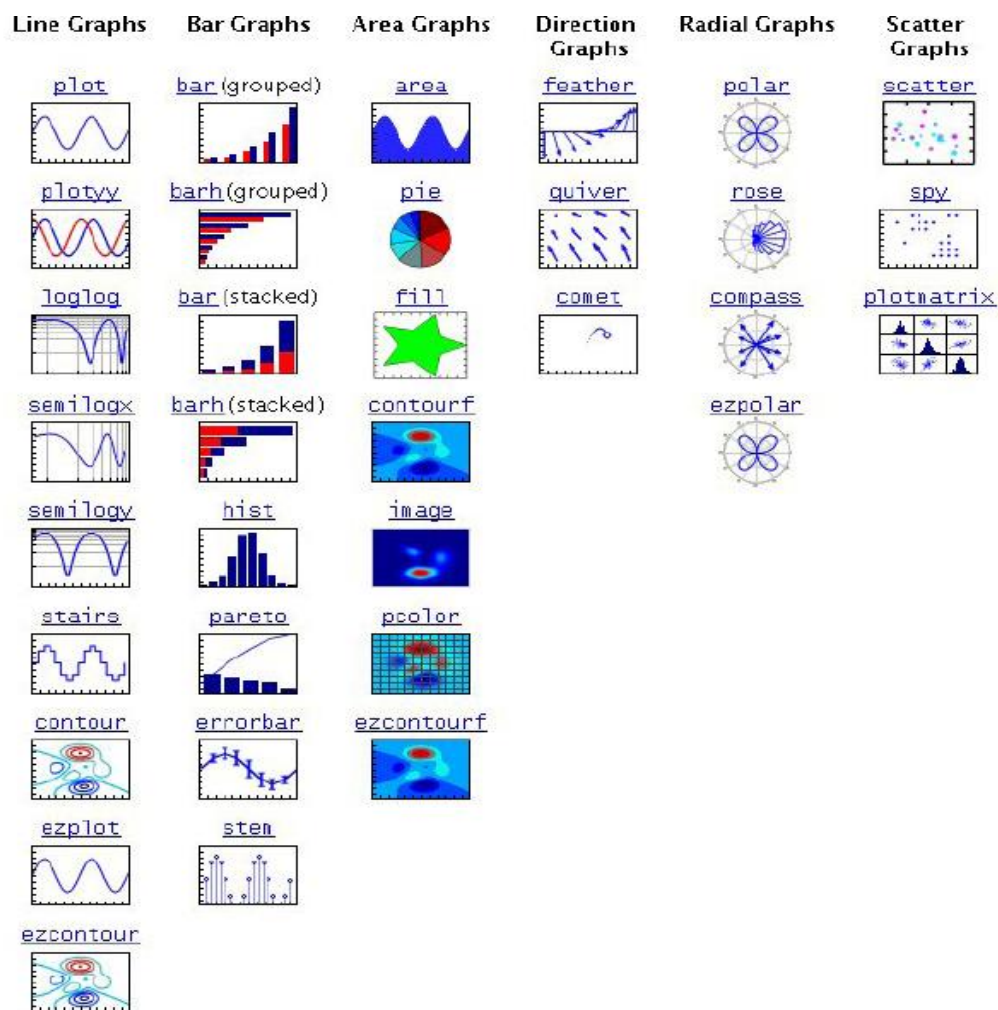


Figure II.2 : Liste des fonctions graphiques 2D [26]

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

### II.3 Environnement de travail, scripts et fonctions

#### II.3.1 Répertoire de travail

Il est indispensable de travailler dans votre propre répertoire et non dans le répertoire de Matlab.

De même dans votre répertoire vous pouvez organiser vos fichiers dans des sous répertoires.

Pour que vos fonctions et scripts soient accessibles à partir de la ligne de commande Matlab il faut au début de chaque session Matlab, déclarer vos répertoires de travail.

Ceci se fait à l'aide de la commande path:

```
path(path,'Mac 1:Projet1:Matlab') % Pour les Macs path(path,'c:\projet1\matlab') %
```

Pour les PCs

Ceci rajoute aux chemins déjà existants (que l'on obtient à l'aide de path) le chemin mis entre quotes.

Il faut aussi se placer dans votre répertoire de travail. On peut se déplacer dans l'arborescence du disque de travail à l'aide des commandes `cd` et `dir` (même syntaxe pour les Macs et sous MS- Dos).

En fait lorsqu'on travaille souvent sous matlab avec des fichiers de fonctions et des scripts organisés dans une arborescence sur le disque de travail, il est possible et préférable de réaliser un fichier *startup.m* qui sera exécuté immédiatement en lançant Matlab. Dans ce fichier on peut définir le path, charger d'éventuelles variables, se placer dans le répertoire désiré...

#### II.3.2 Sauvegarde et chargement de variables

Il peut être utile, lors d'une session de travail, de sauvegarder des variables dans des fichiers du répertoire de travail. Cela peut être réalisé à l'aide de la fonction `save` dont la syntaxe est :

```
save nom_fichier nom_variables
```

exemple :

```
>> save test.mat A, x, y
```

Si le nom des variables est omis, tous l'espace de travail est sauvé; si l'extension du fichier est omise elle sera automatiquement *.mat*, si de plus, le nom du fichier est omis, la sauvegarde se fera dans le fichier *matlab.mat*.

Pour recharger des variables sauvées dans un fichier, il suffit de taper :

```
load nom_fichier
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

Si le nom du fichier est omis, Matlab chargera le fichier *matlab.mat*.

On peut à un moment donné vouloir connaître toutes les variables disponibles dans l'espace de travail. Cela est possible grâce aux commandes *who* et *whos*. La commande *who* nous donne le nom de toutes les variables existantes, tandis que *whos* nous donne leur nom et l'espace mémoire qu'elles occupent.

Lorsque l'on travaille avec des matrices de tailles importantes, ou lorsque la puissance de la machine est limitée, il peut être prudent d'utiliser parfois la commande *pack*. Cette commande consolide l'espace mémoire, qui bien souvent est fragmenté après un certain temps de travail sous Matlab. Ainsi le temps d'allocation et de recherche en mémoire sera réduit.

### II.3.3 Scripts

Il est parfois (souvent) souhaitable, pour ne pas avoir à taper plusieurs fois une même séquence d'instructions, de la stocker dans un fichier. Ainsi on pourra réutiliser cette séquence dans une autre session de travail. Un tel fichier est dénommé *script*.

Sur Macintosh ou sous windows, il suffit d'ouvrir un fichier avec le menu *file, new*, de taper la séquence de commande et de sauver le fichier avec une extension "*.m*" (*nom\_fich.m*). En tapant le nom du fichier sous Matlab, la suite d'instructions s'exécute.

Les variables définies dans l'espace de travail sont accessibles pour le script. De même les variables définies (ou modifiées) dans le script sont accessibles dans l'espace de travail.

On peut (doit) mettre des commentaires à l'aide du caractère pour-cent "*%*". Toute commande située après "*%*" n'est pas prise en compte par Matlab, jusqu'à la ligne suivante. De plus Matlab ne voit pas les espaces blancs (lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté), ce qui permet de bien indenter ses fichiers.

### II.3.4 Fonctions

On a parfois (souvent) besoin de fonctions qui ne sont pas fournies par Matlab. On peut alors créer de telles fonctions dans un fichier séparé et les appeler de la même façon que les fonctions préexistantes.

La première ligne (hormis les lignes de commentaires) d'une fonction doit impérativement avoir la syntaxe suivante :

fonction [ var de sorties, ...] = nom\_fonction( var d'entrée, ...)

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

Exemple de fonction :

```
function y = sinuscardinal(x)
```

```
z = sin(x); % Variable de stockage
```

```
y = z./x; % Résultat de la fonction % Il faudra se méfier de la division pour x=0
```

Cette fonction pourra être appelée par :

```
>> sincpi = sinuscardinal(pi);
```

Exemple de fonction à plusieurs variables de sortie :

```
function [mini, maxi] = minetmax(x)
```

```
mini = min(x); % Première variable de sortie maxi = max(x); % Deuxième variable  
de sortie
```

Cette fonction pourra être appelée par :

```
>> [miny, maxy] = minetmax(y);
```

Le nom de la fonction doit impérativement être le même que le nom du fichier dans lequel elle est stockée (sinon Matlab ne prendra pas en compte ce nom mais uniquement celui du fichier). Les nombres d'arguments en entrée et en sortie ne sont pas fixes et peuvent être récupérés par nargin etargout. Cela nous permet donc de faire des fonctions Matlab pouvant dépendre d'un nombre variable de paramètres.

Les variables de l'espace de travail ne sont pas accessibles à la fonction sauf si elles sont entrées comme variable d'entrée. De même les variables définies dans une fonction ne sont pas accessibles dans l'espace de travail.

### II.4 Boucles et contrôles

Comme de nombreux autres langages de programmation, Matlab possède trois types d'instructions de contrôles et de boucles : for, if et while. Nous n'étudierons ici que if et for.

#### II.4.1 Contrôle : " if "

Cette structure de contrôle est très utilisée pour effectuer des branchements, dans un script ou une fonction, suivant certaines conditions. Sa syntaxe est :

```
if (expression logique) suite d'instructions 1; else  
suite d'instructions 2; end
```

La condition est exprimée au travers d'une expression logique. Les expressions logiques sont des expressions quelconques pour lesquelles on considère uniquement le fait qu'elles soient nulles (expression fausse) ou non (expression vraie).

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

On peut aussi construire ces expressions à l'aide des opérateurs logiques et (&), ou (!), égal (==), supérieur (>,>=), inférieur(<,<=), non(~), ou exclusif (xor) ou à l'aide de fonctions logiques prédéfinies exist, any, find, isinf, isnan...

### II.4.2 Boucle : "for"

La boucle for pour syntaxe :

```
for i=1:10  
suite d'instructions; end
```

Cette structure de contrôle est très utile, mais il est recommandé d'éviter au maximum les boucles dans Matlab, car elles sont très lentes par rapport à un traitement matriciel.

Exemple trivial : la boucle suivante

```
for i=1:N, x(i) = i; end
```

est équivalente à

```
x = 1:N;
```

Malheureusement, on ne rencontre pas toujours des cas aussi simples et il est difficile de penser matriciel, c'est à dire penser en Matlab.

Les fonctions zeros et ones, permettent parfois d'éviter de mettre en oeuvre une boucle. Par exemple, au lieu de faire la boucle :

```
r = 1:10;  
A = []; % initialisation de A à vide for i=1:5, A = [A ; r]; end
```

On peut écrire

```
r = 1:10;  
A = ones(5,1)*r;
```

Une façon plus rusée encore de réaliser ceci est :

```
r = 1:10;  
A = r(ones(5,1),:); % Etudiez bien cette instruction
```

On remarque qu'ainsi on évite la multiplication de l'instruction précédente.

De plus certaines fonctions Matlab agissent sur une matrice en tant que suite de vecteurs.

Ainsi

```
maximum = max(A);
```

nous donne le même résultat (mais en moins de temps) que :

```
n = length(A(1,:));
```

## Chapitre II: outil Matlab et resolution numérique

---

```
for i=1:n, maximum(i) = max(A(:,i)); end
```

Il faut donc bien réfléchir avant de construire une boucle, afin de savoir si on ne peut vraiment pas faire autrement.

Cependant, il est parfois impossible d'éviter la mise en oeuvre d'une boucle, c'est en général le cas pour les algorithmes itératifs.

Dans ce cas il est nécessaire de bien initialiser les variables que l'on va allouer lors de l'exécution de la boucle. Ainsi si l'on ne pouvait éviter d'effectuer la boucle suivante,

```
for i=1:N, x(i) = i; end
```

il ne faudrait pas l'initialiser par

```
x = [];
```

mais par

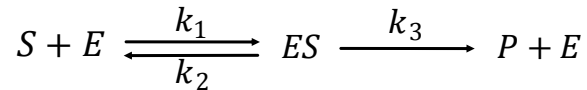
```
x = zeros(1,N);
```

car l'allocation en mémoire de la variable x est réalisée une fois pour toute à l'initialisation et non à chaque itération ou l'on a à augmenter sa dimension. [25]

## **Chapitre III : Analyse et modélisation**

### III.1 Base théorique de l'établissement de la loi de Michaelis-Menten

Le mécanisme réactionnel d'une réaction enzymatique est constitué de deux étapes (ou réactions élémentaires) :



La première étape est la formation du complexe enzyme-substrat (**ES**). C'est une réaction rapide et réversible.

Avec :

$$r_1 = k_1 C_S C_E \quad \text{vitesse de formation du complexe} \quad (\text{III.1})$$

$$r_2 = k_2 C_{ES} \quad \text{vitesse de dissociation du complexe} \quad (\text{III.2})$$

La seconde étape est la formation du produit  $P$  à partir du complexe enzyme-substrat. C'est une réaction lente.

Avec :

$$r_3 = k_3 C_{ES} \quad (\text{III.3})$$

A partir des vitesses de ces réactions élémentaires, il s'agit d'exprimer la vitesse de la réaction globale  $S \longrightarrow P$  uniquement en fonction des concentrations accessibles à l'expérience, c'est-à-dire indépendamment de la concentration du complexe  $ES$ .

Pour cela, l'hypothèse de l'état quasi stationnaire [24] consiste à écrire que le débit net de production chimique de l'intermédiaire  $ES$  est nul :

$$R_{ES} = (r_1 - r_2) - r_3 = k_1 C_S C_E - (k_2 + k_3) C_{ES} = 0 \quad (\text{III.4})$$

D'où :

$$C_{ES} = \frac{C_S C_E}{\frac{k_2 + k_3}{k_1}} \quad (\text{III.5})$$

Avec

$$\frac{k_2 + k_3}{k_1} = \frac{C_S C_E}{C_{ES}} = K_m \quad \text{appelée constante de Michaelis-Menten} \quad (\text{III.6})$$

## Chapitre III : Analyse et modélisation

---

La concentration de l'intermédiaire  $ES$  devient :

$$C_{ES} = \frac{C_S C_E}{K_m} \quad (\text{III.7})$$

On peut écrire d'autre part qu'à tout instant, la concentration totale d'enzyme  $(C_E)_0$  est conservée. Ce qui se traduit par :  $(C_E)_0 = C_E + C_{ES}$  (III.8)

Cette concentration reste constante dans le cas du réacteur ouvert en régime permanent et dans le cas du réacteur fermé.

De l'équation (III.8), on tire :

$$C_E = (C_E)_0 - C_{ES} \quad (\text{III.9})$$

En combinant (III.7) et (III.9), il vient :

$$C_{ES} = [(C_E)_0 - C_{ES}] \cdot \frac{C_S}{K_m} \quad (\text{III.10})$$

L'équation (III.10), une fois réarrangée donne :

$$C_{ES} = (C_E)_0 \cdot \frac{C_S}{K_m + C_S} \quad (\text{III.11})$$

En admettant que la vitesse de la réaction globale est contrôlée par la vitesse de l'étape lente, il vient :

$$r = k_3 C_{ES} \quad (\text{III.12})$$

La combinaison des équations (III.11) et (III.12) permet d'écrire :

$$r = k_3 (C_E)_0 \cdot \frac{C_S}{K_m + C_S} \quad (\text{III.13})$$

La vitesse maximale est atteinte lorsque tous les sites actifs sont saturés de substrat, c'est-à-dire lorsque  $C_S \gg K_m$ . Dans ces conditions le terme  $\frac{C_S}{K_m + C_S}$  tend vers 1. Il s'ensuit :

$$r_{max} = k_3 (C_E)_0 \quad (\text{III.14})$$

La combinaison de (III.13) et (III.14) donne l'équation de Michaelis-Menten :

$$r = r_{max} \cdot \frac{C_S}{K_m + C_S} \quad (\text{III.15})$$

## Chapitre III : Analyse et modélisation

---

- **Détermination expérimentale de la vitesse initiale  $r_0$**

C'est la valeur de la vitesse en début de réaction, pendant la durée où elle apparaît comme quasi-constante.

Le suivi de la concentration du produit  $P$  en fonction du temps permet de tracer la courbe  $C_P = f(t)$ . La pente de la tangente à  $t = 0$  représente la vitesse initiale  $r_0$ .

- **Détermination expérimentale des paramètres  $K_m$  et  $r_{max}$**

Il y a trois méthodes graphiques simples pour établir les valeurs de  $K_m$  et  $r_{max}$  dans des conditions expérimentales données.

Les trois méthodes nécessitent des données expérimentales pour la vitesse initiale  $r_0$  de la réaction en fonction de la concentration initiale du substrat  $(C_S)_0$  pour une concentration fixe d'enzyme.

1<sup>ère</sup> méthode : (Lineweaver-Burk)

En inversant la relation de Michaelis-Menten, on obtient :  $\frac{1}{r_0} = \frac{K_m + (C_S)_0}{r_{max} \cdot (C_S)_0}$

La décomposition donne :  $\frac{1}{r_0} = \frac{1}{r_{max}} + \frac{K_m}{r_{max}} \cdot \frac{1}{(C_S)_0}$

Le graphique  $\frac{1}{r_0} = f\left(\frac{1}{(C_S)_0}\right)$  doit être une droite dont l'ordonnée à l'origine est  $b = \frac{1}{r_{max}}$  et la pente  $tg\alpha = \frac{K_m}{r_{max}}$ .

2<sup>ème</sup> méthode : (Eadie-Hofstee)

Un autre réarrangement de la relation de Michaelis-Menten donne :

$$r_0 K_m + r_0 (C_S)_0 = r_{max} \cdot (C_S)_0$$

En divisant les deux membres de l'égalité par  $(C_S)_0$ , il vient :

$$K_m \cdot \frac{r_0}{(C_S)_0} + r_0 = r_{max}$$

Ou encore :

$$r_0 = r_{max} - K_m \cdot \frac{r_0}{(C_S)_0}$$

## Chapitre III : Analyse et modélisation

Le graphique  $r_0 = f\left(\frac{r_0}{(C_S)_0}\right)$  est une droite d'ordonnée à l'origine  $b = r_{max}$  et de pente  $tg\alpha = -K_m$ .

3<sup>ème</sup> méthode : (Hanes)

$$r_0[K_m + (C_S)_0] = r_{max} \cdot (C_S)_0$$

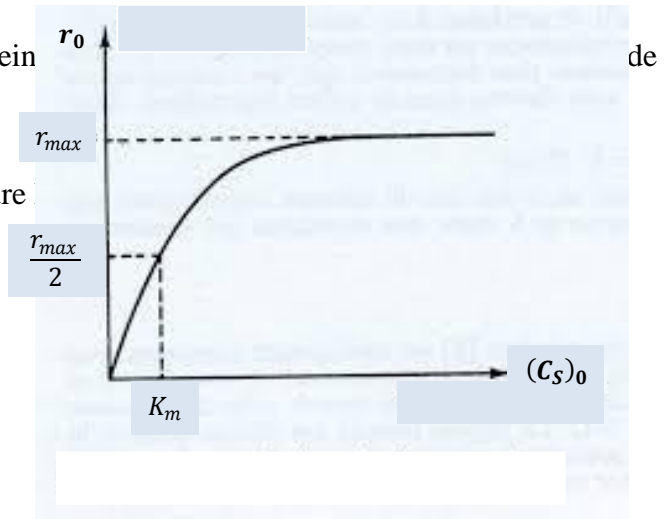
Que l'on peut écrire sous la forme :  $\frac{(C_S)_0}{r_0} = \frac{K_m}{r_{max}} + \frac{1}{r_{max}} \cdot (C_S)_0$

Le graphique  $\frac{(C_S)_0}{r_0} = f[(C_S)_0]$  est une droite d'ordonnée à l'origine  $b = \frac{K_m}{r_{max}}$  et de pente  $tg\alpha = \frac{1}{r_{max}}$

- **Interprétation physique de  $r_{max}$  et  $K_m$**

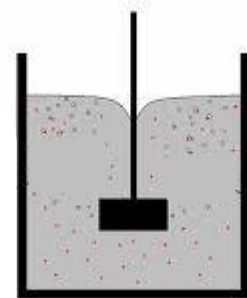
$r_{max}$  est la vitesse maximale que peut atteindre le substrat.

$K_m$  est la concentration de substrat qui sature



### III.2 Modélisation de la réaction de production de bioéthanol en réacteur fermé

La charge, constituée d'une solution aqueuse de sucre (substrat) de masse connue, et d'une suspension homogène de levure préalablement préparée, est introduite dans la cuve de volume  $V_R$ . L'agitation permet d'uniformiser le mélange. La réaction de fermentation évolue avec le temps avec consommation de substrat et formation d'éthanol et de gaz carbonique.



## Chapitre III : Analyse et modélisation

---

Dans un but de prévoir l'avancement de la réaction avec le temps, on écrit le bilan instantané par rapport au substrat :

***Débit de consommation de substrat = débit d'accumulation de substrat dans la cuve***

Ceci se traduit par l'équation :

$$-rV_R = V_R \frac{dC_S}{dt} \quad (\text{III.1})$$

Avec :

$r$  : la vitesse de la réaction.

On adopte très souvent la loi de Michaelis-Menten comme vitesse pour la réaction de fermentation (réaction enzymatique). L'équation (III.1) devient :

$$-r_{max} \frac{C_S}{K_m + C_S} = \frac{dC_S}{dt} \quad (\text{III.2})$$

La concentration instantanée  $C_S$  est remplacée par son expression en fonction du taux de conversion  $X_S$ , il vient :

$$\frac{dX_S}{dt} = (1 - X_S) \left( \frac{r_{max}}{K_m + C_{S0}(1 - X_S)} \right) \quad (\text{III.3})$$

A laquelle on associe la condition initiale :

$$X_S(t = 0) = 0 \quad (\text{III.4})$$

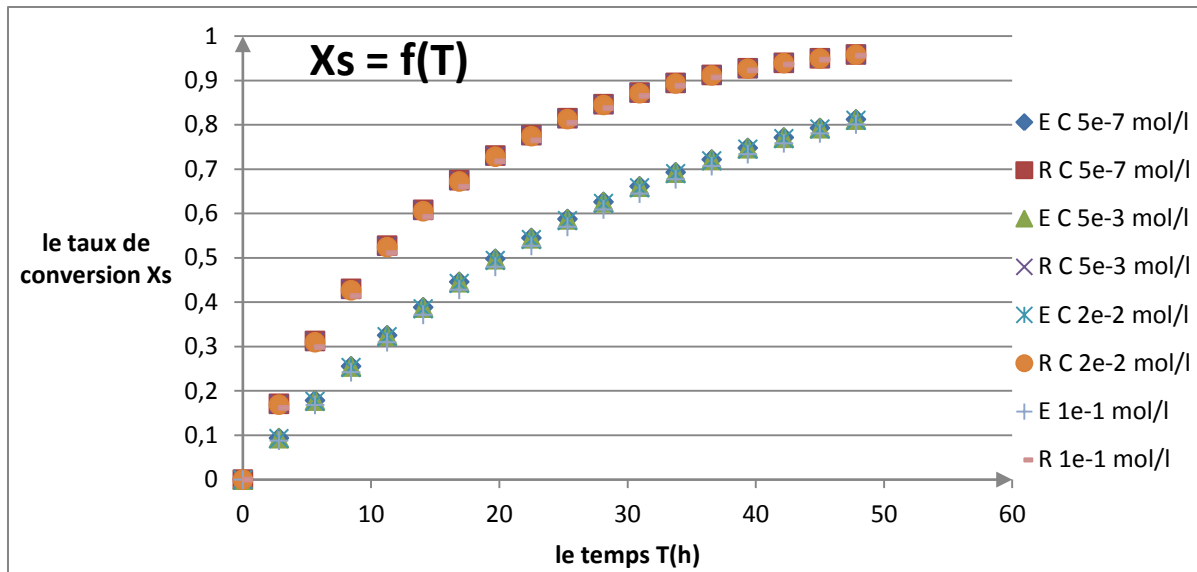
L'équation (III.3) est une équation différentielle non linéaire du premier ordre.

Pour résoudre numériquement l'équation, on a choisi deux méthodes numériques : la méthode d'Euler et la méthode Runge-Kutta 4.

Le code du programme que nous avons écrit pour prévoir  $X_S(t)$  à l'aide de l'outil Matlab, est donné en **annexe 1**.

- **Influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur**

Afin de prévoir l'influence de la concentration initiale en substrat, on donne différentes valeurs à  $C_{S0}$  dans l'équation (III.3). Les résultats de la résolution par les deux méthodes sont représentés sur la figure III.1. Les valeurs numériques sont données dans le tableau de **l'annexe 2**.



**Figure III.1:** influence de la concentration de substrat initiale  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur fermé

### Interprétation

1. Les résultats de l'intégration montrent qu'à un instant  $t$  donné, le taux de conversion n'est pas sensible à la concentration  $C_{S0}$ .  
Sur le plan pratique, les réactions qui suivent la loi cinétique de Michaelis-Menten sont nettement influencées par la concentration initiale de substrat. Plus cette concentration est élevée, meilleur est le taux de conversion à un même instant  $t$ .  
Notre choix de l'intervalle des valeurs choisies de  $C_{S0}$  n'est peut être pas approprié pour mettre en évidence cette influence.
2. Les deux méthodes de résolutions donnent des résultats significativement différents. Il est évident que l'une serait mieux adaptée au problème que l'autre. Une compréhension fine de l'algorithme de chacune des deux permettrait le meilleur choix.

### **III.3 Ajustement des paramètres de Michaelis-Menten par des résultats expérimentaux relevés de la littérature**

Le but recherché ici est de déterminer les valeurs des paramètres de Michaelis ( $r_{max}$  et  $K_m$ ) en ajustant le modèle obtenu à deux séries de résultats expérimentaux relevés des références [28] et [29].

## Chapitre III : Analyse et modélisation

### III.3.1 Résultats de production de bioéthanol à partir de biomasse lignocellulosique

Les résultats expérimentaux relevés de la référence [28] sont présentés dans le tableau III.1.

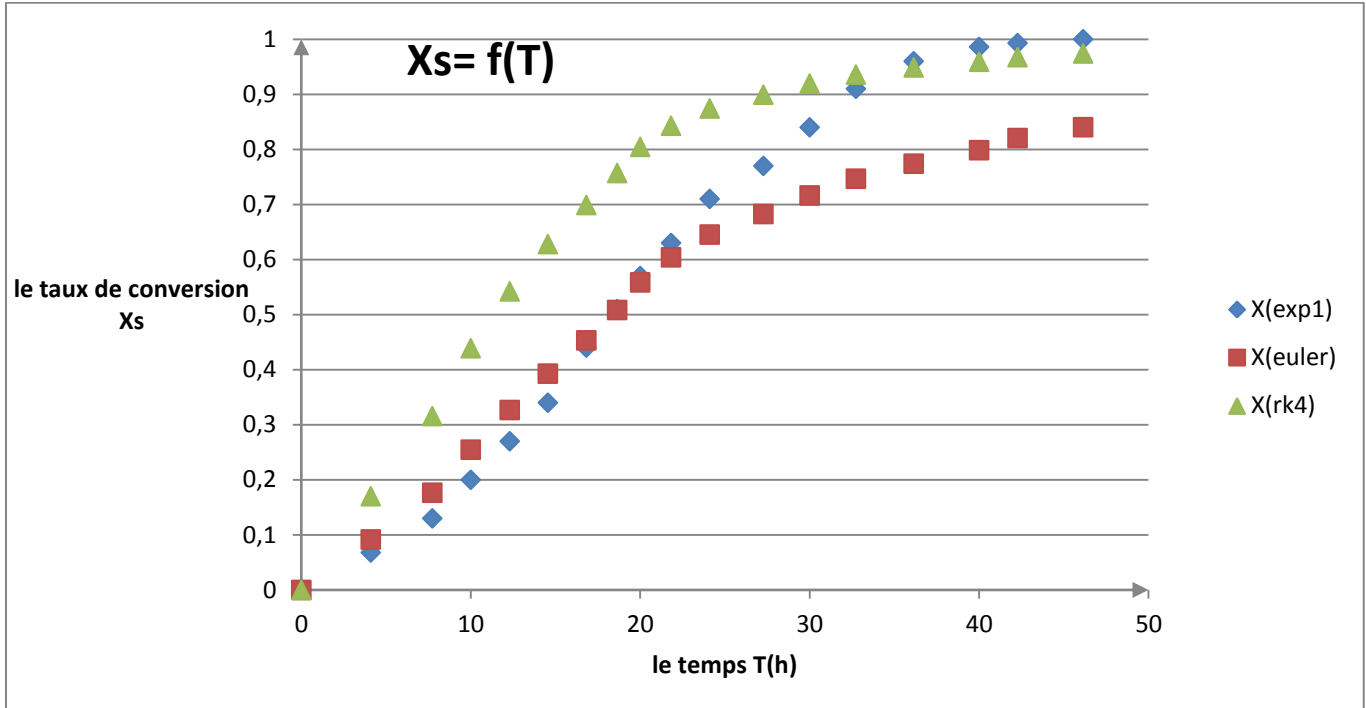
**Tableau III.1** : Concentration instantanée en glucose durant la fermentation

$t$ (h)	$C_{\text{glucose}}$ (g · l <sup>-1</sup> )	$X_{\text{exp.}} = \frac{(C_0 - C_{\text{glucose}})}{C_0}$
0	107.3	0
4.1	100	0.068
7.73	93.45	0.13
10	86.37	0.20
12.30	78.58	0.27
14.55	70.71	0.34
16.82	60	0.44
18.64	52.83	0.51
20	45.71	0.57
21.82	40	0.63
24.1	31.43	0.71
27.27	24.28	0.77
30	17.14	0.84
32.73	10	0.91
36.14	4.29	0.96
40	1.43	0.986
42.27	0.714	0.993
46.14	0	1

## Chapitre III : Analyse et modélisation

Le meilleur ajustement de la courbe  $X_{théor.} = f(t)$  du modèle à la courbe expérimentale (fig. III.2) (**annexe 3**) est obtenu pour les valeurs :

$$r_{max} = 0,2 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{h}^{-1} \quad K_m = 2.4 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$$



**Figure III.2 :** ajustement (fitting) des courbes théorique (modèle) et expérimentale

### III.3.2 Résultats de production de bioéthanol à partir des déchets de l'industrie de transformation de pomme de terre

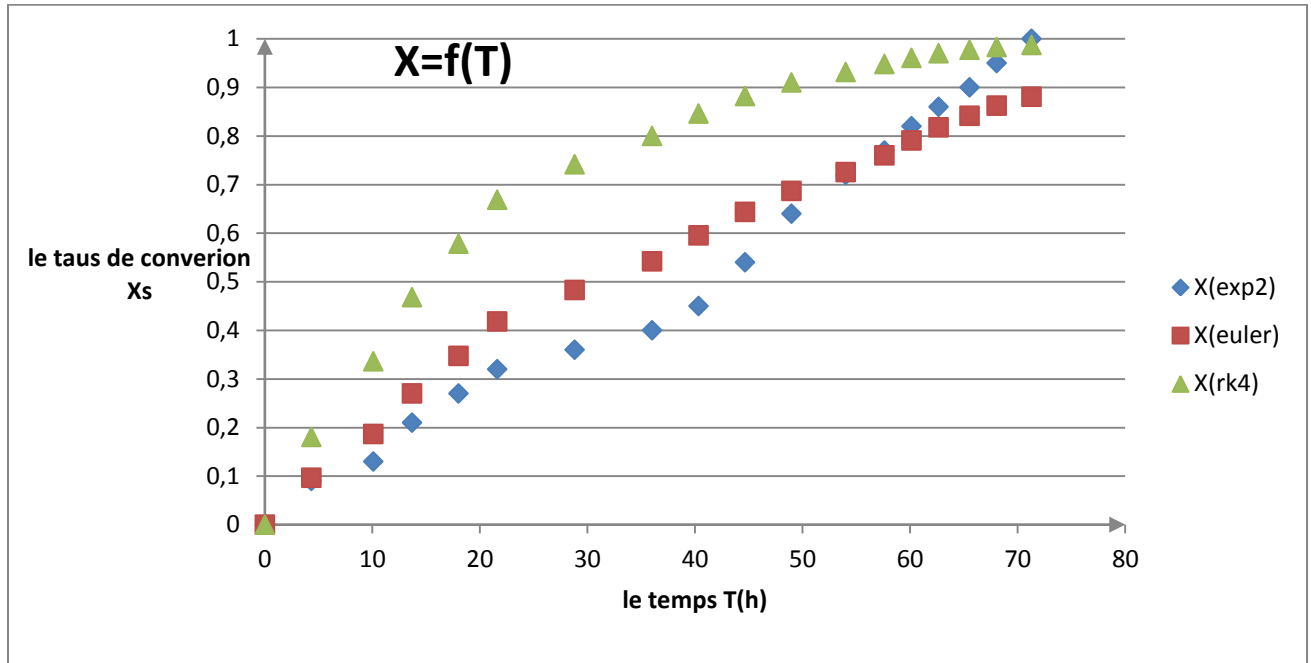
Les résultats expérimentaux relevés de la référence [29] sont présentés dans le tableau III.2.

$t$ (h)	$C_{\text{glucose}}$ (g · l <sup>-1</sup> )	$X_{\text{exp.}} = \frac{(C_0 - C_{\text{glucose}})}{C_0}$
0	129.92	0
4.32	115.38	0.09
10.08	109.61	0.13
13.68	100	0.21
18	92.31	0.27
21.6	86.54	0.32
28.8	80.77	0.36
36	75	0.40
40.32	69.23	0.45
44.64	57.69	0.54
48.96	46.15	0.64
54	34.62	0.72
57.6	28.85	0.77
60.12	23.08	0.82
62.64	17.31	0.86
65.52	11.54	0.90
68.04	5.77	0.95
71.28	0	1

## Chapitre III : Analyse et modélisation

Le meilleur ajustement de la courbe  $X_{théor.} = f(t)$  du modèle à la courbe expérimentale (fig. III.3) (**annexe 4**) est obtenu pour les valeurs :

$$r_{max} = 0.1 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{h}^{-1} \quad K_m = 1.5 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$$



**Figure III.3** : ajustement (fitting) des courbes théorique (modèle) et expérimentale

### III.4 modélisation de la réaction de production de bioéthanol en réacteur ouvert en régime transitoire

La cuve de volume  $V_R$  est alimentée continuellement avec la charge avec un débit volumique  $Q_0$ . Un courant de mélange réactionnel est extrait continuellement de la cuve avec le même débit  $Q_0$ .

Le bilan instantané en substrat s'écrit :

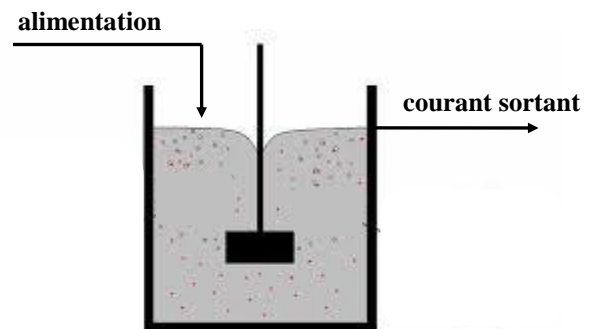
$$Q_0 \cdot C_{s0} - r V_R = Q_0 \cdot C_{ss} + V_R \frac{dC_{ss}}{dt} \quad (\text{III.5})$$

En remplaçant  $r$  par la loi de Michaelis-Menten, il vient :

$$Q_0 \cdot C_{s0} - V_R \cdot r_{max} \frac{C_{ss}}{K_m + C_{ss}} = Q_0 \cdot C_{ss} + V_R \frac{dC_{ss}}{dt} \quad (\text{III.6})$$

Ou encore :

$$\frac{dC_{ss}}{dt} = - r_{max} \frac{C_{ss}}{K_m + C_{ss}} - \frac{C_{ss}}{\tau} + \frac{C_{s0}}{\tau} \quad (\text{III.7})$$



## Chapitre III : Analyse et modélisation

En remplaçant  $C_{SS}$  par son expression en fonction du taux de conversion  $X_s$  :

$$C_{S0} \frac{d(1-X_{SS})}{dt} = -r_{max} \frac{C_{S0}(1-X_{SS})}{K_m + C_{S0}(1-X_{SS})} - \frac{C_{S0}(1-X_{SS})}{\tau} + \frac{C_{S0}}{\tau} \quad (\text{III.8})$$

Ou encore :

$$\frac{d(X_{SS})}{dt} = -\frac{1}{\tau} + (1 - X_{SS}) \left( -\frac{r_{max}}{K_m + C_{S0}(1-X_{SS})} + \frac{1}{\tau} \right) \quad (\text{III.9})$$

A la quelle on associe la condition initiale :

$$X_{SS}(t = 0) = 1 \quad (\text{III.10})$$

L'équation (III.9) est une équation différentielle non linéaire du premier ordre.

Le code du programme écrit pour prévoir  $X_{SS}(t)$  à l'aide de l'outil Matlab, est donné en **annexe 5**.

Nous avons choisi pour les constantes de l'équation (III.6), les valeurs :

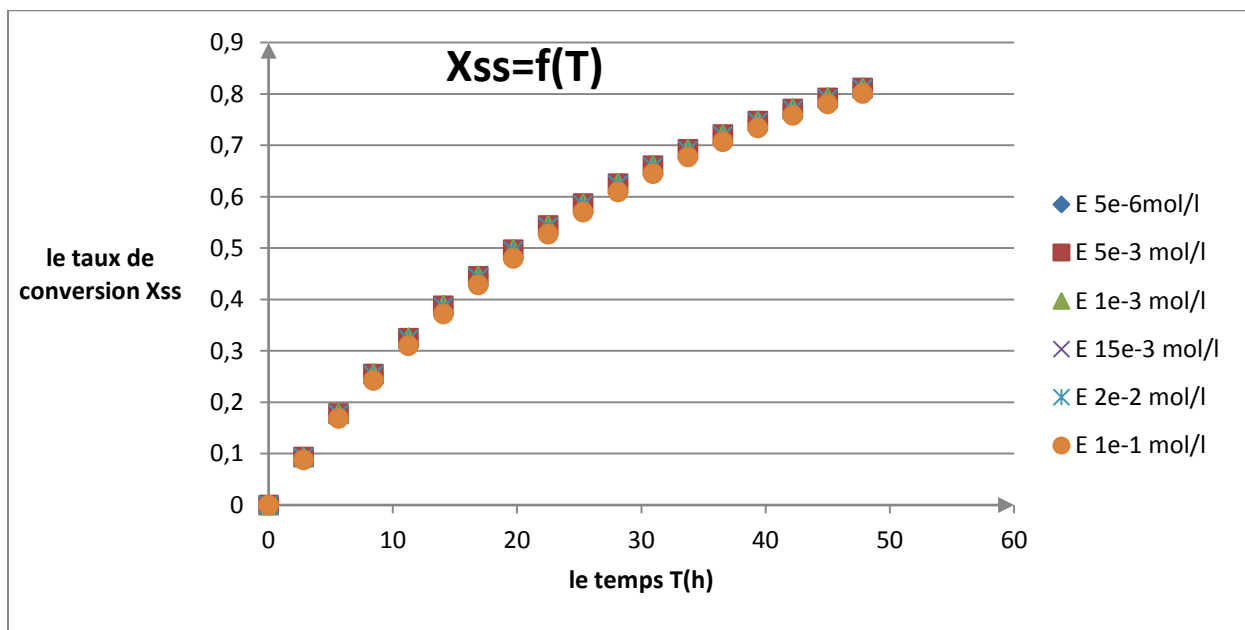
$$r_{max} = 0.1 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{h}^{-1}$$

$$K_m = 1.5 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$$

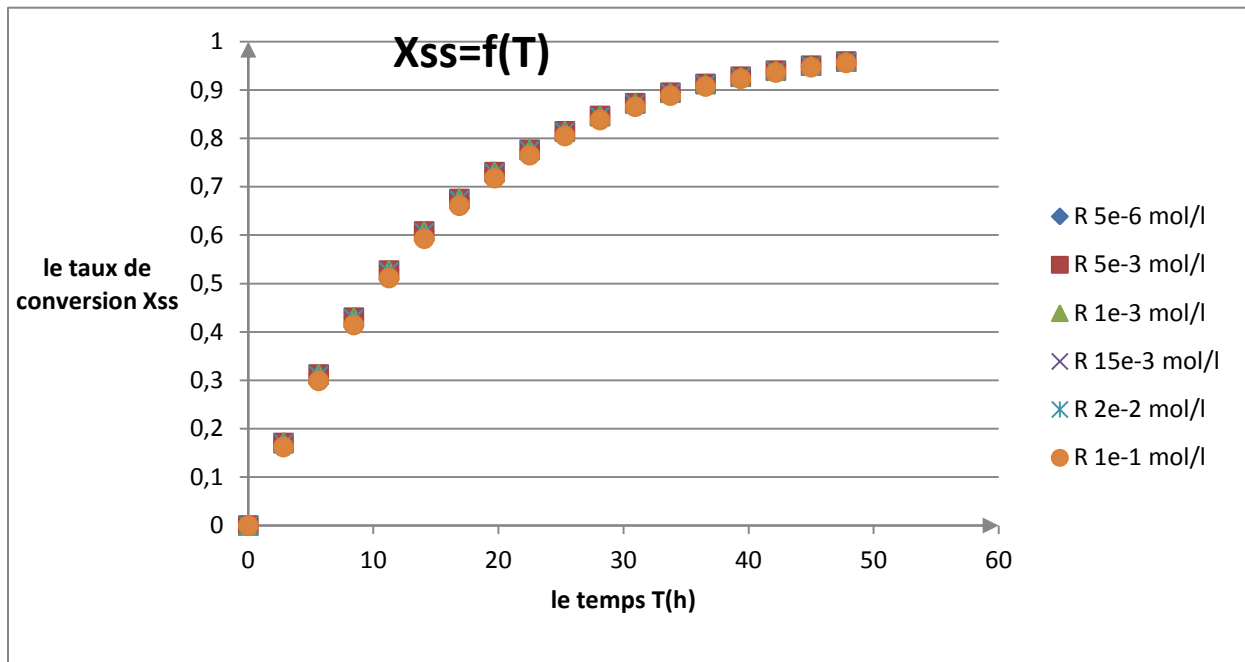
$$\tau = 40 \text{ h}$$

- **Influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur**

Plusieurs valeurs sont données à  $C_{S0}$  pour une valeur de  $\tau$  maintenue fixe. Les résultats de l'intégration sont donnés sur les figures (III.5) et (III.6). Les valeurs numériques correspondant sont données en **annexe 6** et **7**.



**Figure III.5** : influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur (méthode d'Euler)



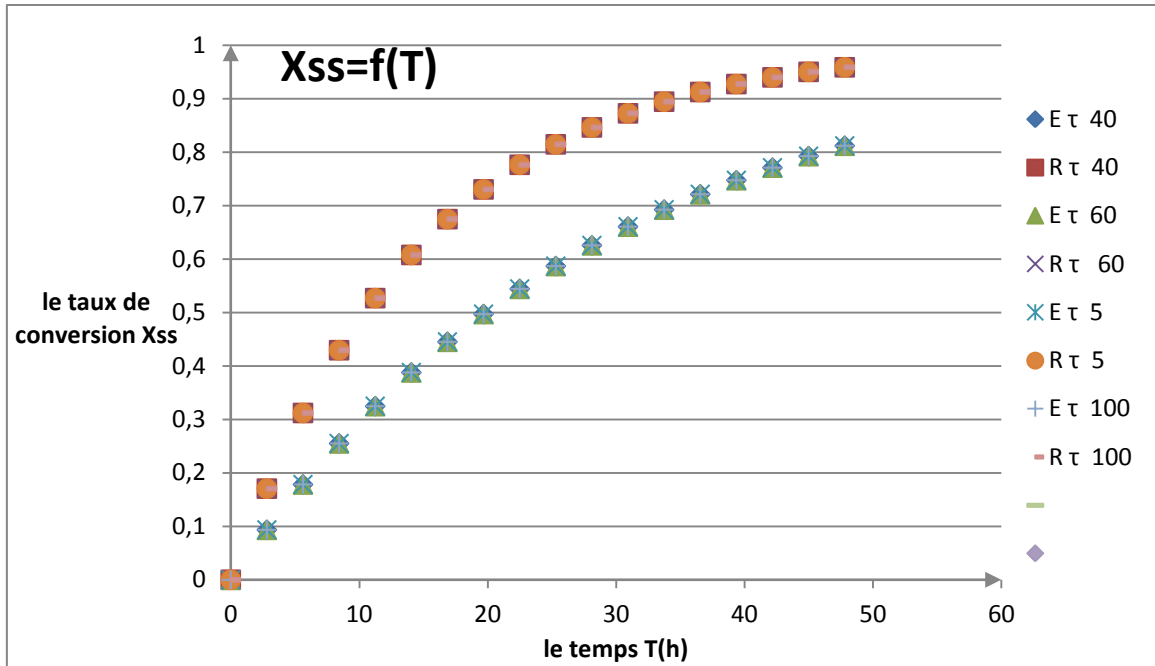
**Figure III.6 :** influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur (méthode de Runge-kutta4)

### Interprétation

Les résultats d'intégration obtenus ne montrent pas d'influence de  $C_{S0}$  sur le taux de conversion à la sortie du réacteur. Le choix de l'intervalle des valeurs de  $C_{S0}$  n'est peut être pas approprié pour voir cette influence.

- **Influence du temps de passage  $\tau$  sur la performance du réacteur**

Plusieurs valeurs sont données à  $\tau$  pour une valeur de  $C_{S0}$  maintenue fixe et égale à  $5 \cdot 10^{-6} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ . Les résultats de l'intégration sont donnés sur la figure (III.7). Les valeurs numériques correspondant sont données en **annexe 8**.



**Figure III.7 :** influence du temps de passage  $\tau$  sur la performance du réacteur ouvert

### Interprétation

Encore une fois les résultats de l'intégration ne montrent pas l'effet que le temps de passage a sur l'avancement de la réaction à la sortie du réacteur. Lorsqu'on choisit un temps de passage de l'ordre d'une dizaine d'heures ou plus, cela signifie que le mélange réactionnel séjourne suffisamment longtemps dans le réacteur. Dans ces conditions, le réacteur est plutôt considéré fermé.

## **Conclusion**

## Conclusion

---

Au terme de notre travail, le premier point à relever est la prise en main de l'outil Matlab. En effet, la résolution numérique des équations de modélisation nous a permis de manipuler cet outil et d'acquérir les bases permettant son utilisation avec succès.

Le deuxième point est relatif à l'écriture des bilans dans les bioréacteurs. Les équations obtenues sont non linéaires en raison de la loi cinétique que nous avons considérée et qui est celle de Michaelis-Menten.

Enfin, l'analyse des résultats de l'intégration permet de conclure que grâce à la modélisation il est tout à fait possible de prévoir la performance d'un réacteur biologique.

## **Références**

## Références

---

### Références :

- [1] Société Chimique de France (SCF) :  
<http://www.societechimiquedefrance.fr/ethanol>
- [2] American Chemical Society (ACS):  
<https://www.acs.org/content/acs/en/molecule-of-the-week>
- [3] Institut national de recherche et de sécurité (INRS), Éthanol, (Fiche toxicologique n°48)
- [4] Institut national de recherche et de sécurité (INRS)
- [5] [www.uarga.org.com](http://www.uarga.org.com)
- [6] Demirbas M.F., 2009. Biorafinerie for biofuel up grading a critical review. *Appl. Energy*, no86, pages 151-161
- [7] Lestari S. et al., 2009. Transforming triglycerides and fatty acids into biofuel. *ChemSusChem*, 2(12), pages 1109-1119.
- [8] Akbi A., 2013. Les implications du développement des biocarburants. Thèse de doctorat, Ecole doctorale 513 Droit Et Sciences Politiques, économiques et de Gestion Nice, paris, 229 pages.
- [9] Lorne D., 2011. Le point sur les biocarburants progression des marchés nationaux et internationaux. IFPEN.
- [10] Akbi A., 2013. Les implications du développement des biocarburants. Thèse de doctorat , Ecole doctorale 513 Droit Et Sciences Politiques, économiques et de Gestion Nice, paris, 229 pages.
- [11] Azmah J., Rahmath A., Siti H., Hartinie M., Jualang A., 2016. a review on a third generation feedstock bioethanol .*Renewable and sustainable energy reviews*, 65(6016).pages 757, 758.
- [12] Didderen I., Destain J., Thonart P., 2008. Procédés de bioconversion en éthanol. In :  
Le bioéthanol de seconde génération. La production d'éthanol à partir de biomasse lignocellulosique. Gembloux, Belgique. *Les Presses Agronomiques de Gembloux*, pages 21-56.
- [13] Touzi A., Azbbès N., 1988. Avant-projet de Réalisation d'Unité de Production de Bioalcool, Rapport Intern, Lab. Biotech, Dans les Wilayas de Biskra, Adrar et Ghardaïa, Algérie. 56pages
- [14] Riess J., 2012. intensification de la brique « fermentation alcoolique » des substrats

## Références

---

- Betteraviers et autre substrats pour la production d'éthanol. Thèse de doctorat, Université de Toulouse. France ,177pages.
- [15] Kara Ali M., 2014. Isolement et caractérisation de souches levurienne des milieux arides productrices de l'éthanol sur différents substrats. Thèse de doctorat, Université Constantine 1, Algérie. 129 pages.
- [16] Boucherba N., 2015. Valorisation des résidus agro-industriels .mémoire magister, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, Algérie, 73pages.
- [17] Hugues P., 2015. Stratégies technologique et réglementaire de déploiement des filières bioénergies françaises. Thèse de doctorat, école nationale supérieure des mines de paris, France ,265 pages.
- [18] Kaidi F., Touzi A., 2001.production du bioéthanol à partir des déchets de dattes.  
*Revue Energie Renouvelable. : Production et Valorisation – Biomasse, pages 75-78*
- [19] FromentinF., Dauriat A., Lucas H., Marchaud D., Sarlos G., 2000.Caractérisation de filière de production de bioéthanol dans le contexte helvétique. *Revue l'office fédérale de l'énergie*, no69809, 120pages.
- [20] Ould el hadj M., Cheick M., hamdi W., Sayah Z., Bouaziz S., 2012. Etude comparative de la production d'éthanol brut à partir de trois variétés de dattes communes (dégela Beida, tacherwit et hamraya) reparties dans les différentes classes de dattes (molle, demi-molle et sèche) de la cuvette de Ouargla (Sahara septentrional est algérien).*revue Algerian journal of arid environment*, Vol. 2, n° 2, pages 78-87.
- [21] Amillastre A., 2012. Amélioration de la robustesse de souches de levures aux stress technologiques par une stratégie de génie microbiologique. Application à la production industrielle de bioéthanol à partir de matières premières agricoles. Thèse de doctorat, Université de Toulouse, France. 294 pages
- [22] Sims, R., Taylor, M., Saddler, J., Mabee, W., 2008. From 1st-to 2nd-generation biofuel technologies: An overview of current industry and RD&D activities, International Energy Agency. Paris, France, pp. 120.
- [23] Hamelinck, C.N., Hooijdonk, G.v., Faaij, A.P., 2005. Ethanol from lignocellulosic biomass: Techno-economic performance in short-, middle-and long-term. *Biomass Bioenergy*. 28(4), 384-410.

## Références

---

- [24] SCHWEICH, Daniel (coord.) *Génie de la réaction chimique*. Paris : Technique & Documentation, 2001, p.39-69
- [25] **Hervé CARFANTAN** <http://webast.ast.obsmp.fr/people/carfan/index.html>
- [26] [http://www.scalab.cnrs.fr/images/Pages\\_perso/lott/Matlab\\_s1.pdf](http://www.scalab.cnrs.fr/images/Pages_perso/lott/Matlab_s1.pdf)
- [27] <httpswww-fourier.ujf-grenoble.fr/~dpiaubio42212015Bio4221RK.pdf>
- [28] Thèse intitulé (Production de bioéthanol à partir de biomasse lignocellulosique en utilisant des enzymes cellulolytiques immobilisées) Pour obtenir le grade de DOCTEUR présenté par PERIYASAMY Karthik le 19 mars 2018 Spécialité Mécanique des fluides, procédés, énergétique
- [29] Mémoire intitulé (Production de bioéthanol à partir des déchets de l'industrie de transformation de pomme de terre) pour obtenir le diplôme de Master en Chimie et Environnement présenté par Fouad BOUNOUA Juillet 2017

## **Liste des annexes**

## Liste des annexes

---

### Annexe 1: le code du programme de Matlab pour le réacteur fermé

```
%%%%%%%%%% Methode d'EULER %%%%%%%%%%%
clear all; close all;
tin = input('donner la valeur initiale du temps tin = ');
tfin = input('donner la valeur finale du temps tfin = ');
n = input('donner le nombre du points n = ');
h = (tfin - tin)/(n-1);
Vmax= input('donner la valeur du vitesse maximale Vmax= ');
Km= input('donner la valeur du canstante de menten Km= ');
c = input('donner la concentration initiale c= ');
x(1) = 0;
F = @(t,x) (1-x)*(Vmax/(c*(1-x)+Km));
t = [tin zeros(1,n)];
x = [x(1) zeros(1,n)];
%%%%%%%%%% boucle t,x
for i = 1:n
    t(i+1) = t(i)+h;
    x(i+1) = x(i) + h/2*F(t(i),x(i));
end
euler = [t' x']
```

```
%%%%%%%%%% Méthode de Runge-kutta d'ordre 4%%%%%%%%%%
y(1) = 0;
y1 = zeros(1,n);
y2 = zeros(1,n);
y3 = zeros(1,n);
y4 = zeros(1,n);
%%%%%%%%%% boucle t,x
for i = 1:n
    t(i+1) = t(i)+h;
    y1(i) = y(i) ; y2(i) = y(i) + h/2*F(t(i),y1(i)) ;
    y3(i) = y(i) + h/2*F(t(i) + h/2, y2(i)) ;
    y4(i) = y(i) + h*F(t(i) + h/2,y3(i)) ;
    y(i+1) =y(i) +h/6*(F(t(i),y1(i)) + 2*F(t(i) + h/2,...
    y2(i)) + 2*F(t(i) + h/2,y3(i)) + F(t(i+1),y4(i))) ;
end
RK4 = [t' y']
figure('color',[1 1 1])
plot(t,x,'*- ',t,y,'o- ');
legend('Euler','Runge-kutta');
```

## Liste des annexes

**Annexe 2:** Influence de  $\tau$  sur la performance du réacteur avec  $C_{s0}$  maintenue fixe par les deux méthodes

T (h)	E $\tau$ 40	R $\tau$ 40	E $\tau$ 60	R $\tau$ 60	E $\tau$ 5	R $\tau$ 5	E $\tau$ 100	R $\tau$ 100
0	0	0	0	0	0	0	0	0
2,8125	0,0934	0,1705	0,0934	0,1705	0,0934	0,1705	0,0934	0,1705
5,625	0,1782	0,312	0,1782	0,312	0,1782	0,312	0,1782	0,312
8,4375	0,255	0,4294	0,255	0,4294	0,255	0,4294	0,255	0,4294
11,25	0,3247	0,5268	0,3247	0,5268	0,3247	0,5268	0,3247	0,5268
14,0625	0,3878	0,6076	0,3878	0,6076	0,3878	0,6076	0,3878	0,6076
16,875	0,4451	0,6746	0,4451	0,6746	0,4451	0,6746	0,4451	0,6746
19,6875	0,497	0,7302	0,497	0,7302	0,497	0,7302	0,497	0,7302
22,5	0,5441	0,7763	0,5441	0,7763	0,5441	0,7763	0,5441	0,7763
25,3125	0,5868	0,8145	0,5868	0,8145	0,5868	0,8145	0,5868	0,8145
28,125	0,6255	0,8462	0,6255	0,8462	0,6255	0,8462	0,6255	0,8462
30,9375	0,6605	0,8725	0,6605	0,8725	0,6605	0,8725	0,6605	0,8725
33,75	0,6923	0,8943	0,6923	0,8943	0,6923	0,8943	0,6923	0,8943
36,5625	0,7211	0,9124	0,7211	0,9124	0,7211	0,9124	0,7211	0,9124
39,375	0,7473	0,9273	0,7473	0,9273	0,7473	0,9273	0,7473	0,9273
42,1875	0,7709	0,9398	0,7709	0,9398	0,7709	0,9398	0,7709	0,9398
45	0,7924	0,9501	0,7924	0,9501	0,7924	0,9501	0,7924	0,9501
47,8125	0,8118	0,9586	0,8118	0,9586	0,8118	0,9586	0,8118	0,9586

**Annexe 3:** ajustement entre model et expérience 1

T(h)	X(exp)	X(euler)	X(rk4)
0	0	0	0
4,1	0,068	0,0917	0,1702
7,73	0,13	0,1765	0,3157
10	0,2	0,2547	0,4389
12,3	0,27	0,3267	0,5421
14,55	0,34	0,3928	0,628
16,82	0,44	0,4532	0,6989
18,64	0,51	0,5083	0,757
20	0,57	0,5585	0,8045
21,82	0,63	0,604	0,843
24,1	0,71	0,6453	0,8742
27,27	0,77	0,6826	0,8993
30	0,84	0,7163	0,9195
32,73	0,91	0,7467	0,9358
36,14	0,96	0,774	0,9488
40	0,986	0,7985	0,9591
42,27	0,993	0,8205	0,9674
46,14	1	0,8402	0,9741

## Liste des annexes

---

### Annexe 4: ajustement entre model et expérience 2

T(h)	X(exp2)	X(euler)	X(rk4)
0	0	0	0
4,32	0,09	0,0966	0,1805
10,08	0,13	0,1866	0,3362
13,68	0,21	0,2701	0,4682
18	0,27	0,3473	0,5783
21,6	0,32	0,4182	0,6687
28,8	0,36	0,483	0,7417
36	0,4	0,542	0,8001
40,32	0,45	0,5954	0,8461
44,64	0,54	0,6437	0,8821
48,96	0,64	0,6869	0,9101
54	0,72	0,7256	0,9316
57,6	0,77	0,7601	0,948
60,12	0,82	0,7907	0,9606
62,64	0,86	0,8177	0,9702
65,52	0,9	0,8415	0,9775
68,04	0,95	0,8624	0,983
71,28	1	0,8807	0,9872

## Liste des annexes

---

### Annexe 5: code du programme du Matlab pour le réacteur ouvert en régime transitoire

```
%%%%%%%%%%%% Methode d'EULER %%%%%%%%%%%%%%
clear all; close all;
tin = input('donner la valeur initiale du temps tin = ');
tfin = input('donner la valeur finale du temps tfin = ');
n = input('donner le nombre du points n = ');
h = (tfin - tin)/(n-1);
Vmax= input('donner la valeur du vitesse maximale Vmax= ');
Km= input('donner la valeur du canstante de menten Km= ');
c = input('donner la concentration initiale c= ');
x(1) = 0;
F = @(t,x) (1-x)*(Vmax/(c*(1-x)+Km));
t = [tin zeros(1,n)];
x = [x(1) zeros(1,n)];
%%%%%%%%% boucle t,x
for i = 1:n
    t(i+1) = t(i)+h;
    x(i+1) = x(i) + h/2*F(t(i),x(i));
end
euler = [t' x']
```

```
%%%%%%%%%%%% Méthode de Runge-kutta d'ordre 4%%%%%%%%%%%%
y(1) = 0;
y1 = zeros(1,n);
y2 = zeros(1,n);
y3 = zeros(1,n);
y4 = zeros(1,n);
%%%%%%%%% boucle t,x
for i = 1:n
    t(i+1) = t(i)+h;
    y1(i) = y(i) ; y2(i) = y(i) + h/2*F(t(i),y1(i)) ;
    y3(i) = y(i) + h/2*F(t(i) + h/2, y2(i)) ;
    y4(i) = y(i) + h*F(t(i) + h/2,y3(i)) ;
    y(i+1) =y(i) +h/6*(F(t(i),y1(i)) + 2*F(t(i) + h/2,...
    y2(i)) + 2*F(t(i) + h/2,y3(i)) + F(t(i+1),y4(i))) ;
end
RK4 = [t' y']
figure('color',[1 1 1])
plot(t,x,'*- ',t,y,'o- ');
legend('Euler', 'Runge-kutta');
```

## Liste des annexes

**Annexe 6:** influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur par la méthode Euler avec  $\tau$  maintenue fixe

T (h)	E 5e-6 mol/l	E 5e-3 mol/l	E 1e-3 mol/l	E 15e-3 mol/l	E 2e-2 mol/l	E 1e-1 mol/l
0	0	0	0	0	0	0
2,8125	0,0937	0,0934	0,0937	0,0928	0,0925	0,0879
5,625	0,1787	0,1782	0,1786	0,1771	0,1766	0,1685
8,4375	0,2557	0,255	0,2556	0,2536	0,2529	0,2424
11,25	0,3255	0,3247	0,3253	0,3231	0,3223	0,31
14,0625	0,3887	0,3878	0,3885	0,3861	0,3852	0,3718
16,875	0,446	0,4451	0,4458	0,4433	0,4424	0,4283
19,6875	0,498	0,497	0,4978	0,4952	0,4943	0,48
22,5	0,545	0,5441	0,5448	0,5423	0,5414	0,5271
25,3125	0,5877	0,5868	0,5875	0,585	0,5841	0,5701
28,125	0,6263	0,6255	0,6262	0,6238	0,6229	0,6093
30,9375	0,6614	0,6605	0,6612	0,6589	0,6581	0,645
33,75	0,6931	0,6923	0,693	0,6908	0,69	0,6775
36,5625	0,7219	0,7211	0,7217	0,7197	0,7189	0,7071
39,375	0,748	0,7473	0,7478	0,7459	0,7452	0,734
42,1875	0,7716	0,7709	0,7715	0,7696	0,769	0,7585
45	0,793	0,7924	0,7929	0,7912	0,7906	0,7808
47,8125	0,8124	0,8118	0,8123	0,8107	0,8102	0,801

**Annexe 7:** influence de  $C_{S0}$  sur la performance du réacteur par la méthode Runge-kutta4 avec  $\tau$  maintenue fixe

T (h)	R 5e-6 mol/l	R 5e-3 mol/l	R 1e-3 mol/l	R 15e-3 mol/l	R 2e-2 mol/l	R 1e-1 mol/l
0	0	0	0	0	0	0
2,8125	0,171	0,1705	0,1709	0,1696	0,1691	0,162
5,625	0,3127	0,312	0,3126	0,3106	0,3099	0,2989
8,4375	0,4302	0,4294	0,43	0,4278	0,427	0,4143
11,25	0,5276	0,5268	0,5275	0,5251	0,5243	0,5113
14,0625	0,6084	0,6076	0,6082	0,606	0,6052	0,5926
16,875	0,6753	0,6746	0,6752	0,6732	0,6724	0,6607
19,6875	0,7308	0,7302	0,7307	0,7289	0,7282	0,7177
22,5	0,7769	0,7763	0,7768	0,7751	0,7745	0,7652
25,3125	0,815	0,8145	0,8149	0,8135	0,813	0,8048
28,125	0,8466	0,8462	0,8466	0,8453	0,8449	0,8378
30,9375	0,8729	0,8725	0,8728	0,8717	0,8714	0,8653
33,75	0,8946	0,8943	0,8945	0,8937	0,8933	0,8882
36,5625	0,9126	0,9124	0,9126	0,9118	0,9115	0,9072
39,375	0,9276	0,9273	0,9275	0,9269	0,9267	0,923
42,1875	0,9399	0,9398	0,9399	0,9394	0,9392	0,9361
45	0,9502	0,9501	0,9502	0,9497	0,9496	0,947
47,8125	0,9587	0,9586	0,9587	0,9583	0,9582	0,956

## Liste des annexes

### Annexe 8: influence de $C_{S0}$ sur la performance du réacteur fermé par les deux méthodes

T(h)	E C 5e-7 mol/l	R C 5e-7 mol/l	E C 5e-3 mol/l	R C 5e-3 mol/l	E C 2e-2 mol/l	R C 2e-2 mol/l	E 1e-1 mol/l	R 1e-1 mol/l
0	0	0	0	0	0	0	0	0
2,8125	0,0937	0,171	0,0934	0,1705	0,0925	0,1691	0,0879	0,162
5,625	0,1787	0,3127	0,1782	0,312	0,1766	0,3099	0,1685	0,2989
8,4375	0,2557	0,4302	0,255	0,4294	0,2529	0,427	0,2424	0,4143
11,25	0,3255	0,5276	0,3247	0,5268	0,3223	0,5243	0,31	0,5113
14,0625	0,3887	0,6084	0,3878	0,6076	0,3852	0,6052	0,3718	0,5926
16,875	0,446	0,6753	0,4451	0,6746	0,4424	0,6724	0,4283	0,6607
19,6875	0,498	0,7308	0,497	0,7302	0,4943	0,7282	0,48	0,7177
22,5	0,545	0,7769	0,5441	0,7763	0,5414	0,7745	0,5271	0,7652
25,3125	0,5877	0,815	0,5868	0,8145	0,5841	0,813	0,5701	0,8048
28,125	0,6263	0,8466	0,6255	0,8462	0,6229	0,8449	0,6093	0,8378
30,9375	0,6614	0,8729	0,6605	0,8725	0,6581	0,8714	0,645	0,8653
33,75	0,6931	0,8946	0,6923	0,8943	0,69	0,8933	0,6775	0,8882
36,5625	0,7219	0,9126	0,7211	0,9124	0,7189	0,9115	0,7071	0,9072
39,375	0,748	0,9276	0,7473	0,9273	0,7452	0,9267	0,734	0,923
42,1875	0,7716	0,9399	0,7709	0,9398	0,769	0,9392	0,7585	0,9361
45	0,793	0,9502	0,7924	0,9501	0,7906	0,9496	0,7808	0,947
47,8125	0,8124	0,9587	0,8118	0,9586	0,8102	0,9582	0,801	0,956