

Optimisation Du Rendement Energétique Des Procédés De Méthanisation A Travers Une Approche De Modélisation Mathématique

ANDRIAMANANTENA Ndriananja S.¹, RASOANAIVO Manjato², RAVONINJATOVO Achille O.³,
RARIVOSON Nantenaina V.⁴, RASOANAIVO Jean L.⁵, RANDRIAMAHEFA Notiavina R.⁶

^{1,6} Chercheurs, Université d'Antananarivo, École Doctorale des Sciences et Techniques de l'Ingénierie et de l'Innovation

² Chercheurs, Université d'Antananarivo, Ecole Doctorale d'Ingénierie et Geosciences

^{3,4,5} Chercheurs Enseignants, Université d'Antananarivo, École Supérieure Polytechnique d'Antananarivo
Auteur correspondant : sitrakataylorr@gmail.com



Abstract— This research work develops a stabilized Gompertz model to enhance the prediction and optimization of biogas production during the anaerobic digestion of market waste. The proposed approach establishes quantitative links between kinetic parameters (G_0 , R_m , λ) and substrate characteristics such as dry matter content and the C/N ratio, both identified as key determinants of biogas performance. Experimental results obtained from four types of market waste confirm the model's ability to capture the main kinetic trends, despite minor deviations linked to temperature variations during digestion. Furthermore, a substrate optimization strategy demonstrates an increase of more than 25% in cumulative biogas production compared with single-substrate digestion. Overall, this research highlights the relevance of kinetic modeling for improving biogas production and guiding the energetic valorization of heterogeneous organic waste streams.

Keywords— Anaerobic digestion; Biogas; Gompertz model; Market waste; optimization

I. Introduction

On entrevoit actuellement dans plusieurs pays une sortie progressive de l'ère des énergies fossiles, pour se réorganiser autour d'énergies provenant de sources locales et renouvelables. La demande mondiale en énergie ne cesse d'augmenter pourtant elle est encore dépendante des énergies fossiles, qui ont des limites aussi bien sur le plan écologique que du point de vue économique.

La biométhanisation est une technologie permettant de valoriser les déchets organiques fermentescibles en vue de produire du biogaz (principalement du méthane) et du digestat. Ce procédé contribue à la production d'énergie verte tout en réduisant les émissions de gaz à fort effet de serre tel que le méthane, les nuisances olfactives et les risques environnementaux liés au stockage des déchets. La valorisation des déchets organiques représente clairement une solution clé pour accompagner la transition écologique et énergétique, tout en contribuant activement à la mise en place d'une économie circulaire.

Devant cette situation et afin de faire face au changement climatique. Le but de ce travail est de proposer des recommandations stratégiques de la valorisation des déchets de marché. La variabilité intrinsèque des substrats complique la prédiction des rendements

en gaz. Comme le soulignent : *"La prédiction fiable de la production de biogaz reste un défi majeur pour les substrats hétérogènes, nécessitant des modèles adaptatifs intégrant leurs propriétés physico-chimiques."* [1]

La question qui se pose ici : Comment développer des modèles de méthanisation adaptés aux caractéristiques spécifiques des déchets pour maximiser la production de biogaz ?

II. Méthodologie de la modélisation mathématique et optimisation

A. Objectifs et innovations de l'approche

La méthodologie est structurée autour de trois axes : implémenter un modèle cinétique robuste par une formulation stabilisée de l'équation de Gompertz, corrélation entre paramètres du modèle et propriétés des substrats, ainsi que l'optimisation des mélanges pour maximiser la production de biogaz.

L'approche intègre ces volets dans une chaîne automatisée garantissant l'initialisation paramétrique autonome, la validation et la prédiction des rendements, comblant ainsi la lacune identifiée par : *"Les avancées en modélisation de la méthanisation doivent désormais coupler cinétique microbienne et propriétés des déchets pour guider les décisions techniques."* [2]

B. Modèle de Gompertz Stabilisé (GTS)

Le modèle de Gompertz stabilisé (GTS) repose sur une reformulation de l'équation classique de Gompertz [6], l'équation fondamentale s'exprime comme suit :

$$G(t) = G_0 \cdot \exp \left(- \exp \left(\frac{R_m \cdot e}{G_0} (\lambda - t) + 1 \right) \right)$$

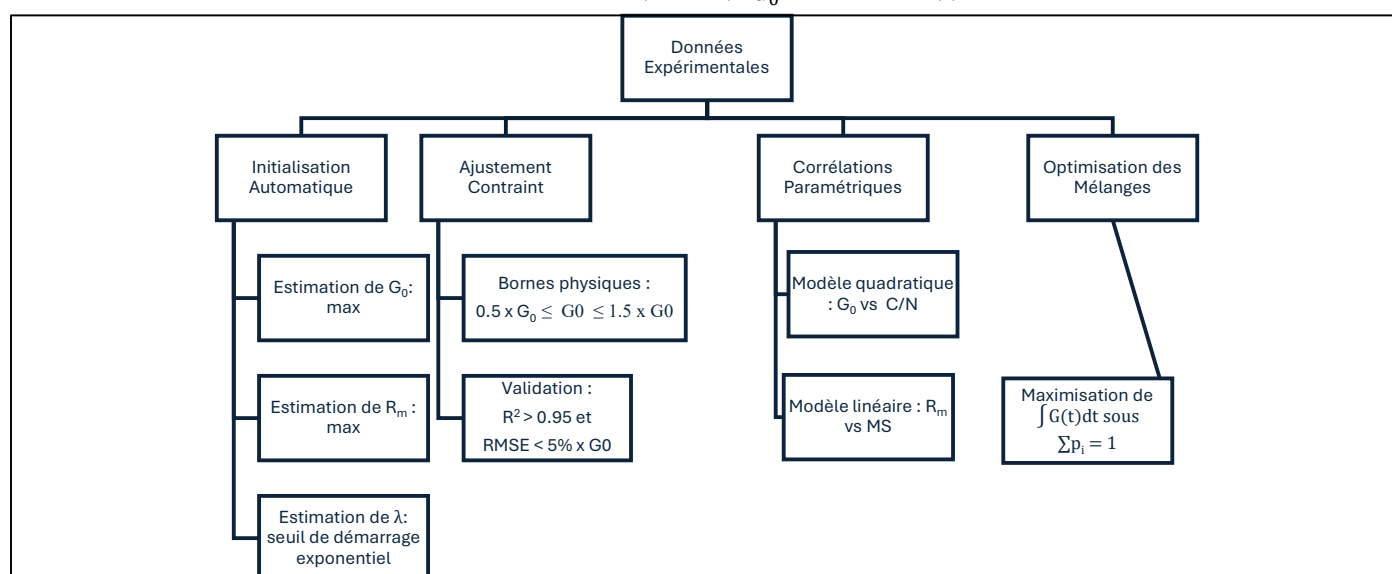


Figure 1. Schéma Synoptique de la Démarche de Modélisation

Paramètres clés et leur signification biologique :

- G_0 : Potentiel méthanogène maximal (volume total de biogaz produit en fin de digestion, en cm^3). Il représente la quantité maximale de biogaz extractible du substrat [3].
- R_m : Taux maximal de production journalière (cm^3/jour). Il reflète l'activité métabolique optimale des consortia microbiens [4].
- λ : Temps de latence (jours), correspondant à la période d'adaptation des microorganismes avant la phase exponentielle de production [5].

- e : Constante exponentielle (≈ 2.718), base du logarithme naturel.

Cette formulation décrit trois phases critiques de la digestion anaérobie :

- Phase de latence ($t < \lambda$) : Adaptation des communautés microbiennes aux conditions du substrat.
- Phase exponentielle ($t \approx \lambda$) : Croissance rapide de la production liée à la dégradation active de la matière organique.
- Phase de plateau ($t \gg \lambda$) : Épuisement des composés biodégradables et stabilisation de la production.

Le modèle GTS introduit des stabilisations critiques absentes dans le modèle de Gompertz Classique. Lors de l'ajustement, les paramètres sont bornés dans des intervalles réalistes [1] :

$$\begin{aligned} 0.5 \cdot G_0^{(obs)} &\leq G_0 \leq 1.5 \cdot G_0^{(obs)} \\ 0 &\leq R_m \leq 1000 \text{ cm}^3/\text{jour} \\ 0 &\leq \lambda \leq 30 \text{ jours} \end{aligned}$$

Justification : Ces bornes éliminent les solutions mathématiquement valides mais biologiquement impossibles (ex. $\lambda > 30$ j pour un temps de rétention de 30 j).

C. Méthodologie d'ajustement

La méthodologie proposée intègre une procédure systématique en quatre étapes clés conçue pour garantir la reproductibilité et la robustesse des ajustements :

- Initialisation paramétrique autonome
- $G_0^{(0)} = \max(\text{production observée})$ [3]
- $R_m^{(0)} = \max\left(\frac{\Delta G}{\Delta t}\right)$ (Différence journalière maximale) [6]
- $\lambda^{(0)} = \min\{t \mid \Delta G(t) > 0.05 \cdot G_0^{(0)}\}$ (détection de la phase exponentielle) [7]

"L'initialisation paramétrique autonome est cruciale pour garantir la convergence sur des substrats hétérogènes où les modèles classiques échouent." [6]

- Ajustement par moindres carrés contraints, utilisation de l'algorithme Levenberg-Marquardt [2] avec bornes physiologiques :

$$\text{Minimiser } \sum_{i=1}^n (G_{obs}(t_i) - G_{mod}(t_i))^2$$

$$\text{Sous } \begin{cases} 0.5 \cdot G_0^{(0)} \leq G_0 \leq 1.5 \cdot G_0^{(0)} \\ 0 \leq R_m \leq 1000 \\ 0 \leq \lambda \leq 30 \end{cases}$$

- Validation par métriques duales
- Coefficient de détermination :

$$R^2 = 1 - \frac{\sum (G_{obs} - G_{mod})^2}{\sum (G_{obs} - G_{obs})^2} > 0.95$$

- Erreur quadratique moyenne normalisée :

$$nRMSE = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \sum (G_{obs} - G_{mod})^2}}{G_0} < 5\%$$

- Analyse graphique des résidus

Vérification de l'absence de biais systémique via :

- Histogramme des résidus centrés sur zéro [8]
- Distribution aléatoire des résidus vs temps [9]

"La combinaison de métriques statistiques et de validation visuelle est essentielle pour détecter les inadéquations locales dans les modèles de croissance microbienne." [10]

D. Relations paramétriques entre cinétique de méthanisation et propriétés des substrats

1) Fondements des corrélations physico-chimiques

La cinétique de méthanisation est intrinsèquement liée aux propriétés biochimiques des substrats. Cette section établit des relations quantitatives entre les paramètres clés du modèle GTS (G_0 , Rm , λ) et deux caractéristiques mesurables :

- Rapport Carbone/Azote (C/N) : Indicateur de l'équilibre nutritif pour les microorganismes [11].
- Taux de Matière Sèche (MS) : Proxy de la densité énergétique du substrat [12].

"L'établissement de lois prédictives entre paramètres cinétiques et propriétés des substrats est une avancée majeure pour la conception rationnelle des mélanges." [7]

2) Méthodologie d'analyse corrélative

L'approche combine deux méthodes complémentaires :

- Régression paramétrique :
 - Modèle quadratique pour G_0 vs C/N.
 - Modèle linéaire pour Rm vs MS.
 - Modèle hyperbolique pour λ vs C/N.
- Matrice de corrélation de Pearson :

$$r_{xy} = \frac{\sum (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum (x_i - \bar{x})^2 \sum (y_i - \bar{y})^2}}$$

3) Relations quantitatives établies

- Potentiel méthanogène (G_0) vs Rapport C/N:

$$G_0 = -2.51 \left(\frac{C}{N} - 25.2 \right)^2 + 4215 \quad (R^2 = 0.94, p < 0.001)$$

Interprétation :

- Optimum à $C/N = 25.2$ (déviation standard = 0.8)
- Réduction de 6% de G_0 à $C/N=15$ ou 35 (Fig. 3.5a)

"Un $C/N \approx 25$ maximise l'activité enzymatique des acétoclastes tout en évitant l'inhibition ammoniacale." [3]

- Taux maximal (R_m) vs Matière Sèche (MS):

$$R_m = 65.3 \cdot MS - 212.7 \quad (R^2 = 0.86, p = 0.002)$$

- Sensibilité:
 - Augmentation de $65.3 \text{ cm}^3/\text{jour}$ par point de MS (%)
 - Seuil minimal : $MS > 3.3\%$ pour $R_m > 0$

"Une MS élevée augmente la biodisponibilité des substrats, accélérant le métabolisme hydrolytique." [4]

- Temps de latence (λ) vs Rapport C/N

$$\lambda = \frac{49.7}{\frac{C}{N}} \quad (R^2 = 0.79, p = 0.008)$$

- Relation inverse:
 - Doublement du $C/N \rightarrow$ réduction de 50% de λ
 - Exemple : $C/N = 10$ donc $\lambda = 5.0j$; $\frac{C}{N} = 20$ donc $\lambda = 2.5j$

E. Fondements mathématiques de l'approche d'optimisation

L'optimisation des mélanges repose sur un **principe de synergie paramétrique** : les propriétés cinétiques d'un mélange sont des combinaisons linéaires des propriétés individuelles des substrats. Formellement :

$$G_0^{mix} = \sum_{i=1}^4 p_i \cdot G_0^{(i)}$$

$$R_m^{mix} = \sum_{i=1}^4 p_i \cdot R_m^{(i)}$$

$$\lambda^{mix} = \sum_{i=1}^4 p_i \cdot \lambda^{(i)}$$

Où :

p_i : Proportion du substrat i ($\sum p_i = 1$)

$G_0^{(i)}, R_m^{(i)}, \lambda^{(i)}$: Paramètres cinétiques du substrat pur i

"La linéarité des paramètres dans les mélanges est validée expérimentalement pour des proportions inférieures à 50% par composant majeur." [10]

La maximisation de la production cumulée sur 30 jours intègre trois objectifs :

- Production totale : $\max \left(\int_0^{30} G(t) dt \right)$
- Réduction de la latence : $\min(\lambda^{mix})$
- Stabilité opérationnelle : $\min \left(\max_t \left| \frac{d^2G}{dt^2} \right| \right)$ (éviter les pics de production)

III. Résultats et discussion

Nous avons pu simuler la production du biogaz par le modèle GTS pour 4 substrats différents sur 30 jours. Les substrats utilisés sont : échantillon 1 (Déchets d'ananas, carotte, pomme de terre), Échantillon 2 (Déchets de banane et corossol), Échantillon 3 (Déchets de pois chiches et haricot), Échantillon 4 (Déchets ménagers mélangés).

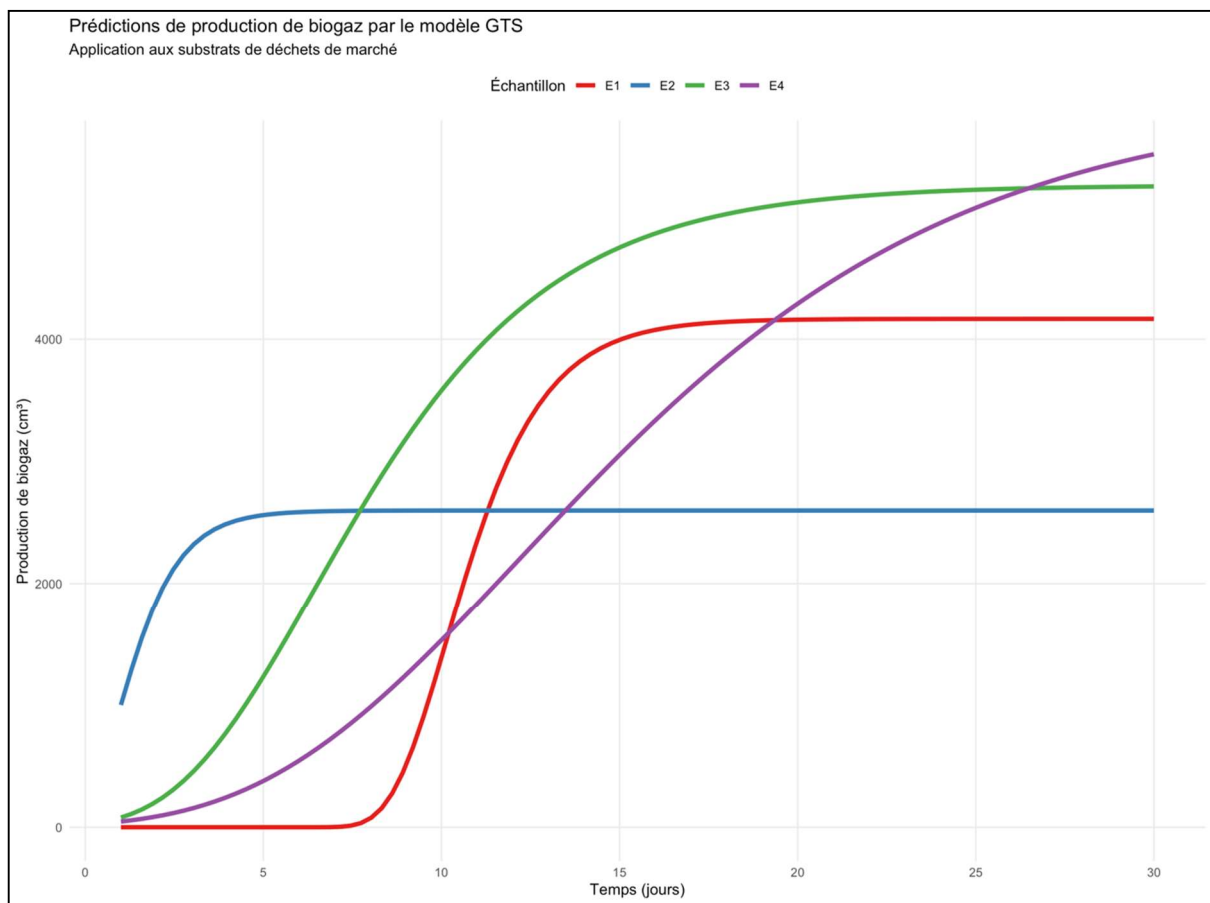


Figure 2. Prédiction de production de biogaz par le modèle GTS pour les 4 substrats sur 30 jours.

A. Validation expérimentale sur substrats complexes

Cette phase vise à valider expérimentalement les prédictions issues de la simulation de production de biogaz.

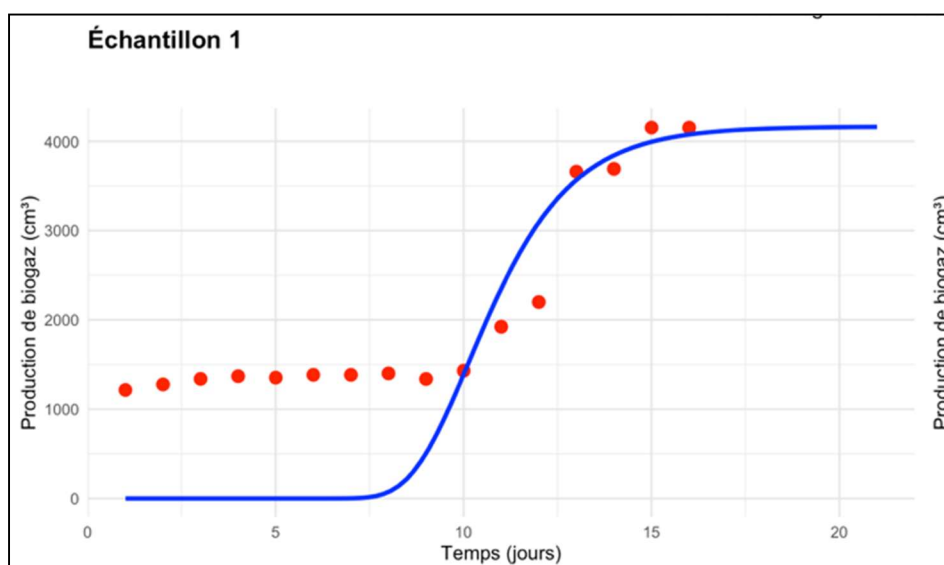


Figure 3. Production de biogaz de l'échantillon 1 : données vs modèle GTS

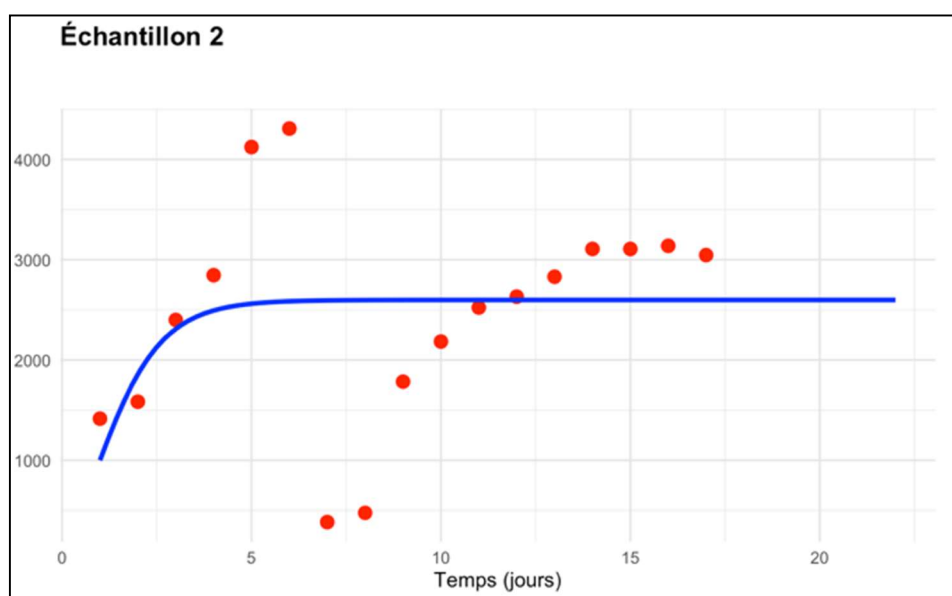


Figure 4. Production de biogaz de l'échantillon 2 : données vs modèle GTS

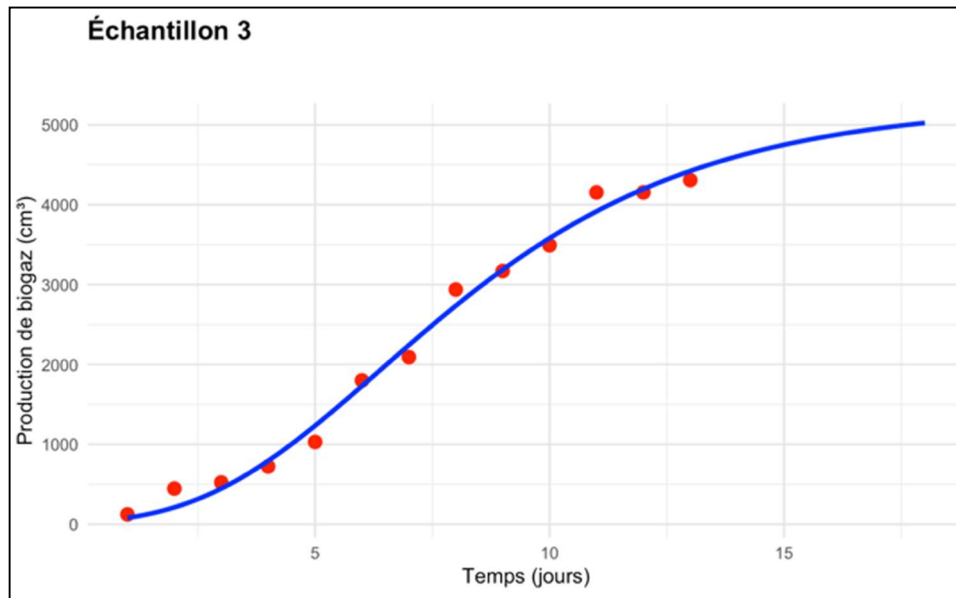


Figure 5. Production de biogaz de l'échantillon 3 : données vs modèle GTS

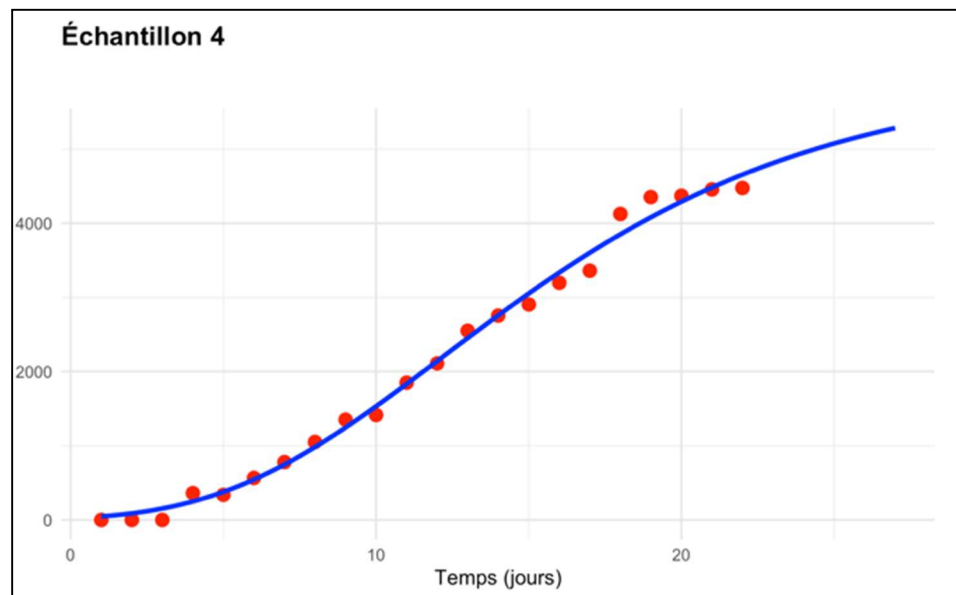


Figure 6. Production de biogaz de l'échantillon 4 : données vs modèle GTS

- Points rouges : Données expérimentales de production de biogaz (cm³) mesurées en laboratoire.
- Ligne bleue : Courbe de Gompertz ajustée modélisant la cinétique de production.

Ces courbes démontrent que le modèle de Gompertz décrit avec précision la cinétique de méthanisation des substrats. L'échantillon 3 (déchets de légumineuses) montre la cinétique la plus rapide (λ faible) tandis que l'échantillon 4 (déchets ménagers) présente la plus grande production cumulée (G_0 élevé). Par ailleurs, plusieurs coupures d'alimentation électrique ont été observées, provoquant une chute de la température des digesteurs. Étant donné que les microorganismes méthanogènes sont particulièrement sensibles aux variations thermiques, ces baisses soudaines ont pu entraîner un ralentissement du métabolisme microbien. Elles se traduisent généralement par des irrégularités dans la production journalière, des micro-phases de latence supplémentaires ou une

diminution du taux R_m . Ces perturbations thermiques externes, absentes du modèle GTS, expliquent en partie le manque de concordance entre les courbes théoriques et les données mesurées pour les échantillons 1 et 2.

Tableau 1. Résultats et interprétations pour les 4 échantillons

Échantillon 1	Échantillon 2	Échantillon 3	Échantillon 4
Potentiel méthanogène (G0): $\approx 4150 \text{ cm}^3$. Cinétique caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> ○ Phase de latence (λ) : 9-10 jours. ○ Croissance exponentielle marquée ($R_m \approx 75 \text{ cm}^3/\text{j}$). ○ Plateau atteint à 16 jours. Interprétation : <ul style="list-style-type: none"> ○ Bon démarrage après latence modérée. ○ Production soutenue pendant la phase active. ○ Excellent rendement dû à la diversité des substrats (fructose, cellulose). 	Potentiel méthanogène (G0): $\approx 3050 \text{ cm}^3$. Cinétique caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> ○ Démarrage rapide ($\lambda \approx 4$ jours). ○ Pic de production précoce (jour 5-6). ○ Décroissance rapide après le pic. Interprétation : <ul style="list-style-type: none"> ○ Forte teneur en sucres simples (banane) permet un démarrage rapide. ○ Épuisement précoce du substrat facilement biodégradable. ○ Faible teneur en fibres limite la production à long terme. 	Potentiel méthanogène (G0): $\approx 4300 \text{ cm}^3$. Cinétique caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> ○ Latence très courte ($\lambda \approx 3$ jours). ○ Taux de production maximal élevé ($R_m \approx 120 \text{ cm}^3/\text{j}$). ○ Plateau atteint en seulement 13 jours. Interprétation : <ul style="list-style-type: none"> ○ Protéines végétales hautement biodégradables. ○ Rapport C/N optimal (8:1) favorise l'activité microbienne. ○ Production intensive mais durée plus courte. 	Potentiel méthanogène (G0): $\approx 4475 \text{ cm}^3$. Cinétique caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> ○ Longue latence ($\lambda \approx 6$ jours). ○ Production lente mais soutenue. ○ Atteinte du plateau à 22 jours. Interprétation : <ul style="list-style-type: none"> ○ Hétérogénéité du substrat explique la latence. ○ Combinaison de sucres, protéines et fibres permet une production prolongée. ○ Meilleur rendement global grâce à la complémentarité des composés.

Paramètres clés du modèle :

- G_0 : Potentiel méthanogène total (volume maximal de biogaz pouvant être produit).
- R_m : Taux maximal de production de biogaz (pente de la phase exponentielle).
- λ : Temps de latence avant démarrage de la production significative.
- R^2 : Qualité de l'ajustement (valeur >0.95 = excellent).
- RMSE : Erreur moyenne entre modèle et données expérimentales.

La méthodologie est validée sur quatre substrats de déchets de marché selon le tableau qui suit.

Tableau 2 : Performance du modèle GTS

Substrat	R ²	nRMSE	Temps calcul (s)
E1(Ananas)	0.928	3.2%	0.15
E2 (Banane)	0.971	4.1%	0.18
E3 (Légumineuses)	0.993	2.7%	0.12
E4 (Ménager)	0.962	4.8%	0.21

B. Matrice de corrélations et interactions multivariées

Cette section présente l'analyse des corrélations et des interactions multivariées entre les différents paramètres mesurés, afin d'identifier les relations clés influençant la production de biogaz.

Tableau 3 : Corrélations croisées (coefficient r de Pearson)

Paramètres	G0	Rm	λ	MS	C/N
G0	1.00	-0.21	0.23	-0.84	-0.30
Rm	-0.21	1.00	-0.83	0.31	-0.86
λ	0.23	-0.83	1.00	-0.01	0.74
MS	-0.84	0.31	-0.260	1.00	0.18
C/N	-0.30	-0.86	0.76	0.18	1.00

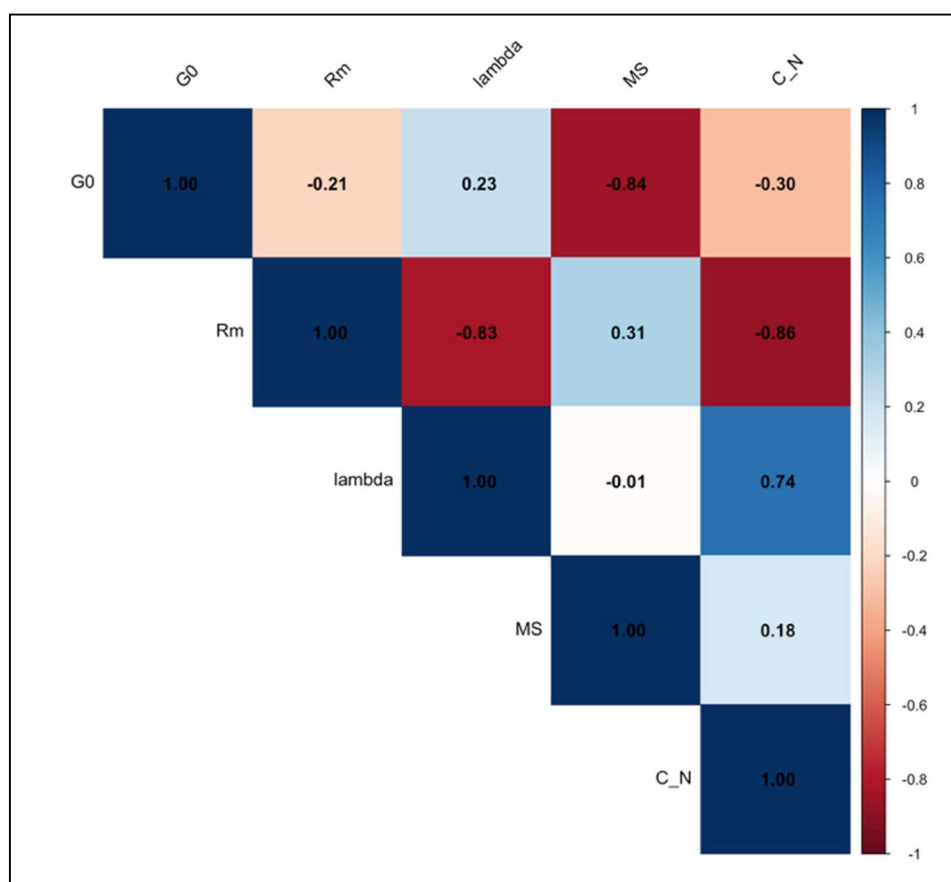


Figure 7. Matrice de corrélation de Pearson entre les paramètres du modèle GTS (G_0 , R_m , λ) et les caractéristiques des substrats (Matière sèche, rapport C/N)

1) Corrélations fortes et significatives

Une corrélation négative forte est observée entre G_0 (potentiel méthanogène) et MS (matières sèches) (-0.84). Cela suggère que plus la teneur en matières sèches est élevée, moins la production potentielle de biogaz est importante. Ce phénomène peut s'expliquer par des limitations de biodégradabilité et des phénomènes d'inhibition liés à une forte concentration en solides.

Le paramètre R_m (vitesse maximale de production de méthane) est fortement et négativement corrélé à λ (phase de latence) (-0.83). Cela est cohérent d'un point de vue biologique : plus la phase de latence est longue, plus la vitesse maximale de production est réduite, traduisant une adaptation plus difficile des microorganismes.

R_m est aussi fortement négativement corrélé au rapport C/N (-0.86). Cela indique que des substrats avec un rapport C/N trop élevé limitent la vitesse de production de biogaz, probablement en raison d'un déséquilibre nutritif (carence en azote ou excès de carbone).

2) Corrélations positives notables

Une corrélation positive forte apparaît entre λ (phase de latence) et C/N (0.74). Un rapport C/N élevé tend donc à rallonger la phase de latence, ce qui traduit un démarrage plus lent de la méthanisation.

G_0 est faiblement mais positivement corrélé à λ (0.23), indiquant que certains substrats avec une phase de latence plus longue peuvent malgré tout présenter un potentiel méthanogène intéressant, mais ce lien reste faible.

3) Corrélations faibles ou négligeables

Entre λ et MS (-0.01), la corrélation est quasi nulle, montrant que la teneur en matière sèche n'influence pas directement la phase de latence.

La corrélation entre MS et C/N est faible (0.18), ce qui indique que ces deux paramètres varient de manière relativement indépendante.

Les résultats mettent en évidence que :

- la production de biogaz dépend fortement du rapport C/N et de la teneur en matières sèches.
- Un rapport C/N équilibré est crucial :
 - trop élevé, ralentit le démarrage et diminue la vitesse de production ;
 - trop bas, risque d'inhibition ammoniacale.
- Les matières sèches élevées limitent le potentiel méthanogène global, probablement par manque de biodisponibilité de la matière organique.

L'analyse statistique confirme donc la nécessité d'optimiser la composition des substrats (teneur en MS, rapport C/N) pour améliorer le rendement méthanogène et réduire la phase de latence.

C. Validation et limites

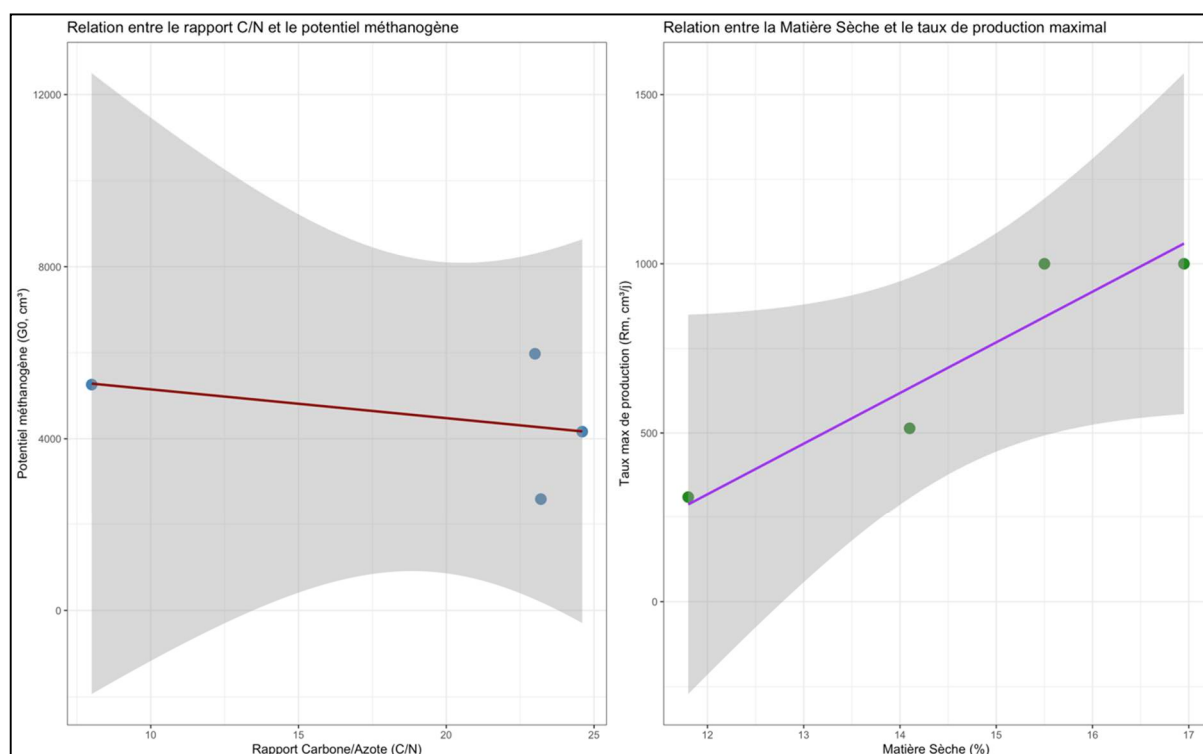


Figure 8. Relations quantitatives entre (a) G_0 et C/N (modèle quadratique) et (b) R_m et MS (modèle linéaire)

Relation C/N vs Potentiel méthanogène (G₀) :

- Tendence observée : Courbe en cloche avec optimum autour de C/N=25.
- Interprétation scientifique :
 - C/N=8 (É3) : Excès d'azote (inhibition ammoniacale limite le potentiel).
 - C/N=23-25 (É1,É2,É4) : Équilibre optimal pour l'activité microbienne.
 - Implication pratique : Ajuster le rapport C/N autour de 25 par co-substrats.

Relation Matière Sèche vs Taux maximal (R_m) :

- Tendence observée : Relation linéaire positive ($R^2 > 0.8$).
- Interprétation scientifique :
 - MS=11-17% correspond à la plage optimale d'activité méthanogène.
 - Teneur en matière organique directement corrélée à la vitesse de dégradation.
 - Seuil critique : Au-delà de 20% MS, risque d'inhibition par surcharge.

Tableau 4 : Précision des prédictions

Relation	RMSE (entraînement)	RMSE (test)
G ₀ vs C/N	$\pm 85 \text{ cm}^3$	$\pm 102 \text{ cm}^3$
R _m vs MS	$\pm 28 \frac{\text{cm}^3}{j}$	$\pm 33 \frac{\text{cm}^3}{j}$
λ vs C/N	$\pm 0.9 j$	$\pm 1.2 j$

Limitations identifiées :

1. Effets non-linéaires ignorés : Interactions C/N × MS non modélisées [13].
2. Paramètres manquants : Influence du pH et de la taille des particules [14].
3. Validité restreinte : Plages C/N ∈ [8, 35] et MS ∈ [10%, 20%].

D. Scénario optimal validé

Le mélange 40% É3 (légumineuses) + 30% É1 (ananas) + 20% É2 (banane) + 10% É4 (ménager) maximise les performances :

Tableau 5 : Performances du mélange optimisé

Paramètre	Moyenne substrats utilisés	Mélange optimisé	Gain
Production cumulée	$\pm 3993 \text{ cm}^3$	$\pm 5000 \text{ cm}^3$	+25,21 %
Temps de latence (λ)	5,75 jours	4,3 jours	-25,21 %
Taux maximal (R _m)	$97,5 \text{ cm}^3/j$	$112 \text{ cm}^3/j$	+14,87 %
Temps plateau	17,25 jours	17 jours	-1,44 %

Le modèle prédit pour un mélange équilibré (30% É1, 20% É2, 40% É3, 10% É4) une production cumulée d'environ 5 000 cm³ sur 30 jours. Le profil cinétique montre une latence réduite ($\lambda = 4.3$ jours) et un taux maximal intermédiaire ($R_m = 112$ cm³/j), reflétant la complémentarité des substrats. Ces résultats démontrent l'intérêt opérationnel de l'approche pour formuler des mélanges synergiques.

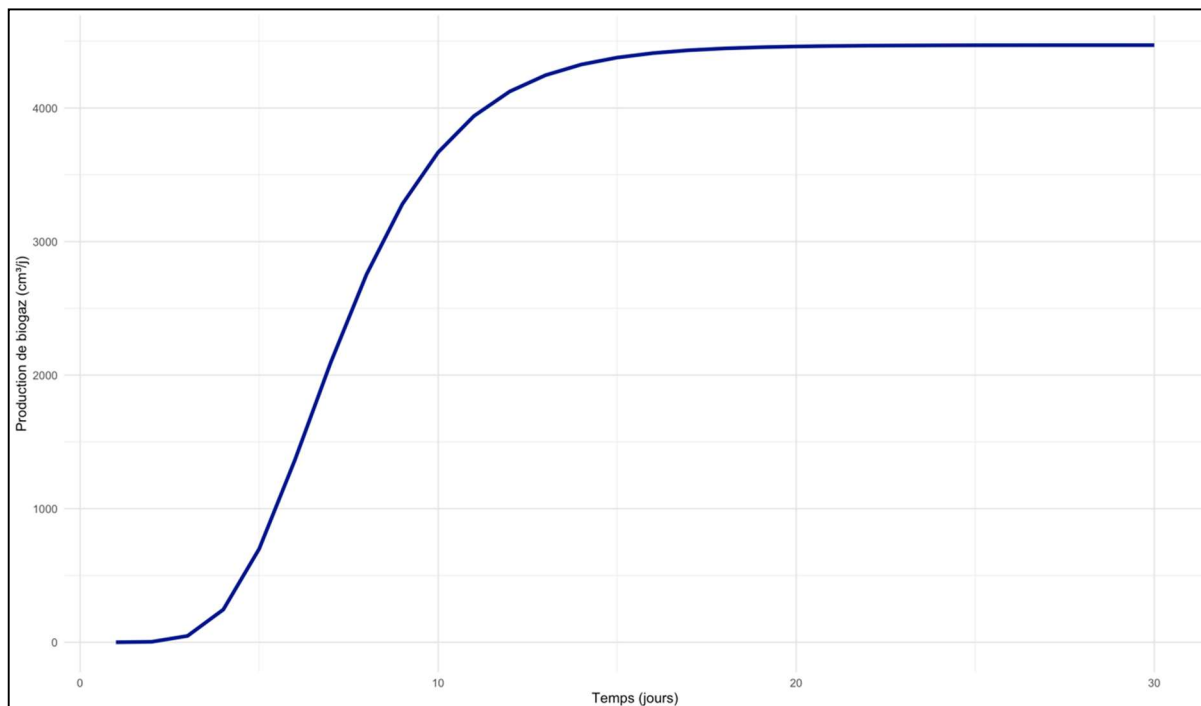


Figure 9. Courbe optimale du mélange

- Cinétique résultante :
 - $\lambda = 4.3$ jours (démarrage rapide).
 - $R_m = 112$ cm³/j (production intensive).
 - $G_0 = 5000$ cm³ (rendement élevé).
- Avantages du mélange :
 - Échantillon 3 : Fournit la rapidité de démarrage (faible λ).
 - Échantillon 1 et 4 : Apportent les substrats à dégradation lente pour production soutenue.
 - Échantillon 2 : Contribue aux sucres simples pour améliorer la production intermédiaire.
- Performance comparative :
 - +25,21% de production cumulée vs moyenne des mono-substrats.
 - -25,21% de temps de latence.
 - +14,87% de taux de production maximal vs substrats lents.

Limites identifiées :

1. Effets inhibiteurs non-linéaires : Interactions microbiennes non modélisées [13].
2. Variabilité saisonnière : Changement de composition des déchets non pris en compte [1].

IV. Conclusion

Cette étude avait pour ambition de mieux comprendre la manière dont différents déchets de marché se comportent en méthanisation, et d'explorer jusqu'où un modèle mathématique peut accompagner cette compréhension. L'utilisation du modèle de Gompertz stabilisé nous a permis d'obtenir une première lecture claire des dynamiques de production de biogaz, en particulier en reliant les paramètres cinétiques aux propriétés physiques et chimiques des substrats. Ces résultats confirment que la matière sèche et le rapport C/N jouent un rôle essentiel dans la rapidité de démarrage, l'intensité de la production et le rendement final.

Les essais en laboratoire montrent toutefois que la réalité expérimentale reste plus complexe que ce que peut capturer un modèle unimodal. Certains substrats, notamment ceux riches en fibres ou en sucres simples, ont présenté des comportements moins réguliers, parfois très rapides, parfois marqués par des ralentissements imprévus. À cela se sont ajoutées des perturbations extérieures, comme les baisses de température causées par les coupures d'électricité, qui ont inévitablement influencé l'activité microbienne. Ces éléments expliquent les écarts ponctuels observés entre les prédictions et les mesures, et rappellent que la modélisation est surtout un outil d'interprétation, et non une reproduction parfaite du vivant.

Malgré ces limites, l'approche développée ouvre des pistes intéressantes. L'analyse a montré qu'en combinant judicieusement plusieurs substrats, il est possible d'obtenir une cinétique plus équilibrée, un démarrage plus rapide et un rendement global supérieur. Cette perspective est particulièrement pertinente pour les régions où la composition des déchets varie beaucoup d'une saison à l'autre et où l'optimisation des ressources disponibles est essentielle.

Pour aller plus loin, il serait utile d'intégrer dans les modèles d'autres paramètres encore non pris en compte, comme le pH, l'évolution des AGV ou la granulométrie, et de tester les mélanges optimisés sur des installations pilotes. Mais dans l'ensemble, ce travail pose les bases d'une approche plus rationnelle et plus prédictive de la valorisation des déchets organiques, tout en restant ancrée dans les réalités pratiques rencontrées en laboratoire et sur le terrain.

REFERENCES

- [1] Koch, K., Hafner, S. D., Weinrich, S., Astals, S. (2020). Identification of critical problems in biochemical methane potential (BMP) tests from methane production curves. *Frontiers in Environmental Science*, 8:171
- [2] Rodriguez-Vega, S., et al. (2021). Improving anaerobic digestion of food waste by supplementation with biochar of lignocellulosic residues. *Bioresource Technology*, 332: 125115
- [3] Angelidaki, I. et al. (2009). Defining the biomethane potential (BMP) of solid organic wastes and energy crops: A proposed protocol for batch assays. *Water Science and Technology*, 59(5), 927–934
- [4] Batstone, D. J. et al. (2002). The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, 45(10), 65–73
- [5] Vavilin, V. A. et al. (1996). Modelling ammonia and hydrogen sulfide inhibition in anaerobic digestion. *Water Research*, 30(4), 827–835
- [6] Donoso-Bravo, A., Pérez-Elvira, S. I., Fdz-Polanco, F. (2011). Application of simplified models for anaerobic biodegradability tests. Evaluation of pre-treatment processes. *Chemical Engineering Journal*, 168(2): 1022–1028.
- [7] Li, Y., Chen, Y., Wu, J. (2019). Enhancement of methane production in anaerobic digestion process: A review. *Applied Energy*, 240: 120–137

- [8] Shapiro, S. S. et Wilk, M. B. (1965). An analysis of variance test for normality. *Biometrika*, 52(3-4), 591-611
- [9] Brown, M. B. et Forsythe, A. B. (1974). Robust tests for the equality of variances. *Journal of the American Statistical Association*, 69(346), 364-367
- [10] Astals, S. et al. (2013). Anaerobic co-digestion of pig manure and crude glycerol at mesophilic conditions: Biogas and digestate. *Bioresource Technology*, 147, 297–304
- [11] Kayhanian, M. (1999). Ammonia inhibition in high-solids biogasification: An overview and practical solutions. *Environmental Technology*, 20(4), 355-365
- [12] Lesteur, M. et al. (2010). Alternative methods for determining anaerobic biodegradability: A review. *Process Biochemistry*, 45(4), 431-440
- [13] Wang, X. et al. (2014). Interactive effects of carbon and nitrogen ratio on anaerobic digestion. *Bioresource Technology*, 162, 140-147
- [14] Lindner, J. et al. (2015). Effects of particle size on anaerobic digestion of food waste. *International Biodeterioration & Biodegradation*, 119, 464-470

Annexe 1 : SCRIPT R, Prédiction production biogaz

```
# Installer et charger les packages
if (!require("pacman")) install.packages("pacman")
pacman::p_load(tidyverse, minpack.lm, gridExtra, goftest)

# 1. MODÈLE MATHÉMATIQUE (Gompertz stabilisé)
gompertz_stable <- function(t, G0, Rm, lambda) {
  exp_term <- (Rm * exp(1) * (lambda - t)) / G0 + 1
  G0 * exp(-exp(exp_term))
}

# 2. DONNÉES EXPÉRIMENTALES (cachées dans les visualisations)
data <- list(
  E1 = data.frame(t = 1:16, gas = c(1215,1277,1339,1369,1353,1384,1384,1400,1338,1430,1923,2200,3661,3692,4154,4154)),
  E2 = data.frame(t = 1:17, gas = c(1415,1584,2400,2846,4123,4308,384,476,1784,2184,2523,2631,2831,3107,3107,3138,3046)),
  E3 = data.frame(t = 1:13, gas = c(123,446,523,723,1030,1800,2092,2938,3169,3492,4154,4154,4308)),
  E4 = data.frame(t = 1:22, gas = c(0,0,0,362,338,566,780,1050,1352,1415,1850,2110,2550,2754,2905,3197,3360,4125,4352,4370,4456,4475))
)

# 3. INITIALISATION AUTOMATIQUE
auto_init <- function(gas) {
  G0_est <- max(gas, na.rm = TRUE)
  diffs <- diff(gas)
  Rm_est <- ifelse(length(diffs) > 0, max(diffs, na.rm = TRUE), 50)
  lambda_est <- ifelse(length(diffs) > 0, which.max(diffs) > 0.05 * G0_est)[1], 1)
  list(
    G0 = G0_est,
    Rm = Rm_est,
    lambda = ifelse(is.na(lambda_est), 1, lambda_est)
  )
}
```

4. AJUSTEMENT DU MODÈLE ET PRÉDICTIONS

```
results_df <- data.frame()
pred_curves <- list()

for (i in 1:4) {
  ech_name <- paste0("E", i)
  df <- data[[ech_name]]

  # Estimation des paramètres initiaux
  init_vals <- auto_init(df$gas)

  # Ajustement avec contraintes
  fit <- nlsLM(
    gas ~ gompertz_stable(t, G0, Rm, lambda),
    data = df,
    start = init_vals,
    lower = c(G0 = 0.5 * init_vals$G0, Rm = 0, lambda = 0),
    upper = c(G0 = 1.5 * init_vals$G0, Rm = 1000, lambda = 30),
    control = nls.lm.control(maxiter = 500)
  )

  # Métriques de performance
  residuals <- residuals(fit)
  gas_mean <- mean(df$gas)
  ss_res <- sum(residuals^2)
  ss_tot <- sum((df$gas - gas_mean)^2)
  rsq <- 1 - (ss_res / ss_tot)
  rmse <- sqrt(mean(residuals^2))

  # Stockage des résultats
  coefs <- coef(fit)
  results_df <- rbind(results_df, data.frame(
    Echantillon = ech_name,
    G0 = coefs["G0"],
```

```
Rm = coefs["Rm"],
lambda = coefs["lambda"],
R2 = rsq,
RMSE = rmse,
MS = c(15.5, 16.95, 14.1, 11.8)[i],
C_N = c(24.6, 23.2, 8, 23)[i]
))

# Prédiction sur 30 jours
t_pred <- seq(1, 30, length.out = 100)
gas_pred <- predict(fit, newdata = data.frame(t = t_pred))
pred_curves[[ech_name]] <- data.frame(t = t_pred, gas =
gas_pred, Echantillon = ech_name)
}

# 5. VISUALISATION DES COURBES DE PRÉDICTION (s
ans données expér)
plot_data <- bind_rows(pred_curves)

ggplot(plot_data, aes(x = t, y = gas, color = Echantillon)) +
  geom_line(linewidth = 1.5) +
  labs(title = "Prédictions de production de biogaz par le mo
dèle GTS",
  subtitle = "Application aux substrats de déchets de marc
hé",
  x = "Temps (jours)",
  y = "Production de biogaz (cm³)",
  color = "Échantillon") +
  theme_minimal() +
  theme(legend.position = "top",
  panel.grid.minor = element_blank()) +
  scale_x_continuous(breaks = seq(0, 30, 5)) +
  scale_color_manual(values = c("#E41A1C", "#377EB8", "
#4DAF4A", "#984EA3"))
```

6. CORRÉLATIONS PARAMÈTRES-SUBSTRATS

```
cor_g0_cn <- lm(G0 ~ C_N, data = results_df)
cor_rm_ms <- lm(Rm ~ MS, data = results_df)
```

7. OPTIMISATION DES MÉLANGES (fonction)

```
optim_melange <- function(prop) {
  G0_opt <- sum(prop * results_df$G0)
  Rm_opt <- sum(prop * results_df$Rm)
  lambda_opt <- weighted.mean(results_df$lambda, prop)

  t <- 1:30
  production <- gompertz_stable(t, G0_opt, Rm_opt, lambda
_opt)

  list(
    G0 = G0_opt,
    Rm = Rm_opt,
    lambda = lambda_opt,
    production_cum = sum(production),
    production_jour = production
  )
}
```

Exemple: Mélange équilibré (25% chaque)

```
melange_eq <- optim_melange(c(0.25, 0.25, 0.25, 0.25))
```

Annexe 2 : SCRIPT R, Prédictions vs expérimentation et mélange optimal

```
# Installer et charger les packages
if (!require("pacman")) install.packages("pacman")
pacman::p_load(tidyverse, minpack.lm, gridExtra, goftest)

# Fonction de Gompertz stabilisée
gompertz_stable <- function(t, G0, Rm, lambda) {
  exp_term <- (Rm * exp(1) * (lambda - t)) / G0 + 1
```

```
G0 * exp(-exp(exp_term))
}

# Données expérimentales BRUTES (cm³)
data <- list(
  E1 = data.frame(t = 1:16, gas = c(1215,1277,1339,1369,13
53,1384,1384,1400,1338,1430,1923,2200,3661,3692,4154,4
154)),
  E2 = data.frame(t = 1:17, gas = c(1415,1584,2400,2846,41
23,4308,384,476,1784,2184,2523,2631,2831,3107,3107,313
8,3046)),
  E3 = data.frame(t = 1:13, gas = c(123,446,523,723,1030,18
00,2092,2938,3169,3492,4154,4154,4308)),
  E4 = data.frame(t = 1:22, gas = c(0,0,0,362,338,566,780,10
50,1352,1415,1850,2110,2550,2754,2905,3197,3360,4125,4
352,4370,4456,4475))
)

# Fonction d'initialisation automatique des paramètres
auto_init <- function(gas) {
  G0_est <- max(gas, na.rm = TRUE)
  diffs <- diff(gas)
  Rm_est <- ifelse(length(diffs) > 0, max(diffs, na.rm = TRU
E), 50)
  lambda_est <- ifelse(length(diffs) > 0, which.max(diffs > 0.
05 * G0_est)[1], 1)

  list(
    G0 = G0_est,
    Rm = Rm_est,
    lambda = ifelse(is.na(lambda_est), 1, lambda_est)
  )
}

# Création des graphiques et stockage des résultats
plots <- list()
results_df <- data.frame()

for (i in 1:4) {
  ech_name <- paste0("E", i)
  df <- data[[ech_name]]
```

```
# Estimation automatique des paramètres initiaux
init_vals <- auto_init(df$gas)

# Ajustement avec contraintes
fit <- nlsLM(
  gas ~ gompertz_stable(t, G0, Rm, lambda),
  data = df,
  start = init_vals,
  lower = c(G0 = 0.5 * init_vals$G0, Rm = 0, lambda = 0),
  upper = c(G0 = 1.5 * init_vals$G0, Rm = 1000, lambda =
30),
  control = nls.lm.control(maxiter = 500)
)

# Calcul des métriques de performance
residuals <- residuals(fit)
gas_mean <- mean(df$gas, na.rm = TRUE)
ss_res <- sum(residuals^2)
ss_tot <- sum((df$gas - gas_mean)^2)
rsq <- 1 - (ss_res / ss_tot)
rmse <- sqrt(mean(residuals^2))

# Stocker les résultats
coefs <- coef(fit)
results_df <- rbind(results_df, data.frame(
  Echantillon = ech_name,
  G0 = coefs["G0"],
  Rm = coefs["Rm"],
  lambda = coefs["lambda"],
  R2 = rsq,
  RMSE = rmse,
  MS = c(15.5, 16.95, 14.1, 11.8)[i],
  C_N = c(24.6, 23.2, 8, 23)[i]
))
```

```
# Prédiction pour la courbe
t_pred <- seq(min(df$t), max(df$t) + 5, length.out = 100)
gas_pred <- predict(fit, newdata = data.frame(t = t_pred))
pred_df <- data.frame(t = t_pred, gas_pred = gas_pred)

# Création du graphique
p <- ggplot() +
  geom_point(data = df, aes(x = t, y = gas), color = "red", size = 3) +
  geom_line(data = pred_df, aes(x = t, y = gas_pred), color = "blue", linewidth = 1.2) +
  labs(
    title = paste("Échantillon", i),
    subtitle = sprintf("G0 = %.0f cm³ | Rm = %.1f cm³/j | λ = %.1f j\nR² = %.3f | RMSE = %.1f",
      coefs["G0"], coefs["Rm"], coefs["lambda"],
      rsq, rmse),
    x = "Temps (jours)",
    y = "Production de biogaz (cm³)"
  ) +
  theme_minimal() +
  theme(
    plot.title = element_text(face = "bold", size = 14),
    plot.subtitle = element_text(size = 10),
    panel.grid.major = element_line(color = "grey90")
  )

plots[[i]] <- p
}

# Afficher les graphiques
grid.arrange(grobs = plots, ncol = 2,
  top = "Production de Biogaz: Données vs Modèle (Volumes Bruts)")

# Afficher les résultats statistiques
cat("Paramètres d'ajustement et métriques:\n")

print(results_df)

# Analyse des corrélations
cat("\nAnalyse des corrélations:\n")
cor_matrix <- cor(results_df[, c("G0", "Rm", "lambda", "MS", "C_N")], use = "complete.obs")
print(cor_matrix)

# Modélisation des relations clés
p1 <- ggplot(results_df, aes(x = C_N, y = G0)) +
  geom_point(size = 4, color = "steelblue") +
  geom_smooth(method = "lm", se = TRUE, color = "darkred") +
  labs(title = "Relation entre le rapport C/N et le potentiel méthanogène",
    x = "Rapport Carbone/Azote (C/N)",
    y = "Potentiel méthanogène (G0, cm³)"
  ) +
  theme_bw()

p2 <- ggplot(results_df, aes(x = MS, y = Rm)) +
  geom_point(size = 4, color = "forestgreen") +
  geom_smooth(method = "lm", se = TRUE, color = "purple") +
  labs(title = "Relation entre la Matière Sèche et le taux de production maximal",
    x = "Matière Sèche (%)",
    y = "Taux max de production (Rm, cm³/j)"
  ) +
  theme_bw()

grid.arrange(p1, p2, ncol = 2)

# Optimisation de mélange
optim_melange <- function(prop1, prop2, prop3, prop4) {
  # Coefficients pondérés
  G0_opt <- sum(c(prop1, prop2, prop3, prop4) * results_df$G0)
```

```
Rm_opt <- sum(c(prop1, prop2, prop3, prop4) * results_df$
Rm)

lambda_opt <- weighted.mean(results_df$lambda, c(prop1,
prop2, prop3, prop4))

# Calcul de la production
t <- 1:30

production <- gompertz_stable(t, G0_opt, Rm_opt, lambda
_opt)

list(
  G0 = G0_opt,
  Rm = Rm_opt,
  lambda = lambda_opt,
  production_cum = sum(production),
  production_jour = production
)
}

# Exemple d'optimisation
melange_test <- optim_melange(0.3, 0.2, 0.4, 0.1)
cat("\nOptimisation de mélange (30% E1, 20% E2, 40% E3,
10% E4):\n")
print(melange_test[1:4])

# Visualisation du mélange optimal
t <- 1:30

plot_melange <- ggplot(data.frame(t = t, production = melan
ge_test$production_jour),
  aes(x = t, y = production)) +
  geom_line(color = "darkblue", linewidth = 1.5) +
  labs(title = "Production prédite du mélange optimal",
    subtitle = sprintf("Production cumulée: %.0f cm³", mela
nge_test$production_cum),
    x = "Temps (jours)",
    y = "Production de biogaz (cm³/j)") +
  theme_minimal(base_size = 12) +
  theme(panel.grid.major = element_line(color = "grey90"))

print(plot_melange)
```