UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

MODÉLISATION PHÉNOMÉNOLOGIQUE DU PROCÉDÉ DE BIOMÉTHANISATION AU SEIN D'UNE ANALYSE DE FLUX DE MATIÈRES POUR L'ÉVALUATION DE SCÉNARIOS DE TRAITEMENT

CHARLES URTNOWSKI-MORIN

DÉPARTEMENT DE GÉNIE CHIMIQUE

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION

DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES

(GÉNIE CHIMIQUE)

OCTOBRE 2018

© Charles Urtnowski-Morin, 2018.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé :

MODÉLISATION PHÉNOMÉNOLOGIQUE DU PROCÉDÉ DE BIOMÉTHANISATION AU SEIN D'UNE ANALYSE DE FLUX DE MATIÈRES POUR L'ÉVALUATION DE SCÉNARIOS DE TRAITEMENT

présenté par : URTNOWSKI-MORIN Charles

en vue de l'obtention du diplôme de : Maîtrise ès sciences appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de :

M. HENRY Olivier, Ph. D., président

M. LEGROS Robert, Ph. D., membre et directeur de recherche

M. HÉROUX Martin, Ph. D., membre et codirecteur de recherche

M. PERRIER Michel, Ph. D., membre

REMERCIEMENTS

J'aimerais commencer par remercier mon directeur de recherche, Robert Legros, pour m'avoir donné l'opportunité d'effectuer un projet de maîtrise au sein de la chaire de recherche sur la valorisation des matières résiduelles sur un sujet qui m'intéressait. J'aimerais également remercier mon co-directeur, Martin Héroux, pour m'avoir aidé à poser clairement mes objectifs de recherche afin qu'ils répondent à une problématique concrète et réelle. En tant que représentant de la Ville de Montréal et partenaire de la chaire, il m'a aussi permis d'élaborer une étude de cas pour l'Agglomération de Montréal. En plus, je suis très reconnaissant du grand aide qu'il a été pour débuter mon parcours professionnel à la suite de cette maîtrise. Je remercie ensuite Laurent Spreutels, directeur des opérations à la chaire, pour son soutien technique et pour ses commentaires constructifs tout au long du projet. Il était toujours disponible et entrain à répondre à mes questions et à discuter de mon projet. J'ai appris énormément grâce à lui.

Je tiens aussi à remercier Philippe Vaillancourt pour m'avoir permis d'effectuer une étude de cas pour la Ville de Laval, ainsi que tous les partenaires de la chaire pour leur support financier. Enfin, je remercie les étudiants de la chaire avec qui j'ai eu des discussions constructives et qui ont permis de rendre les journées de travail plus agréables.

RÉSUMÉ

L'analyse de flux de matières (MFA) est de plus en plus utilisée comme outil d'aide à la décision pour la conception et l'évaluation de systèmes complexes de gestion des matières résiduelles. La représentation des processus de traitement par des coefficients de transfert empiriques telle qu'habituellement effectuée apportent certes une simplification avantageuse des processus, elle est cependant difficilement applicable à des processus plus complexes comme la biométhanisation.

Ce mémoire propose de prendre en compte l'effet de la composition des flux de matières et des conditions d'opération sur la performance du procédé de biométhanisation et sur la composition des flux sortants en utilisant l'*Anaerobic Digestion Model no. 1* (ADM1). Une méthodologie est développée pour caractériser un flux de matières en termes des composés du modèle à partir des compositions élémentaires de ses différentes fractions. Elle est basée sur un bilan de masse des éléments et de la demande chimique en oxygène théorique. Le modèle ADM1 est adapté pour la co-digestion de substrats solides par l'application de stœchiométries variables pour les réactions d'hydrolyse. La méthodologie permet de bien reproduire de façon dynamique les tendances observées sur des résultats expérimentaux provenant de la littérature, même lorsque des compositions élémentaires génériques sont utilisées. Cependant, pour obtenir une meilleure précision, les constantes d'hydrolyse et les potentiels méthanogènes doivent provenir d'analyses effectuées directement sur les matières à l'étude. L'intérêt de la méthodologie pour une MFA est démontré en étudiant les impacts sur les coefficients de transfert en régime permanent du taux de charge organique, de la teneur en matières sèches, du taux de recyclage et de la composition du flux entrant.

En appliquant la méthodologie aux représentations par MFA des systèmes de traitements de la matière organique résiduelle de l'agglomération de Montréal et de la ville de Laval, l'évaluation de différents scénarios est possible en se basant sur des critères de rendement en méthane ou de recyclage des nutriments. Elle permet ainsi d'évaluer les impacts de la composition des matières et des conditions d'opération et peut évaluer la réponse dynamique du système à un changement abrupt de celles-ci. Lorsque le système est surdimensionné comme ce sera le cas dans les premières années de mise en service du centre de biométhanisation de l'agglomération de Montréal, les résultats obtenus montrent l'avantage sur les plans de la production en méthane et du recyclage des nutriments de traiter la fraction organique triée mécaniquement des ordures ménagères dans le

même centre que les résidus organiques triés à la source en appliquant un taux de charge organique faible. Le contenu élevé en matières inorganiques dans le compost laisse cependant prévoir une difficulté à faire accepter le produit sur les marchés. Pour la ville de Laval, les résultats obtenus montrent une grande résilience du système de traitement par biométhanisation des biosolides municipaux face à une période de pointe marquée par des quantités importantes de résidus verts dans la collecte sélective.

ABSTRACT

Material flow analysis (MFA) as a decision support tool in waste management is growing in popularity for the design and evaluation of complex systems. Although the use of transfer coefficients derived from empirical data as traditionally used in MFAs provides a useful simplification, its applicability to represent complex processes such as anaerobic digestion is limited.

This thesis suggests considering the effect caused by waste composition and operating conditions on the process performance and outflow characteristics using the Anaerobic Digestion Model no. 1 (ADM1). A methodology is developed to characterize an incoming waste flow in terms of the model's components using its elemental composition. It is based on elemental mass and theoretical oxygen demand balances. The ADM1 model is adapted for co-digestion of solid substrates using variable stoichiometry for the hydrolysis reactions. It is shown that the main trends observed on experimental data obtained from the literature are well reproduced using the proposed methodology, even when generic elemental compositions are used. However, fitting the waste fractions' hydrolysis constant and methane potential from batch experiments is required to obtain more accurate predictions. The significance of the methodology in an MFA is shown by studying how the steady-state transfer coefficients vary with the organic loading rate, dry matter content, recirculation rate, and waste composition.

The proposed methodology is applied to the organic waste management systems planned for the Montréal Urban Agglomeration and for the city of Laval. An assessment of different management scenarios based on specific criteria, such as methane yield or nutrient recycling, becomes possible. How waste composition and operating conditions alter the systems is assessed, as well as their dynamic response to sudden changes. If the system is oversized as it will likely be the case during the first years of service of Montreal's anaerobic digestion plant, the results obtained show the advantages of adding mechanically-separated organic waste to the source-separated material while operating at a low organic loading rate. However, market resistance for the finished product is expected as the compost shows a high content of inorganic material. In the case of Laval, the results obtained show the strong resilience of the primary sludge anaerobic digestion plant to seasonal peaks in green waste collection.

TABLE DES MATIÈRES

REMERCIEMENTS III

RÉSUMÉ IV

ABSTRACT VI

TABLE DES MATIÈRES VII

LISTE DES TABLEAUX IX

LISTE DES FIGURES XI

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS XVI

LISTE DES ANNEXES XXII

CHAPITRE 1 INTRODUCTION 1

CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE 4

2.1 La MFA en gestion des matières résiduelles 4

2.2 Modèle de biométhanisation ADM1 6

2.2.1 Modèle ADM1 de l'IWA 7

2.2.2 Versions d'ADM1 11

2.2.3 Extensions d'ADM1 13

2.2.4 Modèles de co-digestion basés sur ADM1 18

2.3 Utilisation d'ADM1 20

2.3.1 Estimation des paramètres 21

2.3.2 Caractérisation du substrat 23

2.4 Synthèse critique de la revue de littérature 27

2.5 Objectif générale 28

2.6 Objectifs spécifiques 28

CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT ET VALIDATION DU MODÈLE 29

3.1 Définition du système à l'étude 29
3.2 Interface entre la MFA et ADM1 30
3.3 Modèle ADM1 adapté 35
3.4 Données utilisées 37
3.5 Validation de la méthodologie 38
3.5.1 Validation dynamique 38
3.5.2 Validation de l'intérêt pour une MFA 54
3.6 Conclusion 65
CHAPITRE 4 ÉTUDES DE CAS 67
4.1 Agglomération de Montréal 67
4.1.1 Contexte montréalais 67
4.1.2 Objectifs des simulations 70
4.1.3 Cas de base : biométhanisation des OFMSW séparées à la source 70
4.1.4 Impact du tri des ordures ménagères 75
4.1.5 Impact des conditions d'opération 77
4.1.6 Synthèses de l'étude de cas 81
4.2 Ville de Laval 84
4.2.1 Contexte lavallois 84
4.2.2 Objectifs des simulations 87
4.2.3 Impact des conditions d'opération sur le cas de base 88
4.2.4 Impact de la période de pointe des résidus verts 93
CHAPITRE 5 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS 99
RÉFÉRENCES 102
ANNEXES 117

LISTE DES TABLEAUX

Tableau 2.1 : Fonctions d'inhibition dans le modèle ADM1 (Batstone et al., 2002b) 10

Tableau 2.2 : Différentes formules moléculaires des protéines et des acides aminés.....22

Tableau 2.3 : Erreurs relatives des bilans de masse dans la méthode de Poggio et al. (2016).....26

Tableau 3.1 : Éléments suivis dans la MFA selon leur type 29

Tableau 3.2 : Description des niveaux de flux dans la MFA 30

Tableau 3.3 : DCO théorique des éléments et des charges (Gujer, Henze, Mino et van Loosdrecht, 2000).....32

Tableau 3.4 : Matrice des coefficients stœchiométriques des processus d'hydrolyse d'une matière (les composés qui ne réagissent pas ne sont pas montrés) 36

Tableau 3.5 : Potentiels méthanogènes et constantes d'hydrolyse utilisés.....37

Tableau 3.6 : Comparaison des caractéristiques biochimiques et physico-chimiques des matières génériques avec celles obtenues par analyses expérimentales (le contenu en TS des flux génériques est posé égal à celui du flux expérimental).....39

Tableau 3.7 : Composés ADM1 obtenus selon les deux méthodes de caractérisation 40

Tableau 3.8 : Comparaison des constantes d'hydrolyse et des fractions dégradables utilisées dans les deux simulations 40

Tableau 3.9 : Paramètres opératoires de base pour les simulations 55

Tableau 4.1 : Matières acceptées et rejetées dans les lignes de tri.....72

Tableau 4.2 : Conditions d'opération pour les simulations des deux scénarios de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal 82

Tableau 4.3 : Caractérisation des boues liquides de la station d'épuration de La Pinière en 2009 (Dessau, 2010).....87

Tableau 4.4 : Fractionnement en termes de substances des boues liquides de la station d'épuration de La Pinière et des boues déshydratées des stations Fabreville et d'Auteuil 88

Tableau 5.1 : Matrice des coefficients stœchiométriques (matrice de Petersen) 122

Tableau 5.2 : Fractions massiques des éléments dans les composés (kg/kg).....127

Tableau 5.3 : Paramètres du modèle 128

Tableau 5.4 : Provenance des données utilisées.....131

Tableau 5.5 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau 132

Tableau 5.6 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau (suite) 133

Tableau 5.7 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau (suite) 134

Tableau 5.8 : Coefficients de transfert utilisés dans la MFA d'Allesch et Brunner (2017) 135

Tableau 5.9 : Coefficients de transfert utilisés pour le procédé de compostage 139

LISTE DES FIGURES

Figure 2.1 : Structure du modèle ADM1 (adapté de Batstone et al., 2002b) 9

Figure 2.2 : Structure a) du modèle de Galí et al. (2009) et b) du modèle GISCOD de Zaher, Li, et al. (2009) 20

Figure 3.1 : Interface MFA - ADM1 pour un flux de matière résiduelle solide et dégradable k ... 34

Figure 3.2 : Débit entrant au réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c par unité de volume du réacteur 42

Figure 3.3 : Taux de charge organique (OLR) moyen selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 43

Figure 3.4 : Rendement spécifique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 44

Figure 3.5 : Productivité volumétrique obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 45

Figure 3.6 : Alcalinité bicarbonate obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 46

Figure 3.7 : Concentration en azote ammoniacal obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 47

Figure 3.8 : pH obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 48

Figure 3.9 : Concentration en AGV obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c 49

Figure 3.10 : Rendement spécifique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c, mais utilisant les constantes d'hydrolyse et les fractions dégradables de la DCO théorique calibrés expérimentalement dans les deux méthodes 52

Figure 3.11 : Productivité volumétrique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c, mais utilisant les

constantes d'hydrolyse et les fractions dégradables de la DCO théorique calibrés expérimentalement dans les deux méthodes 53

Figure 3.12 : Représentation du procédé utilisé pour la validation (les paramètres opératoires qui font l'objet de variation sont indiqués en rouge).....55

Figure 3.13 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide ..57

Figure 3.14 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote.....57

Figure 3.15 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide 59

Figure 3.16 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote.....59

Figure 3.17 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide.....60

Figure 3.18 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote 61

Figure 3.19 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide.....62

Figure 3.20 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote.....62

Figure 3.21 : Facteur d'inhibition par l'ammoniac en fonction (a) de variations du taux de charge organique et de la proportion de résidus alimentaires dans l'OFMSW et (b) en fonction de variations du taux de recyclage de l'effluent liquide et de la teneur en matières sèches dans le flux entrant 64

Figure 3.22 : Rendements spécifiques en méthane simulés avec le modèle ADM1, avec un modèle cinétique d'ordre 1 et par le potentiel méthanogène des matières en fonction (a) du taux de charge organique, (b) de la teneur en matières sèches dans l'intrant, (c) du taux de recyclage et (d) de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant 66

Figure 4.1 : Représentation schématique du futur système de gestion des matières résiduelles organiques de la zone Est de l'agglomération de Montréal (les intrants secondaires ne sont pas montrés) 68

Figure 4.2 : Composition du bac brun et des ordures ménagères pour la zone Est de Montréal ... 69

Figure 4.3 : Fractionnement des matières (biens) en termes de substances (la teneur en eau n'est pas montrée) 69

Figure 4.4 : Représentation schématique des courants et des processus ayant lieu dans l'usine de biométhanisation simulée pour l'agglomération de Montréal (le système de base est le même que celui de la Figure 3.12) 71

Figure 4.5 : Composition du digestat solide provenant du bac brun trié mécaniquement, incluant la répartition entre les fractions dégradables et non dégradables en conditions anaérobie 73

Figure 4.6 : Proportion des matières du bac brun se retrouvant dans le digestat solide suite à un tri mécanique 73

Figure 4.7 : Concentration en contaminants dans les composts provenant des bacs bruns triés et non triés comparées aux concentrations limites du critère C1 75

Figure 4.8 : Influence de la masse collectée dans les bacs bruns sur la fraction d'ordures dans le flux entrant au réacteur et sur la pureté minimale que doit avoir les ordures ménagères afin que le compost respecte les critères C1 (en supposant un flux constant de 25 000 t/an d'ordures) 76

Figure 4.9 : Concentrations en contaminants dans les composts provenant des ordures ménagères comparées aux concentrations limites du critère C1 77

Figure 4.10 : Rendement en méthane sur base de la teneur en VS dans l'intrant au biométhaniseur en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut 78

Figure 4.11 : Coefficients de transfert (a) du C et (b) du S dans le biogaz en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut 79

Figure 4.12 : Coefficients de transfert (a) du N et (b) du P dans le digestat solide en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut 80

Figure 4.13 : Facteurs d'inhibition de la méthanogénèse acéticlastique (a) par l'ammoniac et (b) par le pH en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut 81

Figure 4.14 : MFA du système de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal selon le scénario 1 83

Figure 4.15 : MFA du système de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal selon le scénario 2 83

Figure 4.16 : Représentation schématique des principaux courants du futur système de gestion des matières résiduelles organiques de la ville de Laval (les intrants et extrants secondaires ne sont pas montrés) 85

Figure 4.17 : Composition estimée des bacs bruns lavallois (supposée équivalente à celle de la zone Ouest de l'agglomération de Montréal) 86

Figure 4.18 : Teneurs en contaminants dans les digestat provenant des boues primaires et des bacs bruns comparées aux teneurs limites du critère C1 89

Figure 4.19 : Représentation schématique des courants et des processus ayant lieu dans le centre de biométhanisation de La Pinière 89

Figure 4.20 : Réduction (a) des solides volatils et (b) de la DCO en fonction du temps de résidence pour différents mélanges de matières 91

Figure 4.21 : (a) Rendement spécifique en méthane et (b) productivité volumétrique en fonction du temps de résidence pour différents mélanges de matières 92

Figure 4.22 : Débit de méthane obtenu lors de la simulation en co-digestion des matières comparativement aux débits de méthane simulés en mono-digestion 93

Figure 4.23 : (a) Rendement spécifique et (b) productivité volumétrique en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts 94

Figure 4.24 : (a) Valeur de pH et (b) concentration en AGV en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts 95

Figure 4.25 : Facteur d'inhibition (a) par l'ammoniac et (b) par le pH en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts 96

Figure 4.26 : Concentrations en contaminants dans les digestats pour le cas de base et pour deux intensités de période de pointe des résidus verts comparées aux concentrations limites du critère C1 (les concentrations représentent celles dans les digestats à la fin de la période de pointe).....97

Figure 4.27 : (a) Concentration en N et en P dans le digestat et (b) proportion du N et du P à l'état soluble dans le flux sortant selon la durée de la période de pointe de résidus verts (les concentrations représentent celles à la fin de la période de pointe) 97

Figure 4.28 : MFA du système de traitement des matières organiques de Laval en hiver (en t/an) 98

Figure 4.29 : MFA du système de traitement des matières organiques de Laval lors d'une période de pointe de résidus de verts (en t/an) 98

Figure 5.1 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre 135

Figure 5.2 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre 136

Figure 5.3 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre.....136

Figure 5.4 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre.....137

LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS

Abréviations

ADM1	*Anaerobic Digestion Model No. 1*
AGLC	Acides gras à longues chaînes
AGV	Acides gras volatils
ASM	*Activated Sludge Model*
BMP	*Biochemical methane potential*
BSM2	Benchmark Simulation Model No. 2
CSTR	*Continuous stirred-tank reactor*
DCO	Demande chimique en oxygène
DCO_{th}	Demande chimique en oxygène théorique
ÉTI	Élément trace inorganique
FS	*Fixed solids* (cendres)
GISCOD	*General Integrated Solid Waste Co-Digestion model*
GMR	Gestion des matières résiduelles
HRT	*Hydraulic retention time*
IWA	International Water Association
MFA	*Material flow analysis*
MRF	Matière résiduelle fertilisante
MSW	*Municipal solid waste*
OFMSW	*Organic fraction of municipal solid waste*
OLR	*Organic loading rate*
PDGMR	Plan directeur de gestion des matières résiduelles
PGMR	Plan de gestion des matières résiduelles

PQGMR	Politique québécoise de gestion des matières résiduelles
PTMOBC	Programme de traitement des matières organiques par biométhanisation et compostage
PWM	*Plant-wide model*
RA	Résidus alimentaires
RV	Résidus verts
STR-13	*Scientific and technical report no. 13*
TS	*Total solids*
VS	*Volatile solids*

Variables et paramètres

A	Surface disponible pour l'hydrolyse (m^2)
a^*	Surface spécifique (m^2 (kg DCO)$^{-1}$)
B_k	Potentiel méthanogène de la matière k (L CH_4 kg^{-3})
$\dot{\boldsymbol{F}}$	Débit massique des courants (kg j^{-1})
f_i	Fraction du composé i dans la matière, sur base DCO (-)
f_d	Fraction dégradable dans la matière, sur base DCO (-)
G_i	Concentration en composé gazeux i (nominalement kg DCO m^{-3})
k_{sbk}	Constante d'hydrolyse basée sur la surface (kg DCO m^{-2} j^{-1})
$\dot{\boldsymbol{M}}$	Débit massique de biens (kg j^{-1})
M_i	Masse stœchiométrique du composé i (nominalement kg DCO)
m_{a_e}	Masse atomique de l'élément e (kg kmol^{-1})
$N_{\mathrm{aa}}, N_{\mathrm{pr}}$	Teneur en azote des protéines et acides aminées (kmol N (kg DCO)$^{-1}$)
P_{atm}	Pression atmosphérique (bar)
P_{gas}	Pression dans le réacteur (bar)

$p_{\mathrm{gas},i}$	Pression partielle du composé *i* (bar)
q_{in}	Débit liquide entrant (m^3 j^{-1})
q_{out}	Débit liquide sortant (m^3 j^{-1})
q_{gas}	Débit de gaz sortant (m^3 j^{-1})
R_0	Rayon initial de la particule (m)
R_{SRT}	Rayon de la particule au temps de résidence des solides (m)
S_{an}	Concentration en anions (kmol m^{-3})
S_{cat}	Concentration en cations (kmol m^{-3})
S_{hi}	Concentration de l'acide *i* (kmol m^{-3})
S_i	Concentration en composé soluble *i* (nominalement kg DCO m^{-3})
S_{i-}	Concentration de le la base *i* (kmol m^{-3})
$ThOD_e$	Demande chimique en oxygène théorique de l'élément *e* (kg DCO $kmol^{-1}$)
t_{SRT}	Temps de résidence des solides (j)
V_{gas}	Volume de l'espace de tête du réacteur (m^3)
$v_{i,j}$	Coefficient stœchiométrique du composé *i* dans le processus *j* (-)
V_{liq}	Volume d'eau dans le réacteur (m^3)
$\dot{\boldsymbol{X}}$	Débit massique de substances (kg j^{-1})
X_i	Concentration en composé particulaire *i* (kg DCO m^{-3})
$\dot{\boldsymbol{Y}}$	Débit massique d'éléments (kg j^{-1})
Y_i	Rendement de la biomasse *i* sur le substrat, sur base DCO (-)
y	Fraction massique d'éléments (-)
$\alpha_{\mathrm{e},i}$	Fraction massique de l'élément *e* du composé *i*
$\beta_{\mathrm{e},i}$	Masse de l'élément *e* par unité stœchiométrique du composé *i*
ρ	Densité de la particule (kg DCO m^{-3})

ρ_{h2o} Densité de l'eau (kg m^{-3})

ρ_j Vitesse de la réaction *j* (nominalement kg DCO m^{-3} j^{-1})

γ_i Demande théorique en oxygène du composé *i* (kg DCO kg^{-1})

Composés du modèle ADM1 (en ordre d'apparition dans la matrice de coefficient stœchiométrique)

S_{su} Monosaccharides (kg DCO m^{-3})

S_{aa} Acides aminés (kg DCO m^{-3})

S_{fa} Acides gras (kg DCO m^{-3})

S_{hva}, S_{va-} Acide valérique et valérate (kg DCO m^{-3})

S_{hbu}, S_{bu-} Acide butyrique et butyrate (kg DCO m^{-3})

S_{hpro}, S_{pro-} Acide propionique et propionate (kg DCO m^{-3})

S_{hac}, S_{ac-} Acide acétique et acétate (kg DCO m^{-3})

S_{IC}, S_{co2}, S_{hco3-} Carbone inorganique (kmol C m^{-3})

S_{IN}, S_{nh4}, S_{nh3} Azote inorganique (kmol N m^{-3})

S_{IP}, $S_{hpo4=}$, S_{h2po4-} Phosphate (kmol P m^{-3})

S_{IS}, S_{h2s}, S_{hs-} Sulfure d'hydrogène (kg DCO m^{-3})

S_{h+} Ions hydrogène (kmol m^{-3})

S_{oh-} Ions hydroxide (kmol m^{-3})

S_{h2} Hydrogène (kg DCO m^{-3})

S_{ch4} Méthane (kg DCO m^{-3})

S_I Inertes solubles (kg DCO m^{-3})

X_{xc} Composites (kg DCO m^{-3})

X_{ch} Carbohydrates (kg DCO m^{-3})

X_{pr} Protéines (kg DCO m^{-3})

X_{li}	Lipides (kg DCO m^{-3})
X_{su}	Dégradeurs de sucre (kg DCO m^{-3})
X_{aa}	Dégradeurs d'acides aminés (kg DCO m^{-3})
X_{fa}	Dégradeurs d'acides gras (kg DCO m^{-3})
X_{c4}	Dégradeurs de valérate et de butyrate (kg DCO m^{-3})
X_{pro}	Dégradeurs de propionate (kg DCO m^{-3})
X_{ac}	Dégradeurs d'acétate (kg DCO m^{-3})
X_{h2}	Dégradeurs d'hydrogène (kg DCO m^{-3})
X_{so4}	Réducteurs de sulfate (kg DCO m^{-3})
X_{su}	Dégradeurs de sucre (kg DCO m^{-3})
X_{I}	Inertes particulaire (kg DCO m^{-3})
G_{co2}	Dioxyde de carbone gazeux (kmol C m^{-3})
G_{h2}	Hydrogène gazeux (kg DCO m^{-3})
G_{ch4}	Méthane gazeux (kg DCO m^{-3})
G_{h2s}	Sulfure d'hydrogène gazeux (kg DCO m^{-3})
G_{h2o}	Vapeur d'eau (kg m^{-3})
S_{h2o}	Masse d'eau liquide (kg)
X_{FS}	Inerte particulaire (cendres) (kg m^{-3})

Paramètres du modèle ADM1

I_i	Terme d'inhibition (-)
$K_{a,i}$	Constante de dissociation du composé *i*
$K_{H,i}$	Constante de Henry du composé i
$K_{I,j}$	Constante d'inhibition par le composé *i* sur le processus *j* (nominalement kg DCO m^{-3})

$K_{pH,\mathrm{j}}$	Constante d'inhibition par le pH sur le processus *j* (nominalement kg DCO m^{-3})
$K_{S,j}$	Constante de demi-saturation du processus *j* (kg DCO m^{-3})
k_{dis}	Constante de désintégration (j^{-1})
$k_{\mathrm{hyd},i}$	Constante d'hydrolyse du composé *i* (j^{-1})
$k_{\mathrm{L}}a$	Coefficient de transfert de masse (j^{-1})
$k_{\mathrm{m},i}$	Taux maximal spécifique d'utilisation de Monod pour un composé *i* (j^{-1})
k_{p}	Coefficient de résistance à l'écoulement (m^3 j^{-1} bar^{-1})
n_{j}	Exposant pour le calcul du terme d'inhibition par le pH du processus *j* (-)
$\mathrm{pH}_{\mathrm{LL,j}}$	Limite de pH inférieure pour laquelle une inhibition complète de la réaction *j* a lieu (-)
$\mathrm{pH}_{\mathrm{UL,j}}$	Limite de pH supérieure pour laquelle aucune inhibition de la réaction *j* n'a lieu (-)

LISTE DES ANNEXES

Annexe A – Équations du modèle 117

Annexe B – Composition des matières résiduelles 131

Annexe C – Validation MFA 135

Annexe D – Modèle de compostage 138

CHAPITRE 1 INTRODUCTION

La biométhanisation est un procédé bien connu pour le traitement biologique des boues des stations d'épuration des eaux usées (biosolides) et pour la fraction organique des déchets urbains (*organic fraction of municipal solid waste*, OFMSW). Comme le compostage, elle permet de stabiliser la matière avant son application au sol, recyclant ainsi le carbone organique et les nutriments qu'elle contient dans sa phase solide, nommée digestat. Son avantage sur le compostage est la production d'un biogaz riche en méthane et une plus facile gestion des odeurs. En contrepartie, son procédé est beaucoup plus sensible à la qualité des matières entrantes. Les conditions opératoires doivent également être bien calibrées pour éviter l'accumulation de produits intermédiaires pouvant inhiber et entraîner l'échec du procédé. Les coûts d'immobilisation et d'opération étant aussi plus élevés, les opérateurs cherchent à optimiser la composition des matières entrantes et les conditions d'opération afin d'obtenir un rendement maximal en biogaz. C'est pourquoi beaucoup d'efforts ont été déployés depuis la fin des années 1990 à la modélisation du procédé, avec la publication en 2002 du modèle ADM1 pouvant servir de plateforme pour de futurs développements et permettre le transfert technologique vers le milieu industriel (Batstone et al., 2002b). Par contre, le nombre élevé de paramètres biochimiques et physico-chimiques nécessaires et la caractérisation exhaustive de la matière requise pour définir les intrants au modèle rend son utilisation difficile en dehors du domaine de la recherche. Lors de la conception d'un système de gestion des matières résiduelles (GMR), les preneurs de décision ont davantage recours à des heuristiques pour comparer différents scénarios de traitement, basées sur des expériences étrangères.

L'analyse de flux de matières (*material flow analysis*, MFA) est un outil pouvant servir d'aide à la décision qui gagne en popularité en GMR. En suivant la composition des flux au travers des processus de traitement, différents scénarios de gestion peuvent être comparés systématiquement selon leur capacité à remplir les objectifs des plans d'action gouvernementaux. Par contre, les transformations des flux sont modélisées à partir de données empiriques provenant de systèmes en opération. Il existe donc une complémentarité évidente entre un modèle de procédé phénoménologique tel qu'ADM1 et la MFA pour représenter les effets de différentes conditions opératoires et pour quantifier comment des changements au système de GMR influence le procédé de biométhanisation.

Au Québec, où un taux de recyclage de 60% des matières organiques putrescibles est exigé mais loin d'être atteint et où son bannissement des lieux d'élimination est prévu pour 2020, les projets de biométhanisation se multiplient tant pour les biosolides que pour les OFMSW séparées à la source. Dans la Politique québécoise de gestion des matières résiduelles (PQGMR), le gouvernement du Québec planifie de bannir la matière organique des lieux d'enfouissement d'ici 2020, en privilégiant le recyclage au sol de la matière (Ministère du Développement durable, de l'Environnement et des Parcs [MDDEP], 2011). C'est dans cette optique que le gouvernement a mis sur pied en 2012 le Programme de traitement des matières organiques par biométhanisation et compostage (PTMOBC), au travers lequel une aide financière est versée aux municipalités pour l'implantation d'infrastructures de traitement (Ministère du Développement durable, de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques [MDDELCC], 2017). Étant contraint de recycler au sol le digestat ou le compost produit, les municipalités participantes doivent s'assurer d'obtenir une matière qui satisfait la définition d'une matière résiduelle fertilisante (MRF) et qui a une pureté adéquate respectant les normes d'épandage en agriculture. Ces normes sont décrites dans le Guide de recyclage des MRF (Hébert, 2015), qui classifie la matière selon la présence d'éléments inorganiques, de corps étrangers, de pathogènes et d'odeurs. Il devient donc le défi principal des usines de valorisation de la matière organique de maximiser la récupération des nutriments dans le digestat en minimisant celle des métaux, en même temps qu'assurer la rentabilité de l'opération en maximisant la production de biogaz.

L'objet de ce mémoire de maîtrise est de développer une méthodologie permettant d'utiliser un modèle de biométhanisation basé sur ADM1 au sein d'une représentation par MFA d'un système de GMR comme outil d'aide à la décision. Un tel modèle servira à évaluer l'intérêt et la faisabilité de traiter certains flux de matières en respectant les objectifs et contraintes des centres de traitement. Appliqué au futur système de GMR de l'agglomération de Montréal, il permettra d'évaluer l'impact qu'aurait d'ajouter des matières organiques triées mécaniquement des ordures ménagères aux résidus alimentaires de la collecte sélective et de définir des critères de quantité et de pureté pour une telle ligne de tri. En Europe, l'objectif du traitement de ces matières est plutôt de les stabiliser avant l'enfouissement en produisant de l'énergie et non de les recycler au sol. Lorsque traitées seules, les digestats produits contiennent de grandes quantités de contaminants chimiques et physiques; il est donc attendu qu'il y aura une proportion limite d'ordures ménagères pouvant être ajoutées afin de permettre leur valorisation. Appliqué au futur système de GMR de la

Ville de Laval, le modèle pourra évaluer l'impact qu'aurait l'ajout de résidus alimentaires et de résidus verts sur la biométhanisation de ses biosolides et ainsi définir des conditions opératoires optimales pour le procédé. Elle pourra aussi évaluer différents scénarios, tels que la pertinence d'une ligne de tri pour retirer les résidus verts du flux entrant.

CHAPITRE 2 REVUE DE LA LITTÉRATURE

Pour commencer, une revue des méthodes d'application de la MFA et du modèle ADM1 pour représenter le processus de biométhanisation des OFMSW est effectuée, avec un accent sur l'intégration d'ADM1 dans un modèle global de GMR. Une attention particulière est portée sur la prise en compte de l'influence de la caractérisation de la matière et des conditions opératoires sur la production de biogaz, la stabilité du procédé et la qualité du digestat produit.

2.1 La MFA en gestion des matières résiduelles

La MFA consiste en l'étude des flux et des stocks de matières à l'intérieur des frontières d'un système, connectant les sources aux cibles finales en passant par les procédés intermédiaires de transport, transformation et stockage, s'appuyant sur le principe de la conservation de la masse (Brunner et Rechberger, 2017). Sa popularité est grandissante comme outil d'aide à la décision en gestion des ressources, des déchets et de l'environnement, ainsi que pour évaluer les impacts de différentes politiques gouvernementales sur ces derniers.

Une étude faisant la revue des utilisations de la MFA en gestion des matières résiduelles (Allesch et Brunner, 2015) a montré que les objectifs de l'exercice diffèrent et peuvent être de réduire la complexité d'un système intégré de gestion, de quantifier les ressources secondaires produites et les flux de substances vers l'environnement, de modéliser les interactions entre l'économie d'un territoire et sa gestion des matières résiduelles, ou de représenter la structure socioéconomique d'un actuel ou futur système de gestion. L'analyse peut être effectuée au niveau des substances, comme des éléments (atomes) et/ou des composés chimiques (molécules), ou au niveau des biens, qui sont composés de substances et qui ont une valeur économique positive (p. ex. carburant) ou négative (p. ex. matières résiduelles municipales). Le niveau des substances serait essentiel pour évaluer l'atteinte des objectifs de gestion et pour effectuer des analyses de cycles de vie (ACV). Les frontières du système étudiées varient aussi d'une échelle nationale à une usine spécifique de traitement.

Lorsque la MFA est utilisée pour planifier ou pour améliorer un système de gestion des matières résiduelles, les transformations de la matière ayant lieu dans les usines de traitement sont modélisées à l'aide de coefficients de transfert pour les différents biens et substances provenant de données empiriques obtenues d'usines existantes. Par exemple, en évaluant le système de gestion

en Autriche, Allesch et Brunner (2017) ont modélisé l'usine de biométhanisation avec des facteurs empiriques provenant de la littérature afin de représenter le transfert des intrants en flux de biogaz, émissions atmosphériques, digestat liquide, digestat solide, déchets à incinérer, ferraille à broyer et particules grossières à incinérer, en suivant les éléments C, Cd, Cr, Cu, Fe, Hg, N, Ni, P, Pb, Zn. Cette méthode est bien adaptée pour quantifier les changements dans la production de ressources et des émissions qui résulteraient d'altérations majeures de la génération, telles qu'une augmentation des taux de collecte ou de l'implantation de nouvelles usines de traitement. Elle permet ainsi d'aider la prise de décision sur le choix d'un nouveau scénario de gestion. C'est dans ce contexte qu'une analyse des flux de substances adaptée pour différentes régions en Italie a démontré les bénéfices de maximiser une collecte séparée des matières organiques d'une grande qualité en vue d'un traitement biologique et d'implanter un traitement thermique pour les matières non triées (Arena et Di Gregorio, 2014).

Dans les dernières années, il y a un intérêt grandissant pour suivre au travers d'un territoire les flux de nutriments essentiels en agriculture, notamment le phosphore et l'azote (Jakrawatana, Moore et MacGill, 2009; Klinglmair, Vadenbo, Astrup et Scheutz, 2017; Neset, Bader et Scheidegger, 2006; Senthilkumar, Mollier, Delmas, Pellerin et Nesme, 2014; Treadwell, Clark et Bennett, 2018). Ces nutriments sont souvent représentés dans les MFA utilisées comme outil d'aide à la décision en GMR (Allesch et Brunner, 2017). Cette tendance est également présente dans les MFA d'usines de traitement des matières résiduelles incluant un procédé de biométhanisation, où les flux de substances (carbone, nutriments et métaux) permettent d'évaluer la performance des procédés et la valeur des produits finaux (Jensen, Møller et Scheutz, 2017; Knoop, Tietze, Dornack et Raab, 2018; Pognani, Barrena, Font et Sánchez, 2012; Tonini, Dorini et Astrup, 2014).

Cependant, les coefficients de transfert obtenus dans ces MFA sont propres à la matière première et aux conditions opératoires de l'étude. Quoique leur utilisation dans d'autres applications soit commune, elle ne permet que l'optimisation du système global et non des processus qui le composent. En effet, une nouvelle MFA doit être effectuée si les conditions d'opération changent, telles qu'un nouveau temps de résidence hydraulique (*hydraulic retention time*, HRT) ou un nouveau taux de charge organique (*organic loading rate*, OLR). De plus, l'ajout de différents types de matières dans le réacteur, pratique appelée co-digestion, peut entraîner des effets synergiques ou antagonistes sur la production de biogaz, qui ne peuvent être prédits uniquement en sommant les rendements observés en mono-digestion (Mata-Alvarez, Dosta, Macé et Astals, 2011).

Pour ce qui est de la représentation des nutriments dans une MFA, à part l'azote dont une partie se retrouve dans le biogaz, la prédiction des teneurs dans le digestat est effectuée en supposant que toutes les substances s'y retrouvent. Quoique l'hypothèse soit valide si on néglige l'accumulation des substances dans le réacteur suite à leur précipitation, la répartition des substances entre leur forme soluble et solide a un impact important sur la performance des post-traitements. En effet, une séparation solide-liquide suit inévitablement la biométhanisation, puis un procédé de compostage est souvent appliqué. Si les fractions solubles et solides de ces substances varient de celles étudiées, les coefficients de transfert ainsi obtenus ne sont plus valides.

Certains modèles d'analyses de cycle de vie (ACV) développés pour la GMR ont tenté d'améliorer les prédictions de leurs MFA en incorporant des productions en méthane propres à chacune des fractions de matières résiduelles, comme le fait le modèle SWOLF (Levis et Barlaz, 2013). D'autres ont incorporé des réactions d'ordre 1 pour prendre en compte l'effet du temps de résidence sur le degré de dégradation de la matière, comme c'est le cas dans le modèle ORWARE (Dalemo et al., 1997). Certes, ces représentations négligent plusieurs phénomènes prenant place dans le réacteur de biométhanisation que seuls des modèles phénoménologiques comme ADM1 peuvent prendre en compte. Aucune intégration de tels modèles dans une MFA n'a été rapportée dans la littérature. Leur importance a cependant été démontrée pour comparer différents scénarios de traitement des eaux usées en termes de bilans énergétiques et d'émissions de gaz à effet de serre (Bisinella de Faria, Spérandio, Ahmadi et Tiruta-Barna, 2015; Corominas, Flores-Alsina, Snip et Vanrolleghem, 2012).

2.2 Modèle de biométhanisation ADM1

Un grand nombre de modèles phénoménologiques de biométhanisation ont été publiés dans la 2e moitié du XXe siècle, avec un effort soutenu pour le développement de modèles plus généraux dans les années 1990, applicables à une variété de matières premières (Lauwers et al., 2013). En 2002, l'International Water Association (IWA) publie l'*Anaerobic Digestion Model No. 1* (ADM1) (Batstone et al., 2002b) dans le but de mettre en commun tous les efforts de modélisation des dernières décennies en un modèle générique servant de base pour les développements futurs et permettant d'augmenter l'utilisation de modèles de biométhanisation à l'échelle industrielle. Il est maintenant le modèle le plus utilisé pour représenter les procédés de biométhanisation et plusieurs

publications sont disponibles traitant de ses applications, de ses modifications et de ses extensions pour une grande variété de matières, en mono-digestion et en co-digestion.

Dans cette section, le modèle est tout d'abord présenté. Ensuite, les variantes et les extensions jugées pertinentes pour modéliser certains processus importants de la biométhanisation des OFMSW sont exposées. Une analyse critique de l'applicabilité à complémenter la MFA y est effectuée.

2.2.1 Modèle ADM1 de l'IWA

Le modèle original tel que publié dans le *Scientific and Technical Report No. 13* (STR-13) de l'IWA (Batstone et al., 2002a) a été développé principalement pour le cas des biosolides municipaux dans un réacteur complètement mélangé (CSTR), utilisant les mêmes unités, nomenclature et structure que la série des *Activated Sludge Models* (ASM) (Henze, Gujer, Mino et van Loosdrecht, 2000). L'unité de base est donc la demande chimique en oxygène (DCO) pour tous les composés organiques et les moles pour les composés inorganiques.

Le modèle est décrit par :

- 26 variables d'état dynamiques
- 19 réactions biochimiques
- 6 réactions acido-basiques
- 3 transferts liquide-gaz.

Les variables d'état incluent des composés particulaires organiques (X_i), des composés solubles organiques (S_i), des composés solubles inorganiques, soit le dioxyde de carbone (S_{IC}) et l'ammoniac (S_{IN}), et deux composés représentant des acides et bases fortes (S_{cat} et S_{an}). Ces derniers ne jouent pas de rôle dans les réactions biochimiques mais influencent le pH du milieu.

Les réactions biochimiques peuvent être regroupées en 7 étapes :

1. Désintégration de la matière complexe dégradable (substrat) et de la biomasse morte, regroupées ensemble dans un seul composé nommé composite (X_{c}), en particules de carbohydrates (X_{ch}), de protéines (X_{pr}), de lipides (X_{li}) et de matières non dégradables particulaires et solubles (X_{I} et S_{I}, respectivement).

2. Hydrolyse des composés particulaires de carbohydrates, protéines et lipides en composés solubles de monosaccharides (S_{su}), d'acides aminés (S_{aa}) et d'acides gras à longue chaîne (AGLC) (S_{fa}).
3. Acidogénèse des monosaccharides et des acides aminés en acides gras volatils (valérate S_{va}, butyrate S_{bu}, propionate S_{pro} et acétate S_{ac}), hydrogène S_{h2}, dioxyde de carbone et ammoniac, par deux groupes de micro-organismes.
4. Acétogénèse des acides gras à longue chaîne et des acides gras volatils en acétate, hydrogène et dioxyde de carbone par trois différents groupes de micro-organismes (un pour les AGLC, un pour le butyrate et le valérate, un pour le propionate).
5. Méthanogénèse acéticlastique, produisant du méthane (S_{ch4}) et du dioxyde de carbone à partir de l'acétate, par un groupe de micro-organismes.
6. Méthanogénèse hydrogénotrophe, produisant du méthane à partir d'hydrogène et de dioxyde de carbone, par un groupe de micro-organismes.
7. Lyse bactérienne des sept groupes de micro-organismes en composites.

Toute consommation de substrat entraîne une croissance de la biomasse bactérienne. Le carbone et l'azote inorganiques agissent comme composés source-puits, étant consommés ou produits afin d'assurer la conservation de leur masse dans les réactions. La structure métabolique générale adoptée dans ADM1 est présentée dans la Figure 2.1.

Les réactions biochimiques (ρ_j) impliquant des composés particulaires sont modélisées par une réaction d'ordre 1 (Équation 2-1) et celles impliquant la consommation d'un substrat soluble, par une cinétique de Monod basée sur la consommation de substrat (Équation 2-2).

$$\rho_j = k_j \cdot X_i \qquad \text{2-1}$$

Où k_j est la constante cinétique de la réaction j.

$$\rho_j = \frac{\left(k_{m,j} S_i\right)}{K_{S,j} + S_i} X_i \cdot I_{i,j} \qquad \text{2-2}$$

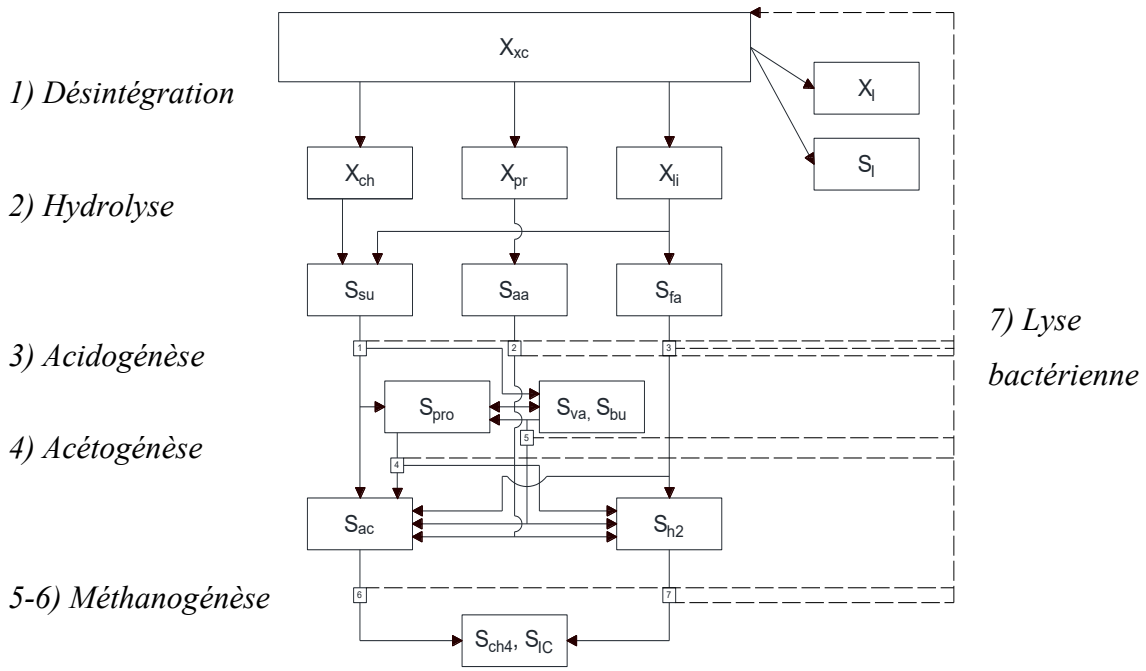


Figure 2.1 : Structure du modèle ADM1 (adapté de Batstone et al., 2002b)

Où $k_{m,j}$ est le taux maximal spécifique d'utilisation de Monod pour le procédé j, $K_{S,j}$ est la constante de demi-saturation, X_i est la concentration en micro-organismes et $I_{i,j}$ est la fonction d'inhibition du processus j par le composé i.

Les termes d'inhibition sont ajoutés aux équations de Monod afin de représenter l'inhibition par le pH, par l'ammoniac et par l'hydrogène sur les réactions concernées. Ils sont présentés dans le Tableau 2.1.

Les réactions acido-basiques ($\rho_{\mathrm{A},j}$) représentent les associations et dissociations des acides valérique, butyrique, propionique et acétique, carbone inorganique et azote inorganique :

$$\rho_{\mathrm{A},j} = k_{\mathrm{A/B}j} \cdot (S_{i^-} - S_{\mathrm{H}^+} - K_{\mathrm{a},i} S_{hi}) \qquad 2\text{-}3$$

Où $k_{\mathrm{A/B}i}$ est la constante cinétique de la réaction base à acide j, $K_{\mathrm{a},i}$ est la constante de dissociation, S_{H^+} est la concentration en ion H^+, S_{i^-} est la concentration de la base et S_{hi} est la concentration de l'acide.

Tableau 2.1 : Fonctions d'inhibition dans le modèle ADM1 (Batstone et al., 2002b)

Type d'inhibition	Équation	Inhibiteur	Processus inhibé
Non-compétitive	$\mathrm{I} = \frac{1}{1 + \mathrm{S_I}/\mathrm{K_I}}$	NH_3	Méthanogénèse acéticlastique
		H_2	Acétogénèse
Substrat secondaire limitant	$\mathrm{I} = \frac{\mathrm{S_I}}{\mathrm{S_I} + \mathrm{K_I}}$	NH_3 et NH_4^+	Tous les processus intracellulaire
Compétitive par un autre substrat	$\mathrm{I} = \frac{1}{1 + \mathrm{S_I}/\mathrm{S}}$	Valérate	Consommation de butyrate
		Butyrate	Consommation de valérate
Empirique	$\mathrm{I} = \frac{1 + 2 \cdot 10^{0.5(\mathrm{pH_{LL}} - \mathrm{pH_{UL}})}}{1 + 10^{\mathrm{pH} - \mathrm{pH_{UL}}} + 10^{\mathrm{pH_{LL}} - \mathrm{pH}}}$	Haut et bas pH[1]	Tous les processus intracellulaires
	$\mathrm{I} = \exp\left(-3\left(\frac{\mathrm{pH} - \mathrm{pH_{UL}}}{\mathrm{pH_{UL}} - \mathrm{pH_{LL}}}\right)^2\right)\Big\vert_{\mathrm{pH} < \mathrm{pH_{UL}}}$ $\mathrm{I} = 1\vert_{\mathrm{pH} > \mathrm{pH_{UL}}}$	Seulement bas pH[1]	Tous les processus intracellulaires

1. $\mathrm{pH_{LL}}$ et $\mathrm{pH_{UL}}$ représentent des limites inférieures et supérieures, respectivement. Pour la première fonction, ces limites correspondent aux pH pour lesquels le groupe de micro-organismes est inhibé à 50%. Pour la deuxième fonction, ces limites correspondent aux pH pour lesquels le groupe de micro-organismes est complètement inhibé et pour lequel il n'est pas du tout inhibé, respectivement.

Le calcul de la concentration en ion H^+ se fait par la résolution d'un bilan de charges :

$$S_{\mathrm{cat}} + S_{\mathrm{nh4+}} + S_{\mathrm{h+}} - S_{\mathrm{hco3-}} - \frac{S_{\mathrm{ac-}}}{64} - \frac{S_{\mathrm{pr-}}}{112} - \frac{S_{\mathrm{bu-}}}{160} - \frac{S_{\mathrm{va-}}}{208} - S_{\mathrm{oh-}} - S_{\mathrm{an}} = 0 \qquad 2\text{-}4$$

Les transferts liquide-gaz ($\rho_{\mathrm{T},j}$) sont implantés pour le CH_4, CO_2 et H_2 :

$$\rho_{\mathrm{T},j} = k_{\mathrm{L}}a(S_i - K_{\mathrm{H},i}p_{\mathrm{gas},i}) \qquad 2\text{-}5$$

Où $p_{\mathrm{gas},i}$ est la pression partielle du composé i, $K_{\mathrm{H},i}$ est sa constante de Henry, S_i est sa concentration dans la phase liquide et $k_{\mathrm{L}}a$ est le coefficient de transfert de masse du réacteur à l'étude.

Finalement, pour chaque composé, une équation différentielle est définie :

$$\frac{dS_i}{dt} = \frac{q_{\mathrm{in}}S_{\mathrm{in},i}}{V_{\mathrm{liq}}} - \frac{S_i q_{\mathrm{out}}}{V_{\mathrm{liq}}} + \sum_{j=1-19} \rho_j v_{i,j} \qquad 2\text{-}6$$

Où $v_{i,j}$ est le coefficient stœchiométrique du composé *i* dans la réaction *j*, $S_{\mathrm{in},i}$ est la concentration du composé i dans le flux entrant, V_{liq} est le volume de liquide dans le réacteur, q_{in} est le débit volumétrique entrant et q_{out} est le débit sortant.

La même équation est définie pour les composés gazeux (G_i), mais en prenant le volume de l'espace de tête du réacteur (V_{gas}), puis le débit gazeux (q_{gas}) sortant est calculé en fonction de la pression dans le réacteur (P_{gas}) et la pression atmosphérique (P_{atm}) :

$$q_{\mathrm{gas}} = k_{\mathrm{p}}\left(P_{\mathrm{gas}} - P_{\mathrm{atm}}\right) \qquad 2\text{-}7$$

Où k_{p} est le coefficient de résistance à l'écoulement.

2.2.2 Versions d'ADM1

Outre la version originale du modèle ADM1, STR-13, deux autres versions ont été développées, principalement pour l'intégration dans un modèle global de traitement des eaux usées :

- La version CEIT pour un *plant-wide model* (ADM1-PWM) (de Gracia et al., 2009; de Gracia, Sancho, García-Heras, Vanrolleghem et Ayesa, 2006; Grau, de Gracia, Vanrolleghem et Ayesa, 2007);
- La version COST pour le *Benchmark Simulation Model no. 2* (BSM2), modèle destiné à l'évaluation de stratégies de contrôle en traitement des eaux usées (Rosén et Jeppsson, 2005; Rosen, Vrecko, Gernaey, Pons et Jeppsson, 2006).

Le développement du modèle ADM1-PWM est basé sur l'application de la conservation de la masse des éléments et des charges. Tandis que la version de l'IWA applique uniquement la conservation de la masse pour la DCO, le carbone et l'azote, la version PWM l'applique pour tous les éléments définissant les composés, c'est-à-dire les éléments C, H, O, N, P ainsi que la charge électrique (Ch). L'ajout du phosphore est une nouveauté dans cette version. Six équations de conservation sont donc définies pour chacun des processus *j* inclus dans le modèle :

$$\sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{C},i} = \sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{H},i} = \sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{O},i} = \sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{N},i} = \sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{P},i} = \sum_i v_{ij} \cdot \beta_{\mathrm{Ch},i} = 0 \qquad 2\text{-}8$$

Où β représente la masse d'un élément par unité stœchiométrique du composé X_i. Pour fermer les bilans, certains composés sont choisis pour agir en tant que source-puits pour les éléments et la charge. Pour ce faire, le phosphore inorganique ($HPO_4^{2-}/H_2PO_4^-$), les cations hydrogène et les anions hydroxydes (H^+, OH^-), et l'eau (H_2O) sous sa forme liquide et gazeuse sont ajoutés, ainsi que leurs réactions d'équilibre correspondantes. Les deux composés représentant les acides et bases fortes (S_{cat} et S_{an}) de la version STR-13 ne sont plus nécessaires, puisque le pH peut être directement calculé à partir de la concentration en ion H^+. La détermination des teneurs en phosphore dans les composés est basée sur la littérature, ainsi que d'après les autres modèles de traitement des eaux usées.

De son côté, les modifications apportées au modèle ADM1 pour son intégration dans BSM2 sont surtout axées sur la réduction des temps de calcul et sur la correction de quelques erreurs dans les bilans de masse pour le carbone et l'azote. Des méthodes de calcul sont proposées afin de réduire la raideur du système, telles que l'utilisation d'équations algébriques pour la résolution du pH et de la concentration en H_2, et l'utilisation d'une fonction continue au lieu d'une fonction discontinue pour le calcul du terme d'inhibition par le pH :

$$I_{\mathrm{pH,j}} = \frac{\left(K_{pH,\mathrm{j}}\right)^{n_{\mathrm{j}}}}{(S_{\mathrm{h+}})^{n_{\mathrm{j}}} + \left(pH_{\mathrm{lim,j}}\right)^{n_{\mathrm{j}}}} \qquad 2\text{-}9$$

Où

$$K_{\mathrm{pH,j}} = 10^{-\frac{\left(pH_{\mathrm{UL,j}}+pH_{\mathrm{LL,j}}\right)}{2}} \qquad 2\text{-}10$$

$$n_{\mathrm{j}} = \frac{3}{pH_{\mathrm{UL,j}} - pH_{\mathrm{LL,j}}} \qquad 2\text{-}11$$

Le but de cette version est de pouvoir utiliser le modèle avec un flux entrant dynamique, des contrôleurs discrets et des senseurs présentant du bruit et des délais.

Dans un contexte de MFA, la version ADM1-PWM procure des avantages évidents dû à sa rigueur dans l'application de la conservation de la masse.

2.2.3 Extensions d'ADM1

Le modèle initial a été conçu pour être malléable et permettre facilement l'ajout d'extensions. Les manques les plus souvent identifiés pouvant avoir un effet lors de conditions standards d'opération, principalement pour le traitement des biosolides, sont la modélisation du phosphore, du soufre et de la précipitation des minéraux, notamment la précipitation des composés phosphatés et soufrés (Batstone, Keller et Steyer, 2006). La prise en compte de la distribution de la taille des particules est la plus rapportée comme extension traitant spécifiquement des OFMSW.

2.2.3.1 Phosphore

Le phosphore est un macronutriment essentiel en agriculture, une ressource limitée et un important polluant aquatique (Elser et Bennett, 2011). L'intérêt principal de l'intégration du phosphore dans ADM1 est de fermer les bilans dans les modèles de traitement des eaux usées (Batstone et al., 2006), mais lorsque le digestat est valorisé en agriculture, le suivi de cet élément et la distinction entre sa présence dans les fractions liquide et solide est primordial pour quantifier sa valeur fertilisante. Par exemple, les techniques de digestion à basse teneur en solides utilisées au Canada requièrent une étape de déshydratation du digestat qui rejette de 0.4 à 0.7 m^3 d'effluent par tonne d'OFMSW (Environment Canada, 2013). Le phosphore contenu dans la fraction liquide n'est donc pas disponible pour application au sol et requiert des procédés additionnels pour le séparer. Sa répartition entre les deux fractions dépend de sa forme et de la technologie de séparation, mais pour un substrat solide comme des cultures énergétique, 35-55% du phosphore peut se retrouver dans la phase liquide (Bachmann et al., 2016; Bauer, Mayr, Hopfner-Sixt et Amon, 2009; Fuchs et Drosg, 2013).

Boucler le cycle des nutriments, particulièrement le phosphore, dans les usines de traitements des matières organiques par biométhanisation est un sujet de recherche actif (Batstone, Hülsen, Mehta et Keller, 2015; Vaneeckhaute et al., 2017), mais une extension complète du modèle ADM1 complexifie grandement le modèle dû aux interactions existantes entre le phosphore, le soufre et le fer et l'ajout d'un grand nombre de procédés de précipitation des minéraux (Flores-Alsina et al., 2016). Une extension a été intégrée dans BSM2 dans lequel le modèle ADM1 reçoit les extrants d'autres modèles de traitement des eaux (Flores-Alsina et al., 2016; Solon et al., 2017). Par contre, il est supposé que les ions Ca^{2+}, Mg^{2+}, K^{+} et Al^{3+} entrent dans le réacteur entièrement sous forme soluble, hypothèse qui n'est pas valide dans le cas des OFMSW.

Une représentation plus simple incluse dans la version ADM1-PWM consiste à incorporer le phosphore organique dans la biomasse, les composites, les carbohydrates et les lipides, ainsi que d'incorporer le phosphore inorganique sous forme d'ions solubles (de Gracia et al., 2006). Le phosphore inorganique n'influence que le pH et aucun processus de précipitation n'est inclus. Ce type de représentation a été utilisé pour la modélisation des traitements de résidus agricoles solides (Galí, Benabdallah, Astals et Mata-Alvarez, 2009) et de résidus de table (Zaher, Li, Jeppsson, Steyer et Chen, 2009).

En observant la stœchiométrie des réactions impliquant le phosphore, cette dernière hypothèse semble valide pour des rapports COD/P dans l'intrant qui sont en équilibre avec le phosphore consommé par la biomasse. En revanche, pour des plus fortes concentrations en phosphore, surtout si le milieu est riche en fer, les processus de précipitation deviennent dominants et la concentration de phosphore à l'état soluble sera surestimée.

2.2.3.2 Soufre

Il a été mentionné dans le rapport technique d'ADM1 (Batstone et al., 2002a) que le modèle est incapable de modéliser des systèmes ayant un flux d'entrée composé de plus de 0.002 M de SO_x dû à l'impact de sa réduction sur un grand nombre de processus biologiques et physico-chimiques. En effet, le soufre oxydé est réduit plus favorablement que les ions d'hydrogène et le dioxyde de carbone, rendant les organismes sulfato-réducteurs compétitifs pour le substrat. Ensuite, le produit de la réduction du sulfate (SO_4) sous sa forme associée, le sulfure d'hydrogène (H_2S), est un composé inhibiteur à des concentrations de 0.002-0.003 M, affectant autant les organismes hydrogénotrophes, acétogènes et acéticlastiques que les bactéries sulfato-réductrices (Batstone et al., 2002a).

En plus, le H_2S sous forme gazeuse est corrosif et toxique; le biogaz doit être désulfurisé s'il contient des concentrations plus élevées que 100 ppm (Edelmann, 2002). Cette procédure est communément effectuée dans les usines de traitement, tant pour le biogaz des biosolides que pour celui des OFMSW, la concentration dans ce dernier pouvant se retrouver entre 20 et 20 000 ppm (Edelmann, 2002). Malgré son importance, le soufre est souvent négligé dans les MFA.

Les extensions d'ADM1 à ce sujet sont essentiellement concentrées sur les processus de réduction du sulfate, en ajoutant un ou plusieurs nouveaux groupes de micro-organismes selon les teneurs en sulfates du flux étudié (Barrera et al., 2015; Batstone, 2006; Fedorovich, Lens et Kalyuzhnyi,

2003). Le soufre est en effet majoritairement sous la forme de sulfate soluble dans les usines de traitement par boues activées des eaux usées (Dewil, Baeyens, Roels et Steene, 2008), avec des concentrations élevées dans l'eau lorsqu'il y a présence de certains effluents industriels, comme de la vinasse de distillerie (Barrera, Spanjers, Romero, Rosa et Dewulf, 2014). Par contre, avant le traitement, le soufre contenu dans les eaux usées municipales (excluant les effluents industriels) est en grande partie sous forme organique, contenu dans les protéines, et sa teneur en sulfate provient uniquement de la source d'eau initiale (Boon, 1995) ou d'une dégradation aérobie (Starkey et Temple, 1956). Il en est de même pour les OFMSW (Edelmann, 2002). C'est pourquoi les extensions développées ne sont pas applicables pour ce type de matière.

En effet, en conditions anaérobies, la décomposition des acides aminés soufrés, majoritairement la cystéine et la méthionine, produit surtout des sulfures et non des sulfates (Boon, 1995; Starkey et Temple, 1956). Ainsi, les deux réactions de formation des composés soufrés sont (Higgins et al., 2006) :

$$C_3H_6O_2N\text{-}S\text{-}CH_3 \text{ (cystéine)} \rightarrow H_2S \qquad 2\text{-}12$$

$$C_4H_8O_2N\text{-}S\text{-}CH_3 \text{ (méthionine)} \rightarrow H\text{-}S\text{-}CH_3 \text{ (méthylmercaptan)} \qquad 2\text{-}13$$

Le méthylmercaptan peut aussi être produit par méthylation du H_2S et peut lui-même être méthylé pour produire du diméthylsulfure ou oxydé pour produire du diméthyldisulfure (Higgins et al., 2006). Ils peuvent tous ensuite être déméthylés par les méthanogènes pour produire du H_2S (Higgins et al., 2006). Ces composés soufrés sont des composés organiques volatils se retrouvant dans le biogaz, mais leur émission cause surtout des problèmes d'odeur lors du stockage de la matière digérée, avant son application au sol. Des extension d'ADM1 pour modéliser la production de ces composés ont été proposées pour le traitement des biosolides (Du et Parker, 2012; Parker et Wu, 2006), mais ne sont pas largement utilisées.

Une méthode simple est de supposer que la biodégradabilité des composés soufrés est la même que celle du C et que tout le S ainsi dégradé se retrouve dans le biogaz sous forme de H_2S (Peu et al., 2012). Cette hypothèse est valide dans la mesure où la concentration en H_2S dans un biogaz issu du traitement des OFMSW est 10 fois plus élevée que celle des composés organiques soufrés (Smet, Van Langenhove et De Bo, 1999). Elle est appliquée dans certains modèles d'ACV, tels qu'ORWARE et WISARD, tandis que d'autres vont supposer une production de dioxyde de soufre lors de la combustion du biogaz, comme dans le modèle d'EASETECH (Boldrin et al., 2011).

Cependant, cette méthode néglige le soufre qui se serait lié ou précipité, pouvant entraîner, pour certains substrats, une surestimation de la production de H_2S dû à une quantité non négligeable de soufre se retrouvant dans la phase solide. Dewil et al. (2008) ont observé que la grande majorité du soufre dans les boues activées se retrouve en tant que sulfure de fer dans la phase solide du digestat à la suite de sa biométhanisation. De plus, en conditions d'enfouissement, environ la moitié des sulfures produits lors de la décomposition d'ordures ménagères se retrouve dans la phase solide (Fairweather et Barlaz, 1998).

Dans ADM1, les sulfures sont généralement modélisés par une réaction acido-basique HS^-/H_2S et par un transfert liquide-gaz du H_2S, avec généralement une modification des cinétiques biochimiques pour prendre en compte l'inhibition par le H_2S (Barrera et al., 2015; Batstone, 2006; Fedorovich et al., 2003; Galí et al., 2009). Par contre, le comportement des sulfures est beaucoup plus complexe et une modélisation complète doit prendre en compte les processus de précipitation et les interactions entre le soufre, le phosphore et le fer (Batstone, Puyol, Flores-Alsina et Rodríguez, 2015). Une version pour BSM2 a été proposée récemment, incluant la précipitation du soufre en tant que sulfure de fer (Flores-Alsina et al., 2016) mais qui, comme dans le cas du phosphore, présente des hypothèses qu'on peut difficilement valider pour les OFMSW.

En bref, les méthodes de modélisation des processus impliquant le phosphore et le soufre ont été revues dans cette section, en portant une attention particulière sur leur applicabilité pour les OFMSW. Cependant, il y a plusieurs autres substances qui peuvent causer des inhibitions ou qui peuvent nuire à la qualité du digestat, telles que les surfactants, les pesticides et les métaux lourds, ou des carences en vitamines et minéraux (Mata-Alvarez, 2003). Des teneurs minimales et maximales ont été publiés pour plusieurs composés (Thanh, Ketheesan, Yan et Stuckey, 2016), mais leur impact dépend d'un grand nombre de facteurs et il est difficile de les appliquer dans des conditions différentes.

La valeur fertilisante du digestat est aussi une fonction de sa teneur en potassium, un macronutriment important, ainsi que sa teneur en micronutriments comme le magnésium, le calcium, le manganèse, etc., qui participent tous aux réactions de précipitation dans le réacteur. La modélisation de ces substances est habituellement incluse avec celle des précipitations du phosphore et du soufre.

2.2.3.3 Taille des particules

Il est connu que la taille des particules influence les cinétiques de dégradation (Sanders, Veeken, Zeeman et van Lier, 2002; Vavilin, Fernandez, Palatsi et Flotats, 2008). C'est pourquoi les prétraitements appliqués aux OFMSW visent habituellement la réduction de la taille ou la désintégration mécanique des cellules (Delgenès, Penaud et Moletta, 2002). Plusieurs modèles cinétiques ont été développés comme alternative à la cinétique d'ordre 1 telle qu'utilisée dans le modèle ADM1 pour représenter ces effets (Vavilin et al., 2008). Le plus utilisé suppose qu'une concentration excessive en enzyme rend la surface de contact des particules le facteur limitant (Hills et Nakano, 1984; Sanders, Geerink, Zeeman et Lettinga, 2000) :

$$\frac{dM}{dt} = -k_{\mathrm{sbk}} A \qquad \text{2-14}$$

Où M est la masse du substrat, k_{sbk} est la constante d'hydrolyse basée sur la surface et A est la surface disponible pour l'hydrolyse. Contrairement à la constante de premier ordre k_{hyd} qui dépend de la matière et de la taille des particules, k_{sbk} dépend uniquement de la matière.

Une telle cinétique a été incorporée dans ADM1 spécifiquement pour évaluer l'effet de la réduction de la taille des particules des OFMSW en co-digestion avec des biosolides (G. Esposito, Frunzo, Panico et d'Antonio, 2008; G. Esposito, Frunzo, Panico et Pirozzi, 2011). L'équation a été reformulée et appliquée à l'étape de désintégration :

$$\frac{dX_c}{dt} = -k_{\mathrm{sbk}} \cdot a^* \cdot X_c \qquad \text{2-15}$$

Où a^* est la surface spécifique, supposée constante en régime permanent. En posant l'hypothèse que les particules ont une forme sphérique et en utilisant la moyenne arithmétique entre le rayon initial R_0 et le rayon final R_{SRT}, a^* peut être calculé :

$$a^* = \frac{3}{\rho} \cdot \frac{1}{2(R_{\mathrm{SRT}} + R_0)} \qquad \text{2-16}$$

$$R_{\mathrm{SRT}} = R_0 - k_{\mathrm{sbk}} \cdot \frac{t_{\mathrm{SRT}}}{\rho} \qquad \text{2-17}$$

Ici, ρ est la densité de la matière et t_{SRT} est le temps de résidence des solides dans le réacteur.

Une représentation comme celle-ci peut être utile dans le contexte de la modélisation d'un prétraitement pour lequel on cherche à optimiser un procédé de réduction de la taille des particules. Par contre, les paramètres requis, tels que k_{sbk} et ρ, ne sont pas autant disponibles dans la littérature que les constantes d'ordre 1. De plus, l'effet est davantage marqué pour les réacteurs opérant à hautes teneurs en solides ou à fortes teneurs en lipides (Sanders et al., 2002)

2.2.4 Modèles de co-digestion basés sur ADM1

Les avantages de la co-digestion ont été maintes fois démontrés à toutes les échelles d'opération, tant sur la production en méthane et la stabilité du procédé que sur la valeur du digestat et la rentabilité de l'opération (Hartmann, Angelidaki et Ahring, 2002; Mata-Alvarez et al., 2014, 2011). Le choix des matières et de leurs proportions est important; le défi est de calibrer un mélange qui favorise les interactions positives, telles qu'équilibrer les teneurs en eau et en nutriments, qui permettent d'éviter les inhibitions et qui optimisent la production en méthane (Mata-Alvarez et al., 2011). Les biosolides représentent le substrat principal le plus étudié, après le fumier animal, avec les OFMSW comme cosubstrat. En mono-digestion, les biosolides et les déchets organiques municipaux ont des caractéristiques qui les désavantagent, qui sont principalement une charge organique faible pour les premiers et des teneurs élevées en métaux lourds et en matières impropres pour les seconds (Mata-Alvarez et al., 2014). En effet, un mélange composé de 20% de biosolides et 80% de matières organiques provenant des déchets municipaux sur base solide permet de diluer ces derniers et de compenser son manque en nutriments, en plus d'augmenter la biodégradabilité des boues et obtenir un rapport C/N optimal (Hartmann et al., 2002).

Cependant, l'utilisation d'heuristiques comme celle-ci a engendré des problèmes dans le passé qui ont en fait entraîné une baisse de la performance. L'effet des caractéristiques des matières et des conditions d'opération doit être pris en compte, rendant évident l'intérêt pour la modélisation phénoménologique (Zaher, Li, et al., 2009). Par exemple, il a été montré que l'ajout de matières provenant d'un tri mécanique des ordures ménagères à un digesteur de boues primaires peut augmenter la production absolue en méthane, mais entraîne une baisse de la rendement spécifique et une accumulation de métaux lourds et de corps étrangers dans le digestat (Pahl, Firth, MacLeod et Baird, 2008). Un modèle complet doit donc pouvoir représenter les changements en production de méthane, mais également les effets des concentrations en métaux et en corps étrangers sur la valorisation du digestat.

Les premiers modèles de co-digestion ont été publiés dans la 2e moitié des années 1990, mais on observe un débit important de publications à partir de 2008, toutes basées sur ADM1 (Mata-Alvarez et al., 2014, 2011). Les différents modèles se distinguent par leur structure et par les processus inclus, ces derniers étant influencés par le type de matières traitées. Les publications traitant des OFMSW le font toutes avec les biosolides comme cosubstrat, en mettant l'accent sur la prédiction de l'inhibition par l'ammoniac (Kiely, Tayfur, Dolan et Tanji, 1997), sur la taille des particules (G. Esposito et al., 2008) ou simplement pour valider les capacités de prédiction d'ADM1 pour ce type de mélange (Derbal, Bencheikh-lehocine, Cecchi, Meniai et Pavan, 2009).

Il y a deux principales méthodes de modélisation de la co-digestion pour intégration dans ADM1, une développée à partir de la version ADM1-PWM et une basée sur la version BSM2 (Figure 2.2). Dans la version développée à partir d'ADM1-PWM, proposée par Galí et al. (2009), un composé X_c est défini pour chaque matière, chacun ayant son propre fractionnement et sa propre constante de désintégration. Tous les autres paramètres sont gardés constants. Dans le modèle développé à partir de la version BSM2, nommé GISCOD *(General Integrated Solid Waste Co-Digestion model)* et proposé par Zaher, Li, et al. (2009), les matières sont directement définies en termes de carbohydrates, protéines, lipides et inertes, puis seulement une constante d'hydrolyse est propre à la matière. Dans ce cas, le composé X_c n'est pas utilisé et les processus de désintégration et d'hydrolyse sont assimilés en un seul processus. Cette dernière méthode serait plus en accord avec la littérature, l'utilisation du composé X_c pour caractériser la matière n'étant plus recommandée (Batstone, Puyol, et al., 2015).

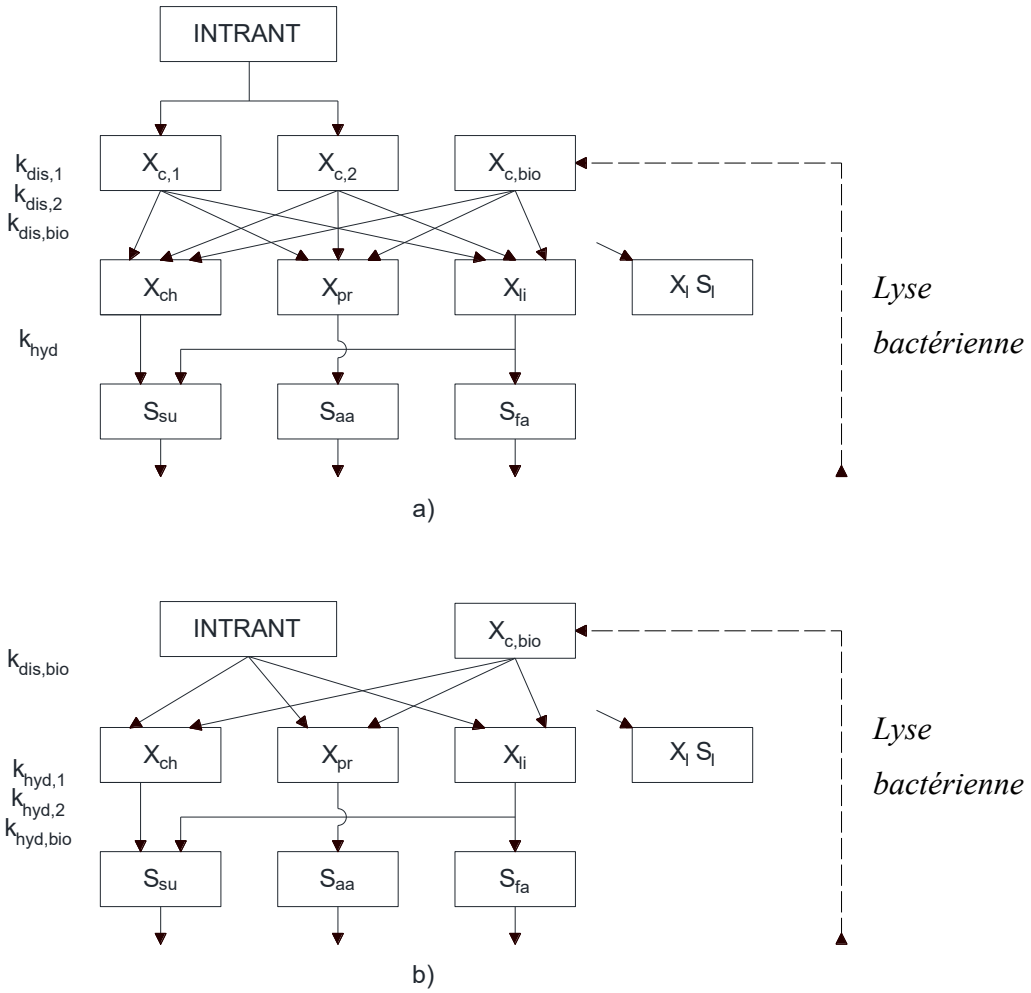


Figure 2.2 : Structure a) du modèle de Galí et al. (2009) et b) du modèle GISCOD de Zaher, Li, et al. (2009)

2.3 Utilisation d'ADM1

Quoique le modèle ADM1 a été développé principalement pour le cas des biosolides, il a été utilisé pour simuler la biométhanisation d'une grande variété de substrats dans différentes conditions d'opération. Le défi dans l'application du modèle réside majoritairement dans la caractérisation de la matière (Batstone et Rodriguez, 2015), ainsi que dans l'identification et l'estimation des paramètres (Donoso-Bravo et al., 2011).

Dans cette section, une revue est faite des utilisations d'ADM1, mettant en lumière les considérations pour l'implantation du modèle dans une représentation MFA d'une usine de traitement des OFMSW.

2.3.1 Estimation des paramètres

Dans la publication technique originale d'ADM1 (Batstone et al., 2002a), les paramètres peu sensibles et peu variables ont été fixés et n'ont normalement pas besoin d'être modifiés. Les auteurs ont également proposé des valeurs pour les paramètres très variables mais peu sensibles, qui sont souvent repris tels quels dans les études de modélisation. Lorsque disponibles pour le substrat traité, des valeurs de la littérature peuvent être utilisées, comme l'ont fait El-Fadel, Maroun, Eldeen et Ghanimeh (2012) pour le cas des OFMSW triées à la source. Pour les paramètres identifiés comme très sensibles et variables, notamment la constante de désintégration (k_{dis}), les constantes d'hydrolyse ($k_{\mathrm{hyd,ch}}$, $k_{\mathrm{hyd,pr}}$, $k_{\mathrm{hyd,li}}$), les constantes de demi-saturation pour les dégradations de l'acétate, du propionate et de l'hydrogène ($K_{\mathrm{S,ac}}$, $K_{\mathrm{S,pro}}$, $K_{\mathrm{S,h2}}$) et les taux maximales de dégradation de l'acétate et du propionate ($k_{\mathrm{m,ac}}$, $k_{\mathrm{m,pro}}$), un certain nombre est généralement estimé par régression. Par exemple, El-Fadel et al. (2012) ont estimé k_{dis}, $K_{\mathrm{S,ac}}$, $K_{\mathrm{S,pro}}$, $K_{\mathrm{S,h2}}$, $k_{\mathrm{m,ac}}$ et $k_{\mathrm{m,pro}}$ pour les OFMSW. Pour le cas des graminées fourragères, Koch, Lübken, Gehring, Wichern et Horn (2010) ont calibré les paramètres $K_{\mathrm{S,h2}}$ et $k_{\mathrm{m,ac}}$, ainsi que la constante d'inhibition de la dégradation du propionate, et celle du butyrate et du valérate, par l'hydrogène ($K_{\mathrm{I,h2,ac}}$ et $K_{\mathrm{I,h2,c4}}$).

Par contre, plusieurs études impliquant différents substrats solides ont obtenu des résultats satisfaisants en se concentrant uniquement sur l'estimation de la constante cinétique de l'étape limitante, telle que k_{dis} (Galí et al., 2009 pour différents résidus agricoles) ou $k_{\mathrm{hyd,ch}}$, $k_{\mathrm{hyd,pr}}$ et $k_{\mathrm{hyd,li}}$ (Arnell et al., 2016 pour des résidus d'abattoir; Zaher, Li, et al., 2009 pour du fumier et des résidus de table). Dans tous les cas, dû aux difficultés d'identification, la même valeur est donnée aux trois constantes d'hydrolyse.

Les constantes d'hydrolyse sont habituellement estimées à partir de tests de potentiels méthanogènes (*biochemical methane potential*, BMP). Ils consistent à faire réagir en mode *batch* une quantité de substrat dans un excès d'inoculum et de nutriments afin de fournir des conditions optimales de dégradation. La production de méthane est mesurée et le test se déroule jusqu'à ce que la production ait chuté ou jusqu'à un temps prédéterminé, indiquant la quantité de méthane par unité de masse volatile (VS) (ou par unité de DCO) que le substrat peut produire en condition anaérobie. Les méthodes varient énormément en termes de préparation du substrat et de l'inoculum, de déroulement du test et d'analyse des données, rendant la comparaison des résultats difficiles

(Angelidaki et al., 2009). Un protocole d'uniformisation a été ainsi proposé par le *Task Group for Anaerobic Biodegradation, Activity and Inhibition* (TG-ABAI) de l'IWA (Angelidaki et al., 2009).

Quoique les valeurs de biodégradabilité obtenues par tests de BMP et par essais à pleine échelle avec des réacteurs en continu concordent bien, des constantes d'hydrolyse d'un ordre de magnitude plus élevées ont été obtenues à pleine échelle (Batstone, Tait et Starrenburg, 2009).

En plus des paramètres cinétiques, les formules moléculaires des carbohydrates, protéines et lipides sont parfois modifiées de celles proposées dans la publication d'ADM1 STR-13. Dans la version PWM, 1% massique de phosphore a été posé pour les carbohydrates et les lipides. De plus, dû aux effets inhibiteurs de l'ammoniac, les formules moléculaires des protéines et des acides aminés sont parfois modifiées, surtout lorsque le substrat n'est pas un biosolide (Tableau 2.2). Plus la quantité d'azote par kg DCO dans les acides aminés (N_{aa}) est élevée, plus petite sera la proportion absorbée par les micro-organismes lors de la consommation du substrat et plus grande sera la libération d'ammoniac.

Tableau 2.2 : Différentes formules moléculaires des protéines et des acides aminés

Formule moléculaire	$\boldsymbol{DCO}_{\mathrm{th}}$ kg DCO kg^{-1}	$\boldsymbol{N}_{\mathrm{pr}}, \boldsymbol{N}_{\mathrm{aa}}$ kmol N (kg DCO)$^{-1}$	**Substrat étudié**	**Référence**
$C_4H_{6.1}O_{1.2}N$	1.530	0.0075	Biosolides (boues activées)	STR-13, PWM, BSM2
$C_5H_7O_2N$	1.416	0.0063	Graminées	(Koch et al., 2010)
$C_6H_{12}O_3N_2$	1.200	0.010	Résidus organiques mélangés	(Zaher, Buffiere, Steyer et Chen, 2009)
$C_{3.95}H_{7.74}O_{2.06}N$	1.287	0.0076	Résidus verts	(Poggio, Walker, Nimmo, Ma et Pourkashanian, 2016)
$C_{3.85}H_{7.64}O_{2.17}N$	1.225	0.0080	Résidus alimentaires	(Poggio et al., 2016)

Bref, le nombre de paramètres à estimer dépend du but de la modélisation. Lorsqu'il est désiré de prédire adéquatement les composés intermédiaires, un plus grand nombre de paramètres est estimé, tandis qu'un niveau de précision moins grand est nécessaire lorsqu'on recherche seulement à prédire certains éléments clés de la performance ou de la stabilité du procédé. Dans ce dernier cas, la production et la composition du biogaz, le pH, l'alcalinité, les concentrations en ions

ammoniums et en DCO soluble et le taux de dégradation des solides volatils sont les principales caractéristiques (Cecchi, Traverso, Pavan, Bolzonella et Innocenti, 2002).

2.3.2 Caractérisation du substrat

Dû au grand nombre de variables définissant le substrat dans le modèle originale d'ADM1 (13 fractions de la DCO excluant les micro-organismes et 4 variables physico-chimiques), de nombreuses méthodes de caractérisation ont été publiées, s'appliquant à différents substrats, différentes prises de mesure et différents niveaux de détail. De façon générale, elles peuvent être regroupées en trois familles : basée sur la mesure directe des différentes variables, basée sur un bilan élémentaire d'analyses typiques ou basée sur des données cinétiques provenant d'expériences en réacteur.

Dans la première famille, on retrouve les méthodes demandant un grand nombre de prises de mesure, le choix de ces dernières étant souvent influencé par les analyses couramment effectuées sur le substrat en question. Par exemple, les biosolides sont habituellement caractérisés suivant les méthodes standards (APHA, 2005) pour les composés solubles, la DCO totale et la concentration en lipides, puis la teneur en protéines est calculée à partir de la différence entre l'azote Kjeldahl et l'azote ammoniacal, et la teneur en carbohydrates est calculée en soustrayant des VS, la quantité de protéine, lipides et acides gras volatils (AGV) (Astals et al., 2013). Pour des résidus agricoles, tels que des fumiers ou des cultures énergétiques, la composition est déterminée sur base VS par analyse de Weender avec la méthode de van Soest, puis en convertissant les fractions de VS en DCO selon un facteur propre à la matière (Koch et al., 2010; Lübken, Wichern, Schlattmann, Gronauer et Horn, 2007; Wichern et al., 2009). Par exemple, des graminées fourragères ont été caractérisées en mesurant les concentrations massiques en protéines, lipides, amidon, cellulose, hémicellulose, lignine et cendres, ramenant les concentrations en termes de DCO à l'aide de la DCO théorique des formules moléculaires correspondantes (Koch et al., 2010). La fraction de carbohydrate est composée d'amidon et de la fraction dégradable des celluloses et hémicelluloses, calculée à partir d'une valeur expérimentale pour le taux de dégradation des solides volatils. La fraction inerte est donc composée de la lignine et de la fraction non dégradable des carbohydrates. Les graminées étant un substrat majoritairement solide, tous les composés solubles sont supposés nuls. La méthode présentée dans Astals et al. (2013) pour des biosolides a également été utilisée pour des résidus agricoles tels que du fumier animal et des résidus de plantes et de fruits, en

incorporant la mesure des teneurs en cellulose, hémicelluloses et lignine pour déterminer la fraction dégradable (Galí et al., 2009).

Dans la deuxième famille, on retrouve les méthodes qui demandent une quantité réduite d'analyses et qui estiment les fractions biochimiques en appliquant la conservation des éléments. Kleerebezen et Van Loosdrecht (2006) ont développé une méthode de caractérisation des eaux usées pour ADM1 s'appuyant sur 5 mesures : DCO, carbone organique totale, azote organique, alcalinité des bicarbonates et alcalinité des AGV neutralisées. La méthode est basée sur l'application d'un bilan de la DCO sur les éléments, un bilan de la valence du carbone et un bilan de charge pour obtenir la stœchiométrie du substrat, puis faisant correspondre cette dernière avec les formules moléculaires des carbohydrates, protéines, lipides et AGV, en conservant l'état d'oxydation du substrat. La différence entre les concentrations en cations et anions est la somme des deux alcalinités. Cette méthode a été validée avec une incertitude plutôt élevée pour prédire le pH, la production de biogaz et sa composition pour un substrat solide végétal (Daels et al., 2009). Une méthode plus complète et adaptée pour le cas des déchets solides a été développée par Zaher, Buffiere, et al. (2009) en utilisant 12 mesures communes en caractérisation des eaux. Elle est basée également sur des formules moléculaires pour les différentes fractions et génère les composés ADM1 en appliquant une conservation des éléments, de la DCO et des liaisons covalentes avec le carbone.

Dans la troisième famille, on retrouve les méthodes qui complètent certaines analyses biochimiques avec des tests en batch pour représenter les différences dans les cinétiques de dégradation des différentes fractions. En effet, les maximas des courbes de taux de production de méthane obtenues dans les tests de BMP permettent de distinguer entre les fractions solubles, rapidement consommées, et les fractions particulaires, limitées par l'étape d'hydrolyse (Girault et al., 2012).

Ensuite, pour les substrats solides, il a été montré à plusieurs reprises que le substrat est mieux représenté comme composé de plusieurs fractions ayant des vitesses de dégradation différentes, entraînant une modification à la structure d'ADM1. À partir des courbes de production de méthane pour des boues primaires, Yasui, Goel, Li et Noike (2008) ont identifié trois fractions particulaires : une hydrolysable, une ayant une dégradation s'apparentant à une lyse de la biomasse, et une dernière ayant besoin de plusieurs étapes de désintégration pour représenter les grosses particules. Les auteurs mentionnent que le nombre variable de réactions de désintégration pour cette dernière fraction est un frein à l'utilisation de cette structure dans le futur. Dans le même ordre idée, Mottet

et al. (2013) propose pour le cas des boues activées de séparer, à l'aide des courbes de taux de production de méthane, la variable X_c en deux fractions, une s'hydrolysant rapidement et une lentement, et de modéliser les réactions de désintégration et d'hydrolyse avec une cinétique de Contois. Cette nouvelle structure a été appliquée pour modéliser la digestion de différents résidus alimentaires mais avec une cinétique de premier ordre, fractionnant la DCO à partir d'une évaluation visuelle des courbes de taux de production de méthane et de compositions biochimiques provenant d'une banque de données (García-Gen et al., 2015).

La méthode proposée dans Poggio et al. (2016) combine l'idée d'un fractionnement cinétique basé sur des tests en batch avec une analyse élémentaire de la matière et l'applique pour des résidus alimentaires et des résidus de jardin. Puisque la mesure de la DCO n'est pas communément effectuée sur ces matières, la DCO théorique calculée à partir de la composition en éléments C, H, O et N est utilisée. Puis, le fractionnement en carbohydrates, protéines et lipides ($f_{\mathrm{ch}}, f_{\mathrm{pr}}, f_{\mathrm{li}}$) est déterminé en appliquant trois équations de bilan :

1. Bilan d'azote : $f_{\mathrm{pr}} = \frac{gN_{\mathrm{substrat}}}{gDCO_{\mathrm{substrat}}} \cdot \frac{gDCO_{\mathrm{pr}}}{g_{\mathrm{pr}}} \cdot \frac{g_{\mathrm{pr}}}{gN_{\mathrm{pr}}}$
2. Bilan de DCO : $f_{\mathrm{ch}} + f_{\mathrm{pr}} + f_{\mathrm{li}} = 1$
3. Bilan de masse volatile : $\left(f_{\mathrm{ch}} \frac{g_{\mathrm{ch}}}{gDCO_{\mathrm{ch}}} + f_{\mathrm{pr}} \frac{g_{\mathrm{pr}}}{gDCO_{\mathrm{pr}}} + f_{\mathrm{li}} \frac{g_{\mathrm{li}}}{gDCO_{\mathrm{li}}}\right) \frac{gDCO_{\mathrm{substrat}}}{gVS_{\mathrm{substrat}}} = 1$

Ici, il est supposé que les composés volatils comme les acides gras et l'azote ammoniacal sont perdus lors de la préparation des échantillons pour l'analyse élémentaire et que toute la DCO théorique est allouée aux carbohydrates, protéines et lipides. Les concentrations en AGV (S_{ac}, S_{pro}, S_{bu}, S_{va}), en azote ammoniacal (S_{IN}) et en ions hydrogènes et hydroxydes ($S_{\mathrm{h+}}$ et $S_{\mathrm{OH\text{-}}}$) sont directement mesurées. Le carbone inorganique (S_{IC}) est déterminé par la mesure d'alcalinité partielle, puis la différence entre S_{cat} et S_{an} est calculée avec un bilan de charge.

Ensuite, un fractionnement cinétique par minimisation d'erreurs est appliqué afin de séparer chaque fraction biochimique (carbohydrates, protéines, lipides) en fraction non dégradable (X_{I}), solide à dégradation rapide (X_{r}), solide à dégradation lente (X_{s}) et soluble (S). Les deux fractions solides ont des constantes d'hydrolyse différentes, mais le même fractionnement biochimique. Il est cependant noté que pour les matières à forte teneur en lignine, la fraction de lipides est surestimée dû à leur DCO théorique élevée comparativement aux autres fractions.

Il est supposé dans cette méthode que la fraction non dégradable a le même fractionnement que la fraction dégradable. Cependant, puisqu'il y 4 éléments et seulement 3 équations, le carbone, l'hydrogène et l'oxygène ne sont pas balancés. Les erreurs relatives sont présentées dans le Tableau 2.3 pour les deux matières décrites dans la publication, en comparant l'utilisation des formules moléculaires des auteurs et celles de la version STR-13.

Tableau 2.3 : Erreurs relatives des bilans de masse dans la méthode de Poggio et al. (2016)

Éléments	**Unité**	**Résidus alimentaires**		**Résidus verts**	
		Protéine de Poggio et al. (2016)	Protéine de STR-13	Protéine de Poggio et al. (2016)	Protéine de STR-13
C	% erreur relative	0.77	-1.03	3.29	1.84
H	% erreur relative	-2.51	2.46	-10.51	-5.98
O	% erreur relative	-0.89	0.68	-2.56	-1.47
N	% erreur relative	0	0	0	0

En général, la plupart des méthodes appliquées aux biosolides distinguent entre les fractions particulaires et solubles de la DCO, tandis que c'est une pratique moins populaire pour les OFMSW. Girault et al. (2012) ont montré l'importance de distinguer les fractions solubles et particulaires de la DCO pour étudier l'impact de différents temps de résidence hydraulique, mais les différences sont jugées non-significatives lorsque la constante d'hydrolyse est supérieure à 0.4 jour^{-1}. L'impact du fractionnement est également réduit lorsqu'on augmente le temps de résidence, avec des différences de l'ordre de 5% de la conversion de la DCO en méthane pour une différence de 20% dans le fractionnement et un temps de résidence de 30 jours.

En conclusion, on observe que les méthodes sont nombreuses et le choix dépend du type de matière, du type d'analyse qu'on désire effectuer et des objectifs de la modélisation. Lorsque le but est d'évaluer différents scénarios de traitement et de prédire l'effet de la co-digestion de différentes matières en étapes préliminaires de conception, les méthodes ayant besoin d'une caractérisation exhaustive de la matière ne sont pas applicables et un recours à des compositions provenant de la littérature est nécessaire. La variabilité dans les substrats que cela engendre devrait théoriquement être compensée par un plus faible niveau de détail requis pour la modélisation. Par exemple, des compositions biochimiques sont disponibles dans des banques de données pour un grand nombre de matières. Par contre, dans le cas d'une intégration dans un modèle MFA où les flux sont caractérisés en termes de masse d'éléments et non en termes de leur composition biochimique, cela engendrerait des complications au niveau de la conservation de la masse. C'est pourquoi la

méthode de fractionnement en termes de carbohydrates, protéines et lipides basée sur une analyse élémentaire proposée par Poggio et al. (2016) semble bien adaptée, mais elle dépend grandement des formules moléculaires choisies et la masse des éléments doit être conservée. Elle n'a également pas été validée pour d'autres substrats que les résidus de table et les résidus verts.

2.4 Synthèse critique de la revue de littérature

Suite à la revue de la littérature, on peut discerner un manque au niveau de la modélisation du processus de biométhanisation lorsque des scénarios de traitement sont évalués avec une MFA, ainsi qu'une difficulté à appliquer le modèle ADM1 pour la comparaison de ces scénarios :

- Les aspects les plus importants à prendre en compte lorsqu'on évalue un scénario de traitement de la matière organique par biométhanisation sont le rendement en biogaz et les teneurs en nutriments, métaux et corps étrangers dans le digestat.
- Les MFA de traitement de matières organiques suivent de plus en plus les nutriments et les métaux, mais ne prennent jamais en compte les corps étrangers.
- L'utilisation de coefficients de transfert obtenus empiriquement ne permet pas de capturer la complexité du procédé, limitant leur applicabilité à des conditions d'opération et à une composition de l'intrant semblables à celles de l'expérience dans laquelle ils ont été obtenus.
- Il n'existe aucun exemple d'intégration de modèles phénoménologiques pour représenter le procédé de biométhanisation dans une MFA.
- Le modèle ADM1 est le modèle de biométhanisation phénoménologique le plus rapporté dans la littérature, mais nécessite un grand nombre de paramètres et une caractérisation expérimentale exhaustive de la matière, rendant son utilisation complexe et peu adaptée pour des études de faisabilité.
- La version d'ADM1, les extensions, les paramètres estimés et la méthode de caractérisation de la matière utilisés dépendent du type de substrat et du but de la modélisation.
- L'utilisation d'ADM1 pour des OFMSW en co-digestion est plutôt récente et encore inexistante pour des fractions organiques triées mécaniquement provenant d'ordures ménagères.

- Les efforts de modélisation phénoménologique du devenir des nutriments dans le réacteur sont focalisés sur les biosolides et peu de validation ont été effectués.
- La méthode de fractionnement de la DCO développée par Poggio et al. (2016) est la méthode qui concorde le mieux avec le type d'information disponible dans une MFA, mais est limitée aux éléments C, H, O et N.

2.5 Objectif générale

L'objectif du projet de maîtrise est de développer une méthode permettant de représenter le procédé de biométhanisation dans une MFA avec un modèle phénoménologique basé sur ADM1 dans le but de comparer différents scénarios de traitement des OFMSW.

2.6 Objectifs spécifiques

L'objectif générale se divise en quatre objectifs spécifiques :

- Créer une interface entre la description des flux dans une MFA et celle du modèle ADM1.
- Adapter le modèle ADM1 pour le cas d'une MFA.
- Valider l'interface et le modèle avec des résultats expérimentaux provenant de la littérature.
- Appliquer le modèle aux flux de matières de l'agglomération de Montréal et de la ville de Laval pour évaluer différents scénarios de traitement.

CHAPITRE 3 DÉVELOPPEMENT ET VALIDATION DU MODÈLE

Dans ce chapitre, le système analysé est tout d'abord défini, puis l'interface entre la MFA et le modèle ADM1 est développée. Ensuite, le modèle ADM1 est adapté pour prendre en compte les aspects déterminants d'un choix de scénario de traitement de la matière organique. Enfin, la méthodologie est validée avec des résultats expérimentaux provenant de la littérature et son intérêt en MFA est démontré.

3.1 Définition du système à l'étude

Dans la MFA à l'étude, le réacteur de biométhanisation est vu comme un processus dans une chaîne de traitement, faisant partie d'un système plus global de GMR. Il reçoit des flux provenant des processus en amont qui, lorsque l'analyse est effectuée aux niveaux des biens et des substances, sont représentés en termes de débits massiques des différentes fractions de matières résiduelles, eux-mêmes définis en termes de débits d'éléments.

Les éléments suivis dans une MFA dépendent des objectifs de l'analyse. Dans le cas où la performance du procédé de biométhanisation et la valeur du digestat produit sont évaluées, les éléments chimiques composant les solides volatils, les macronutriments agricoles et les éléments traces inorganiques (ÉTI) sont choisis (Tableau 3.1). Les ÉTI correspondent à ceux dont la concentration fait l'objet de contraintes d'épandage agricole au Québec selon le Guide sur le recyclage des matières résiduelles fertilisantes (Hébert, 2015).

Tableau 3.1 : Éléments suivis dans la MFA selon leur type

Solides volatils	**Macro-nutriments**	**ÉTI**	
C	(N)	As	Mo
H	P	Cd	Ni
O	K	Co	Pb
N		Cr	Se
S		Cu	Zn
		Hg	

Les éléments qui font l'objet de transformations dans le modèle de biométhanisation développé (CHONSP) sont choisis en tenant compte de leur rôle dans les principaux processus biochimiques, de l'état des connaissances des processus et de l'influence du procédé sur leur présence dans les différents flux. Dû au manque de compréhension des processus de transformation des autres

éléments à l'intérieur du réacteur, des coefficients de transfert empiriques sont utilisés pour ceux-ci comme c'est le cas pour une MFA traditionnelle. On suppose également que la teneur en eau des matières est suivie.

Afin de permettre l'utilisation d'ADM1 pour modéliser le procédé de biométhanisation, les flux doivent en plus être définis en termes des composés du modèle, ajoutant un niveau descriptif additionnel à la MFA. Les différents courants l reliant les processus sont composés de biens k qui, dans le cas du flux entrant au processus de biométhanisation, représentent les différentes fractions de matières résiduelles. Les biens, sont ensuite caractérisés en termes de substances i, comprenant dans ce cas-ci les composés ADM1, qui ont chacune une composition fixe en éléments e. Outre la masse totale, seuls les éléments doivent être conservés dans l'analyse. Les courants, les biens, les substances et les éléments sont définis en termes de débits massiques $\dot{F}$, $\dot{M}$, $\dot{X}$ et $\dot{Y}$, respectivement (Tableau 3.2).

Au lieu d'utiliser des coefficients de transfert empiriques provenant d'usines en opération pour prédire les débits massiques dans une future usine, l'objectif est ici de calculer les coefficients de transfert en régime permanent $TC_{k,i}$ ou dynamique $TC_{k,i}(t)$ des substances pour chaque bien par modélisation du procédé avec le modèle ADM1.

Tableau 3.2 : Description des niveaux de flux dans la MFA

Nom du flux	**Courants**	**Biens**	**Substances**	**Éléments**
Variable	F	M	X	Y
Indice	l	k	i	e
Exemples	- Matières organiques ayant subi un prétraitement - Digestat - Biogaz	- Résidus de table - Résidus verts - Verre - Plastique - Métal	- Carbohydrates - Protéines - Lipides - Matière organique non dégradable - Eau	- C - O - N - S - P - Zn - As

3.2 Interface entre la MFA et ADM1

La MFA initiale décrit les flux en termes de biens et d'éléments. Afin de décrire les flux en termes de substances, la méthode de fractionnement de la DCO proposée par Poggio et al. (2016) est étendue pour inclure le soufre et le phosphore dans la représentation des formules moléculaires. Les teneurs en phosphore dans les carbohydrates et dans les lipides sont habituellement fixées par

souci de cohérence avec les autres modèles biochimiques de traitement des eaux, telle la série ASM, mais celles-ci ne peuvent être utilisées avec la méthode de fractionnement de la DCO. En effet, il a été mentionné dans la section 2.3.2 que cette dernière ne permet pas de conserver les éléments CHO, seulement la masse volatile et sa DCO. Quoiqu'il ne soit pas problématique de compenser les erreurs pour ces éléments en modifiant la composition de la fraction non dégradable, cette stratégie n'est pas désirable pour le phosphore et le soufre. La distribution de ces derniers dans les fractions dégradables et non dégradables influencent leur mise en solution à la suite de l'hydrolyse des composés dégradables; donc l'absorption du P par la biomasse, l'inhibition par les sulfides et la proportion de H_2S dans le biogaz sont altérées. Pour assurer que leur disponibilité soit proportionnelle à la dégradabilité de la matière, leurs fractions massiques dans les substances deviennent des paramètres variables à identifier pour chaque bien.

Ainsi, les hypothèses suivantes sont posées pour fractionner la DCO d'une matière (bien) k :

1. Les matières dans un flux de déchets solides ne contiennent aucun composé soluble, que des carbohydrates, des protéines et des lipides sous forme particulaire, ainsi que des cendres.
2. Les fractions massiques des éléments C, H, O et N dans les carbohydrates, protéines et lipides sont fixes pour une matière donnée, tandis que celles du S et du P sont calculées à partir de leur fraction dans la matière.
3. Tout le phosphore dans la matière est contenu dans les fractions de carbohydrates et de lipides.
4. Les proportions massiques en phosphore dans les carbohydrates et dans les lipides sont les mêmes.
5. Tout le soufre est contenu dans les protéines.
6. La fraction non dégradable suit le même fractionnement en carbohydrates, protéines et lipides que la fraction dégradable.

La DCO théorique d'un bien ou d'une substance est calculée à partir de sa composition en éléments CHONSP, en appliquant pour chaque élément e, la demande théorique en oxygène ($ThOD_e$) nécessaire pour complètement l'oxyder à son état de référence (Tableau 3.3).

Tableau 3.3 : DCO théorique des éléments et des charges (Gujer, Henze, Mino et van Loosdrecht, 2000)

Élément ou charge	**État de référence**	**DCO théorique** ($ThOD_e$)
		g DCO (mol élément ou charge)$^{-1}$
C	CO_2	+ 32
H	H_2O	+ 8
O	O_2	- 16
N	NH_4^+	- 24
S	SO_4^{2-}	+ 48
P	PO_4^{3-}	+ 40
-	Zéro charge	+ 8
+	Zéro charge	- 8

Ainsi, pour un bien k ayant un vecteur de débits massiques en base sèche d'éléments $\dot{\boldsymbol{Y}}_k$ et une composition élémentaire $\boldsymbol{y}_k$ définie par :

$$\boldsymbol{y}_k = \dot{\boldsymbol{Y}}_k \cdot \frac{1}{\sum_e \dot{Y}_{k,e}} \qquad 3\text{-}1$$

Où e correspond aux éléments caractérisant totalement la matière :

$$\sum_e y_{k,e} = 1 \qquad 3\text{-}2$$

On peut calculer une DCO théorique sur base massique γ_k :

$$\gamma_k = \left[\frac{ThOD_e}{m_{a_e}}\right] \cdot \boldsymbol{y}_k \qquad e \in \{\mathrm{C, H, O, N, S, P}\} \qquad 3\text{-}3$$

Où m_{a_e} représente les masses atomiques des éléments. Ensuite, les fractions f_i de carbohydrates, protéines et lipides, sur base DCO, ainsi que la fraction massique de soufre dans les protéines ($\alpha_{\mathrm{S,pr}}$) et celle du phosphore dans les carbohydrates et lipides ($\alpha_{\mathrm{ch,P}} = \alpha_{\mathrm{li,P}}$), sont calculées en résolvant le système d'équations suivant pour chaque bien k, ajoutant un bilan de phosphore et un bilan de soufre à celui de Poggio et al. (2016) :

Bilan de masse : $$\gamma_k \left(\frac{f_{\mathrm{ch}}}{\gamma_{\mathrm{ch}}} + \frac{f_{\mathrm{pr}}}{\gamma_{\mathrm{pr}}} + \frac{f_{\mathrm{li}}}{\gamma_{\mathrm{li}}}\right) = y_{k,\mathrm{C}} + y_{k,\mathrm{H}} + y_{k,\mathrm{O}} + y_{k,\mathrm{N}} + y_{k,\mathrm{P}} + y_{k,\mathrm{S}} \qquad 3\text{-}4$$

Bilan de DCO : $f_{\mathrm{ch}} + f_{\mathrm{pr}} + f_{\mathrm{li}} = 1$ 3-5

Bilan de N : $\gamma_k \left(\alpha_{\mathrm{pr,N}} \frac{f_{\mathrm{pr}}}{\gamma_{\mathrm{pr}}} \right) = y_{k,\mathrm{N}}$ 3-6

Bilan de P : $\gamma_k \left(\alpha_{\mathrm{ch,P}} \frac{f_{\mathrm{ch}}}{\gamma_{\mathrm{ch}}} + \alpha_{\mathrm{li,P}} \frac{f_{\mathrm{li}}}{\gamma_{\mathrm{li}}} \right) = y_{k,\mathrm{P}}$ 3-7

Bilan de S : $\gamma_k \left(\alpha_{\mathrm{pr,S}} \frac{f_{\mathrm{pr}}}{\gamma_{\mathrm{pr}}} \right) = y_{k,\mathrm{S}}$ 3-8

Ensuite, puisque des résultats de tests de BMP sont disponibles pour un grand nombre de matières et qu'ils représentent bien la biodégradabilité anaérobie, ils sont utilisés pour déterminer la fraction dégradable de la DCO (f_{d}). Cette dernière est déterminée comme suit :

$$f_{\mathrm{d}} = \frac{B_k}{\gamma_k} \cdot \frac{\gamma_{\mathrm{CH4}}}{V_{\mathrm{m}}} \qquad 3\text{-}9$$

Où B_k est le potentiel méthanogène de la matière k (volume de CH_4 par unité de matière de matière) et V_{m} est le volume molaire qui, pour un gaz parfait en conditions normales de température et de pression, est 22.4 L/mol.

La fraction inerte de la DCO (f_{I}) devient donc la proportion de la DCO théorique qui n'est pas dégradée lors d'un test de BMP :

$$f_{\mathrm{I}} = 1 - f_{\mathrm{d}} \qquad 3\text{-}10$$

Les débits massiques des quatre substances peuvent ainsi être calculés en base humide :

$$\dot{\boldsymbol{X}}_k = \gamma_k \frac{\boldsymbol{f}_k}{\boldsymbol{\gamma}_k} \dot{M}_k$$

$$\begin{bmatrix} \dot{X}_{\mathrm{ch}} \\ \dot{X}_{\mathrm{pr}} \\ \dot{X}_{\mathrm{li}} \\ \dot{X}_{\mathrm{I}} \end{bmatrix}_k = \gamma_k \begin{bmatrix} f_{\mathrm{ch}}/\gamma_{\mathrm{ch}} \\ f_{\mathrm{pr}}/\gamma_{\mathrm{pr}} \\ f_{\mathrm{li}}/\gamma_{\mathrm{li}} \\ f_{\mathrm{I}}/\gamma_{\mathrm{I}} \end{bmatrix}_k \dot{M}_k \qquad 3\text{-}11$$

Où $\dot{M}_k$ est le débit massique en base humide. La teneur en eau $w_{k,\mathrm{h2o}}$ devient une substance :

$$\dot{X}_{k,\mathrm{h2o}} = w_{k,\mathrm{h2o}} \cdot \dot{M}_k \qquad 3\text{-}12$$

Contrairement aux principales versions d'ADM1 rapportées dans la littérature, les substances $\dot{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{ADM1}}$ entrantes au modèle sont ici définies en termes de débits massiques et non en termes de concentration dans le courant total :

$$\dot{\boldsymbol{X}}_k^{\mathrm{ADM1}} = \gamma_k \cdot \boldsymbol{f}_k \cdot \dot{M}_k \qquad 3\text{-}13$$

L'interface développée est résumée dans la Figure 3.1. Les autres éléments dans la MFA sont agrégés dans le nouveau composé $\dot{X}_{k,\mathrm{FS}}$.

Débits avant l'interface

Bien	**Unité**
$\dot{M}_k$	kg k j^{-1}
Substance	**Unité**
$\dot{X}_{k,\mathrm{h2o}}$	kg H_2O j^{-1}
Élément	**Unité**
$\dot{Y}_{k,\mathrm{C}}$	kg C j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{H}}$	kg H j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{O}}$	kg O j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{N}}$	kg N j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{S}}$	kg S j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{P}}$	kg P j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{As}}$	kg As j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Cd}}$	kg Cd j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Co}}$	kg Co j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Cr}}$	kg Cr j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Cu}}$	kg Cu j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Hg}}$	kg Hg j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Mo}}$	kg Mo j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Ni}}$	kg Ni j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Pb}}$	kg Pb j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Se}}$	kg Se j^{-1}
$\dot{Y}_{k,\mathrm{Zn}}$	kg Zn j^{-1}

INTERFACE

Débits après l'interface

Substance	**Unité**
$\dot{X}_{k,\mathrm{h2o}}$	kg H_2O j^{-1}
$\dot{X}_{k,\mathrm{ch}}$	kg DCO j^{-1}
$\dot{X}_{k,\mathrm{pr}}$	kg DCO j^{-1}
$\dot{X}_{k,\mathrm{li}}$	kg DCO j^{-1}
$\dot{X}_{k,\mathrm{I}}$	kg DCO j^{-1}
$\dot{X}_{k,\mathrm{FS}}$	kg j^{-1}

Figure 3.1 : Interface MFA - ADM1 pour un flux de matière résiduelle solide et dégradable k

Enfin, puisque les matières entrantes sont définies uniquement en termes de composés solides, il est supposé que leur pH initial n'influence pas les résultats du modèle. Un pH arbitraire de 7.0 est posé pour le flux entrant. Des simulations en régime permanent avec différents pH démontrent la validité de cette hypothèse : entre un pH entrant de 3 et un pH entrant de 9, le pH du réacteur ne varie que de l'ordre de 0.005.

3.3 Modèle ADM1 adapté

Afin d'être cohérent avec la nomenclature d'ADM1, les substances particulaires, solubles et gazeuses sont désignées dans le modèle par les variables X_i, S_i et G_i, respectivement. Comme dans la version PWM, le volume de liquide V_{liq} dans le réacteur utilisé pour calculer les concentrations correspond à un volume d'eau à une densité constante ρ_{h2o}, négligeant l'apport de la matière sèche :

$$V_{\mathrm{liq}} = \frac{S_{\mathrm{h2o}}}{\rho_{\mathrm{h2o}}} \qquad 3\text{-}14$$

Où S_{h2o} est la masse d'eau dans le réacteur.

Ensuite, l'intrant au procédé étant défini en termes de différents flux de matières, la structure d'ADM1 est modifiée selon celle de GISCOD (Zaher, Li, et al., 2009) pour une co-digestion. Mais, en plus des cinétiques uniques, les processus d'hydrolyse de chaque matière font également l'objet de stœchiométries uniques provenant des différentes fractions massiques des éléments dans les composés. La structure de la matrice des coefficients stœchiométriques pour les processus d'hydrolyse d'une matière k est présentée dans le Tableau 3.4. Pour les autres processus, la structure de la version PWM d'ADM1 est utilisée, avec une extension pour la modélisation de la réaction acido-basique du soufre sous forme de HS^-/H_2S une fois en solution. Des termes d'inhibition par les sulfures sont ajoutés également. Comme dans GISCOD, le composé X_{c} est utilisé uniquement pour représenter de la biomasse morte. Les équations du modèle, la matrice des coefficients stœchiométriques pour les réactions de base et les paramètres utilisés sont disponibles dans l'Annexe A.

Pour ce qui est des paramètres, seule la constante d'hydrolyse (k_{hyd}) est adaptée selon la matière et provient de tests de BMP. La même constante est utilisée pour l'hydrolyse des carbohydrates, des protéines et des lipides. Les autres paramètres sont les mêmes qu'utilisés dans les versions PWM et BSM2 pour le traitement des biosolides. Malgré les limitations discutées à la section 2.3.1, ces paramètres sont jugés valides pour les besoins de ce projet de maîtrise si les conditions d'opération ne dévient pas significativement de celles pour le traitement des biosolides.

La distribution de la taille des particules est négligée étant donné le manque de constantes cinétiques disponibles dans la littérature pour une hydrolyse basée sur la surface des particules. Une cinétique d'ordre 1 est donc utilisée, comme dans le modèle ADM1 de base.

Tableau 3.4 : Matrice des coefficients stœchiométriques des processus d'hydrolyse d'une matière (les composés qui ne réagissent pas ne sont pas montrés)

Composé →	***i***	**Soluble**			**Particulaire**			**Composés source-puit**					
j	**Processus ↓**	S_{su}	S_{aa}	S_{fa}	$X_{k,\mathrm{ch}}$	$X_{k,\mathrm{pr}}$	$X_{k,\mathrm{li}}$	S_{h2o}	$S_{\mathrm{h+}}$	$S_{\mathrm{hpo4=}}$	$S_{\mathrm{nh4+}}$	S_{co2}	S_{h2s}
1	**Hydrolyse carbo-hydrates**	1			-1			$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{H}} v_{i,1}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{Ch}} v_{i,1}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{P}} v_{i,1}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{N}} v_{i,1}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{C}} v_{i,1}$	$-\sum_i \beta_{i,S} v_{i,1}$
2	**Hydrolyse protéines**		1			-1		$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{H}} v_{i,2}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{Ch}} v_{i,2}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{P}} v_{i,2}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{N}} v_{i,2}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{C}} v_{i,2}$	$-\sum_i \beta_{i,S} v_{i,2}$
3	**Hydrolyse lipides**	$1-f_{\mathrm{fa,li}}$		$f_{\mathrm{fa,li}}$			-1	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{H}} v_{i,3}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{Ch}} v_{i,3}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{P}} v_{i,3}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{N}} v_{i,3}$	$-\sum_i \beta_{i,\mathrm{C}} v_{i,3}$	$-\sum_i \beta_{i,S} v_{i,3}$

Note : Le paramètre $\beta_{i,e}$ représente la masse d'élément *e* par unité stœchiométrique du composé *i*, et $v_{i,j}$ représente le coefficient stœchiométrique du composé *i* dans le processus *j*. Ces paramètres sont propres à chaque matière *k*.

3.4 Données utilisées

Les deux paramètres qui sont spécifiques à chaque matière sont le potentiel méthanogène et la constante d'hydrolyse, tous les deux pouvant être obtenus avec un test de BMP. Quoique les résultats sont disponibles pour un grand nombre de matières, les valeurs diffèrent grandement, en partie à cause des différences au niveau de la nature de la matière et sa préparation et au niveau du déroulement des expériences et de l'analyse des données (Raposo, De la Rubia, Fernández-Cegrí et Borja, 2012; Vavilin et al., 2008). Les paramètres utilisés dans le cadre de ce mémoire ont été choisis en suivant une méthode systématique de sélection :

- La méthode expérimentale et la présentation des résultats doivent respecter le plus possible celles du protocole d'Angelidaki et al. (2009).
- Le même ensemble de données doit être utilisé pour obtenir le potentiel méthanogène et la constante d'hydrolyse.
- L'inoculum utilisé doit provenir d'un réacteur traitant des OFMSW.
- La nature de la matière doit se rapprocher le plus possible de celle qui sera traitée dans les usines de biométhanisation du Québec.

Les valeurs choisies pour les cinq catégories de matières dégradables traitées dans ce mémoire sont présentées dans le Tableau 3.5.

Tableau 3.5 : Potentiels méthanogènes et constantes d'hydrolyse utilisés

Catégorie de matières (Bien)	**BMP (NL CH_4 kgVS^{-1})**	**k_{hyd} (j^{-1})**	**Réf.**
Résidus alimentaires	357 ± 24.7	0.25[1]	(Trzcinski et Stuckey, 2012)
Résidus verts mélangés	114 ± 0.6	0.121[1]	(Trzcinski et Stuckey, 2012)
Papier	147 ± 17.1	0.095[1]	(Trzcinski et Stuckey, 2012)
Couches[2]	204 ± 18	0.025 ± 0.003	(Jokela, Vavilin et Rintala, 2005)
Textile[2]	228 ± 118	0.021 ± 0.001	(Jokela et al., 2005)

[1] Les incertitudes ne sont pas rapportées pour ce paramètre

[2] L'inoculum utilisé provient d'un réacteur traitant des biosolides

3.5 Validation de la méthodologie

Dans cette section, la capacité du modèle à prédire de façon dynamique les extrants au procédé de biométhanisation, en utilisant des compositions élémentaires génériques en combinaison avec des constantes d'hydrolyse et des potentiels méthanogènes provenant de la littérature, sera tout d'abord évaluée. Ensuite, l'intérêt de la méthodologie en MFA sera démontré.

3.5.1 Validation dynamique

Afin de valider de façon dynamique les hypothèses de l'interface et quantifier les erreurs qu'engendrent l'utilisation de compositions élémentaires génériques pour caractériser les matières, les résultats de simulations utilisant la méthode développée sont comparés avec des résultats expérimentaux provenant de la littérature (Poggio, 2015; Poggio et al., 2016). Les données proviennent de 3 réacteurs semi-continus : le premier traitant uniquement des résidus alimentaires (R-a), le deuxième traitant des résidus alimentaires en co-digestion avec des résidus verts (R-b), et le troisième traitant des résidus verts en début d'expérience, puis en co-digestion en fin d'expérience (R-c). Différentes charges organiques sont appliquées au cours des expériences, permettant d'évaluer la performance du modèle dans des conditions d'opération variables. La méthode de caractérisation en termes de composés ADM1 développée précédemment est comparée avec la méthode de caractérisation expérimentale où un plus grand nombre d'analyses est nécessaire et où celles-ci sont effectuées directement sur les matières à l'étude.

Les caractéristiques des flux génériques de résidus alimentaires (RA) et de résidus verts (RV) utilisés comme intrants au modèle MFA proviennent de données de caractérisation des ordures ménagères danoises (Götze, Pivnenko, Boldrin, Scheutz et Astrup, 2016), avec une proportion de viande dans les résidus alimentaires de 37% (base sèche) (Riber, Petersen et Christensen, 2009). Les compositions élémentaires utilisées sont disponibles dans l'Annexe B. La teneur en solides (TS) des flux est déduite des analyses expérimentales, puisque ce paramètre est habituellement contrôlé dans une usine de biométhanisation.

Les caractéristiques biochimiques et physico-chimiques des flux ainsi obtenues (flux générique) sont comparées avec les analyses expérimentales (flux expérimental) dans le Tableau 3.6. On note des différences relatives plutôt faibles pour les concentrations des éléments ayant le plus d'impact sur les composés ADM1, soit les éléments C, H, O et N, se traduisant par des DCO théoriques

semblables. Les différences sont toutefois plus élevées pour le soufre, mais les concentrations demeurent relativement faibles. De plus, aucune alcalinité partielle n'a été détectée, confirmant l'hypothèse que la concentration en carbonate est négligeable. En revanche, les analyses expérimentales montrent que les matières contiennent des concentrations plutôt élevées en acide acétique. Ceci peut avoir un impact sur les prédictions, plus particulièrement le pH, puisque la concentration d'AGV est négligée dans la méthodologie développée. Les auteurs stipulent qu'une dégradation de la matière durant le stockage est la cause de cette teneur élevée en AGV.

Tableau 3.6 : Comparaison des caractéristiques biochimiques et physico-chimiques des matières génériques avec celles obtenues par analyses expérimentales (le contenu en TS des flux génériques est posé égal à celui du flux expérimental)

Paramètre	**Unité**	**RA**		**RV**	
		Flux expérimental	Flux générique	Flux expérimental	Flux générique
TS	Kg TS kg^{-1}	0.2965	0.2965	0.4017	0.4017
VS	kg (kg TS)$^{-1}$	0.925	0.89	0.6836	0.68
Cendre	kg (kg TS)$^{-1}$	0.075	0.11	0.316	0.32
C	kg (kg TS)$^{-1}$	0.488	0.44	0.347	0.32
H	kg (kg TS)$^{-1}$	0.072	0.072	0.045	0.047
N	kg (kg TS)$^{-1}$	0.033	0.029	0.020	0.020
S	kg (kg TS)$^{-1}$	0.0010	0.0059	0.0003	0.0047
O	kg (kg TS)$^{-1}$	0.331	0.34	0.272	0.29
P	kg (kg TS)$^{-1}$	N/A	0.0058	N/A	0.0032
DCO_{th}	kg DCO (kg TS)$^{-1}$	1.48	1.38	0.97	0.91
pH	-	4.74	7.0	5.02	7.0
Alk part.	mg $CaCO_3$ kg^{-1}	0	0	0	0
Alk inter.	mg $CaCO_3$ kg^{-1}	3443	0	3181	0
$N\text{-}NH_4$	mg $N\text{-}NH_4$ kg^{-1}	528	0	630	0
AGV					
Acétique	mg kg^{-1}	3029	0	4173	0
Propionique	mg kg^{-1}	27	0	223	0
i-butyrique	mg kg^{-1}	19	0	12	0
n-butyrique	mg kg^{-1}	53	0	136	0
i-valérique	mg kg^{-1}	0	0	25	0
n-valérique	mg kg^{-1}	2	0	8	0

Les caractérisations en termes de composés ADM1 sont présentées dans le Tableau 3.7. Pour la méthode expérimentale, les fractions dégradables de la DCO et les constantes d'hydrolyse sont celles rapportées par les auteurs et ont été obtenues par calibration en utilisant des réacteurs

discontinus (*batch*). Pour les matières génériques, ces paramètres sont ceux obtenus à partir du Tableau 3.5. Ils sont comparés dans le Tableau 3.8. Ces deux paramètres présentent les différences les plus significatives du point de vue de l'impact potentiel sur le procédé. En effet, les constantes d'hydrolyse utilisées dans les simulations sont 4 à 5 fois plus petites que celles rapportées par les auteurs. Les fractions dégradables sont plus petites également qui, en combinaison avec des DCO théoriques légèrement inférieures, entraînent des concentrations plus faibles en composés dégradables X_{ch}, X_{pr} et X_{li}. Ceci se traduit par des charges organiques (sur base DCO) plus faibles. On peut donc s'attendre à un rendement plus faible en méthane et à des temps de réponse plus lent pour les simulations utilisant les paramètres génériques.

Tableau 3.7 : Composés ADM1 obtenus selon les deux méthodes de caractérisation

Composé	**Unité**	**RA**		**RV**	
	x10^{-3}	Flux expérimental	Flux générique	Flux expérimental	Flux générique
S_{va}	kg DCO kg^{-1}	0.004	0	0.032	0
S_{bu}	kg DCO kg^{-1}	0.132	0	0.147	0
S_{pro}	kg DCO kg^{-1}	0.04	0	0.251	0
S_{ac}	kg DCO kg^{-1}	3.241	0	4.465	0
S_{IN}	kmol N kg^{-1}	0.03	0	0.036	0
S_{IC}	kmol C kg^{-1}	0	0	0	0
X_{ch}	kg DCO kg^{-1}	137.77	129.07	68.91	61.07
X_{pr}	kg DCO kg^{-1}	69.47	55.43	22.87	19.27
X_{li}	kg DCO kg^{-1}	121.44	84.97	25.53	9.25
X_{I}	kg DCO kg^{-1}	111.32	140.26	273.7	277.86
S_{h2o}	kg kg^{-1}	703.5	703.5	598.3	598.3
$X_{\mathrm{other,FS}}$	kg kg^{-1}	22.1	30.60	127.1	125.35
$S_{\mathrm{h+}}$	kmol kg^{-1}	N/A	10^{-7}	N/A	10^{-7}
$S_{\mathrm{oh-}}$	kmol kg^{-1}	N/A	10^{-7}	N/A	10^{-7}
S_{cat}	kmol kg^{-1}	0	N/A	0	N/A
S_{an}	kmol kg^{-1}	0.012	N/A	0.004	N/A

Tableau 3.8 : Comparaison des constantes d'hydrolyse et des fractions dégradables utilisées dans les deux simulations

Composé	**Unité**	**RA**		**RV**	
		Flux expérimental	Flux générique	Flux expérimental	Flux générique
k_{hyd}	j^{-1}	1.09	0.25	0.682	0.121
f_{d}	-	0.747	0.658	0.300	0.244

Les intrants des 3 réacteurs sont présentés dans la Figure 3.2 et les taux de charges organiques (OLR) résultant de l'application des deux méthodes de caractérisation, dans la Figure 3.3. L'OLR est calculé à chaque épisode de chargement du réacteur en prenant la moyenne des 6 derniers chargements.

Pour les fins de validation, les résultats obtenus lors de la simulation avec le modèle développé précédemment (flux générique) sont comparés avec ceux obtenus en utilisant la méthode expérimentale de caractérisation (flux mesuré expérimentalement). Pour ce dernier, la version d'ADM1 STR-13 est utilisée, puisque la caractérisation expérimentale a été effectuée spécifiquement pour cette version. Le calcul du pH s'effectue donc par un bilan de charge, rendant nécessaire l'évaluation des composés S_{cat} et S_{an} à partir du pH des matières (Équation 2-4).

Le rendement spécifique en méthane (Figure 3.4), la productivité volumétrique (Figure 3.5), l'alcalinité bicarbonate (Figure 3.6), la concentration en azote ammoniacal (Figure 3.7), le pH (Figure 3.8) et la concentration en AGV totaux (Figure 3.9) pour chacun des réacteurs sont utilisés pour évaluer la validité du modèle. Les rendements spécifiques en méthane sont calculés en prenant le volume de méthane produit entre 2 épisodes de chargement du réacteur, divisé par la moyenne de la charge organique des 6 chargements précédents.

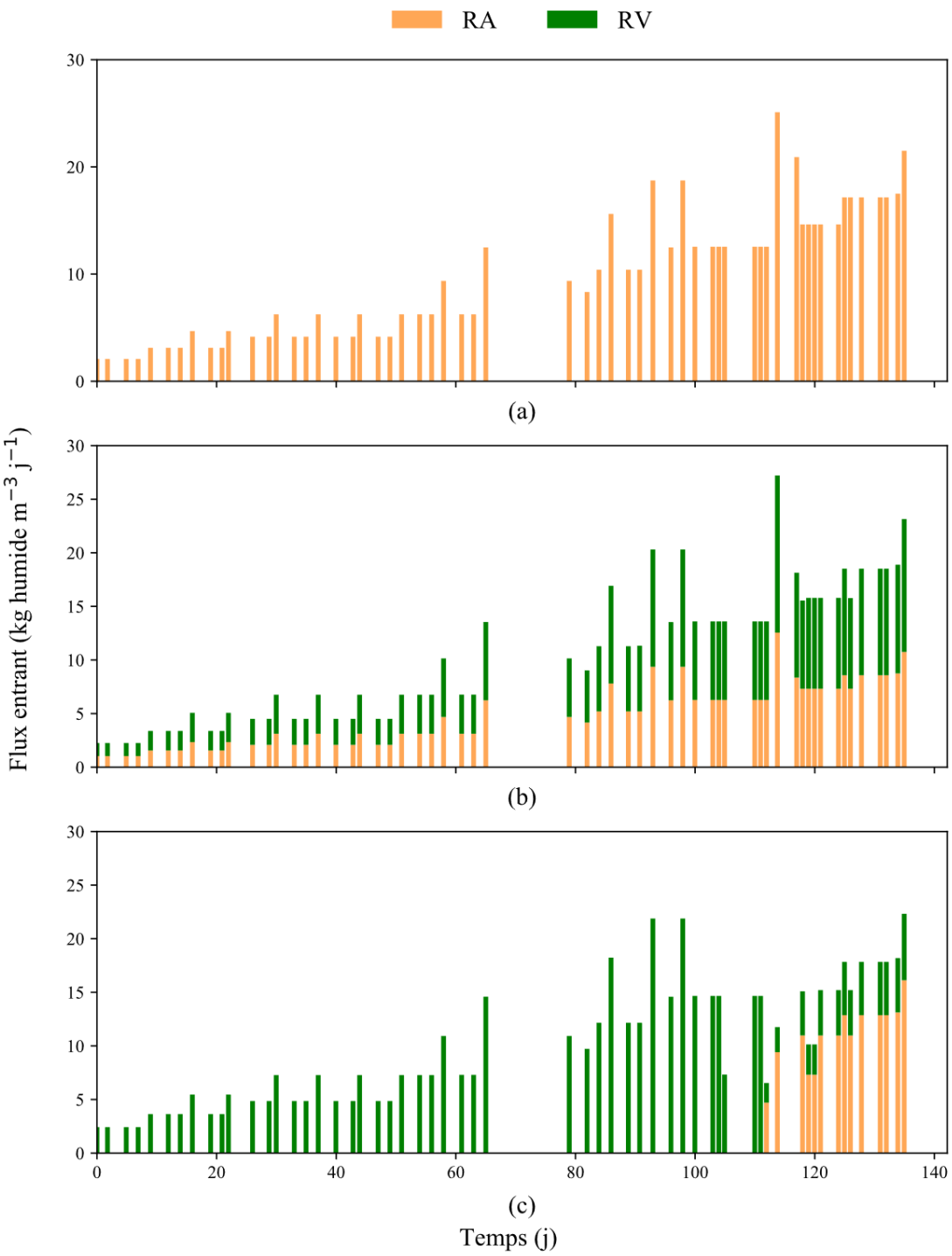


Figure 3.2 : Débit entrant au réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c par unité de volume du réacteur

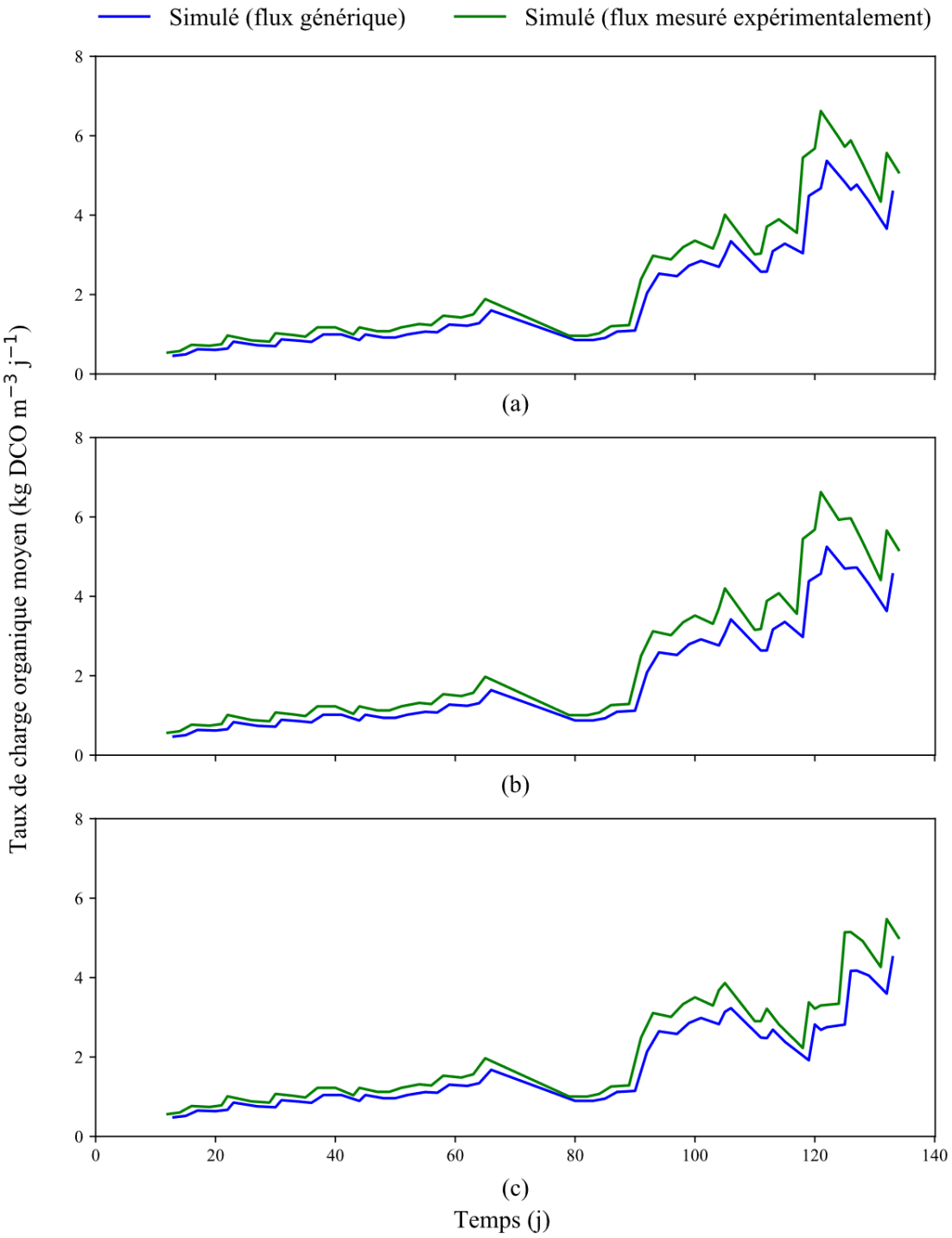


Figure 3.3 : Taux de charge organique (OLR) moyen selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

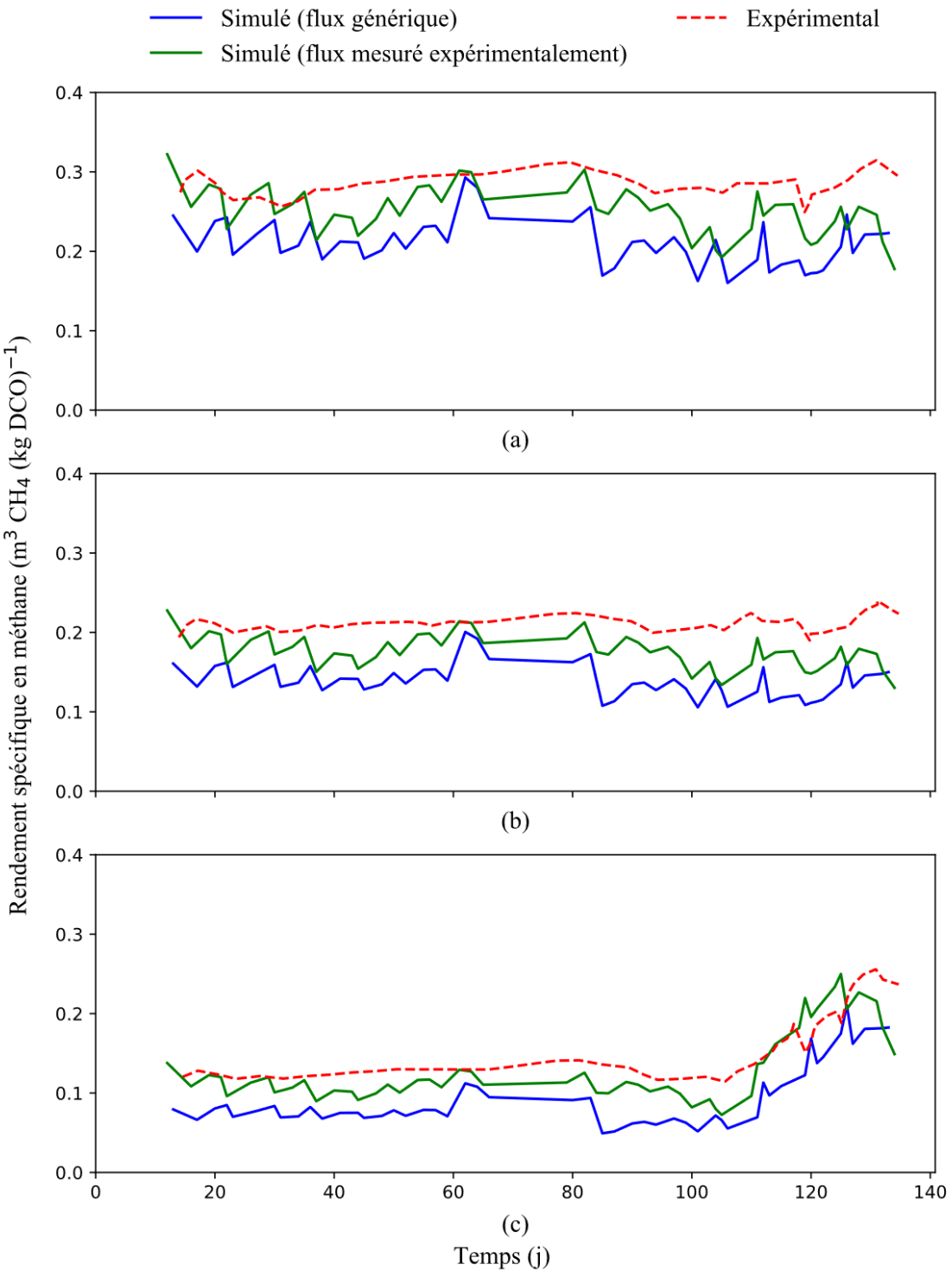


Figure 3.4 : Rendement spécifique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

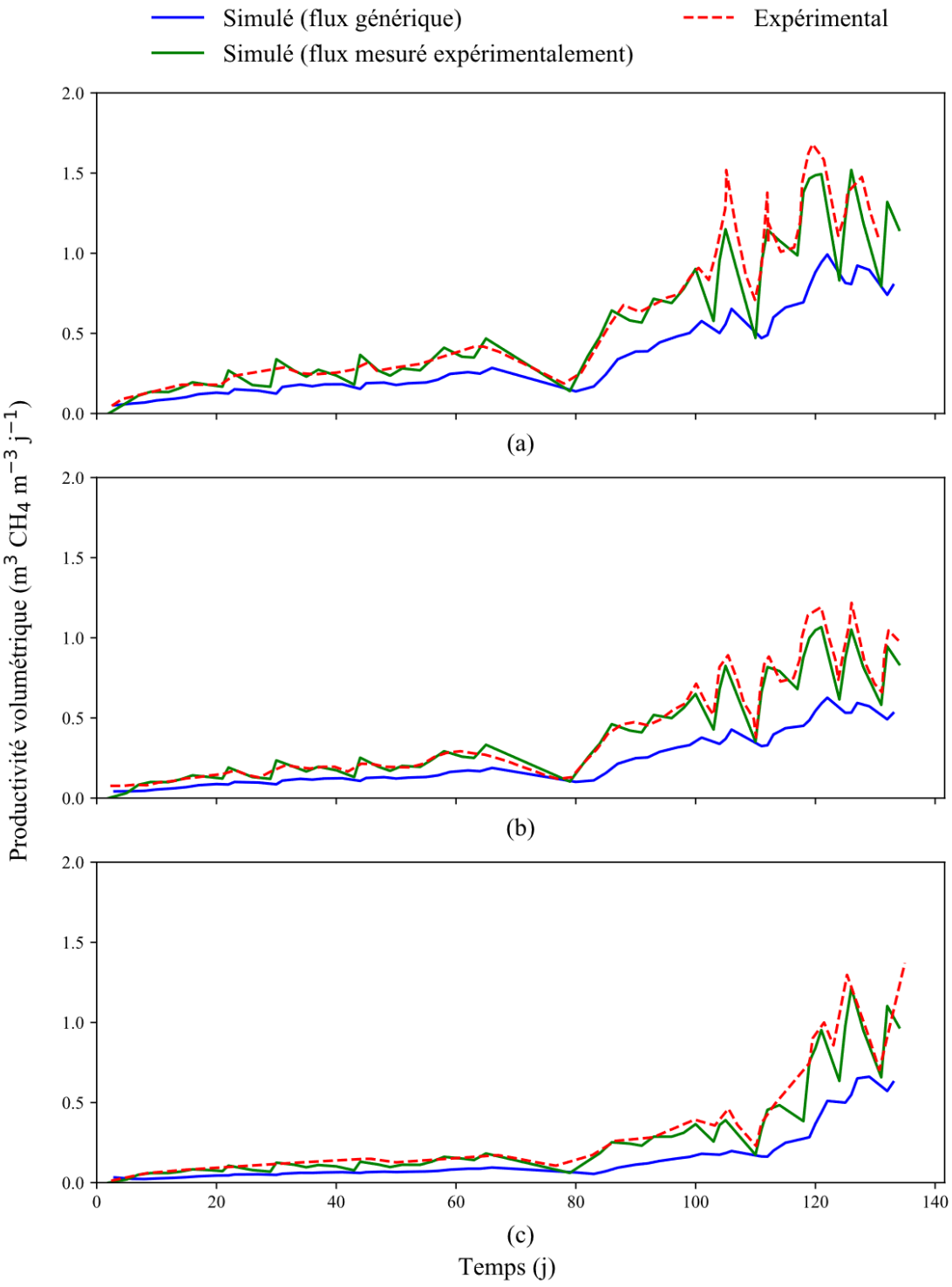


Figure 3.5 : Productivité volumétrique obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

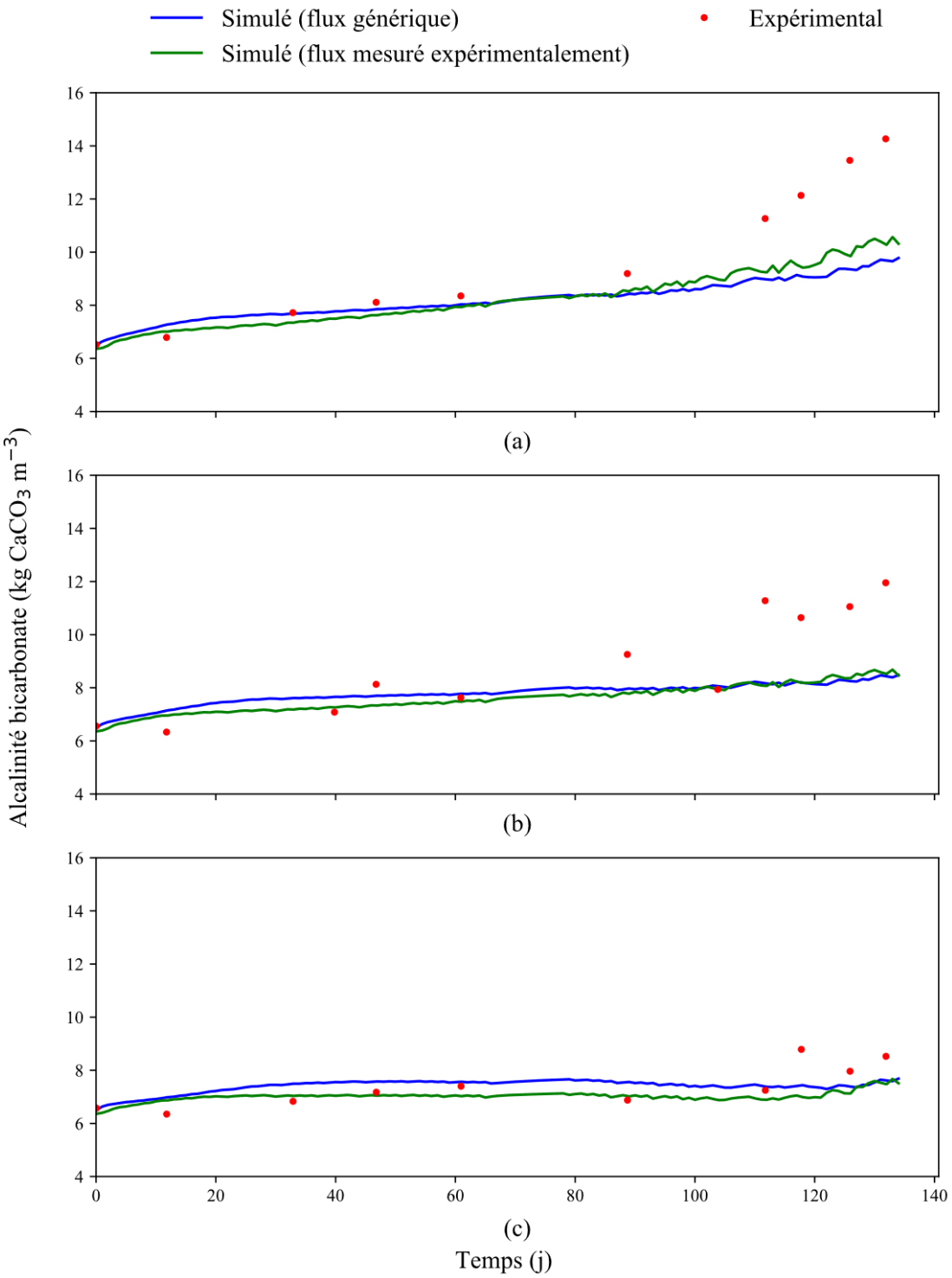


Figure 3.6 : Alcalinité bicarbonate obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

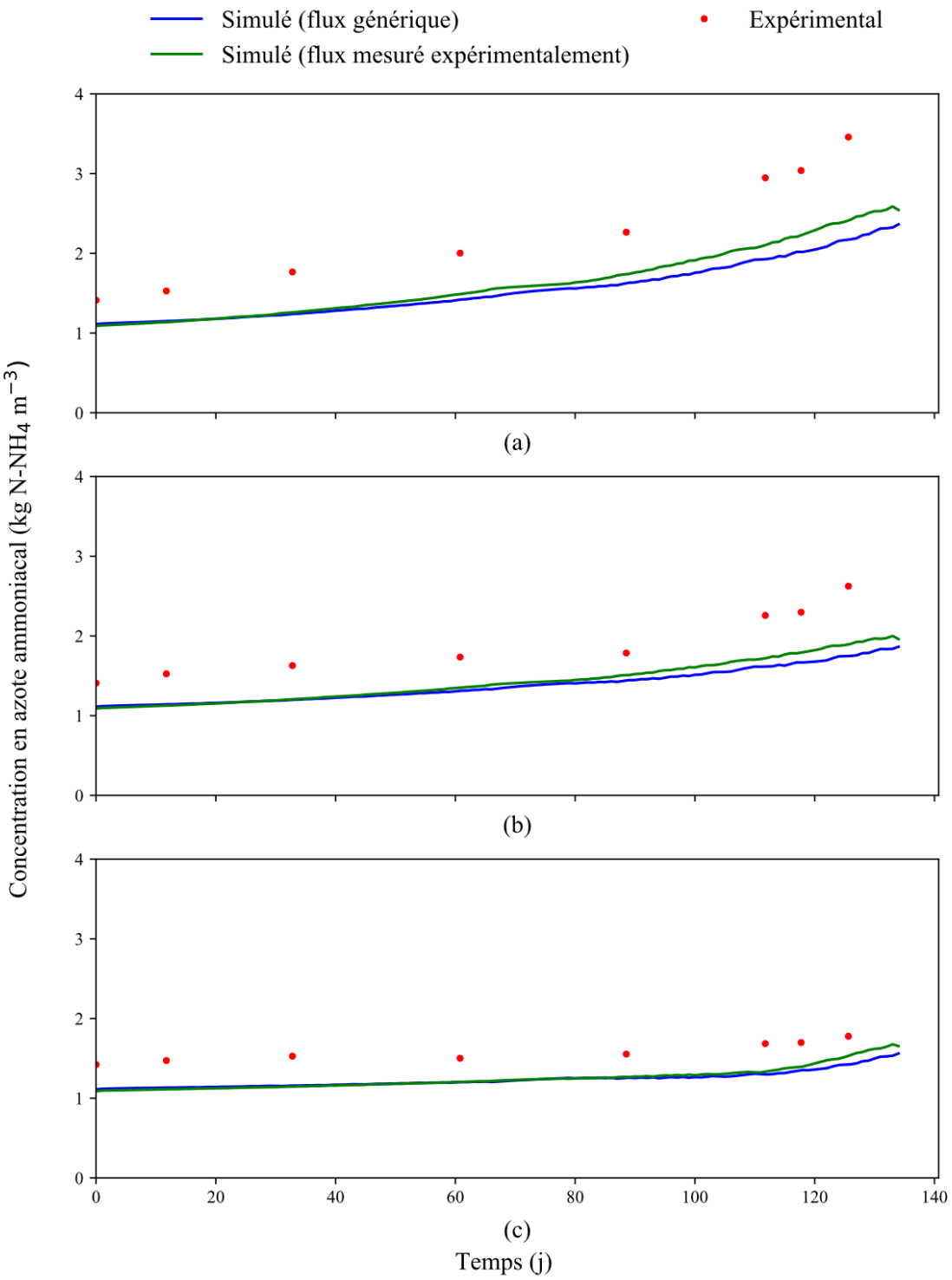


Figure 3.7 : Concentration en azote ammoniacal obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

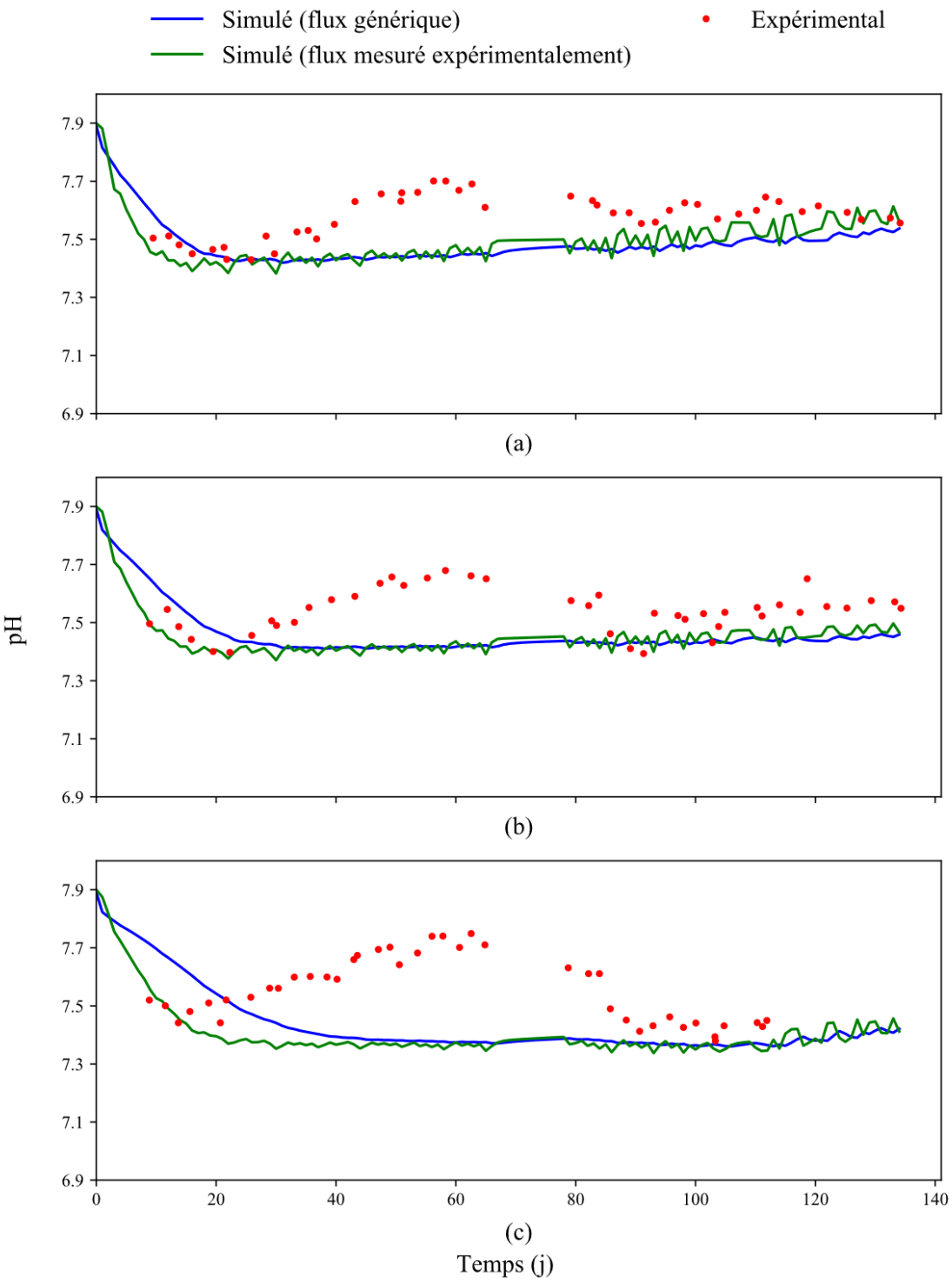


Figure 3.8 : pH obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

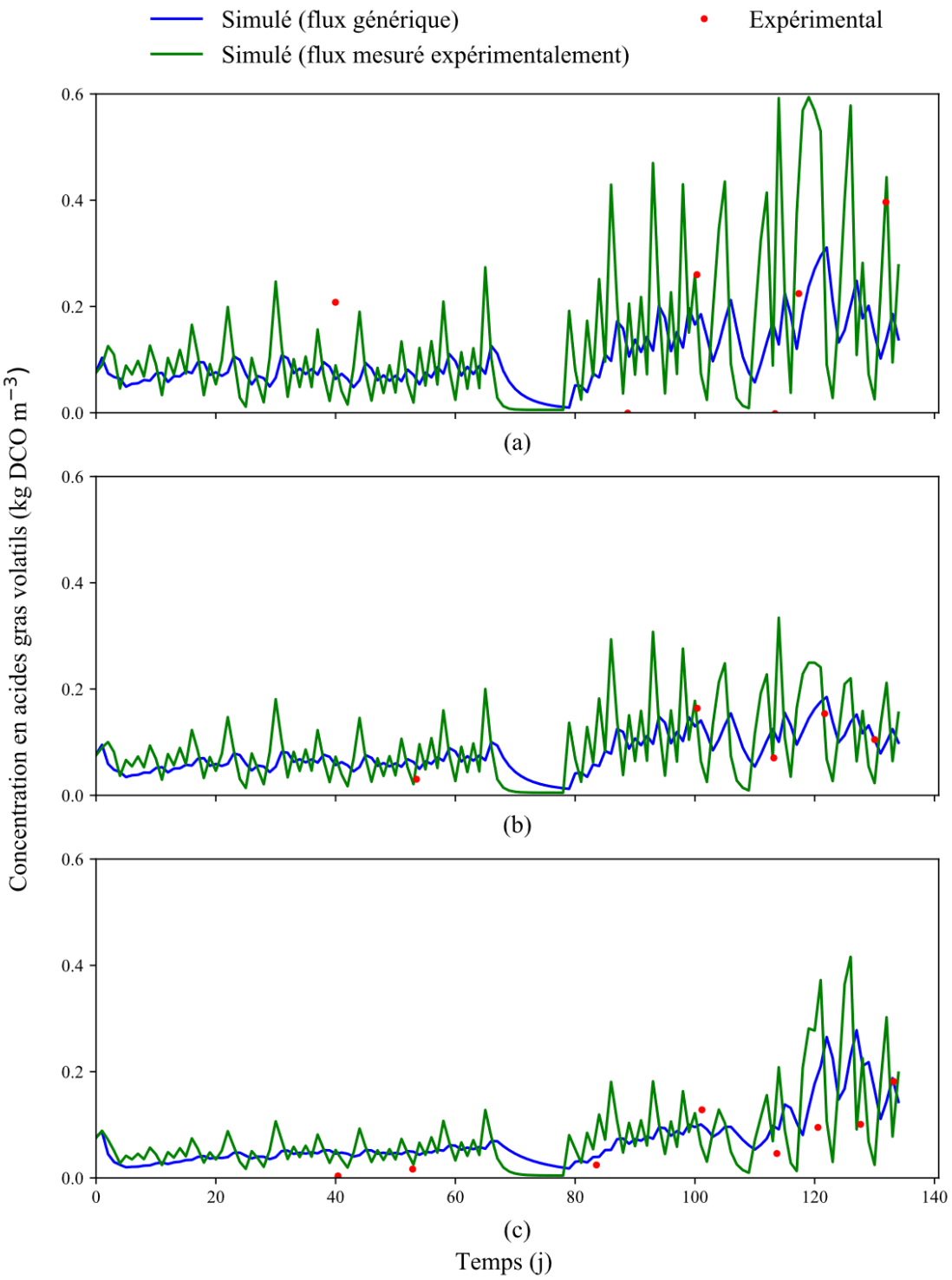


Figure 3.9 : Concentration en AGV obtenue expérimentalement et simulée selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c

Les trois expériences débutent en appliquant des OLR faibles, puis ceux-ci sont augmentés progressivement jusqu'en surcharge. La différence entre les deux méthodes pour l'évaluation de la DCO_{th} est négligeable, un résultat de la ressemblance entre les compositions élémentaires. Par contre, les différences entre les fractions dégradables entraînent un rendement spécifique en méthane plus bas, tendance observée dans les trois réacteurs. En fait, le paramètre qui montre la plus grande disparité est la constante d'hydrolyse, les valeurs de la littérature utilisées étant nettement plus petites. En plus de causer une apparente baisse dans le rendement en méthane, la disparité cause un décalage dans la réponse du système à l'évolution de la charge organique. En effet, on n'observe qu'un très faible décalage dans la Figure 3.10 et dans la Figure 3.11, dans lesquelles les constantes d'hydrolyse et les fractions dégradables de la DCO théorique calibrées expérimentalement ont été utilisées dans les deux méthodes de caractérisation. En comparant les simulations des flux mesurés expérimentalement et des flux génériques dans ces figures, on observe uniquement les différences causées par les compositions élémentaires utilisées et la méthodologie appliquée pour caractériser la matière. Cette différence négligeable permet de conclure que les hypothèses derrière la méthodologie, notamment le fait de négliger tout composé soluble et de poser arbitrairement un pH de 7, n'engendrent pas d'erreurs significatives. En fait, les erreurs entre les deux méthodes reposent presqu'exclusivement sur le choix des constantes d'hydrolyse et des potentiels méthanogènes. La grande variabilité de la constante d'hydrolyse est un phénomène connu, dû entre autres aux variabilités dans l'exécution du test de BMP (Vavilin et al., 2008). Une des méthodes rapportées dans la revue de la littérature pour éliminer la variabilité est d'utiliser des cinétiques basées sur la surface des particules, mais comme mentionné, les constantes sont peu disponibles dans la littérature.

Pour ce qui est du pH, les deux méthodes le sous-estiment entre les jours 50 et 75. Il est difficile d'expliquer cette légère différence. Poggio et al. (2016) la justifient par le manque de processus physico-chimiques inclus dans cette version d'ADM1, notamment les processus de précipitation du carbonate et de la struvite. Les deux méthodes sont aussi équivalentes pour l'évaluation de l'alcalinité bicarbonate et de la concentration en azote ammoniacal. Dans ce cas-ci, les différences avec les résultats expérimentaux sont donc plutôt attribuables à la version d'ADM1 utilisé qu'à la méthode de caractérisation.

Il est plus difficile de comparer les concentrations en acides gras volatils étant donné les variations importantes observées et le peu de mesures expérimentales disponibles. Cependant, les deux

méthodes de caractérisation donnent des résultats semblables, même si la méthode utilisant les flux mesurés expérimentalement présente davantage de bruit que la méthode utilisant les flux génériques. Cette différence s'explique par l'écart important entre les constantes d'hydrolyse utilisées dans les deux méthodes.

Outre les erreurs mentionnées, les tendances aux niveaux des paramètres clés de la biométhanisation, tels que le rendement en méthane, le pH, l'alcalinité bicarbonate et les concentrations en azote ammoniacal et en AGV, sont bien captées pour les besoins d'une MFA avec la méthode de caractérisation développée. Elle est également satisfaisante pour représenter les effets de la composition du flux entrant et de différentes conditions d'opération. Enfin, les erreurs entre le modèle développé et les résultats expérimentaux en conditions normales d'opération découlent essentiellement des deux paramètres obtenus de la littérature, avec la part restante provenant de la structure de la version d'ADM1 utilisée. Pour les réacteurs à l'étude, l'utilisation de compositions élémentaires génériques n'a pas entraîné de divergences importantes.

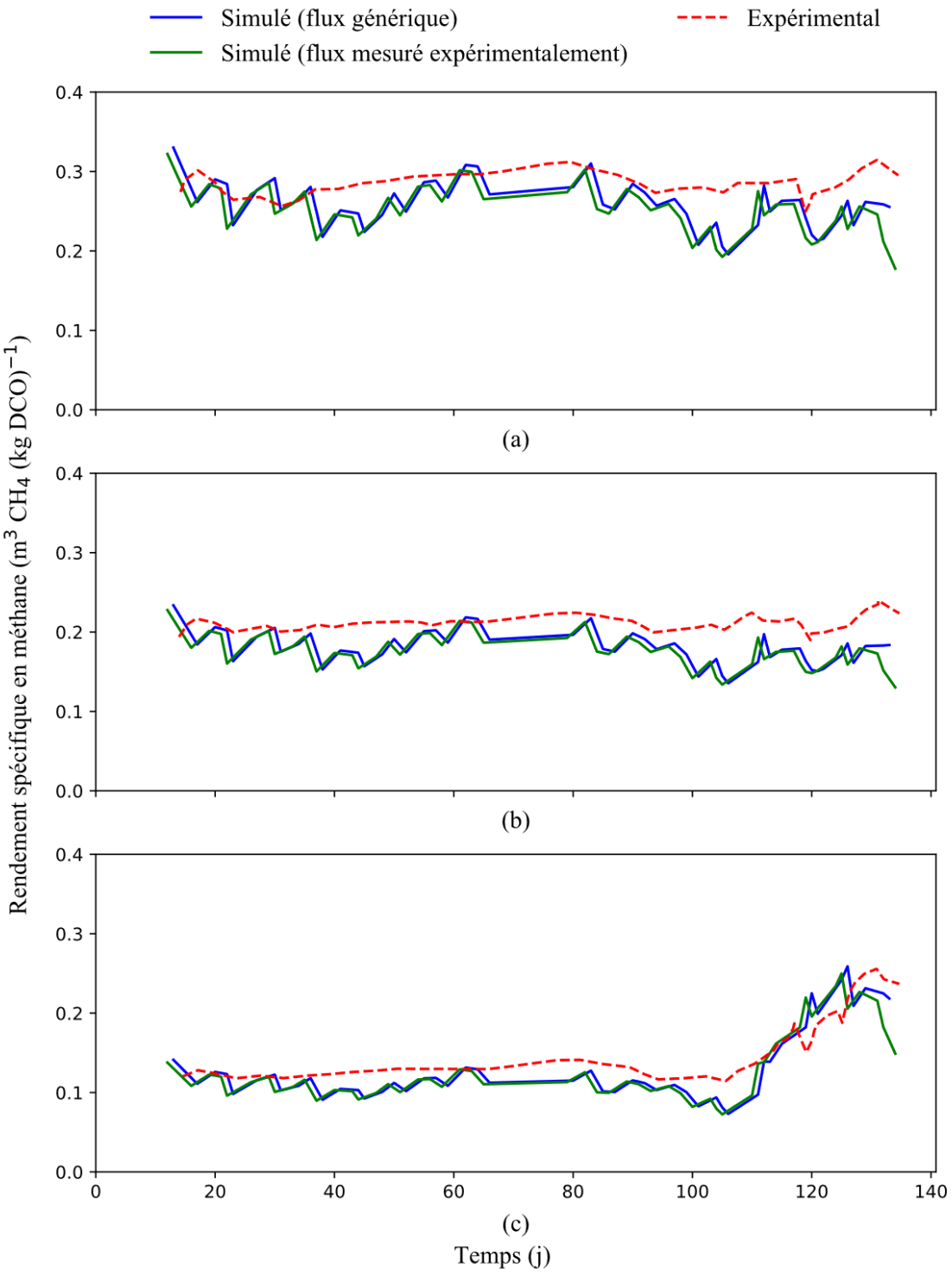


Figure 3.10 : Rendement spécifique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c, mais utilisant les constantes d'hydrolyse et les fractions dégradables de la DCO théorique calibrés expérimentalement dans les deux méthodes

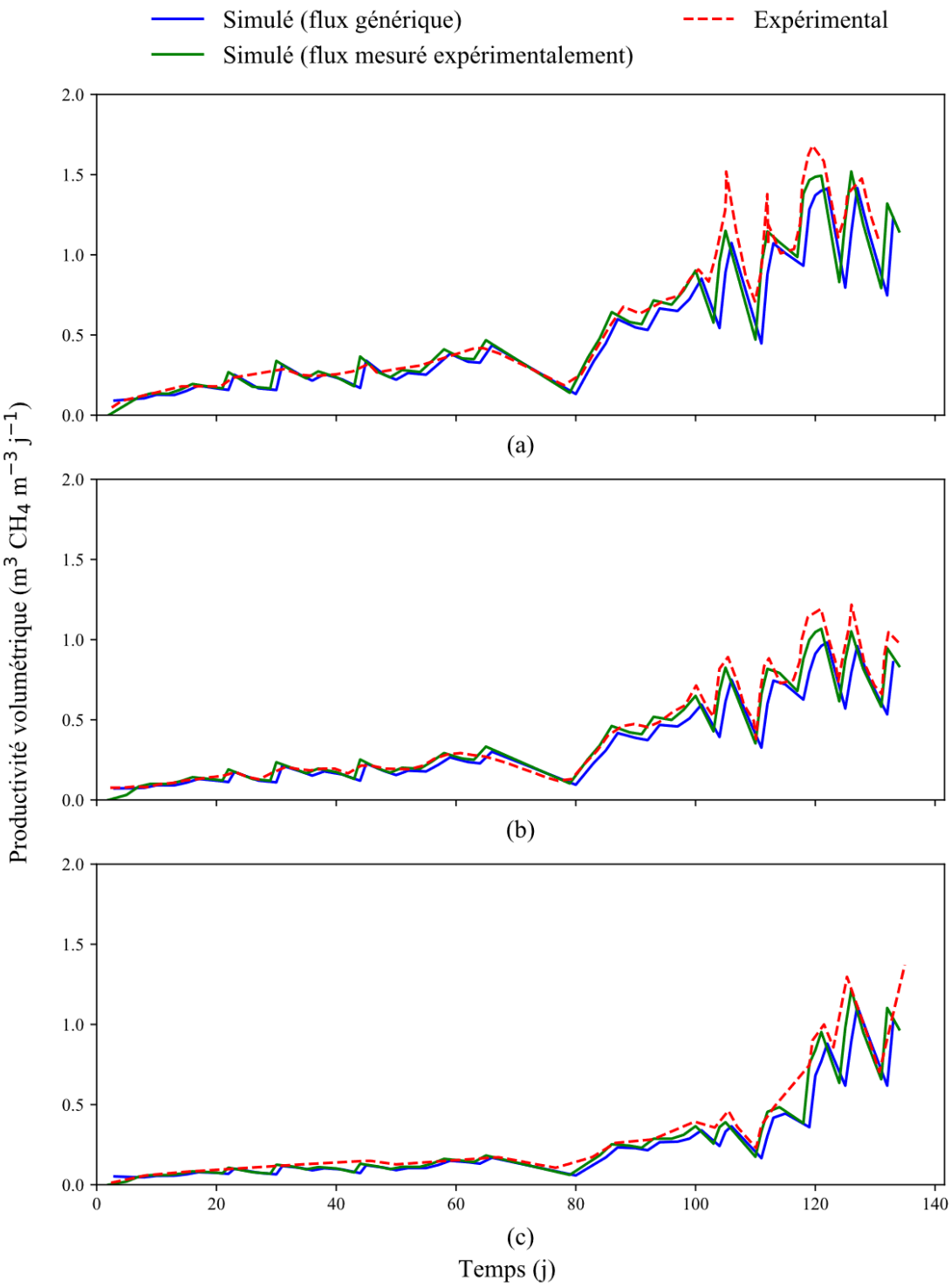


Figure 3.11 : Productivité volumétrique en méthane obtenu expérimentalement et simulé selon les deux méthodes de caractérisation pour le réacteur (a) R-a, (b) R-b et (c) R-c, mais utilisant les constantes d'hydrolyse et les fractions dégradables de la DCO théorique calibrés expérimentalement dans les deux méthodes

3.5.2 Validation de l'intérêt pour une MFA

Afin de valider l'intérêt de l'utilisation d'ADM1 pour prédire les caractéristiques des flux sortants d'un procédé de biométhanisation au lieu de l'utilisation de coefficients empiriques provenant de la littérature, les coefficients de transfert obtenus en régime permanent avec la méthodologie développée sont comparés dans cette section avec deux MFA disponibles dans la littérature (Allesch et Brunner, 2017; Jensen et al., 2017). Ces MFA ont été choisies puisqu'elles analysent un grand nombre d'élément dans les différents flux sortants de la biométhanisation. Jensen et al. (2017) ont étudié une usine de biométhanisation utilisant un procédé à haute teneur en solides (voie sèche) située en Allemagne et opérant en mode batch à des températures mésophile. Les coefficients de transfert utilisés dans la MFA d'Allesch et Brunner (2017) sont des moyennes de plusieurs usines en opération en Autriche, avec des matières et des conditions d'opération différentes. Ceux-ci sont basés sur des données empiriques de caractérisation des digestats et sur des hypothèses concernant la dégradation de la matière.

L'usine de biométhanisation simulée est présentée schématiquement dans la Figure 3.12. Elle est composée de quatre processus. La matière entrante (l'OFMSW triée à la source) est tout d'abord diluée pour atteindre la teneur en matières sèches désirées avant la biométhanisation, nécessitant un apport externe d'eau. Deux flux sortent du réacteur de biométhanisation, soit un flux de biogaz et un flux de digestat. Ce dernier est ensuite déshydraté à 28% TS à une efficacité de 98%, comme dans BSM2 (Gernaey, Jeppsson, Vanrolleghem et Copp, 2014). La fraction liquide est ensuite virtuellement divisée en deux flux : un effluent liquide et un flux de recyclage servant à diluer la matière entrante.

Pour illustrer l'impact des conditions d'opération sur les coefficients de transfert, plusieurs simulations ont été effectuées en modifiant successivement l'OLR, le taux de dilution de l'intrant, le taux de recyclage de l'effluent liquide, puis la composition des matières entrantes. Ces modifications sont effectuées à partir d'un scénario de base présenté dans le Tableau 3.9. Il est supposé que les OFMSW séparées à la source sont composées uniquement de résidus alimentaires et de résidus verts. Ces conditions d'opération ont été choisies puisqu'elles sont communes, stables et évitent de voir le réacteur s'inhiber. On note que les conditions opératoires du réacteur analysé par Jensen et al. (2017) diffèrent significativement des conditions de base pour la simulation (Tableau 3.9).

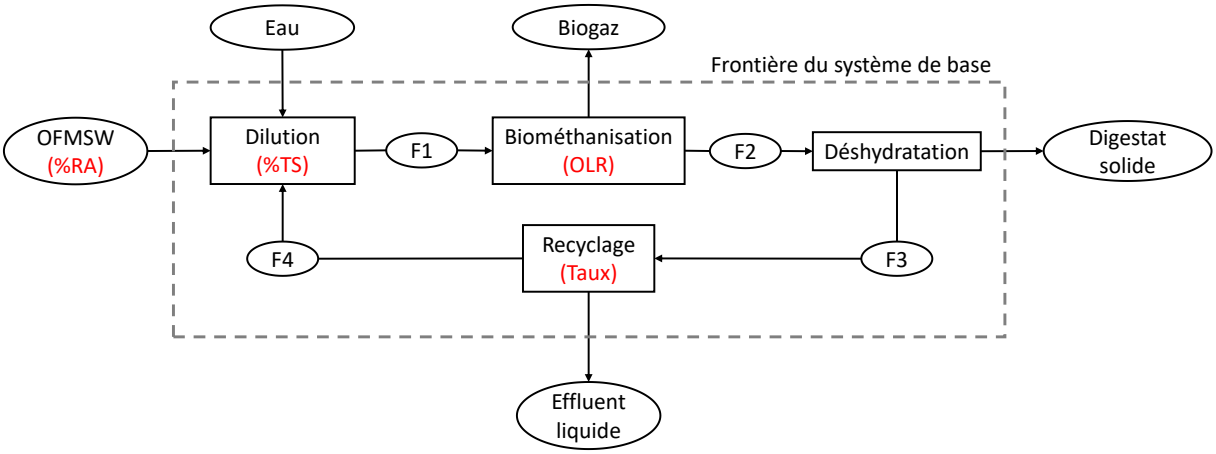


Figure 3.12 : Représentation du procédé utilisé pour la validation (les paramètres opératoires qui font l'objet de variation sont indiqués en rouge)

Tableau 3.9 : Paramètres opératoires de base pour les simulations

Paramètre	**Unités**	**Simulation**	**Jensen et al.**
OLR	kgVS m^{-3} j^{-1}	3.0	N.D.
Temps de résidence	j	34	28-42
TS	kgTS kg^{-1}	0.08	0.37
Taux de recyclage de l'effluent liquide	%	50	100
Proportion RA	Base humide	50%	N.D.
Température	°C	35	35
Mode	-	Continu	Batch

N.D. : Non disponible

Les coefficients de transfert pour la masse sèche et pour la masse humide, ainsi que pour le carbone et l'azote, sont comparés avec ceux mesurés par Jensen et al. (2017) et avec ceux utilisés par Allesch et Brunner (2017), représentés par (J) et (A) dans les graphiques ci-dessous, respectivement. Les coefficients de transfert pour le phosphore et pour le soufre suivent habituellement les mêmes tendances que pour l'azote et le carbone, respectivement. Ceux-ci sont disponibles dans l'Annexe C, aux côtés des coefficients de transfert utilisés par Allesch et Brunner (2017). Aussi, puisqu'il a été posé que les autres éléments demeurent sous forme solide tout au long du procédé, leur répartition entre les phases liquides et solides dépend uniquement de l'étape de déshydratation et leurs coefficients ne sont donc pas présentés.

Premièrement, l'OLR a été varié de 0.5 à 7 kg VS $(m^3\ j)^{-1}$, équivalent à une variation du temps de résidence de 199 à 14 jours, et les coefficients de transfert obtenus par simulation et ceux obtenus de la littérature pour la masse sèche, la masse humide, le carbone et l'azote sont présentés dans les

Figure 3.13a, Figure 3.13b, Figure 3.14a et Figure 3.14b, respectivement. À première vue, on observe que la somme des coefficients de transfert pour la masse sèche obtenus par simulation est supérieure à 1, mais qu'elle est inférieure à 1 dans le cas de Jensen et al. (2017). En fait, concernant les résultats de la simulation, le procédé de biométhanisation consomme de l'eau, principalement au cours des réactions d'hydrolyse, entraînant une production nette de matières sèches. Ainsi, l'avantage de suivre l'eau en tant que substance dans le modèle MFA est évident, puisque la masse humide est conservée dans le procédé. Pour le cas de Jensen et al. (2017), la consommation de masse sèche est probablement expliquée par des variations expérimentales.

Ensuite, tel qu'attendu, on observe que la production de biogaz diminue lorsque l'OLR est augmenté, ce qui est équivalent à réduire le temps de résidence. Elle est toutefois, dans tous les cas, supérieure à celles de Jensen et al. (2017) et d'Allesch et Brunner (2017). On observe également une grande disparité entre les fractions solides et liquides. En effet, les coefficients d'Allesch et Brunner ne reflètent pas une usine typique, mais plutôt une moyenne à l'échelle nationale, avec une majorité d'usines n'effectuant pas de déshydratation du digestat. En Autriche, dû à la forte proportion de petites usines de biométhanisation installées en milieu agricole, les digestats sont plus souvent épandus directement sur les terres sans étapes de déshydratation et de compostage (Brunner et al., 2015). De son côté, l'usine analysée par Jensen et al. (2017) présente le cas inverse, pour lequel un procédé par voie sèche ne requiert pas d'étape de déshydratation.

Pour ce qui est des nutriments, la majorité du P et du N se retrouvent dans le digestat solide, tendance qui s'accentue lorsque l'OLR est augmenté, similairement au comportement de la matière sèche. On note une petite quantité d'azote relâchée dans le biogaz dans l'étude d'Allesch et Brunner, qui est en fait uniquement présente dans les émissions à l'atmosphère. Le modèle ADM1 ne permet pas de quantifier ces émissions, l'azote étant uniquement sous forme soluble ou solide. Pour le carbone, une quantité nettement supérieure se retrouve dans le biogaz dans l'étude d'Allesch et Brunner, malgré une production plus faible en biogaz. Ceci peut être expliqué par une différence dans le contenu en méthane du biogaz.

Cependant, la version d'ADM1 utilisée sous-estime les inhibitions pouvant avoir lieu à des OLR élevés (Poggio, 2015). La production de biogaz pourrait donc être plus faible que celle obtenue par simulation avec la méthodologie développée, se rapprochant ainsi des productions rapportées par Jensen et al. (2017) et Allesch et Brunner (2017).

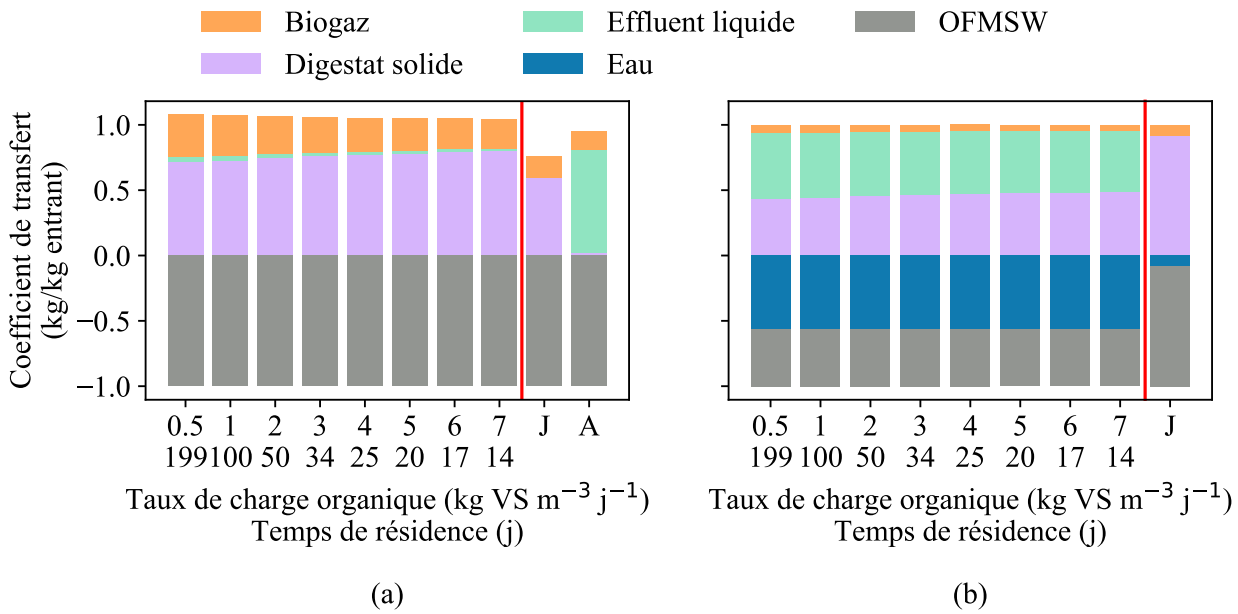


Figure 3.13 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide

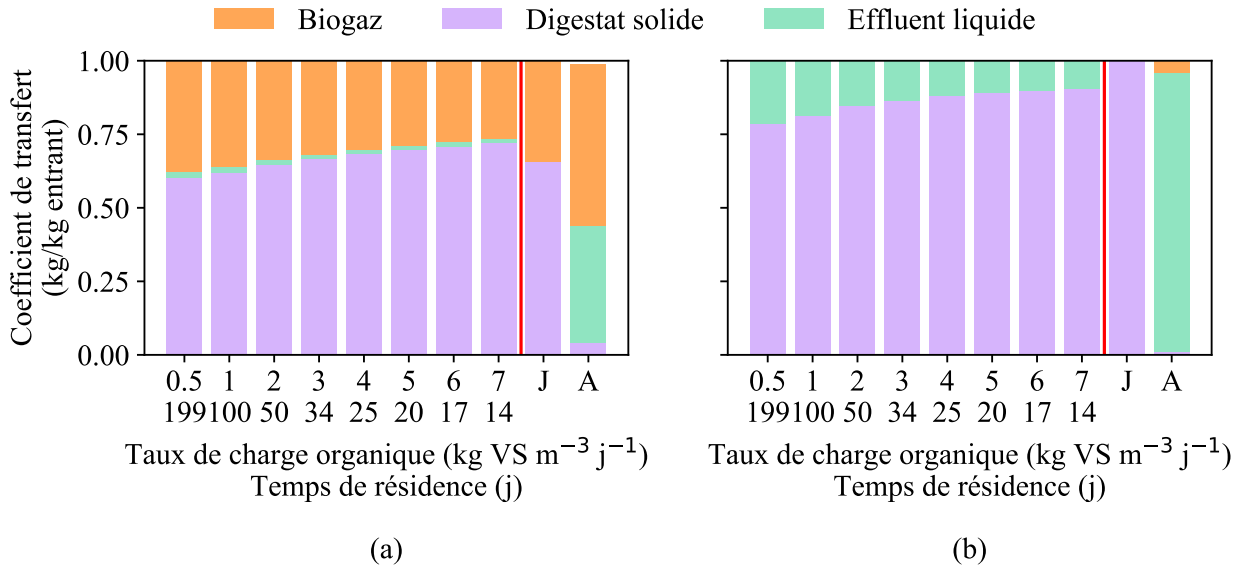


Figure 3.14 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote

Deuxièmement, la teneur en matières sèches de l'intrant au réacteur de biométhanisation a été variée de 7% à 39% TS pour illustrer l'impact du choix d'une technologie humide ou sèche sur les coefficients de transfert (Figure 3.15 et Figure 3.16). La teneur limite de 39% TS correspond au

flux non dilué. En observant les coefficients en base sèche, une réduction dans le taux de dilution de la matière entraîne une augmentation de la production de biogaz, qui est toutefois toujours supérieure à celle d'Allesch et Brunner. Il est particulièrement intéressant dans ce cas-ci de comparer les coefficients en base sèche et ceux en base humide. En augmentant la proportion de matières sèches, la quantité de digestat solide, en base sèche, diminue, ainsi que le carbone, tandis qu'elle augmente en base humide. Ce phénomène s'explique par la diminution de la quantité d'eau à retirer lors de la déshydratation. Comme attendu, un procédé sec consomme donc moins d'eau et produit moins d'effluents liquides à traiter.

En observant la répartition de l'azote, on note que sa fraction dans l'effluent liquide demeure stable jusqu'à 20% TS, avant de diminuer au profit du digestat solide à des teneurs plus élevées en matières sèches. Cette tendance n'est pas observée dans le cas du carbone, pour lequel sa présence dans la fraction liquide diminue constamment avec l'augmentation de la teneur en matières sèches. Lorsque cette dernière s'approche de celle de l'usine analysée par Jensen et al. (2017), les coefficients obtenus par simulation concordent très bien avec ceux mesurés.

Cependant, il faut noter les limitations que présente le modèle ADM1 pour représenter la biométhanisation par voie sèche. En effet, des teneurs élevées en solides entraîne une diminution de l'activité méthanogénique dans le réacteur (Hyaric et al., 2012). Des modifications à la structure d'ADM1 est nécessaire (Bollon, Le-hyaric, Benbelkacem et Buffiere, 2011; Liotta et al., 2015), de même qu'une calibration des constantes d'hydrolyse (Abbassi-Guendouz et al., 2012; Liotta et al., 2014).

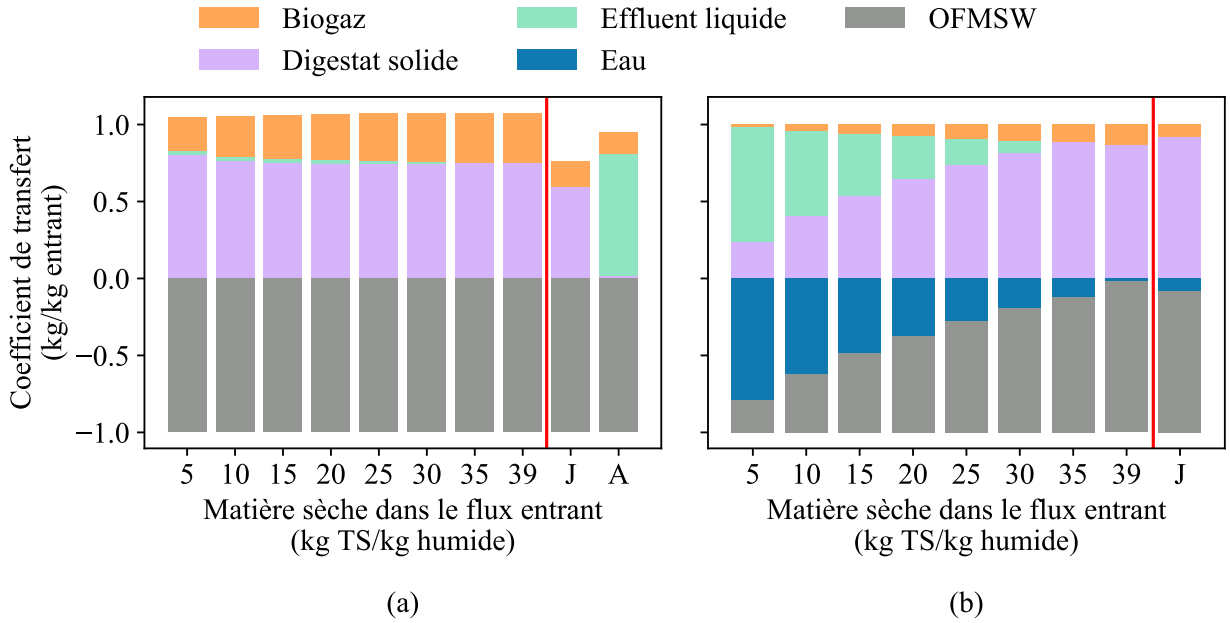


Figure 3.15 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide

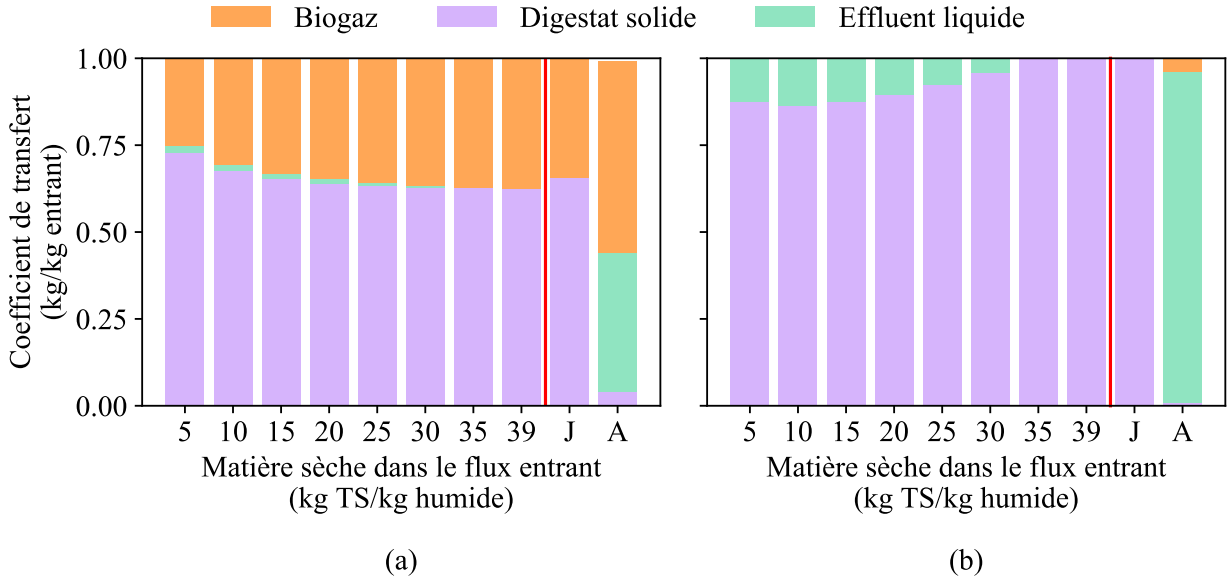


Figure 3.16 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote

Troisièmement, le taux de recyclage de l'effluent liquide comme eau de dilution a été varié de 0 à 100% (Figure 3.17 et Figure 3.18). En base sèche, la production de biogaz demeure constante, mais comme attendu, la production d'effluent liquide diminue. Le comportement du carbone suit la même tendance. Par contre, en base humide, la production de biogaz semble augmenter, puisque l'augmentation du taux de recyclage diminue la demande en eau du procédé, donc la masse totale de l'intrant. Pour les nutriments, on note une légère augmentation de la quantité d'azote dans le digestat solide avec un taux de recyclage entre 0% et 60%, avec un saut plus abrupt de 80% à 100% (Figure 3.18). À un taux de recyclage de 100%, les coefficients obtenus par simulation sont équivalents à ceux mesurés par Jensen et al. (2017), malgré les différences dans les teneurs en matières sèches.

Les conditions opératoires de base étant choisies pour être stables, aucune inhibition majeure n'est observée lorsqu'on augmente le taux de recyclage. Cependant, un taux de recyclage de 100% est rarement possible en pratique dû à l'accumulation d'ammoniac ou d'AGV (Benabdallah El Hadj, Astals, Galí, Mace et Mata-Álvarez, 2009).

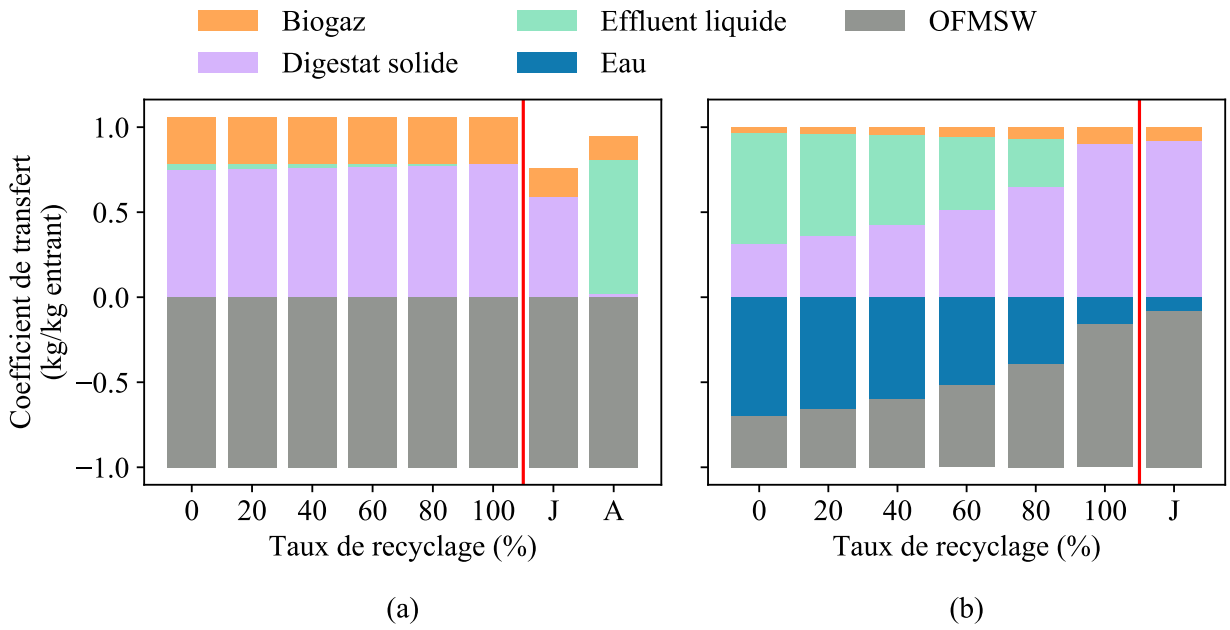


Figure 3.17 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide

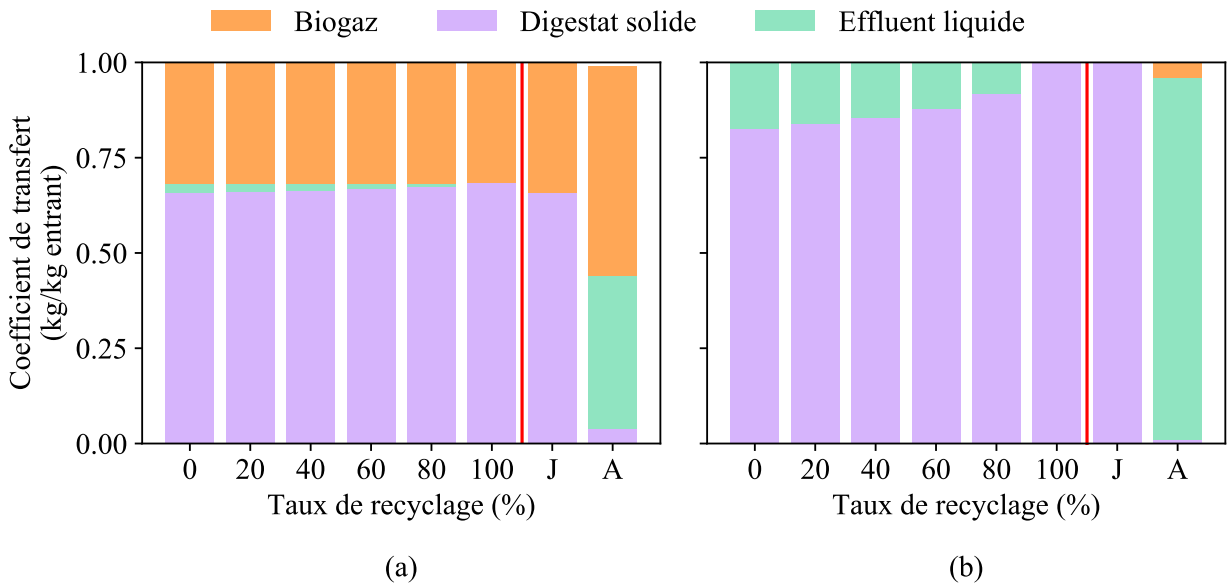


Figure 3.18 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote

Quatrièmement, la proportion de résidus alimentaires dans l'OFMSW a été variée de 0% à 100%, la balance étant composée uniquement de résidus verts (Figure 3.19 et Figure 3.20). Les résidus alimentaires ayant un potentiel méthanogène environ trois fois plus élevé que les résidus verts (Tableau 3.5), il est évident que la production de biogaz est très influencée par la composition de l'intrant, comme le montre les coefficients de transfert. En effet, une augmentation de la proportion de résidus alimentaires dans le flux entrant entraîne, tant sur une base sèche que sur une base humide, une augmentation significative de la production de biogaz et une diminution de la production de digestat solide. Ce phénomène est visible également pour le carbone. On note aussi une diminution de la quantité d'eau nécessaire pour diluer la matière, conséquence de sa teneur en eau plus élevée, mais aussi une augmentation des pertes de nutriments qui se retrouvent davantage dans l'effluent liquide. Puisque ni Jensen et al. (2017) ni Allesch et Brunner (2017) n'ont effectué de caractérisation du flux entrant en termes de catégories de matières, une comparaison des coefficients de transfert sur ce plan ne peut être effectuée.

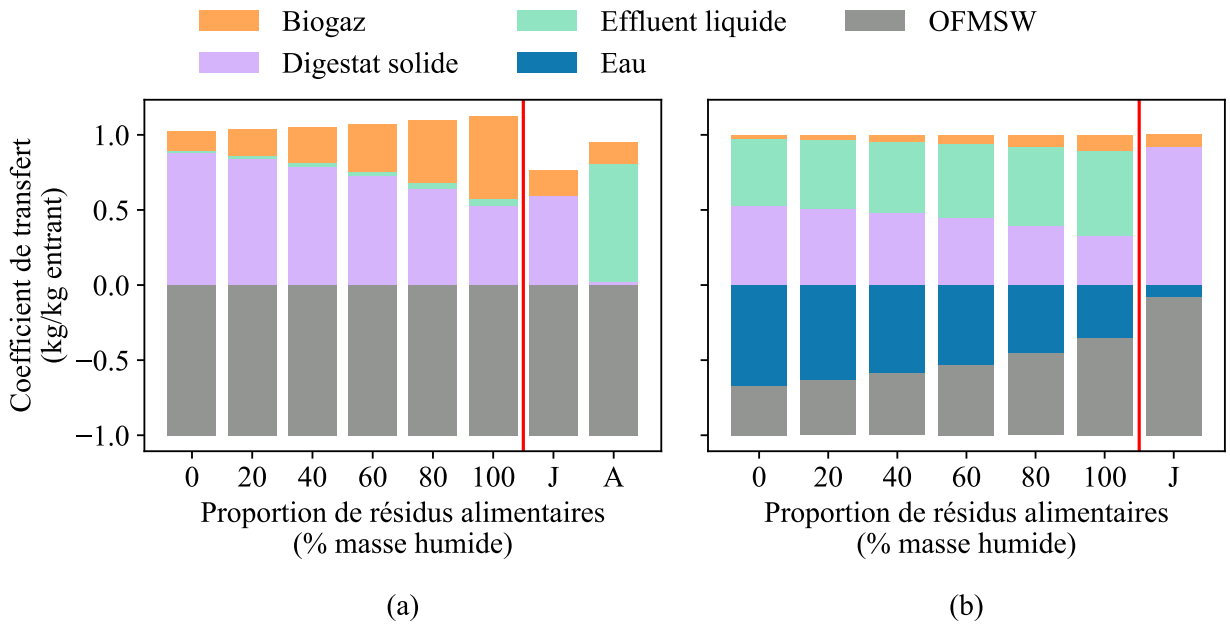


Figure 3.19 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) en base sèche et (b) en base humide

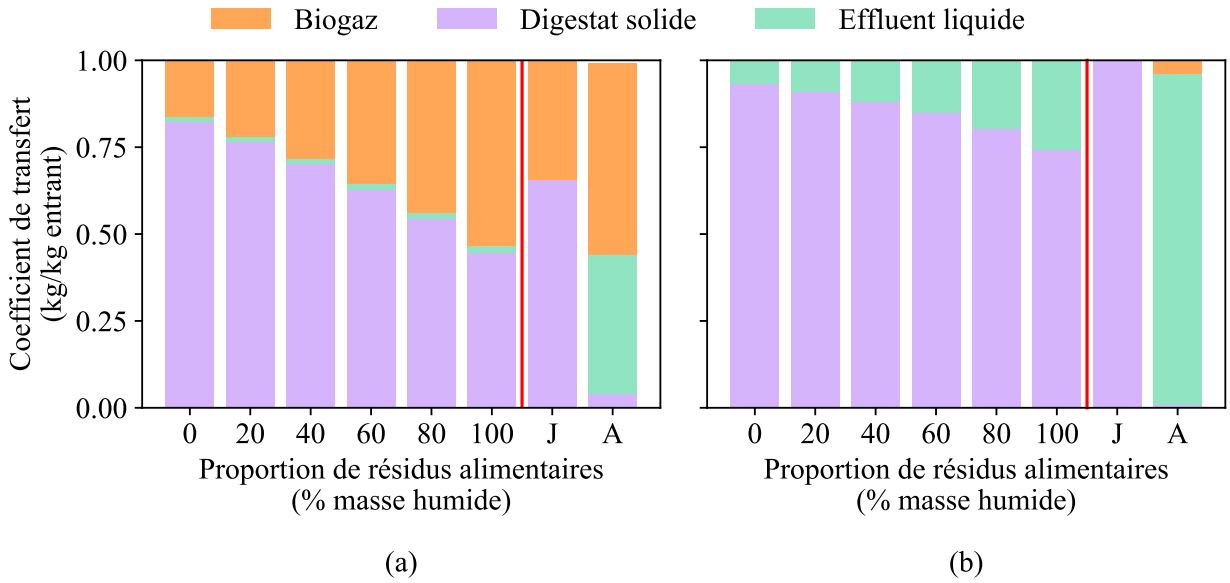


Figure 3.20 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le carbone et (b) pour l'azote

La démonstration ci-haut montre le danger d'extrapoler des coefficients de transfert développés pour un cas particulier et les appliquer dans un cas différent. En effet, les coefficients de transfert sont des fonctions de la nature de l'intrant et des conditions d'opération de l'usine. Les comparaisons avec les coefficients de Jensen et al. (2017) démontre que ces derniers varient considérablement lorsque ces paramètres dévient de ceux de l'usine sur laquelle ils ont été mesurés. Les comparaisons avec les coefficients d'Allesch et Brunner (2017) démontrent quant à elles les limitations d'utiliser des moyennes nationales pour les calculer. D'une part, les coefficients ainsi obtenus ne peuvent être transposés pour représenter un procédé de biométhanisation dans un système différent de GMR. D'autre part, ces coefficients ne sont plus valides lorsque l'objectif est d'effectuer des prédictions ou d'évaluer différents scénarios de traitement. Par exemple, si l'objectif est d'évaluer la réponse du système de GMR à une augmentation de la capacité de traitement par biométhanisation, soit de nouvelles usines devront être construites, soit les usines existantes devront modifier leurs conditions d'opération pour faire face à une augmentation du flux entrant. Dans les deux cas, une modification des coefficients de transfert est exigée.

Finalement, l'avantage d'utiliser un modèle complexe comme ADM1 est qu'il permet de prédire certaines inhibitions. Par exemple, si l'objectif est de maximiser la production de biogaz, l'analyse précédente semble promouvoir de minimiser l'OLR et le taux de dilution et de maximiser le taux de recyclage et le contenu en résidus alimentaires. Par ailleurs, si l'objectif est de traiter le maximum de matières dans un réacteur le plus petit possible, une augmentation de l'OLR et de la teneur en matières sèches est recommandée. Quoique ces conclusions correspondent aux principes de conception des réacteurs rapportées dans la littérature, le procédé de biométhanisation est stable uniquement dans une zone plutôt restreinte de conditions opératoires. Le modèle ADM1 permet de prédire l'ordre de grandeur de cette zone. En régime permanent, un déséquilibre dans le procédé, comme une baisse de pH et une accumulation d'AGV, entraîne automatiquement l'échec du procédé. Par exemple, ce phénomène est observé pour un intrant composé uniquement de résidus vert à un OLR de 7 kg VS $(m^3\ j)^{-1}$. Une telle accumulation à un OLR élevé est un phénomène commun et s'accentuant lorsque l'alcalinité est faible (Cecchi et al., 2002). Un rapport C/N plus élevé, comme c'est le cas des résidus verts, entraîne une plus faible concentration d'ammoniac dans le réacteur, qui se traduit par une baisse de l'alcalinité et une plus grande instabilité face à des conditions opératoires plus exigeantes.

Mais une inhibition peut entraîner des baisses de rendement sans entraîner l'échec du procédé. En effet, l'ammoniac est aussi un inhibiteur commun lors du traitement des résidus alimentaires et sa concentration dépend fortement de la nature de la matière et des conditions d'opération. Par exemple, la variation du facteur d'inhibition par l'ammoniac sur la méthanogénèse acéticlastique (voir

Tableau 2.1) lors des différentes conditions d'opération simulées précédemment est présentée à la Figure 3.21. On note une augmentation de l'inhibition avec l'augmentation de la proportion de résidus alimentaires, du taux de recyclage et de la teneur en matières sèches. Cependant, une augmentation de l'OLR fait diminuer ce facteur d'inhibition, puisque le temps de résidence plus faible qui en résulte entraîne une dégradation incomplète des protéines.

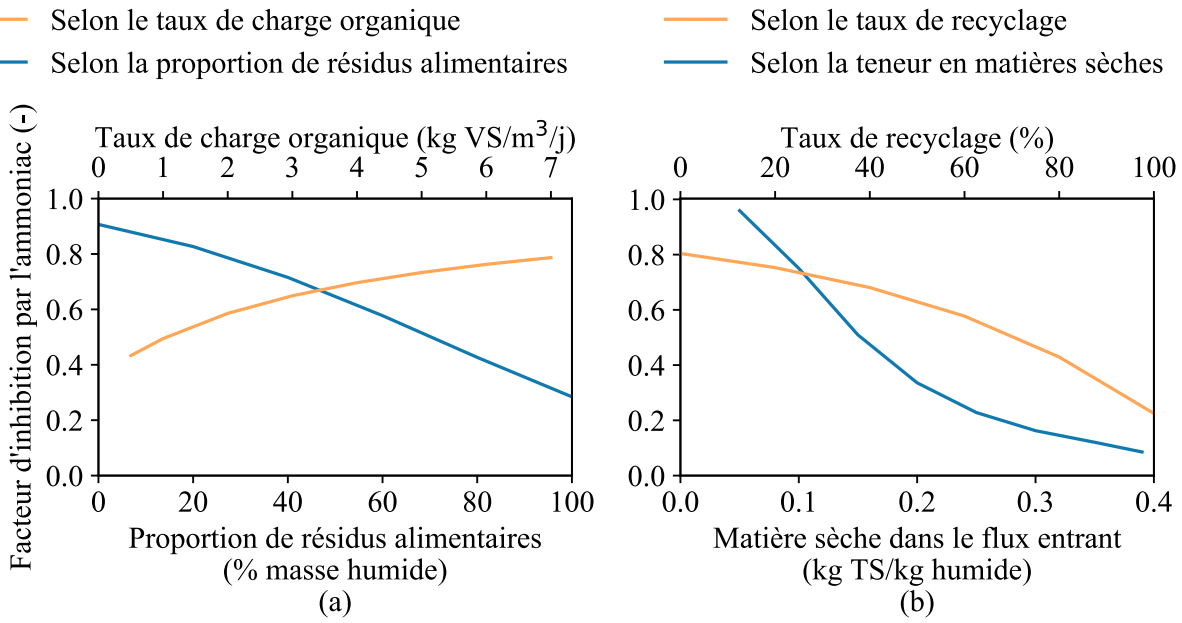


Figure 3.21 : Facteur d'inhibition par l'ammoniac en fonction (a) de variations du taux de charge organique et de la proportion de résidus alimentaires dans l'OFMSW et (b) en fonction de variations du taux de recyclage de l'effluent liquide et de la teneur en matières sèches dans le flux entrant

Pour visualiser l'importance de prendre en compte ces inhibitions dans les prédictions du rendement en méthane d'un flux de matières, les prédictions obtenues selon deux méthodes couramment utilisées pour l'évaluation de scénarios de traitement utilisant la MFA sont comparées dans la Figure 3.22 avec celles obtenues avec la méthodologie développée. Pour clairement isoler

l'effet du modèle, les potentiels méthanogènes ont été ajustés pour la teneur en VS et le modèle d'ordre 1 est appliqué sur la DCO dégradable uniquement. Ce dernier correspond donc exactement aux réactions d'hydrolyse inclues dans le modèle ADM1, mais en supposant que la totalité de la DCO dégradée se transforme en méthane. On observe que l'utilisation du potentiel méthanogène surestime grandement le rendement, même avec des matières se dégradant relativement rapidement comme c'est le cas des résidus alimentaires. De plus, quoiqu'un modèle d'ordre 1 permet de représenter certaines tendances, une surestimation du rendement est également observée dans tous les cas. Par exemple, le rendement spécifique en méthane simulé avec le modèle ADM1 à un OLR de 3 kg VS m^{-3} j^{-1} est reproduit avec le modèle d'ordre 1 uniquement à un OLR de 6 kg VS m^{-3} j^{-1}.

3.6 Conclusion

Une méthode simplifiée de fractionnement des matières résiduelles organiques solides en termes de composés biochimiques a été développée ici. Elle permet d'utiliser le modèle ADM1 au sein d'une MFA représentant les flux en termes de débits massiques des éléments chimiques C, H, O, N, S et P. L'utilisation de potentiels méthanogènes et de constantes d'hydrolyse provenant de la littérature, de même que des compositions élémentaires génériques pour les différentes fractions des matières résiduelles, permet d'effectuer des prédictions sur le rendement en méthane et sur le devenir des éléments chimiques suivis sans avoir recours à de longues analyses en laboratoire. Ces prédictions concordent bien avec des résultats expérimentaux et avec d'autres MFA provenant de la littérature. En plus de permettre de calculer des coefficients de transfert adaptés à la matière et aux conditions d'opération d'une usine de biométhanisation, l'utilisation du modèle ADM1 au sein d'une MFA servant à évaluer différents scénarios de traitement de la matière organique permet de répondre à des questions précises de conception. Ceci est mieux illustré avec des études de cas.

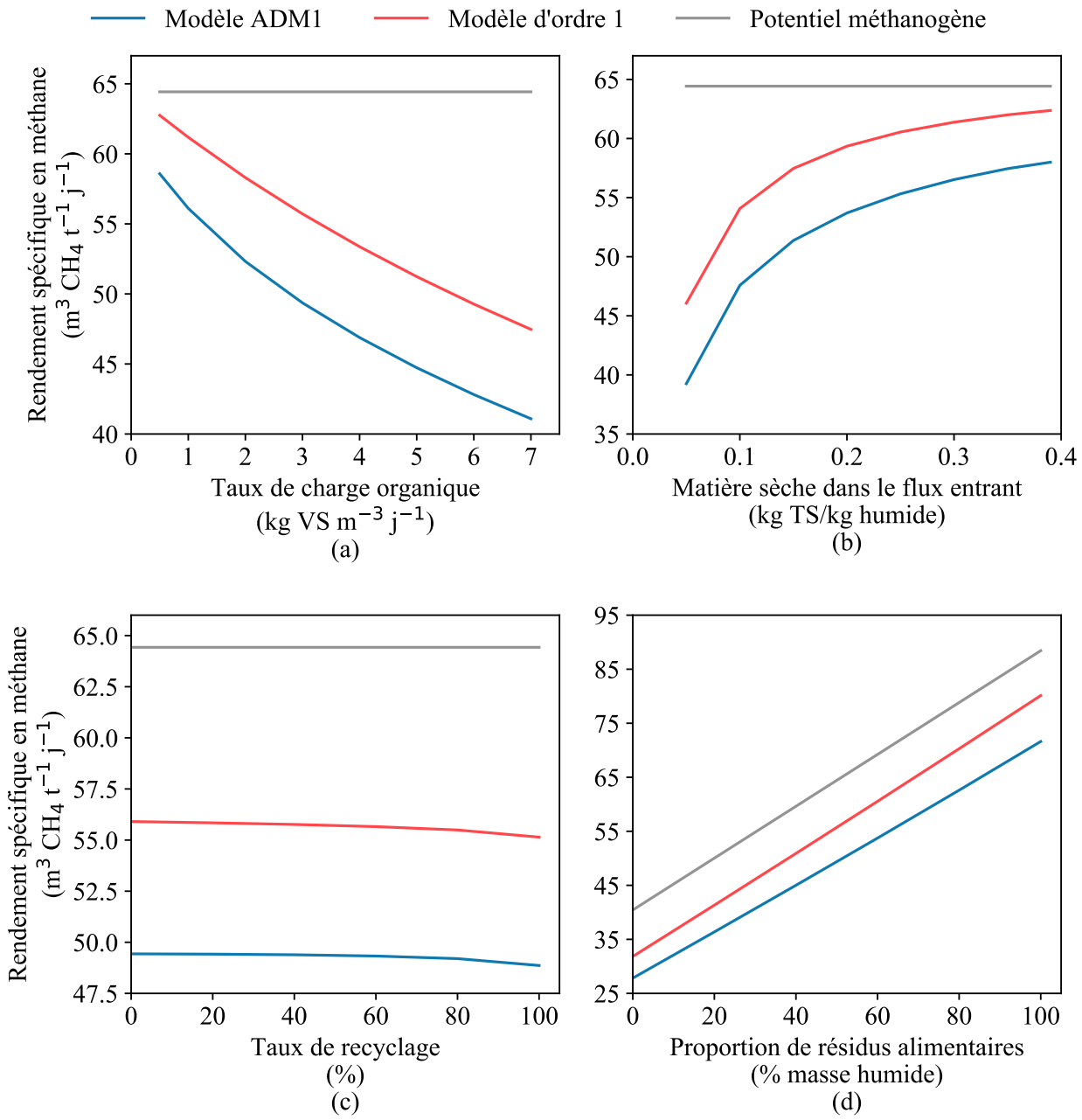


Figure 3.22 : Rendements spécifiques en méthane simulés avec le modèle ADM1, avec un modèle cinétique d'ordre 1 et par le potentiel méthanogène des matières en fonction (a) du taux de charge organique, (b) de la teneur en matières sèches dans l'intrant, (c) du taux de recyclage et (d) de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant

CHAPITRE 4 ÉTUDES DE CAS

Dans ce chapitre, la méthodologie développée est appliquée aux représentations par MFA de la gestion des matières résiduelles de l'agglomération de Montréal et celle de la ville Laval afin de démontrer son applicabilité et ses limites à assister la prise de décision.

4.1 Agglomération de Montréal

4.1.1 Contexte montréalais

Dans son dernier plan directeur de gestion des matières résiduelles (PDGMR) 2010-2014 (Ville de Montréal, 2009), l'Agglomération de Montréal annonçait l'implantation de 4 centres de traitement des résidus verts et alimentaires pour l'ensemble de l'île. Un centre de compostage fermé traitant les résidus verts et alimentaires collectées ensemble a été privilégié pour la zone Ouest de l'île. Dans la zone Est, la Ville a opté pour une collecte séparée pour les deux matières ainsi que des traitements distincts : les résidus alimentaires seront traités dans deux centres de biométhanisation et les résidus verts, dans un second centre de compostage. Les digestats de biométhanisation seront acheminés dans les deux centres de compostage. Les opérations du premier centre de biométhanisation est prévu pour 2021, tandis que le deuxième sera implanté à l'horizon 2025. Le déploiement des bacs bruns pour les résidus alimentaires dans les immeubles de 8 logements et moins est actuellement en cours jusqu'en 2019.

L'Agglomération a également annoncé son intention d'implanter un centre pilote de prétraitement (CPP) afin de séparer et valoriser les différentes fractions des ordures ménagères. Ce centre sera annexé au premier centre de biométhanisation de la zone Est. L'Agglomération montre un intérêt pour un traitement par biométhanisation du flux organique sortant du CPP avec recyclage au sol du digestat, car en plus d'avoir le potentiel d'augmenter son taux de recyclage pour la matière organique, qui était de 20% en 2016 (Ville de Montréal, 2017), les centres auront possiblement la capacité nécessaire pour traiter ce flux. Un apport de matières organiques provenant du CPP, en plus des résidus alimentaires triés à la source, permettrait d'optimiser l'utilisation de l'usine.

Lorsque le CPP et le premier centre de biométhanisation fonctionneront à pleine capacité, la représentation schématique du système de gestion des matières résiduelles organiques de la zone Est sera telle que présentée dans la Figure 4.1. La composition des flux entrants en termes de

catégories de matières (biens) est présentée dans la Figure 4.2 et provient d'une campagne de caractérisation effectuée en 2012 (NI Corporation, 2013) dans quatre arrondissements de la zone Est : Plateau-Mont-Royal, Rosemont-la-Petite-Patrie, Verdun et Westmount. Quoique le centre de biométhanisation a été dimensionné pour un flux de 60 000 t/an de résidus alimentaires, seulement 15 647 t de résidus alimentaires ont été collectés en 2016 (Ville de Montréal, 2017). Ce flux grandira en importance lorsque le déploiement des bacs bruns sera terminé et que la participation à la collecte augmentera. Les compositions élémentaires des matières ont été posées à partir d'études de caractérisations des ordures ménagères danoises (Götze et al., 2016; Riber et al., 2009) en posant certaines hypothèses pour faire correspondre les catégories (Annexe B).

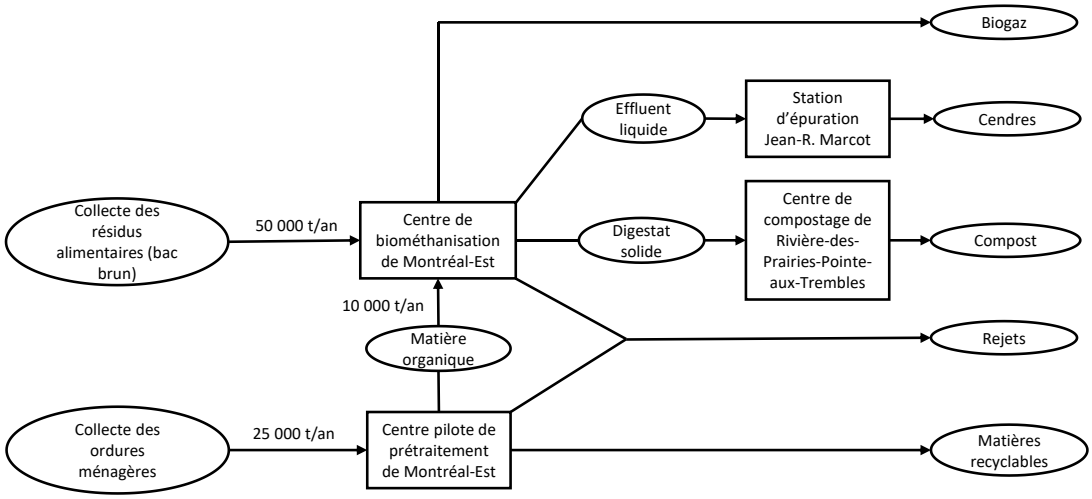


Figure 4.1 : Représentation schématique du futur système de gestion des matières résiduelles organiques de la zone Est de l'agglomération de Montréal (les intrants secondaires ne sont pas montrés)

Le flux de résidus alimentaires (bac brun) contient 39% de matières non acceptées par l'Agglomération, principalement des résidus verts (33% du bac). La fraction de matières inorganiques dans le bac brun est de 2.9%, avec 1.6% de sacs de plastique servant à contenir la matière. Ces chiffres sont légèrement supérieurs à ceux provenant d'une campagne de caractérisation britanno-colombienne, rapportant 1% de matières inorganiques (Tetra Tech EBA Inc., 2015), mais sont en ligne avec des caractérisations suédoises qui rapportent 1-5% de contaminants (Bernstad, 2010). Le flux d'ordures ménagères, quant à lui, contient 67% de matières organiques, avec 38.5% du flux pouvant être acceptées dans le bac brun, et 33% de matières inorganiques.

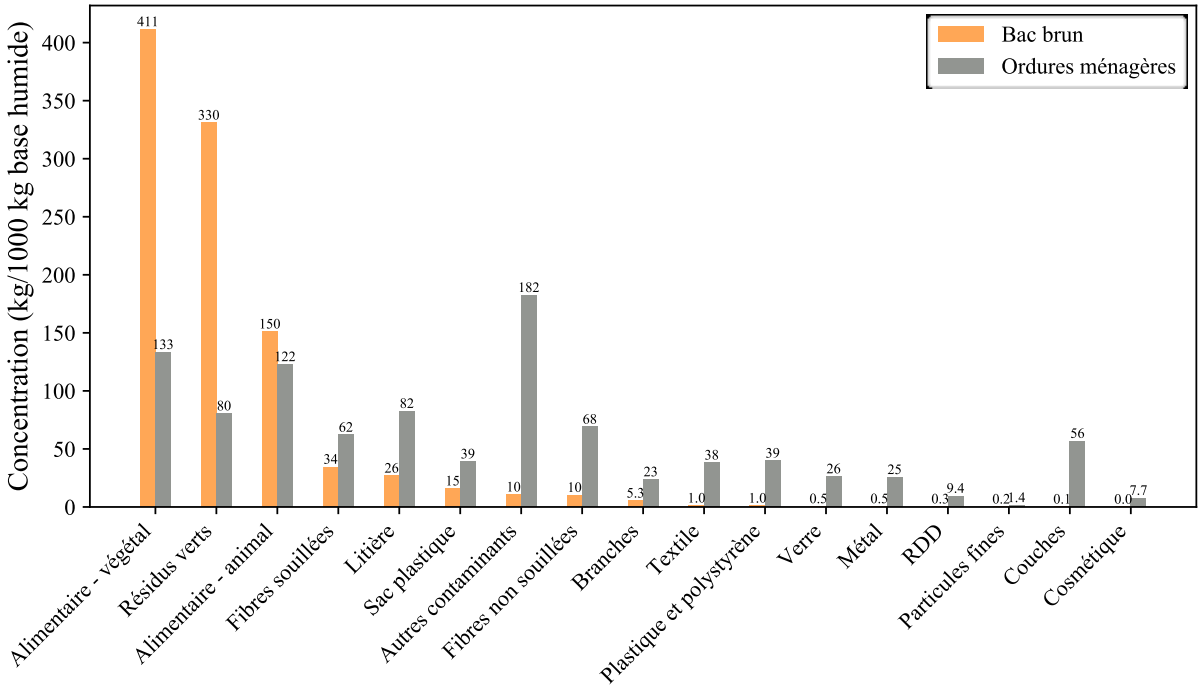


Figure 4.2 : Composition du bac brun et des ordures ménagères pour la zone Est de Montréal

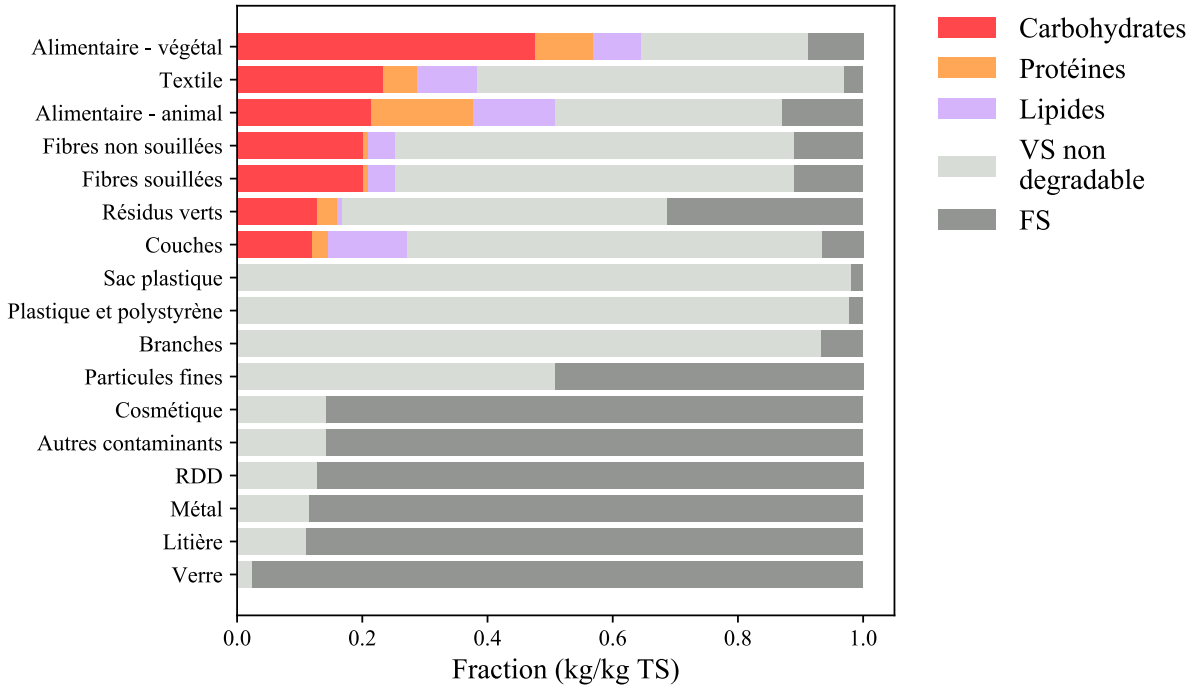


Figure 4.3 : Fractionnement des matières (biens) en termes de substances (la teneur en eau n'est pas montrée)

Utilisant la méthodologie développée, le niveau des substances est calculé pour chaque matière (Figure 4.3). Ici, le potentiel méthanogène de la litière et des branches a été négligé.

4.1.2 Objectifs des simulations

Dans l'optique de vouloir traiter un plus grand nombre de matières dans un même réacteur afin d'augmenter la rentabilité du projet de biométhanisation et d'atteindre les objectifs de recyclage de la matière organique, il est intéressant pour l'Agglomération de Montréal de considérer une co-digestion pour les résidus alimentaires triés à la source. Par contre, l'apport de matières organiques retirées mécaniquement des ordures ménagères entraînera une augmentation de la teneur en contaminants chimiques et physiques pouvant nuire à la stabilité du procédé et à la qualité du digestat produit, ce dernier devant être recyclé au sol en tout respect des normes applicables. La qualité des matières et leur quantité ne sont pas encore connues, elles varieront avec la participation citoyenne et la performance du prétraitement. Ce dernier devra être calibré afin d'obtenir un taux de récupération adéquat à une pureté satisfaisante. La pureté est ici définie comme le pourcentage de matières organiques dans le flux. La question est donc :

Dans quelle proportion et à quelle pureté les flux d'organiques provenant d'un tri mécanique peuvent être utilisés, conjointement avec les résidus alimentaires triés à la source, dans le procédé de biométhanisation prévu dans le PDGMR et ce, sans nuire à la stabilité du procédé et à la qualité du digestat ?

Pour répondre à la question, le cas de base pour lequel le centre de biométhanisation traite uniquement le flux de matières provenant des bacs bruns est tout d'abord présenté. Ensuite, l'influence de la masse collectée dans les bacs bruns, ainsi que de certains paramètres opératoires de la ligne de tri des ordures ménagères, sur la qualité du compost produit est étudiée. Pour terminer, l'impact de la masse collectée et du taux de charge organique sur le rendement et la stabilité du procédé est quantifié.

4.1.3 Cas de base : biométhanisation des OFMSW séparées à la source

Le cœur du système modélisé est le même que celui de la Figure 3.12, mais ce dernier a été étendu afin d'inclure un prétraitement de la matière (tri) et un post-traitement (compostage) (Figure 4.4). Les conditions d'opération de base pour le procédé de biométhanisation consistent en une teneur

en matières sèches dans l'intrant de 0.1 kg TS kg^{-1} et un taux de recyclage 50% de l'effluent liquide comme eau de dilution.

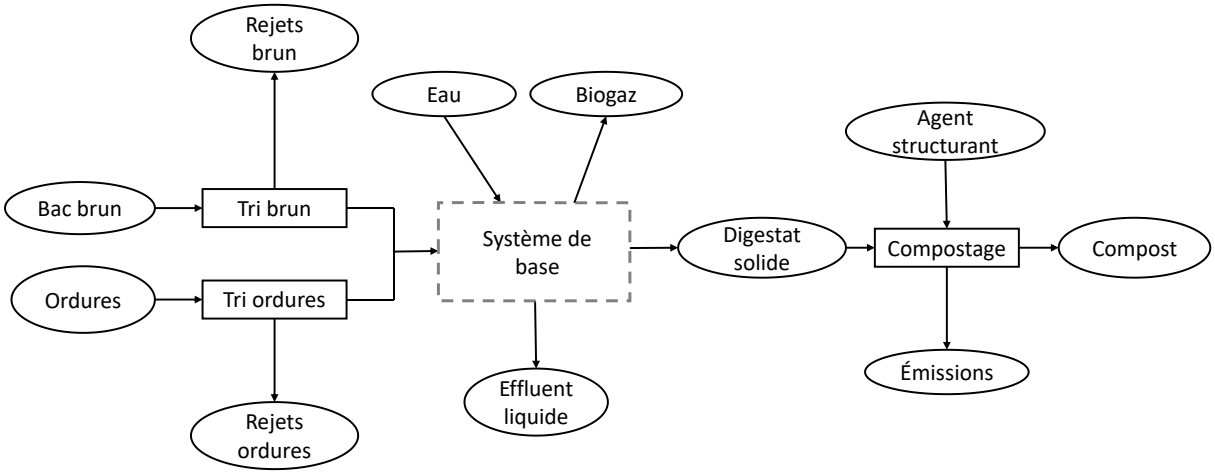


Figure 4.4 : Représentation schématique des courants et des processus ayant lieu dans l'usine de biométhanisation simulée pour l'agglomération de Montréal (le système de base est le même que celui de la Figure 3.12)

Le tri est modélisé à partir de deux critères de performance : la fraction de la matière organique récupérée dans le flux sortant (critère de récupération) et son contenu en matières organiques (critère de pureté). Il est supposé que le prétraitement permette uniquement de séparer les matières organiques des matières inorganiques. Il ne permet pas de retirer les matières organiques refusées dans les bacs bruns, telles les résidus verts, les couches et la litière, à l'exception des branches et du textile (Tableau 4.1). Une récupération de 75% et une pureté de 99% sont posées, ce qui entraîne 27% de la matière entrante dans le flux de rejets. Ce flux est composé à 90% de matières organiques. Ces performances se situe entre les performances mesurées sur 4 usines suédoises, rapportant 21.7% de rejets (Bernstad, Malmquist, Truedsson et la Cour Jansen, 2013), et d'une usine espagnole rapportant 32.0% de rejets (Pognani et al., 2012). Pour ce dernier, sa plus petite concentration en matières organiques dans le flux de rejets (49.7%) laisse prétendre qu'il y avait une plus grande concentration en matières inorganiques dans le flux entrant. Cependant, au Danemark, Hansen, la Cour Jansen, Davidsson et Christensen (2007) ont observé une différence significative dans la fraction de rejets selon la technologie de séparation, avec 41% pour une presse à vis et 34% pour un crible à disques, avec des contenus en matières organiques de plus de 90%.

Tableau 4.1 : Matières acceptées et rejetées dans les lignes de tri

Matières acceptées	**Matières rejetées**
Alimentaire - animal	Autres contaminants
Alimentaire - végétal	Branches
Couches	Cosmétique
Fibres non souillées	Métal
Fibres souillées	Particules fines
Litière	Plastique et polystyrène
Résidus verts	RDD
	Sac plastique
	Textile
	Verre

Le procédé de compostage a été modélisé à partir des coefficients de transfert obtenus d'une usine allemande traitant des OFMSW triées à la source par biométhanisation avec post-traitement (Knoop et al., 2018). Les détails sont disponibles dans l'Annexe D.

La composition du digestat produit à partir du bac brun trié, en termes de matières dégradées et non dégradées, est présentée à la Figure 4.5 et la proportion des matières entrantes qui se retrouvent dans le digestat solide, à la Figure 4.6. On remarque que le digestat est composé en majorité de substances non dégradables en conditions anaérobies. En effet, à l'OLR de la simulation, 81% des substances potentiellement dégradables en conditions anaérobies ont été effectivement dégradées, entraînant une conversion de 42% de la masse sèche (47% du contenu en VS). Par contre, dû à l'hypothèse stipulant que toutes les matières non dégradables demeurent sous forme solide durant le procédé, ces matières se retrouvent en quasi-totalité dans le digestat solide, étant guidé uniquement par le taux d'efficacité de la déshydratation. Les matières inorganiques occupent donc 2.1% de la masse sèche du digestat, provenant en majorité des sacs de plastique (1.25%). Au Québec, les critères de qualité des digestats et des composts produits à partir de matières résiduelles pour une application au sol sont indiqués dans le Guide sur le recyclage des matières résiduelles fertilisantes (Hébert, 2015). D'après le critère E1 permettant une application la moins restrictive sur les terres en culture, un compost doit contenir moins de 0.5% TS de corps étrangers de plus de 2 mm. Mais puisque la distribution de la taille des particules n'est pas connue, il est possible qu'une pureté de 99% ne soit pas suffisante pour assurer le respect du critère E1 et l'acceptabilité du compost sur les marchés.

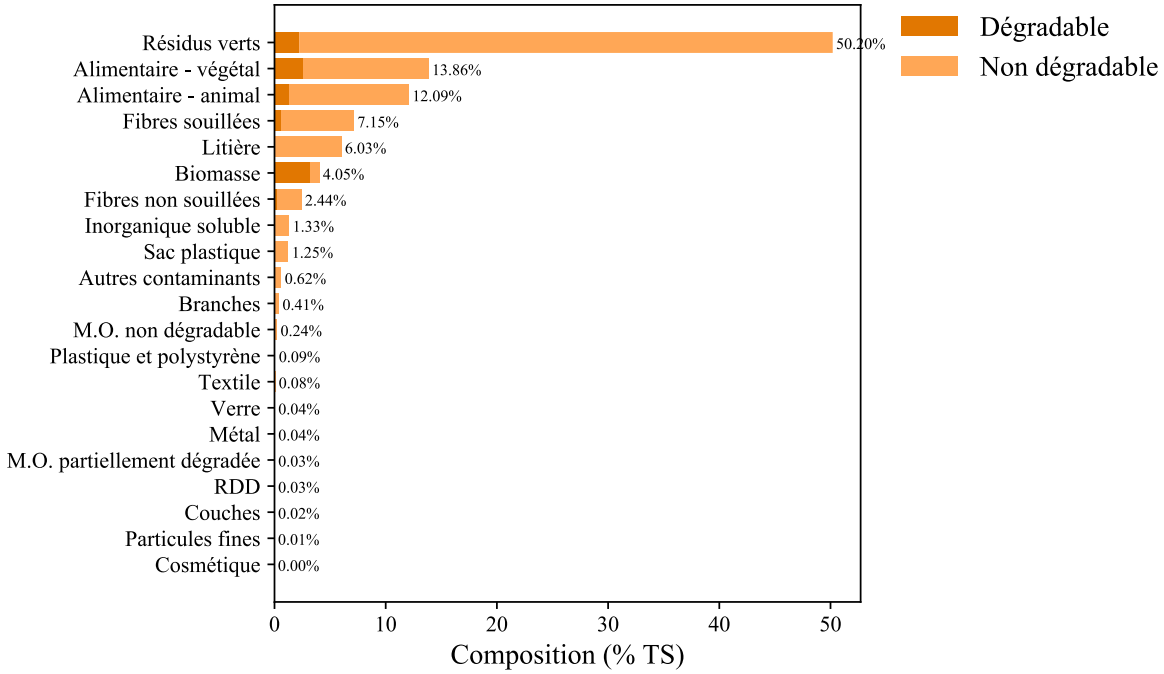


Figure 4.5 : Composition du digestat solide provenant du bac brun trié mécaniquement, incluant la répartition entre les fractions dégradables et non dégradables en conditions anaérobie

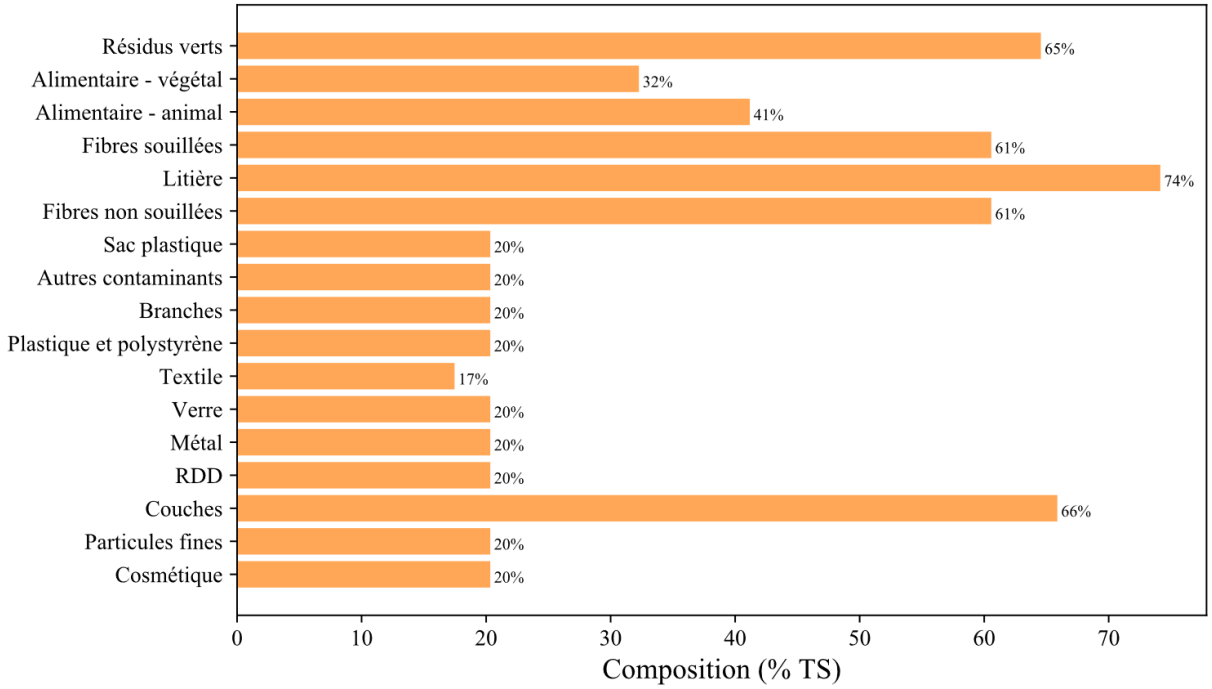


Figure 4.6 : Proportion des matières du bac brun se retrouvant dans le digestat solide suite à un tri mécanique

Pour ce qui est des contaminants chimiques, on note à la Figure 4.7 que les composts produits à partir des digestats de biométhanisation du bac brun trié et non trié contiennent une grande quantité de sélénium, provenant majoritairement des résidus verts et alimentaires. Cependant, pour toutes les fractions de matières résiduelles définies dans l'étude de cas, à l'exception de la fraction de plastique, la concentration en sélénium a été fixée à la limite de détection, puisque l'élément n'a pas été détecté dans la caractérisation utilisée (Götze et al., 2016). Aucune autre étude quantifiant la teneur en sélénium des fractions de matières résiduelles n'est rapportée dans la littérature, ce contaminant ne faisant pas l'objet de contraintes d'épandage en Europe (Saveyn et Eder, 2014). À Montréal, des concentrations de l'ordre de 1.5 mg (kg TS)$^{-1}$ ont été mesurées dans un digestat d'ordures ménagères (Bernard et Hardy, 2017). Quoiqu'après un compostage, la concentration de ce contaminant pourrait excéder la limite du critère C1 de 2 mg (kg TS)$^{-1}$, l'impact de ce contaminant est négligé dans cette étude de cas.

Les concentrations en arsenic dépassent aussi légèrement le critère C1; cet élément provenant essentiellement de la fraction de résidus verts. Peu d'études rapportent sa concentration dans les digestats et composts d'OFMSW, ne faisant pas l'objet de contraintes d'épandage dans tous les pays européens. Jensen et al. (2017) ont mesuré des concentrations de 2.3 et de 2.6 mg (kg TS)$^{-1}$ dans le flux entrant et dans le compost, respectivement. Riber et al. (2009) ont mesuré une concentration d'As 50% moindre dans les résidus verts que celle utilisée dans cette étude de cas. Néanmoins, ces concentrations élevées en As peuvent être un frein à l'utilisation du compost en agriculture. Limiter le contenu en résidus verts, matières refusées dans le bac brun de la zone Est, permettrait de réduire les teneurs en As.

Pour les autres contaminants, les concentrations obtenues par simulation sont plus élevées que celles mesurées par Jensen et al. (2017), mais ressemblent à celles mesurées par Knoop et al. (2018). Cependant, leurs concentrations en Pb sont plus élevées, avec des moyennes de 19 mg (kg TS)$^{-1}$ pour le premier et de 196 mg (kg TS)$^{-1}$ pour le deuxième. Ces mesures sont en revanche rapportées sur des intrants non triés, diminuant quelque peu à la suite de l'affinage du compost. Une vaste étude européenne a conclu que plus de 90% des composts produits à partir d'OFMSW triées à la source respectaient les critères européens, qui sont, à l'exception du Hg, plus strict que les critères québécois. L'élément le plus problématique rapporté est le Ni, qui ne semble pas causer de problème ici. D'autres contaminants habituellement rapportés comme étant les plus problématiques dans les digestats d'OFMSW sont le Zn, le Pb et le Cu (Govasmark et al., 2011;

Smith, 2009). Quoiqu'ils ne causent pas de problème ici en utilisant des compositions élémentaires danoises, il est possible que les concentrations en contaminants chimiques des matières résiduelles québécoises dévient de celles du Danemark.

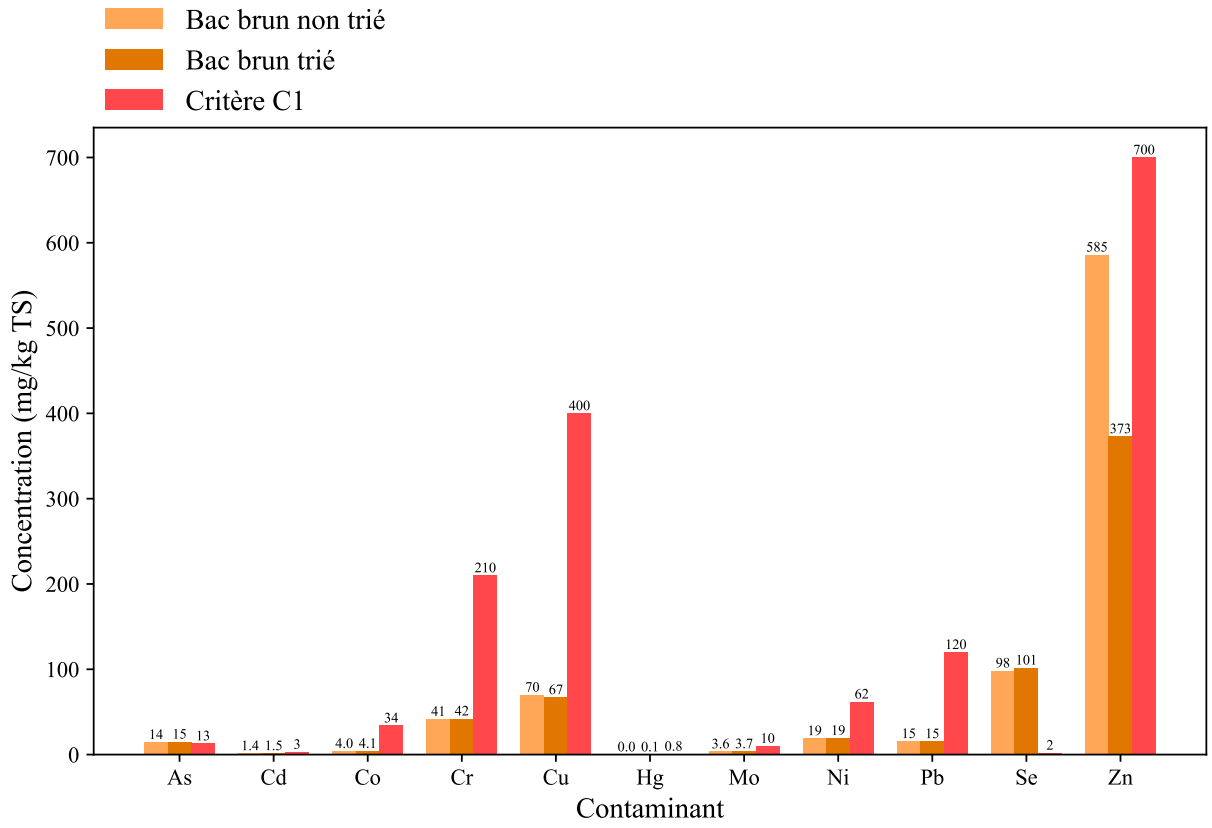


Figure 4.7 : Concentration en contaminants dans les composts provenant des bacs bruns triés et non triés comparées aux concentrations limites du critère C1

4.1.4 Impact du tri des ordures ménagères

La ligne de tri des ordures est modélisée de la même façon, avec un taux de récupération de 75%, mais avec un degré de pureté variable. La pureté minimale que doivent avoir les ordures afin de respecter les concentrations limites en contaminants chimiques dépend de la proportion d'ordures dans le flux à traiter. Des simulations en régime permanent sont effectuées en faisant varier la pureté du flux sortant du tri et la quantité de matières collectées dans les bacs bruns, supposant une quantité fixe de 25 000 tonnes/an d'ordures ménagères. Les puretés minimales sont présentées à la Figure 4.8, aux côtés de celles requises si le textile, une matière organique ayant une forte

concentration en Zn, était accepté par la ligne de tri. On note une grande différence dans la pureté minimale dans les deux cas, justifiant le besoin de retirer le textile dans le tri. On note aussi l'impact de la participation citoyenne dans la collecte des bacs bruns sur les puretés minimales. En effet, une pureté de plus de 95% est requise en prenant la masse collectée en 2016, tandis qu'à pleine capacité une pureté de 92% est acceptable. L'effet du tri et de la masse collectée dans les bacs bruns sur la fraction d'ordures dans le flux entrant au réacteur est aussi montré dans la Figure 4.8. On note que la fraction d'ordures avant le tri est plus élevée que la fraction après le tri.

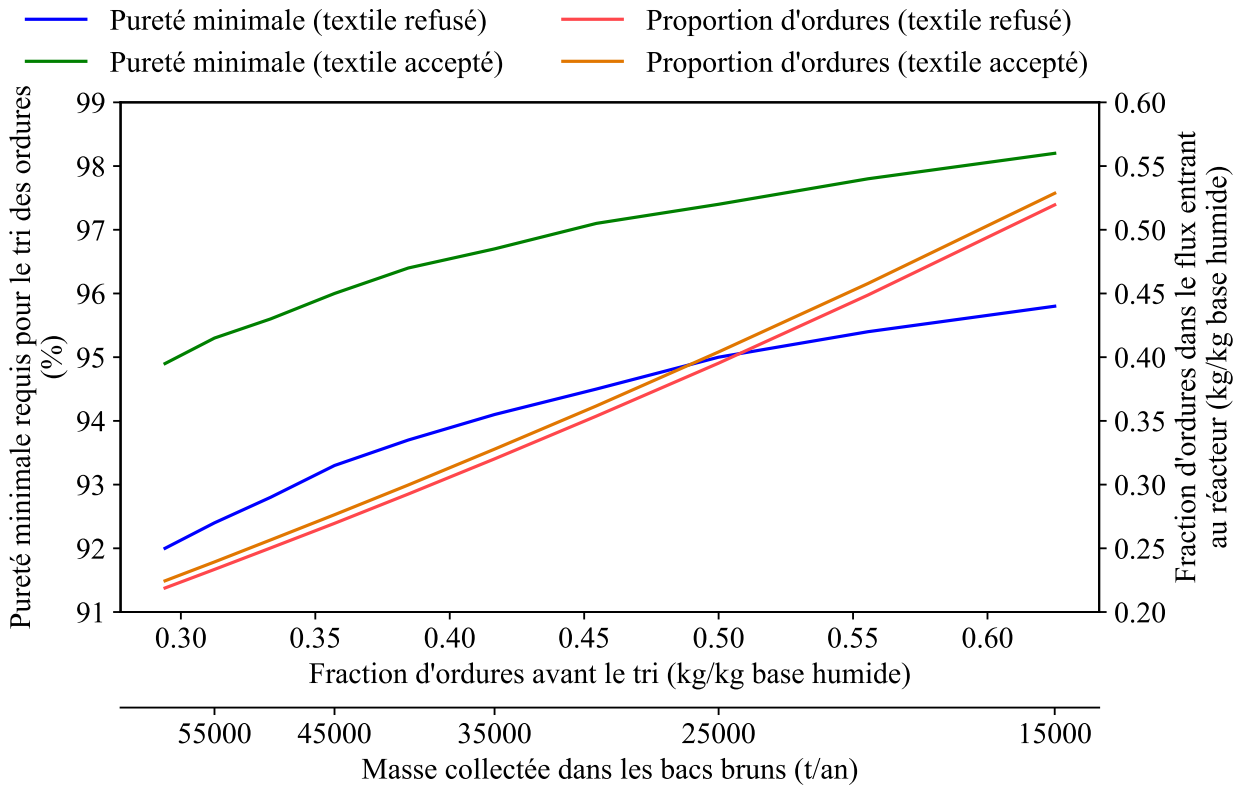


Figure 4.8 : Influence de la masse collectée dans les bacs bruns sur la fraction d'ordures dans le flux entrant au réacteur et sur la pureté minimale que doit avoir les ordures ménagères afin que le compost respecte les critères C1 (en supposant un flux constant de 25 000 t/an d'ordures)

Le contaminant présent dans les ordures qui dicte la pureté dans ce cas-ci est le Zn. Dans les ordures triées mécaniquement, cet élément provient surtout du textile et des RDD, malgré la faible proportion de ces derniers dans la matière initiale. Dans la Figure 4.9, les concentrations en contaminants chimiques des composts produits uniquement à partir d'ordures ménagères triées à une pureté de 92% et 98% sont montrées. En négligeant le Se, on note qu'à une pureté de 98% le

compost respecte les critères C1, tandis que celui d'un bac brun trié à 99% ne le respecte pas. Ce résultat contre-intuitif provient des différences dans la répartition des différentes fractions de matières organiques dans les deux flux. En effet, les ordures ont une concentration plus élevée en résidus alimentaires et plus faible en résidus verts, ce dernier contenant davantage d'As selon les compositions élémentaires danoises. La validité des seuils de pureté prédits dépend donc de la ressemblance entre les compositions élémentaires utilisées et celles des matières résiduelles montréalaises. Les résultats dépendent aussi fortement des catégories de matières acceptées et refusées dans la ligne de tri.

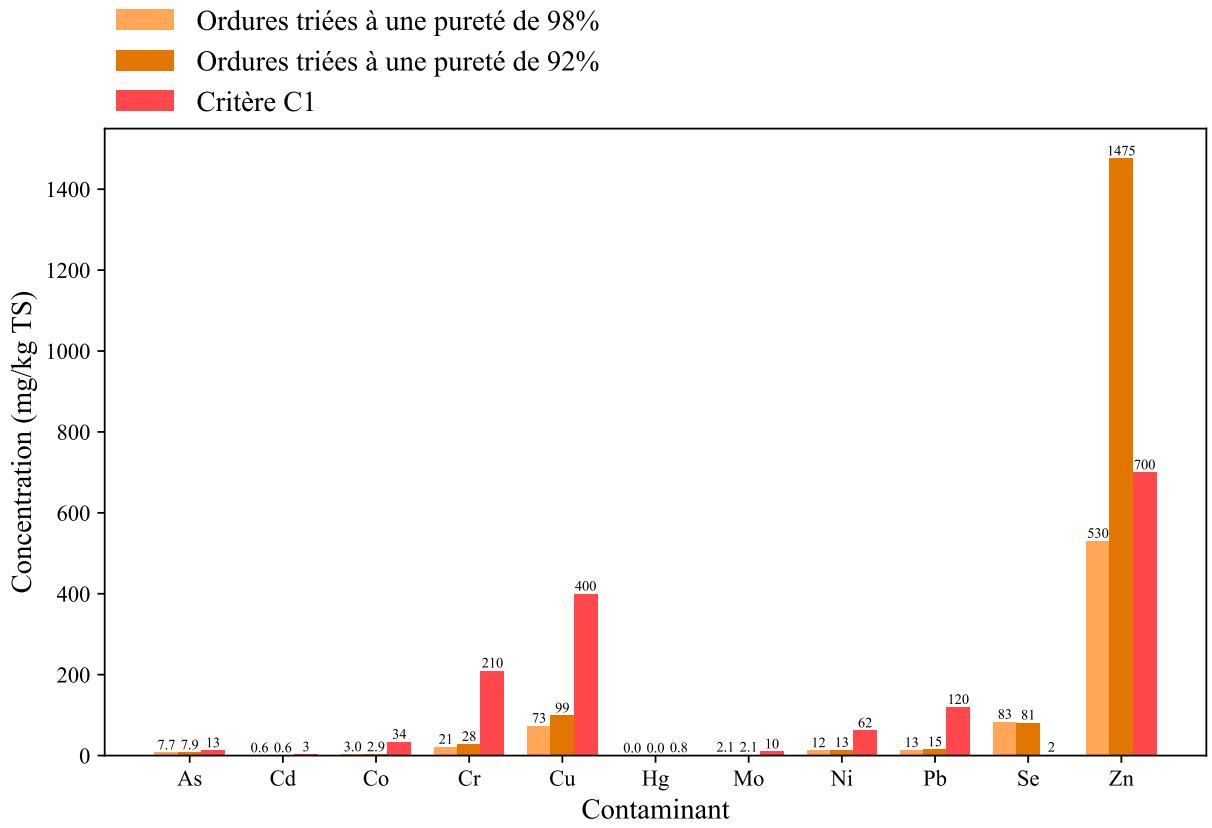


Figure 4.9 : Concentrations en contaminants dans les composts provenant des ordures ménagères comparées aux concentrations limites du critère C1

4.1.5 Impact des conditions d'opération

Une pureté de 96% est choisie pour la ligne de tri des ordures afin de simuler la performance et la stabilité du procédé à différents OLR et à différentes compositions de l'intrant. Dans la Figure 4.10,

on observe que le rendement en méthane de l'usine, par unité de masse humide entrante, tend à diminuer significativement lorsque la fraction d'ordures ménagères augmente. Cette baisse de rendement occasionnée par des faibles taux de participation à la collecte sélective, supposant un flux constant de 25 000 t/an d'ordures, peut être compensée en diminuant l'OLR, permettant aux matières de se dégrader davantage. Ceci est une option intéressante lorsque la participation est faible, comme il est prévu pour les premières années d'opération de l'usine, puisque cette dernière sera en sous-capacité. La productivité volumétrique, quant à elle, est moins influencée par la composition de l'intrant et davantage par les conditions d'opération. Lorsque l'usine atteindra sa pleine capacité, augmenter la productivité volumétrique en augmentant l'OLR va devenir plus intéressant. En effet, l'augmentation de la masse collectée dans les bacs bruns, contenant des matières se dégradant plus rapidement, va permettre de traiter plus de matières sans compromettre le rendement en méthane. Ce type d'information est important pour faire des choix de scénarios de traitement, puisque le rendement en méthane sera influencé par plusieurs facteurs au fil du temps.

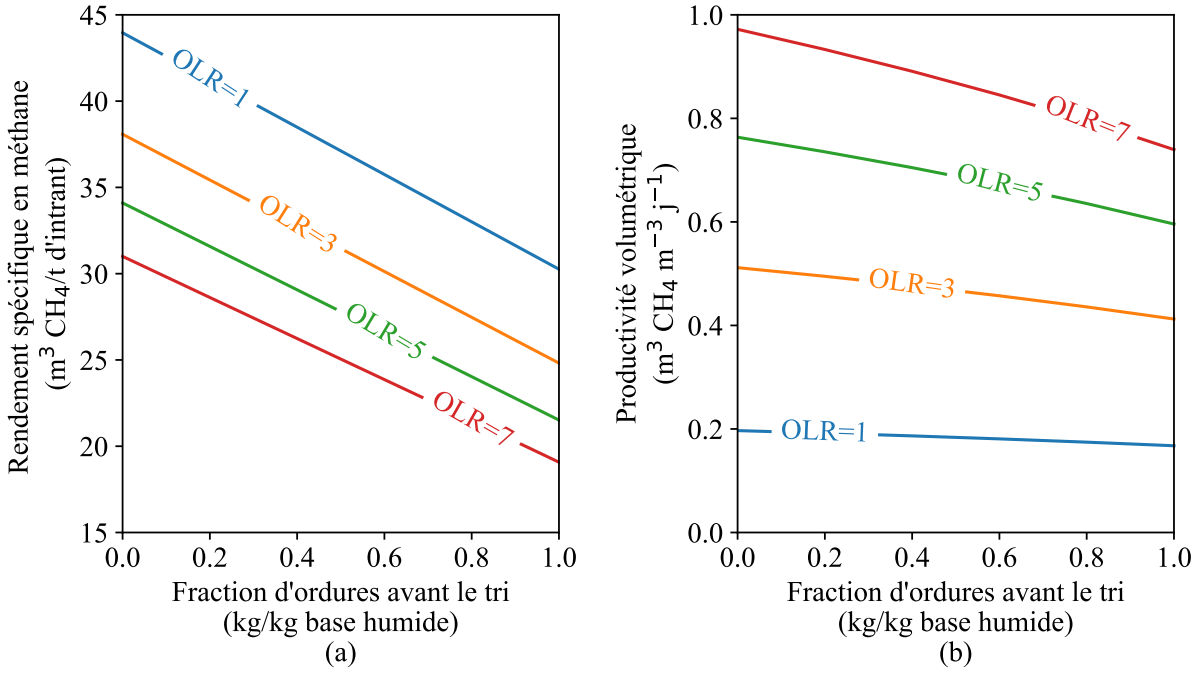


Figure 4.10 : Rendement en méthane sur base de la teneur en VS dans l'intrant au biométhaniseur en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut

En effet, avec l'évolution de la participation citoyenne et les changements aux conditions opératoires qui suivent, les coefficients de transfert des principaux éléments se voient modifiés

également, comme le montrent la Figure 4.11 et la Figure 4.12. Les coefficients de transfert du carbone et du soufre suivent les mêmes tendances qu'observées pour le rendement spécifique en méthane, mais des différences importantes sont observées pour l'azote et le phosphore. Quoique les pertes de phosphore dans l'effluent liquide ne soient pas influencées par la fraction d'ordures dans le flux entrant, les pertes d'azote diminuent légèrement. Les effets sont largement plus importants lorsque l'OLR change, avec des pertes significativement plus élevées à des OLR plus faibles. Cette analyse montre que si l'OLR est diminué afin de compenser les pertes de rendement causées par un manque de matières, la valeur fertilisante du digestat va diminuer et les pertes de nutriments dans l'environnement vont augmenter. En plus, les plus grandes concentrations d'azote dans l'effluent liquide qui résultent de la diminution de l'OLR peuvent entraîner des émissions de N_2O plus élevées lors de son traitement, comme l'ont montré Corominas et al. (2012).

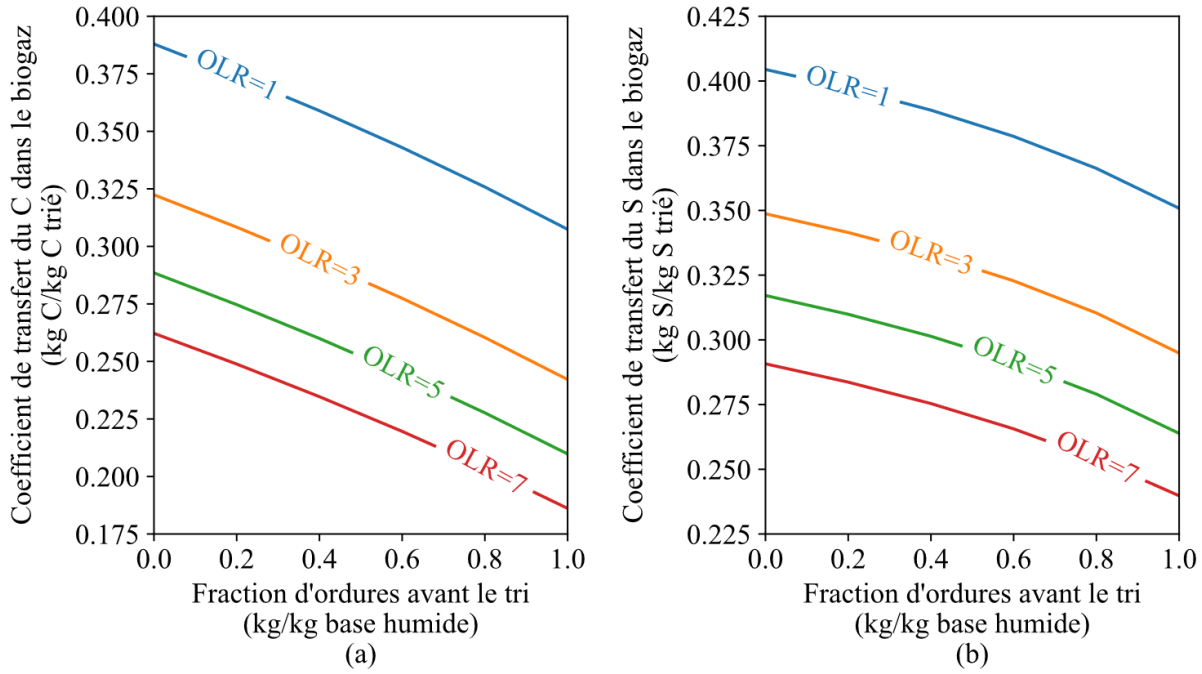


Figure 4.11 : Coefficients de transfert (a) du C et (b) du S dans le biogaz en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut

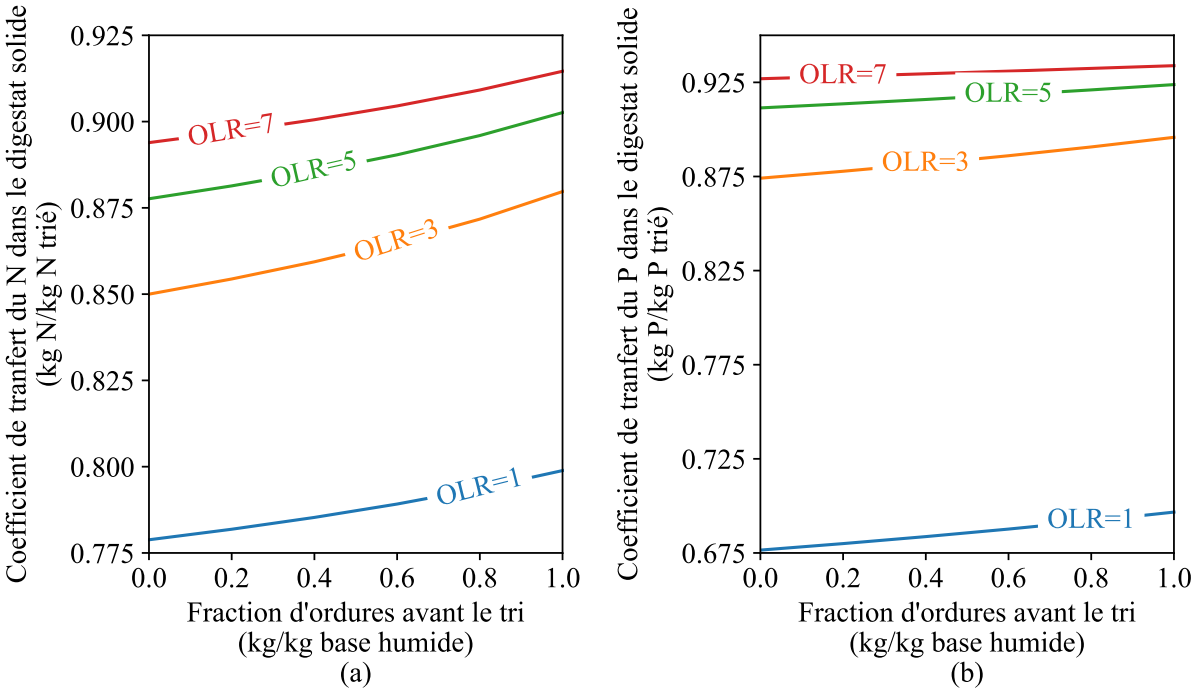


Figure 4.12 : Coefficients de transfert (a) du N et (b) du P dans le digestat solide en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut

La stabilité du procédé est quant à elle représentée par les facteurs d'inhibition de la méthanogénèse acéticlastique par l'ammoniac et le pH (Figure 4.13). L'OLR est le facteur déterminant de la concentration d'ammoniac dans le réacteur, avec une inhibition plus marquée à un OLR plus faible. L'ajout d'ordures tend à réduire la concentration d'ammoniac, ce qui réduit l'inhibition causée par cette substance, mais la perte d'alcalinité entraîne une diminution du pH. Ceci se traduit par une augmentation de l'inhibition par le pH. On voit qu'à un OLR faible, le système est plutôt résilient à l'augmentation de la fraction d'ordures, mais qu'à un OLR plus élevé, le facteur d'inhibition diminue rapidement.

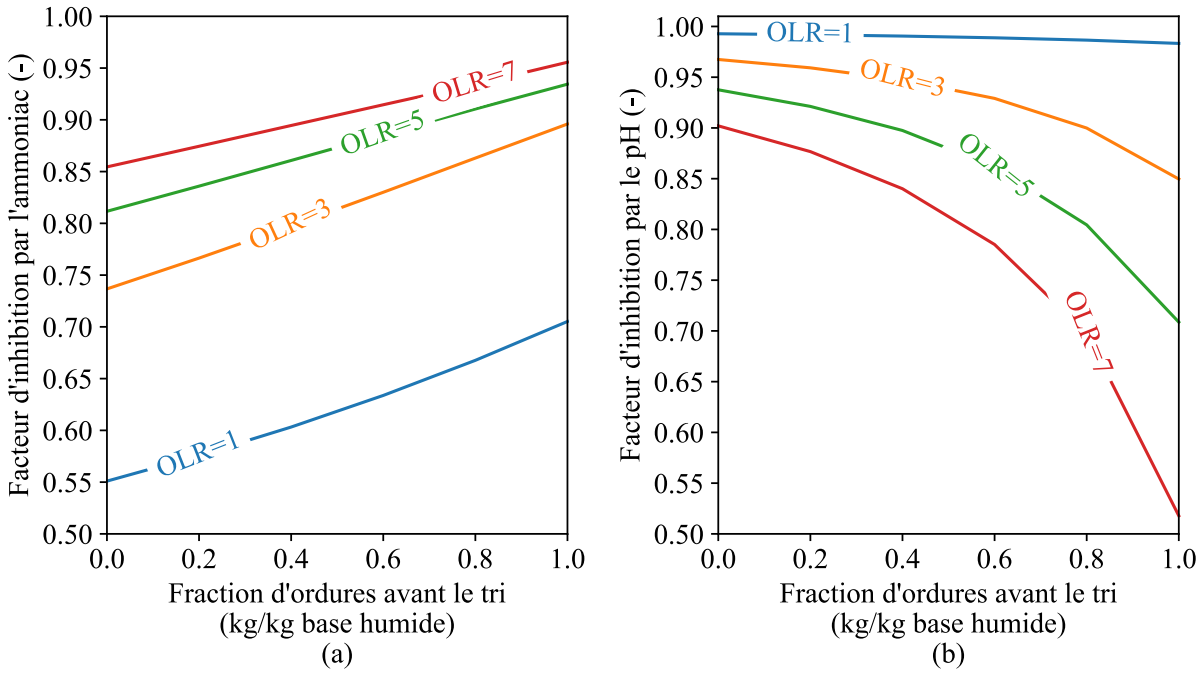


Figure 4.13 : Facteurs d'inhibition de la méthanogénèse acéticlastique (a) par l'ammoniac et (b) par le pH en fonction de la fraction d'ordures dans le flux brut

4.1.6 Synthèses de l'étude de cas

Bref, les résultats obtenus semblent indiquer qu'il est acceptable d'ajouter de la matière organique provenant des ordures ménagères pour optimiser l'utilisation du centre de biométhanisation prévu pour la zone Est. Il a été montré qu'il est avantageux dans ce cas de réduire l'OLR dans les premières années d'opération de l'usine, lorsque la masse collectée dans les bacs bruns est faible. Par contre, la proportion importante de matières inorganiques dans le produit fini, même si obtenu uniquement à partir de matières du bac brun (Figure 4.5), laisse prétendre qu'il peut être difficile de respecter le critère E1 pour la teneur en corps étrangers. Écouler le compost sur les marchés peut donc s'avérer un défi.

Avec les puretés posées pour les lignes de tri, un mélange consistant d'OFMSW collectées dans les bacs bruns et provenant des ordures ménagères permet plus facilement de respecter les critères limites de concentrations en contaminants chimiques dans les composts. Cependant, les teneurs en contaminant de ces derniers varient grandement dans la littérature. Par exemple, Kupper, Bürge, Bachmann, Güsewell et Mayer (2014) n'ont trouvé aucune différence significative entre l'impact du procédé de traitement, de la composition et de l'origine des matières, de la saison, de la taille

des particules et de la quantité d'impureté sur la teneur en métaux lourds dans des composts et digestats provenant d'OFMSW triées à la source. Quoique ces derniers respectaient, en moyenne, les concentrations limites en Suisse, des variations importantes ont été observées pouvant entraîner des lots hors-normes. Des variations importantes ont aussi été observées par Knoop et al. (2018). Il faut donc faire attention à l'utilisation de valeurs moyennes pour effectuer des prédictions comme il a été fait dans cette étude de cas.

Enfin, les MFA pour la masse humide et les éléments majeurs (C, N, P, S) obtenues selon deux scénarios de traitement pour les matières organiques, soit un scénario correspondant au début de vie des infrastructures et un scénario correspondant aux infrastructures fonctionnant à pleine capacité, sont présentées dans la Figure 4.14 et la Figure 4.15, respectivement. Un OLR plus faible a été choisi pour le scénario 1 et un OLR plus élevé pour le scénario 2. Les détails des conditions d'opération sont résumés dans le Tableau 4.2.

Tableau 4.2 : Conditions d'opération pour les simulations des deux scénarios de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal

Paramètre d'opération	**Unité**	**Scénario 1**	**Scénario 2**
Pureté de la ligne de tri du bac brun	%	99	
Taux de récupération de la ligne de tri du bac brun	%	75	
Pureté de la ligne de tri des ordures	%	96	
Taux de récupération de la ligne de tri des ordures	%	75	
Teneur en matières sèches de l'intrant	kg TS kg^{-1}	0.1	
Taux de récupération	%	50	
OLR	kg VS m^{-3} j^{-1}	2	4
Temps de résidence	j	40	20

Ces MFA sont présentées afin de montrer qu'outre les analyses effectuées sur le rendement en méthane et sur la qualité du compost produit, la méthodologie développée permet de prédire le débit et la composition de l'ensemble des flux entrants et sortants du centre de biométhanisation. Intégrée dans une MFA complète du système de GMR de l'agglomération, les impacts du comportement du générateur de matières résiduelles et des conditions d'opération du centre de biométhanisation sur les traitements en aval peuvent être quantifier. Par exemple, les prédictions peuvent servir à évaluer les émissions de gaz à effet de serre produites lors du traitement de l'effluent liquide dans la station d'épuration.

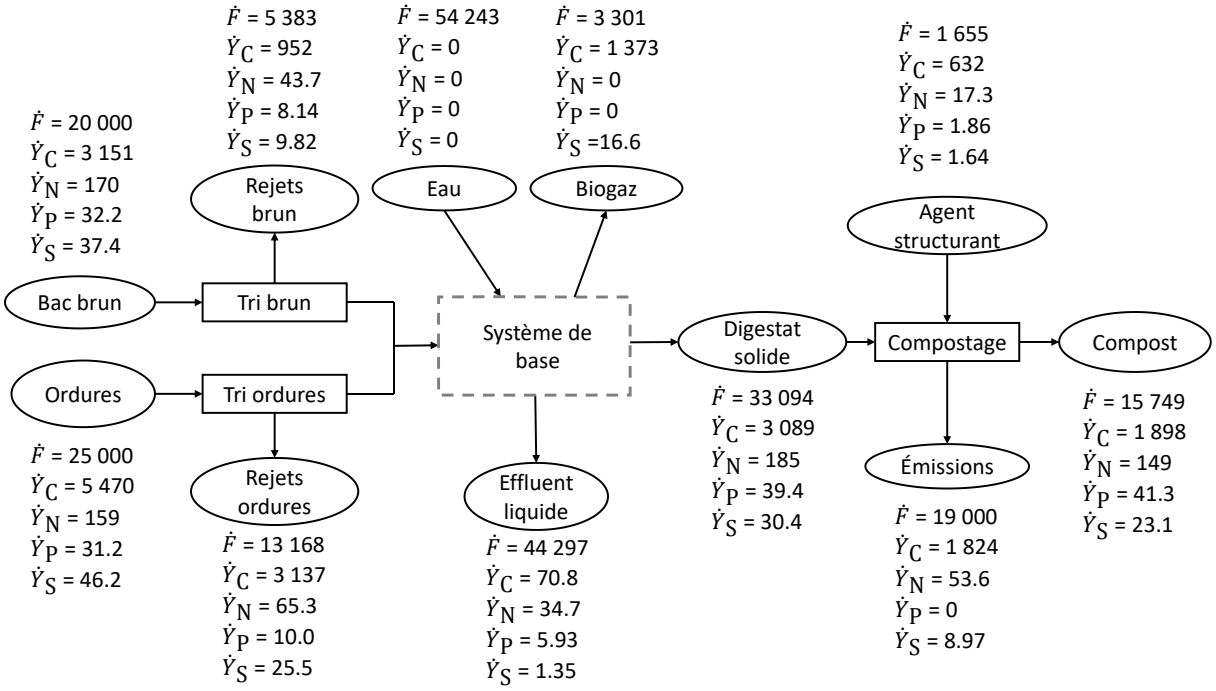


Figure 4.14 : MFA du système de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal selon le scénario 1

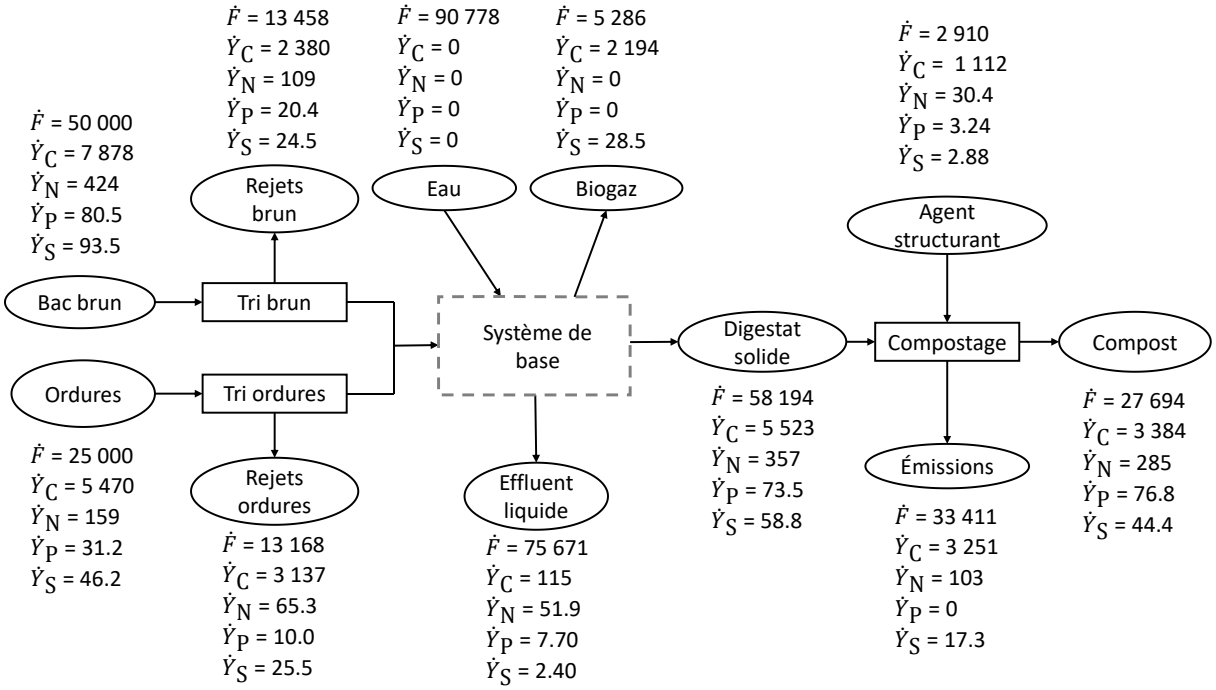


Figure 4.15 : MFA du système de traitement des matières organiques de l'agglomération de Montréal selon le scénario 2

4.2 Ville de Laval

Dans ce chapitre, la méthodologie développée est appliquée au contexte d'une représentation par MFA du système de gestion des matières résiduelles de la ville de Laval.

4.2.1 Contexte lavallois

La Ville de Laval a également annoncé ses intentions en matière de traitement des résidus organiques dans son dernier plan de gestion des matières résiduelles (PGMR) 2012-2017 (Ville de Laval, s.d.). Elle prévoit la construction d'un centre de biométhanisation qui traitera principalement les boues de ses stations d'épuration des eaux usées. La Ville est en train d'implanter une collecte des matières organiques pour l'ensemble des résidences de 7 logements et moins, collectant les résidus alimentaires et les résidus verts dans un même bac.

Le centre de biométhanisation, qui sera annexé à la station d'épuration de La Pinière, est prévu pour 2022 et traitera la totalité des boues des trois stations d'épuration de la ville, en plus des matières organiques provenant des bacs bruns résidentiels (Figure 4.16). Il est aussi prévu d'y traiter de la matière organique provenant des industries, commerces et institutions (ICI), mais puisque les détails ne sont pas encore élaborés, ce flux de matières est négligé dans la présente étude de cas. Les biosolides produit à la station de la Pinière sont présentement déshydratés par des pressoirs rotatifs, puis séchés sous forme de granules pour être valorisés en agriculture. Il est prévu de continuer à produire des granules à partir du digestat de biométhanisation (Vaillancourt, communication personnelle, 17 novembre 2017).

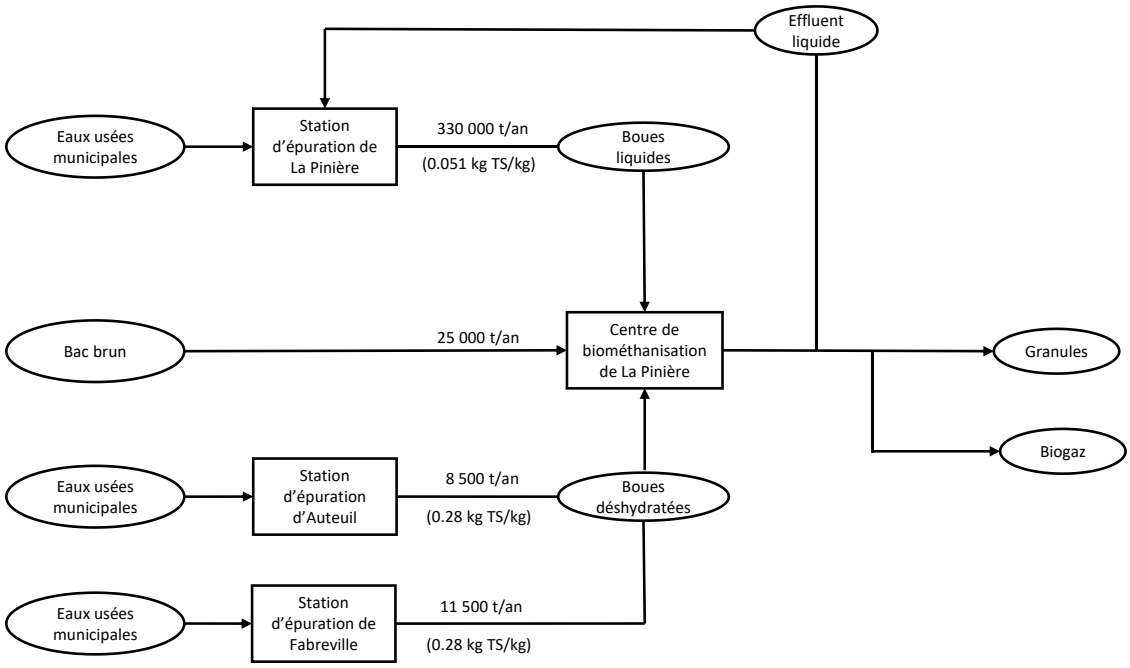


Figure 4.16 : Représentation schématique des principaux courants du futur système de gestion des matières résiduelles organiques de la ville de Laval (les intrants et extrants secondaires ne sont pas montrés)

Puisqu'aucune campagne de caractérisation du contenu des bacs bruns lavallois n'a été réalisée, la composition du flux en termes de catégories de matières (biens) est prise de celle réalisée en 2014 dans la zone Ouest de l'agglomération de Montréal (NI Corporation, 2015) (Figure 4.17). Comme à Laval, les résidus alimentaires et les résidus verts y sont collectés dans le même bac. Les compositions élémentaires et le fractionnement des matières en termes de substances sont les mêmes que ceux définis dans l'étude de cas précédente. Cependant, le contenu en matières inorganiques (0.9%) est beaucoup plus faible que celui de la zone Est de l'agglomération de Montréal, nécessitant des besoins plus faibles en prétraitement. La différence majeure est que le bac brun est composé en grande partie de résidus verts (76.8%), malgré que les compositions présentées constituent des moyennes annuelles. En fait, les résidus verts sont principalement produits lors des périodes de pointe au printemps et à l'automne, avec des quantités moindres en été et quasi-nulles en hiver (NI Corporation, 2015).

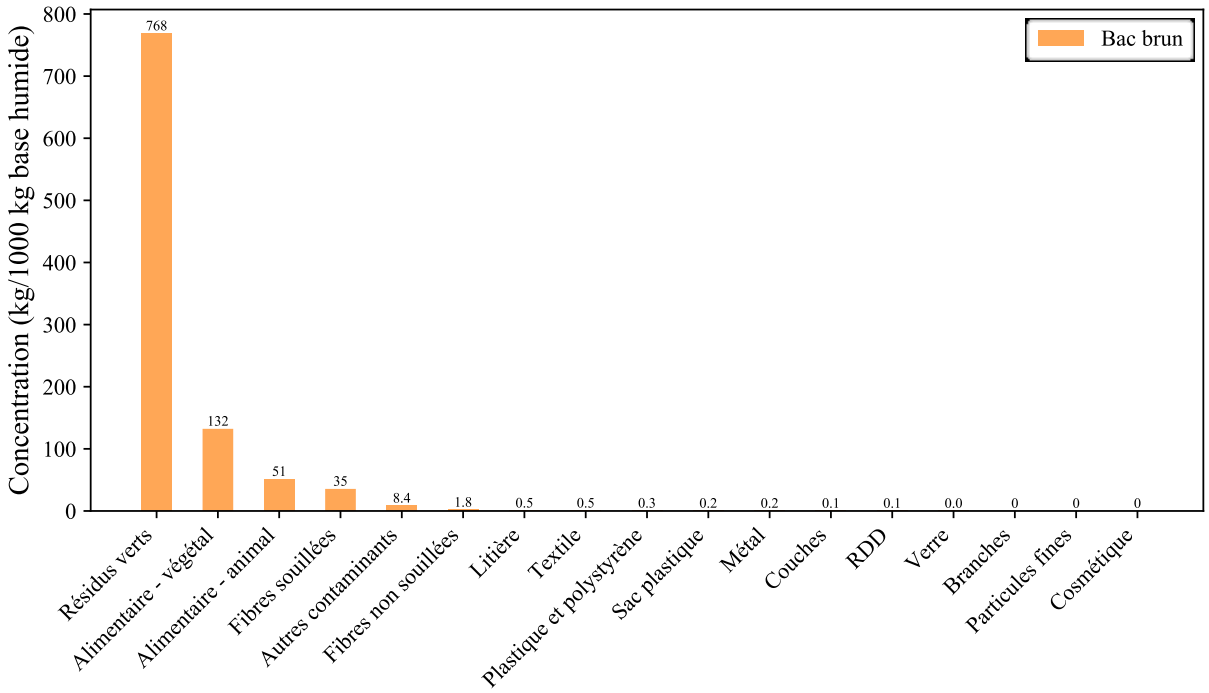


Figure 4.17 : Composition estimée des bacs bruns lavallois (supposée équivalente à celle de la zone Ouest de l'agglomération de Montréal)

La méthode utilisée pour obtenir les compositions des courants de biosolides en termes de biens, substances et éléments diffère de celle utilisée pour les OFMSW discutée jusqu'à maintenant parce que la méthodologie présentée dans le Chapitre 3 n'a pas été développée pour ce type de matière. Le fractionnement en termes de substances des boues liquides de La Pinière est effectué à partir d'analyses effectuées sur les boues primaires d'une usine de traitement des eaux usées néerlandaise (Miron, Zeeman, van Lier et Lettinga, 2000), adapté pour ADM1-PWM par de Gracia, Huete, Beltrán, Grau et Ayesa (2011). Les concentrations sont ensuite calibrées pour correspondre aux mesures effectuées en 2009 sur les boues de la station d'épuration de La Pinière (Dessau, 2010) (Tableau 4.3). Le fractionnement en termes de substances est présenté dans le Tableau 4.4. La composition des boues déshydratées provenant des stations d'Auteuil et de Fabreville est obtenue en simulant une déshydratation avec une efficacité de 98% des boues de La Pinière.

Tableau 4.3 : Caractérisation des boues liquides de la station d'épuration de La Pinière en 2009 (Dessau, 2010)

Mesures	**Unité**	**Valeur**
pH	(-)	6.6
Potentiel méthanogène	L CH_4 (kg TS)$^{-1}$	307
DCO_t	kg DCO (kg TS)$^{-1}$	1.3
Arsenic	mg (kg TS)$^{-1}$	2.8
Cadmium	mg (kg TS)$^{-1}$	1
Chrome	mg (kg TS)$^{-1}$	73
Cobalt	mg (kg TS)$^{-1}$	4
Cuivre	mg (kg TS)$^{-1}$	249
Mercure	mg (kg TS)$^{-1}$	0.4
Molybdène	mg (kg TS)$^{-1}$	3
Nickel	mg (kg TS)$^{-1}$	40
Plomb	mg (kg TS)$^{-1}$	29
Sélénium	mg (kg TS)$^{-1}$	1.7
Zinc	mg (kg TS)$^{-1}$	388

Note : Les concentrations en contaminants correspondent aux valeurs maximales mesurées sur 4 échantillons

4.2.2 Objectifs des simulations

Afin d'augmenter la rentabilité du centre de biométhanisation des biosolides, il est intéressant pour la Ville de Laval de considérer une co-digestion avec la matière organique résidentielle séparée à la source. Cependant, la forte proportion de résidus verts lors des périodes de pointe au printemps et à l'automne peut nuire au rendement en méthane et provoquer des instabilités dans le réacteur, en plus de modifier les propriétés fertilisantes des granules produites à partir du digestat. La question est donc :

Quels sont les impacts de la période de pointe des résidus verts sur le procédé et sur le digestat produit dans le centre de biométhanisation prévu dans le PGMR pour les biosolides municipaux et les bacs bruns ?

Pour répondre à la question, l'effet que provoquent les conditions d'opération sur la co-digestion des différents flux est tout d'abord isolé. Ensuite, une modélisation dynamique de la réponse du système à une période de pointe d'intensité variable est effectuée.

Tableau 4.4 : Fractionnement en termes de substances des boues liquides de la station d'épuration de La Pinière et des boues déshydratées des stations Fabreville et d'Auteuil

Substance	Unité	Matière (bien)	
	x10^{-3}	Boues de La Pinière	Boues déshydratées
S_{su}	kg kg^{-1}	0.234	0.177
S_{aa}	kg DCO kg^{-1}	0.673	0.508
S_{fa}	kg DCO kg^{-1}	5.850	4.411
S_{va}	kg DCO kg^{-1}	0.855	0.644
S_{pro}	kg DCO kg^{-1}	0.855	0.644
S_{ac}	kg DCO kg^{-1}	0.855	0.644
S_{IC}	kmol C kg^{-1}	9.9 x 10^{-3}	7.5 x 10^{-3}
S_{IN}	kmol N kg^{-1}	7.4 x 10^{-3}	5.6 x 10^{-3}
S_{h+}	kmol kg^{-1}	2.5 x 10^{-7}	1.9 x 10^{-7}
S_{oh-}	kmol kg^{-1}	8.3 x 10^{-8}	6.2 x 10^{-8}
S_{I}	kg DCO kg^{-1}	1.410	1.063
X_{ch}	kg DCO kg^{-1}	17.844	110.656
X_{pr}	kg DCO kg^{-1}	8.436	52.313
X_{li}	kg DCO kg^{-1}	9.133	56.637
X_{I}	kg DCO kg^{-1}	21.356	132.435
S_{h2o}	kg kg^{-1}	949	715
X_{FS}	kg kg^{-1}	7.388	45.815

4.2.3 Impact des conditions d'opération sur le cas de base

À partir de simulations en régime permanent de la biométhanisation des courants de biosolides et de bacs bruns traités séparément, on observe que les teneurs en contaminants des digestats produits respectent dans les deux cas les critères C1 (Figure 4.18). La plus faible concentration en matières inorganiques dans les bacs bruns, de même que l'absence d'un procédé de compostage, rend la teneur en contaminants du courant plus faible que celle des bacs bruns de la zone Est de l'agglomération de Montréal (Figure 4.7). Les concentrations en contaminants du digestat provenant des boues primaires, à l'exception de l'As et du Cd, sont plus élevées que celles provenant des bacs bruns. Dans ce cas-ci, une ligne de tri pour retirer les matières inorganiques des bacs bruns ne semble pas être nécessaire pour atteindre les critères de qualité du digestat.

De plus, dû à la masse importante de boues liquides à faible teneur en matières sèche, l'hypothèse est posée qu'aucune dilution du courant provenant des bacs bruns n'est nécessaire. Aucun recyclage de l'effluent liquide n'est donc effectué. Une représentation schématique des courants et

des processus ayant lieu dans le centre de biométhanisation telle que simulée est présentée à la Figure 4.19.

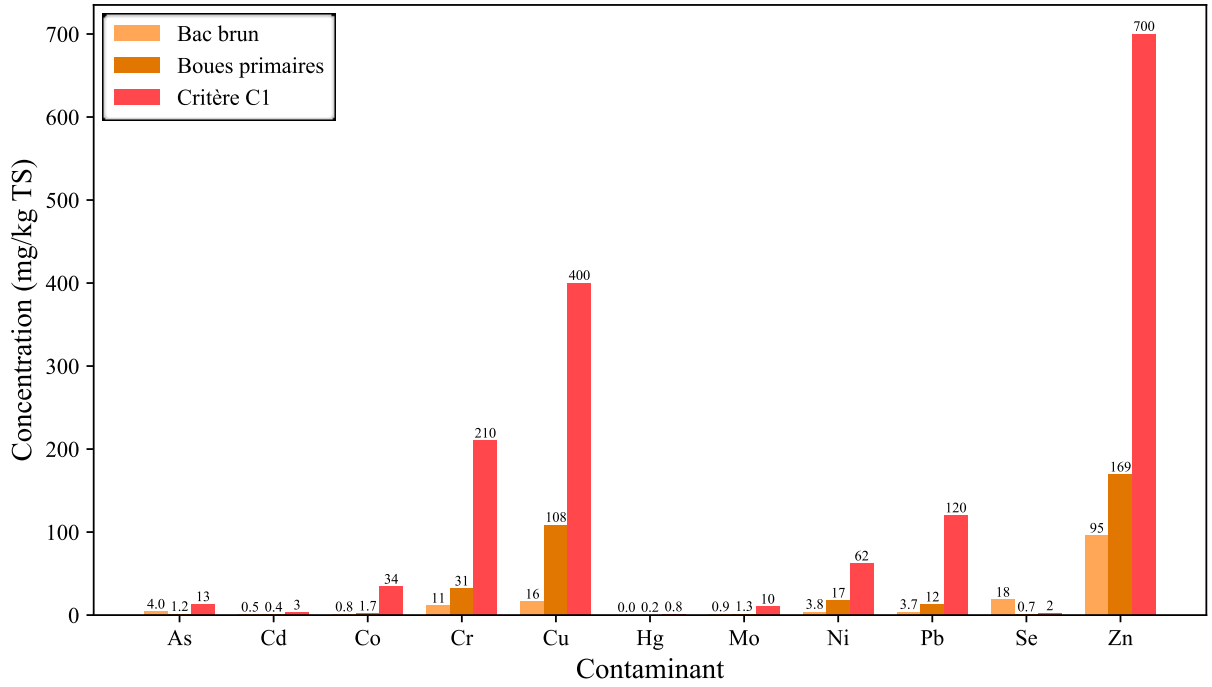


Figure 4.18 : Teneurs en contaminants dans les digestat provenant des boues primaires et des bacs bruns comparées aux teneurs limites du critère C1

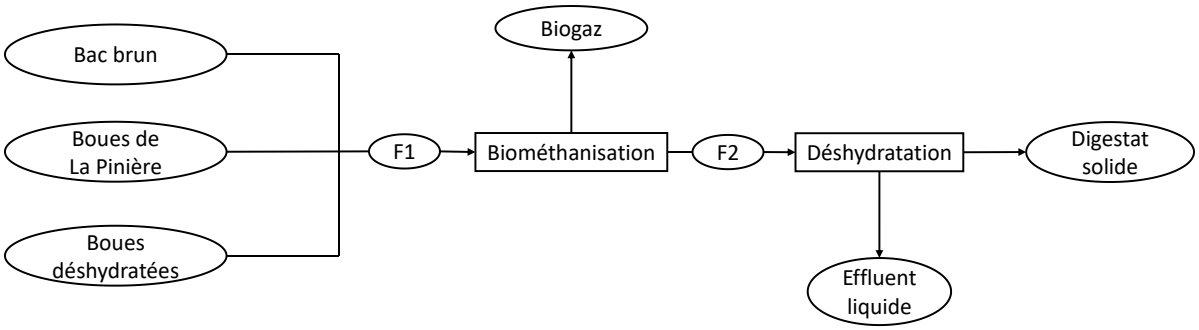


Figure 4.19 : Représentation schématique des courants et des processus ayant lieu dans le centre de biométhanisation de La Pinière

Pour évaluer l'impact des conditions d'opération, le temps de résidence dans le réacteur de différents mélanges de matières est varié de 10 à 40 jours. Les intrants considérés sont :

1. Boues liquides provenant de la station d'épuration de La Pinière seulement;
2. Boues liquides en combinaison avec les boues déshydratées provenant des autres stations d'épuration;
3. Boues liquides et boues déshydratées en combinaison avec le contenu des bacs bruns sans résidus verts (pour simuler des conditions hivernales);
4. Boues liquides, boues déshydratées et contenu du bac brun avec une composition deux fois plus élevée en résidus verts (pour simuler des conditions estivales).

Contrairement aux analyses effectuées jusqu'à maintenant, le temps de résidence est choisi au lieu de l'OLR comme condition d'opération à varier, car l'augmentation de la teneur en matières sèches de l'intrant avec l'ajout de boues déshydratées et de matières provenant du bac brun va entraîner une augmentation du temps de résidence si l'OLR est fixe. Le procédé est habituellement conçu en fixant un temps de résidence le plus court possible afin de réduire les dimensions du réacteur sans compromettre une réduction adéquate des solides volatiles. Un temps de résidence de 20 jours permet habituellement d'atteindre l'objectif de 0.40-0.50 kg VS dégradées (kg VS entrant)$^{-1}$ pour des biosolides (Camacho et Prévot, 2015).

Comme le montre la Figure 4.20a, tous les scénarios à l'exception de celui ayant des résidus verts comme intrant atteignent l'objectif de réduction des solides volatils à un temps de résidence de 20 jours. Sur ce critère, le gain d'augmenter le temps de résidence est faible pour ces matières. La réduction de la DCO est un critère plus adéquat pour évaluer la performance, mais comme le montre la Figure 4.20b, elle est également significativement inférieure lorsque des résidus verts sont ajoutés. Cependant, puisque la déshydratation du digestat en granules permet d'obtenir un produit stable, l'effet de ce critère sur le reste des analyses est négligé.

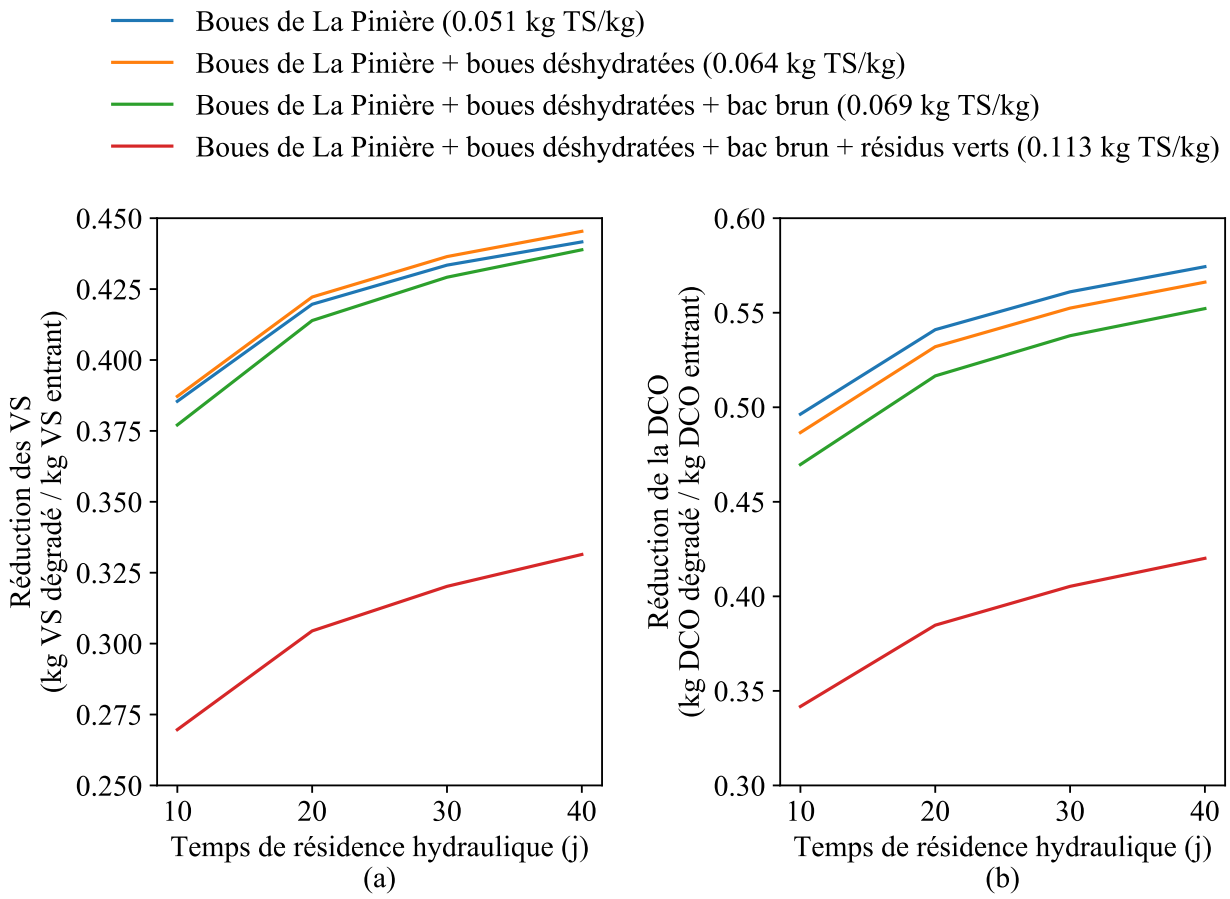


Figure 4.20 : Réduction (a) des solides volatils et (b) de la DCO en fonction du temps de résidence pour différents mélanges de matières

L'ajout d'OFMSW permet habituellement d'augmenter le débit de méthane et la productivité volumétrique (Mata-Alvarez et al., 2011), phénomène observé lors des simulations (Figure 4.21 et Figure 4.22). Le modèle ADM1 permet en effet d'observer les synergies ayant lieu lors d'une co-digestion de matières complémentaires comme les biosolides et les OFMSW. On observe à la Figure 4.22 une légère augmentation du débit de méthane en simulant les matières en co-digestion comparativement à une simulation des biosolides et du bac brun séparément. Ce phénomène a été observé en laboratoire (Aichinger et al., 2015) et par modélisation (Giovanni Esposito, Frunzo, Panico et Pirozzi, 2012). En effet, les OFMSW augmente le rapport C/N et le contenu en solides volatils des biosolides, tandis que ce dernier procure une alcalinité aux OFMSW (Hartmann et al., 2002). Il en résulte un mélange plus stable avec une production accrue en biogaz.

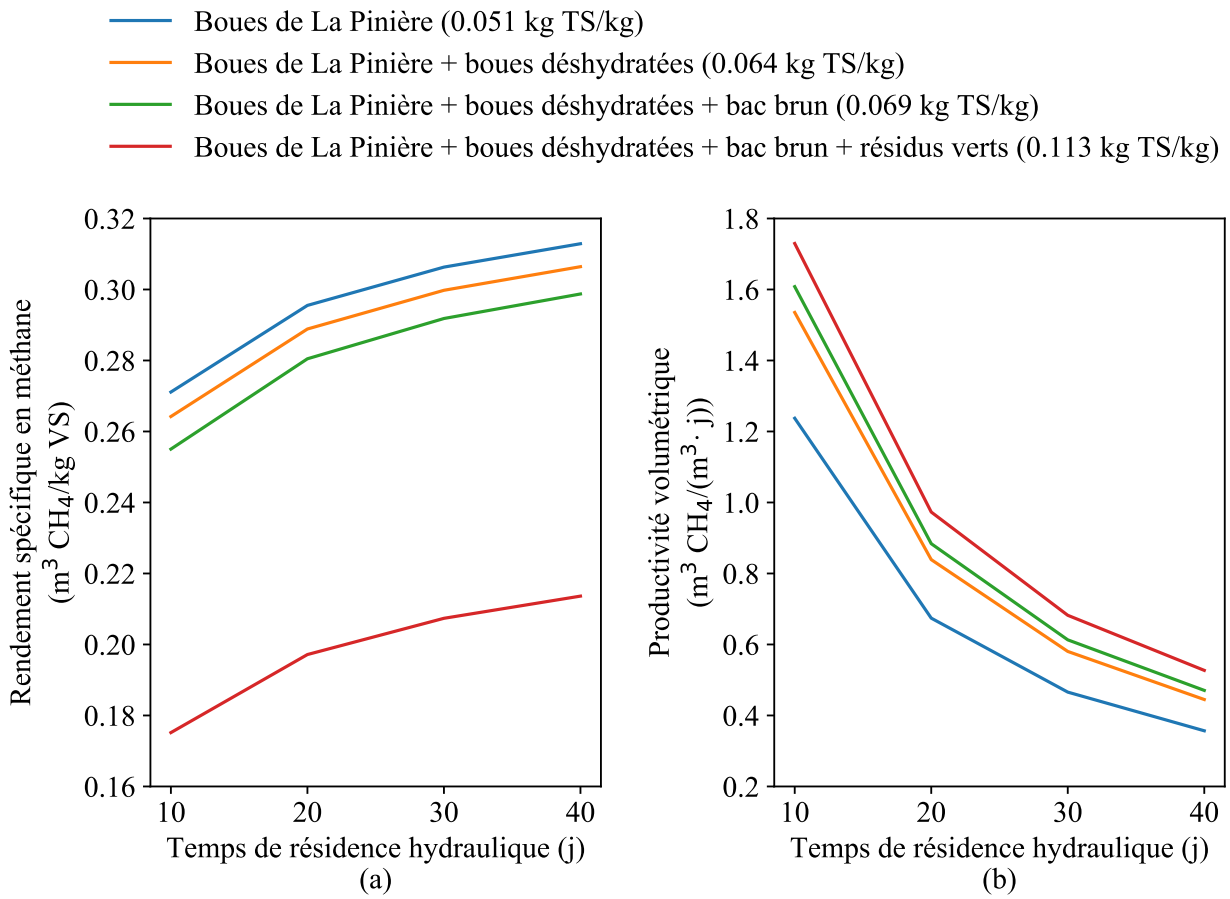


Figure 4.21 : (a) Rendement spécifique en méthane et (b) productivité volumétrique en fonction du temps de résidence pour différents mélanges de matières

Cependant, le rendement spécifique en termes de solides volatils est largement diminué avec l'ajout de matières provenant des bacs bruns, conséquence de leur dégradabilité plus faible. Tel qu'attendu, le rendement augmente avec le temps de résidence, mais l'effet est plutôt faible à plus de 20 jours. Le temps de résidence a un effet beaucoup plus important sur la productivité volumétrique. Cette baisse de rendement a été observée par Pahl et al. (2008) dans un réacteur traitant des boues primaires et des OFMSW provenant d'ordures ménagères. En considérant que l'objectif de la co-digestion dans cette étude de cas est d'augmenter la rentabilité de l'usine en y traitant un maximum de matières, la productivité volumétrique est jugée plus adéquate comme critère d'évaluation de la performance. L'ajout du courant de bacs bruns permet en effet d'augmenter significativement la teneur en solides de l'intrant, surtout lors de la période estivale. En fait, la contribution du bac brun sur la performance du procédé en période hivernale est quasi

nulle. Le besoin d'étudier plus profondément l'impact de cette période de pointe de résidus verts devient donc évident et nécessite une simulation dynamique pour bien le capturer.

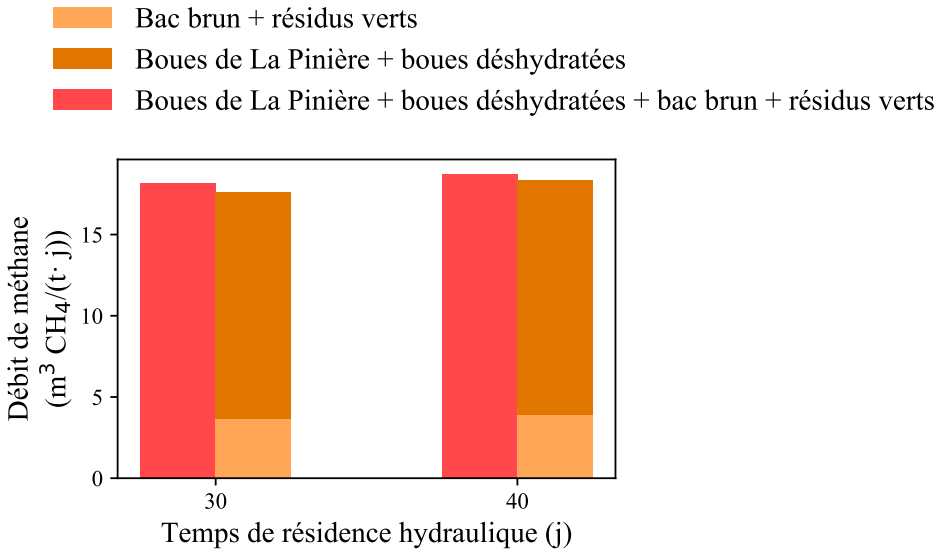


Figure 4.22 : Débit de méthane obtenu lors de la simulation en co-digestion des matières comparativement aux débits de méthane simulés en mono-digestion

4.2.4 Impact de la période de pointe des résidus verts

La simulation de la période de pointe des résidus verts s'effectue par une perturbation du régime permanent (cas de base) par une quantité variable de résidus verts. Les débits massiques des courants sont les mêmes que définis à la Figure 4.16, mais la période de temps durant laquelle la masse annuelle de résidus verts est fractionnée diffèrent entre un mois et six mois. La concentration de résidus verts dans l'intrant varient ainsi de 0.39 kg kg^{-1} à 0.07 kg kg^{-1}, respectivement.

Tel qu'attendu, on observe une importante diminution, visible dans les 5 premiers jours, du rendement spécifique en méthane avec l'ajout de résidus verts (Figure 4.23a). Le rendement se stabilise rapidement, avec une période de pointe d'un mois entraînant un rendement deux fois plus faible qu'une période de six mois. Comme dans la section précédente, la productivité volumétrique augmente significativement avec l'ajout de résidus verts (Figure 4.23b). Une productivité 35% plus élevée est observée avec la période de pointe d'un mois comparativement à la période de 6 mois.

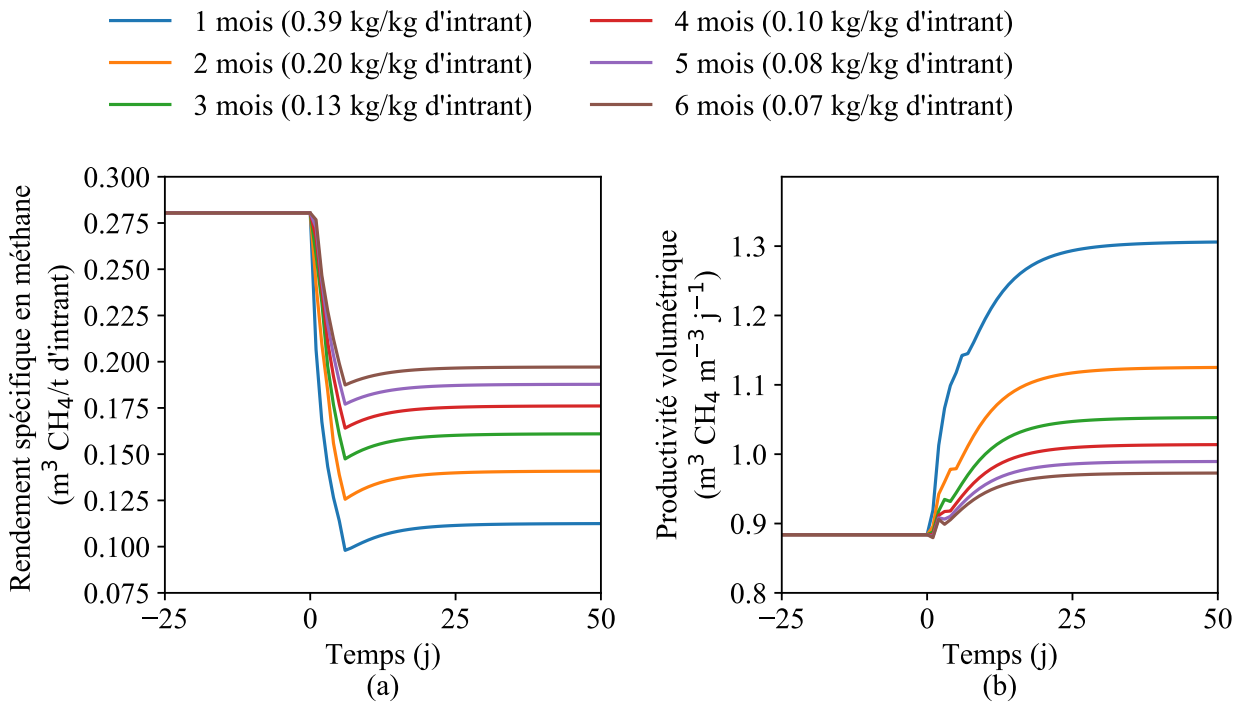


Figure 4.23 : (a) Rendement spécifique et (b) productivité volumétrique en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts

Cependant, pour évaluer la stabilité du procédé, le pH et la concentration en AGV sont de meilleurs indicateurs. Comme le montre la Figure 4.24a, le pH descend subitement avec l'ajout de résidus verts, mais la différence est peu significative, plus particulièrement pour les périodes de pointe plus longue. Avec une période de pointe d'un mois, le pH passe de 7.10 à 7.03 en moins de 5 jours, ce qui est peu significatif, mais remonte tranquillement pour se stabiliser à un pH légèrement inférieur à celui du cas de base. Naturellement, le temps requis pour que le pH se stabilise augmente avec l'importance de la période de pointe. Ce phénomène va de pair avec l'augmentation de la concentration en AGV dans le réacteur (Figure 4.24b).

En regardant la Figure 4.25 montrant l'évolution des facteurs d'inhibitions par l'ammoniac et par le pH, on observe que l'impact sur la stabilité du procédé est plutôt faible, même dans les premiers jours de la perturbation. Pour les périodes de pointe plus longue, l'effet est quasi nul. On peut donc conclure à la lumière des résultats de la simulation que les biosolides procurent un effet stabilisant sur le procédé qui est suffisant pour résister à des périodes de pointe d'une grande importance.

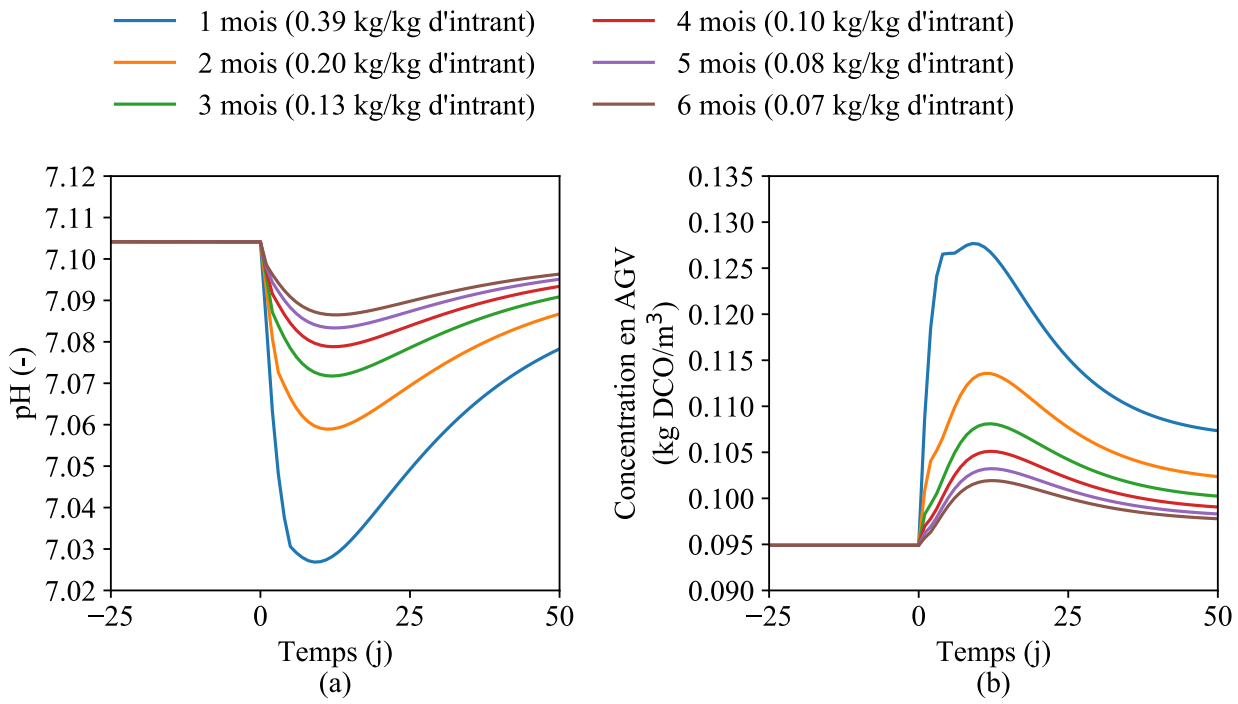


Figure 4.24 : (a) Valeur de pH et (b) concentration en AGV en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts

Pour ce qui est de l'impact sur le digestat, l'augmentation de la quantité de résidus verts entraîne une réduction de sa concentration en contaminants, comme le montre la Figure 4.26, à l'exception de l'As qui augmente légèrement. Les critères C1 sont respectés dans les tous les cas. L'impact est cependant plus élevé sur les teneurs en nutriments (Figure 4.27a). En effet, le digestat du cas de base contient une concentration significativement plus élevée de N, passant de 0.061 kg N (kg TS)$^{-1}$ à 0.041 kg N (kg TS)$^{-1}$ lors d'une période de pointe de 6 mois, puis à 0.028 kg N (kg TS)$^{-1}$ pour une période de pointe d'un mois. Pour le P, la concentration passe de 0.0088 kg P (kg TS)$^{-1}$ pour le cas de base à 0.0062 kg P (kg TS)$^{-1}$ lors d'une période de pointe de 6 mois, puis à 0.0044 kg P (kg TS)$^{-1}$ pour une période de pointe d'un mois.

Les pertes de N et de P sont quantifiées par le ratio entre leur concentration à l'état soluble et leur concentration totale à la sortie du réacteur, avant toute forme de déshydratation. Comme le montre la Figure 4.27b, les pertes de N et de P sont de respectivement 0.089 kg N (kg N)$^{-1}$ et de 0.078 kg P (kg P)$^{-1}$ pour le cas de base. Les pertes de N et de P sont 2.4 fois plus élevées lors d'une période de pointe de 6 mois, mais seulement de 1.6 fois plus élevée pour le N et 1.3 fois plus élevée pour le P lors d'une période de pointe d'un mois. Cette tendance s'explique davantage par

l'augmentation de la masse de N et de P à l'état solide lorsque le débit massique de résidus verts augmente, causée par la dégradabilité plus faible des matières. En fait, la concentration de N et de P à l'état soluble augmente, mais pas de façon proportionnelle avec la quantité de matières.

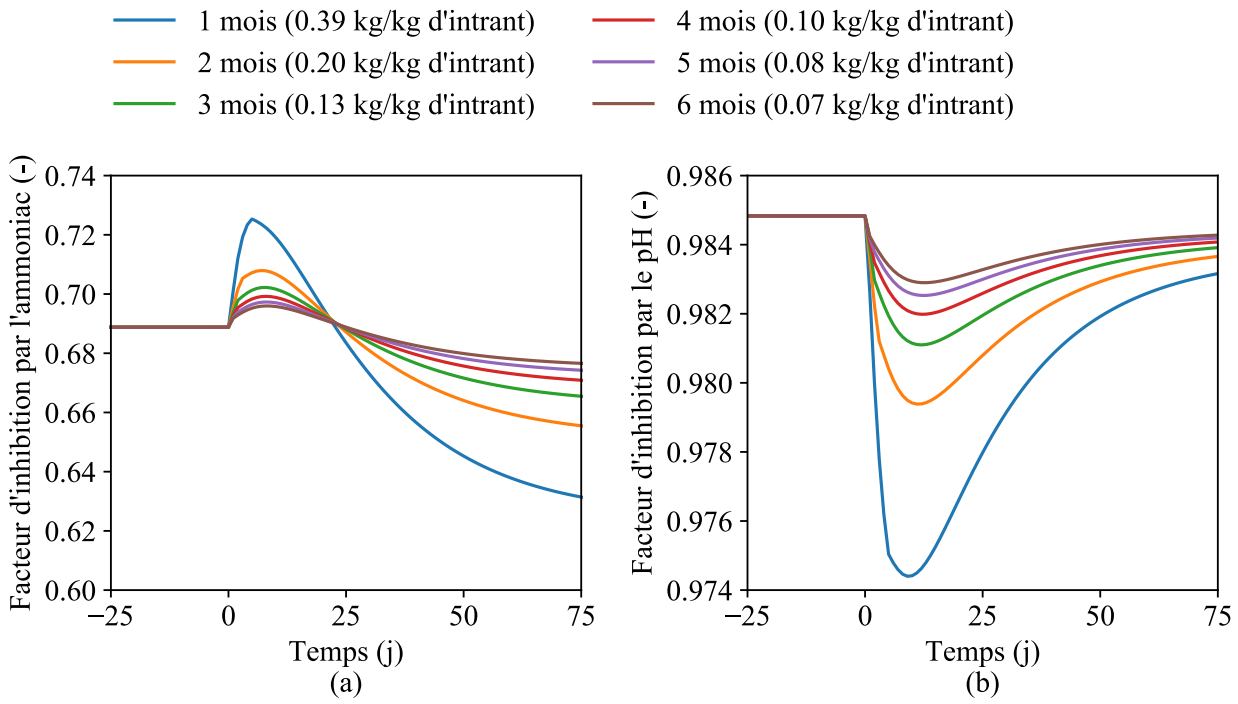


Figure 4.25 : Facteur d'inhibition (a) par l'ammoniac et (b) par le pH en fonction du temps écoulé depuis la perturbation du cas de bas avec un flux de résidus verts

Bref, il apparaît très avantageux d'ajouter le contenu du bac brun au réacteur de biométhanisation prévu pour les biosolides, tant sur le procédé que sur la qualité du digestat produit. Même lors des périodes où la collecte de résidus verts est très élevée, la complémentarité entre les deux flux permet d'éviter toute inhibition, en même temps qu'augmenter la concentration en nutriments du digestat. Cependant, l'utilisation de la caractérisation des bacs bruns de la zone Ouest de l'agglomération de Montréal entraîne des limites aux conclusions apportées. En effet, il est possible que les bacs bruns de la ville de Laval aient une concentration plus élevée en matières inorganiques, pouvant contribuer négativement à la qualité du digestat. Les matières acceptées diffèrent aussi. La Ville de Laval accepte les couches et la litière de chat dans sa collecte sélective, matières que l'Agglomération de Montréal interdit.

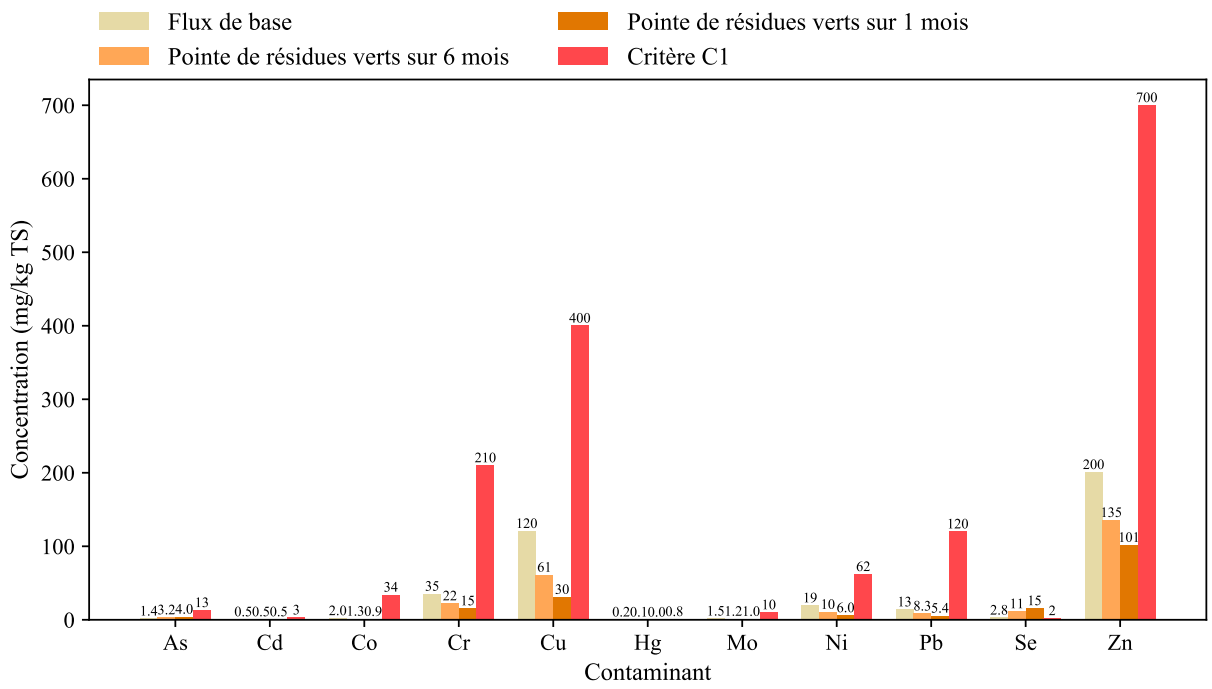


Figure 4.26 : Concentrations en contaminants dans les digestats pour le cas de base et pour deux intensités de période de pointe des résidus verts comparées aux concentrations limites du critère C1 (les concentrations représentent celles dans les digestats à la fin de la période de pointe)

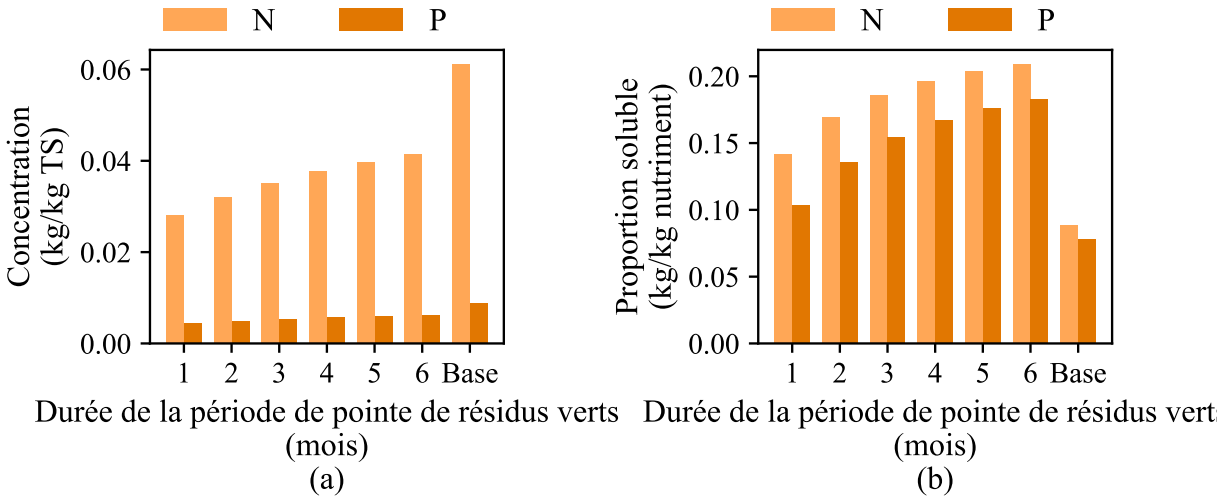


Figure 4.27 : (a) Concentration en N et en P dans le digestat et (b) proportion du N et du P à l'état soluble dans le flux sortant selon la durée de la période de pointe de résidus verts (les concentrations représentent celles à la fin de la période de pointe)

Enfin, similairement à l'agglomération de Montréal, les MFA pour la masse humide et les éléments majeurs (C, N, P) obtenues en hiver et lors d'une période de pointe de résidus verts d'une durée de 3 mois sont présentées dans la Figure 4.28 et la Figure 4.29, respectivement.

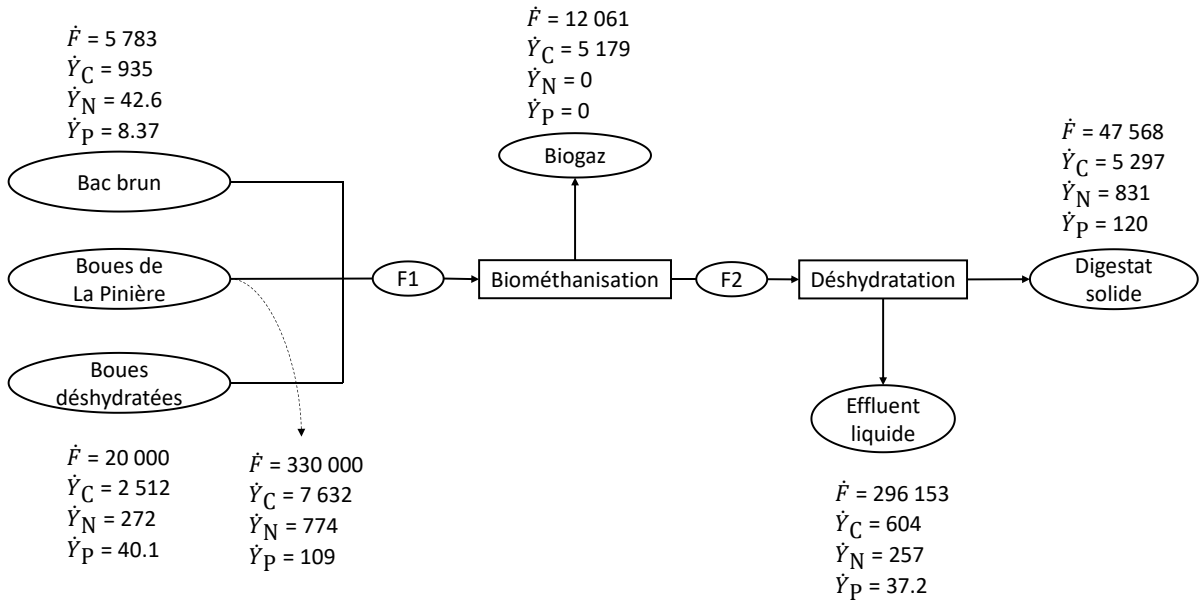


Figure 4.28 : MFA du système de traitement des matières organiques de Laval en hiver (en t/an)

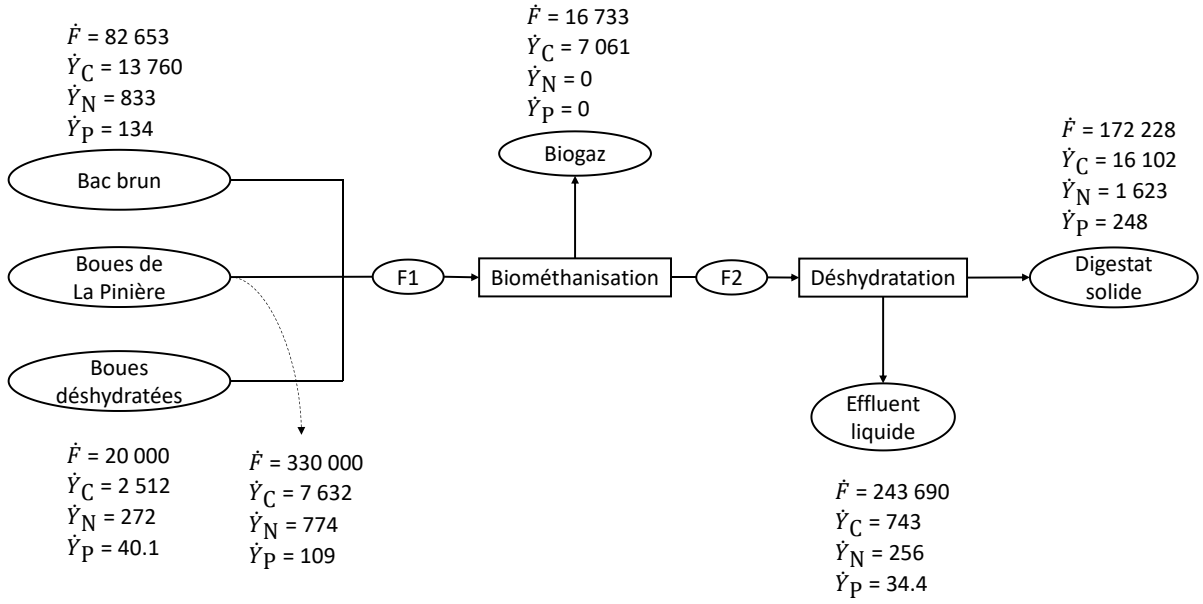


Figure 4.29 : MFA du système de traitement des matières organiques de Laval lors d'une période de pointe de résidus de verts (en t/an)

CHAPITRE 5 CONCLUSION ET RECOMMANDATIONS

L'objectif général du projet de recherche était de développer une méthode permettant d'utiliser le modèle ADM1 pour prédire le comportement du procédé de biométhanisation au sein d'une représentation par MFA d'un système de gestion des matières résiduelles municipales servant d'outil d'aide à la décision. La méthodologie de caractérisation, basée sur le respect des bilans massiques d'éléments ainsi que de la DCO théorique entre les matières constituant un flux de matières résiduelles et les composés ADM1, permet de bien reproduire des résultats expérimentaux. Ceci a été observé même lorsque des compositions élémentaires génériques sont utilisées. L'exercice a permis de discerner l'importance d'utiliser des valeurs adéquate pour la constante d'hydrolyse et le potentiel méthanogène d'une matière. Bien que les tendances aux niveaux de la production en méthane et de la concentration en composés déterminants pour la stabilité du procédé soient bien capturées, il est nécessaire de calibrer ces deux paramètres avec des tests de BMP pour obtenir une meilleure reproduction des résultats expérimentaux.

En dépit de ces limites, la méthodologie développée dans ce mémoire permet d'accroître la précision et le niveau de détail des flux sortants du procédé de biométhanisation comparativement à l'utilisation de coefficients de transfert empiriques ou de modèles cinétiques simples comme c'est habituellement la coutume en MFA. En effet, l'intégration des principales réactions biochimiques et physico-chimiques prenant place dans le réacteur, de même que leurs inhibiteurs, rend possible la prise en compte de l'influence de la composition des matières et des conditions d'opération sur le procédé. De plus, le développement de la version modifiée du modèle ADM1-PWM pour une co-digestion, avec l'ajout de stœchiométries variables, permet de mieux suivre le P et le S que le fait la version originale. Quoiqu'ils aient un impact considérable sur les traitements en aval et sur la valeur des produits sur les marchés, ces deux éléments sont souvent négligés dans les publications portant sur la modélisation de la biométhanisation d'OFMSW avec ADM1.

La méthodologie développée a permis d'effectuer des prédictions pointues sur les flux de matières dans les futurs systèmes de gestion des matières résiduelles organiques de l'Agglomération de Montréal et de la Ville de Laval. Elle a aussi permis de répondre à des questions précises de conception. Les résultats obtenus montrent qu'il est avantageux pour l'Agglomération de Montréal de traiter la fraction organique des ordures ménagères dans le même réacteur que les résidus alimentaires dans les premières années de vie du centre de biométhanisation, lorsque celui-ci sera

utilisé à sous capacité. Avec l'ajout d'un flux de matières organiques triées mécaniquement des ordures ménagères ayant une pureté de plus de 96%, le compost produit respecte les critères québécois les plus stricts en matière de contaminants chimiques pour un épandage sur des terres agricoles. Pour contrer la baisse de rendement et obtenir un procédé plus stable, il apparaît avantageux de réduire l'OLR malgré la baisse de la productivité volumétrique que cela engendre. Cependant, un OLR trop bas entraîne une augmentation importante de la fraction d'azote et de phosphore se retrouvant dans l'effluent liquide.

Dans le cas du système de traitement envisagé par la Ville de Laval, les résultats obtenus montrent qu'il est avantageux du point de vue de la productivité volumétrique de traiter la matière organique provenant de la collecte sélective en co-digestion avec les biosolides des trois stations d'épuration. Cette pratique permet en plus de réduire la teneur en contaminants chimiques du digestat, de même que les pertes de nutriments dans l'effluent liquide. Même lors de la période de pointe estivale durant laquelle une grande quantité de résidus verts est collectée, la stabilité du procédé s'en voit peu affectée.

Outre l'amélioration de l'exactitude des résultats que procurerait des tests de BMP sur les différentes fractions de matières organiques québécoises, l'extension qui serait la plus intéressante à apporter à la méthodologie développée dans ce mémoire est le suivi de la taille des particules. En plus de permettre une modélisation plus précise des réactions d'hydrolyse dans le réacteur, elle rend possible de quantifier la teneur en corps étrangers dans le digestat. Comme c'est toujours le cas dans la littérature, les conclusions émises dans les études de cas présentées négligent cette contrainte qui a potentiellement un impact très important sur l'acceptabilité des composts et des digestats sur les marchés. Les résultats obtenus pour l'agglomération de Montréal ont effectivement montré des concentrations en matières inorganiques élevées, pouvant potentiellement dépassées les critères québécois pour l'épandage agricole si la taille de leurs particules est suffisamment grande. Afin de prendre des décisions les plus éclairées possibles concernant différents scénarios de traitement de la matière organique, il est recommandé d'étudier cet aspect en profondeur.

Une représentation simplifiée du comportement du phosphore et du soufre a été inclue dans le modèle, mais il a été mentionné dans la revue de la littérature qu'un modèle plus complexe, incluant des réactions physico-chimiques avec plusieurs autres éléments non pris en compte ici, a été développé récemment pour le traitement des biosolides. Il serait particulièrement intéressant

d’adapter ce modèle pour le traitement des OFMSW, car en plus d’augmenter la précision des prédictions de pH, un plus grand nombre d’éléments pourraient être suivis de manière dynamique au travers le procédé.

Enfin, l’intégration de la méthodologie développée au sein d’une MFA d’un système plus global de GMR serait particulièrement intéressant. Comment la génération de matières résiduelles et la conception du centre de traitement par biométhanisation influencent les traitements en aval pourrait ainsi être évalué. Les prédictions pourraient également servir à quantifier les émissions de gaz à effet de serre produites lors du traitement de l’effluent liquide ou lors de l’épandage du digestat.

RÉFÉRENCES

Abbassi-Guendouz, A., Brockmann, D., Trably, E., Dumas, C., Delgenès, J.-P., Steyer, J.-P. et Escudié, R. (2012). Total solids content drives high solid anaerobic digestion via mass transfer limitation. *Bioresource Technology*, *111*, 55-61. doi:10.1016/j.biortech.2012.01.174

Aichinger, P., Wadhawan, T., Kuprian, M., Higgins, M., Ebner, C., Fimml, C., … Wett, B. (2015). Synergistic co-digestion of solid-organic-waste and municipal-sewage-sludge: 1 plus 1 equals more than 2 in terms of biogas production and solids reduction. *Water Research*, *87*, 416-423. doi:10.1016/j.watres.2015.07.033

Allesch, A. et Brunner, P. H. (2015). Material flow analysis as a decision support tool for waste management: A literature review. *Journal of Industrial Ecology*, *19*(5), 753-764. doi:10.1111/jiec.12354

Allesch, A. et Brunner, P. H. (2017). Material flow analysis as a tool to improve waste management systems: The case of Austria. *Environmental Science & Technology*, *51*(1), 540-551. doi:10.1021/acs.est.6b04204

Angelidaki, I., Alves, M., Bolzonella, D., Borzacconi, L., Campos, J. L., Guwy, A. J., … Lier, J. B. van. (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. doi:10.2166/wst.2009.040

APHA. (2005). *Standard methods for the examination of water and wastewater*. Washington, DC : American Public Health Association (APHA).

Arena, U. et Di Gregorio, F. (2014). A waste management planning based on substance flow analysis. *Resources, Conservation and Recycling*, *85*, 54-66. doi:10.1016/j.resconrec.2013.05.008

Arnell, M., Astals, S., Åmand, L., Batstone, D. J., Jensen, P. D. et Jeppsson, U. (2016). Modelling anaerobic co-digestion in Benchmark Simulation Model No. 2: Parameter estimation, substrate characterisation and plant-wide integration. *Water Research*, *98*, 138-146. doi:10.1016/j.watres.2016.03.070

Astals, S., Esteban-Gutiérrez, M., Fernández-Arévalo, T., Aymerich, E., García-Heras, J. L. et Mata-Alvarez, J. (2013). Anaerobic digestion of seven different sewage sludges: A biodegradability and modelling study. *Water Research*, *47*(16), 6033-6043. doi:10.1016/j.watres.2013.07.019

Bachmann, S., Uptmoor, R., Eichler-Löbermann, B., Bachmann, S., Uptmoor, R. et Eichler-Löbermann, B. (2016). Phosphorus distribution and availability in untreated and mechanically separated biogas digestates. *Scientia Agricola*, *73*(1), 9-17. doi:10.1590/0103-9016-2015-0069

Barrera, E. L., Spanjers, H., Romero, O., Rosa, E. et Dewulf, J. (2014). Characterization of the sulfate reduction process in the anaerobic digestion of a very high strength and sulfate rich vinasse. *Chemical Engineering Journal*, *248*, 383-393. doi:10.1016/j.cej.2014.03.057

Barrera, E. L., Spanjers, H., Solon, K., Amerlinck, Y., Nopens, I. et Dewulf, J. (2015). Modeling the anaerobic digestion of cane-molasses vinasse: Extension of the Anaerobic Digestion Model No. 1 (ADM1) with sulfate reduction for a very high strength and sulfate rich wastewater. *Water Research*, *71*(Supplement C), 42-54. doi:10.1016/j.watres.2014.12.026

Batstone, D. J. (2006). Mathematical modelling of anaerobic reactors treating domestic wastewater: Rational criteria for model use. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, *5*(1), 57-71. doi:10.1007/s11157-005-7191-z

Batstone, D. J., Hülsen, T., Mehta, C. M. et Keller, J. (2015). Platforms for energy and nutrient recovery from domestic wastewater: A review. *Chemosphere*, *140*, 2-11. doi:10.1016/j.chemosphere.2014.10.021

Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S. V., Pavlostathis, S. G., Rozzi, A., … Vavilin, V. A. (2002a). *Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1)*. Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Batstone, D. J., Keller, J., Angelidaki, I., Kalyuzhnyi, S. V., Pavlostathis, S. G., Rozzi, A., … Vavilin, V. A. (2002b). The IWA Anaerobic Digestion Model No 1 (ADM1). *Water Science and Technology*, *45*(10), 65-73.

Batstone, D. J., Keller, J. et Steyer, J. P. (2006). A review of ADM1 extensions, applications, and analysis: 2002–2005. *Water Science and Technology*, *54*(4), 1-10. doi:10.2166/wst.2006.520

Batstone, D. J., Puyol, D., Flores-Alsina, X. et Rodríguez, J. (2015). Mathematical modelling of anaerobic digestion processes: applications and future needs. *Reviews in Environmental Science and Bio/Technology*, *14*(4), 595-613. doi:10.1007/s11157-015-9376-4

Batstone, D. J. et Rodriguez, J. (2015). Modelling anaerobic digestion processes. Dans H. H. P. Fang et T. Zhang (dir.), *Anaerobic biotechnology: Environmental protection and resource recovery* (p. 133-160). Londres, Royaume-Uni : Imperial College Press.

Batstone, D. J., Tait, S. et Starrenburg, D. (2009). Estimation of hydrolysis parameters in full-scale anerobic digesters. *Biotechnology and Bioengineering*, *102*(5), 1513-1520. doi:10.1002/bit.22163

Bauer, A., Mayr, H., Hopfner-Sixt, K. et Amon, T. (2009). Detailed monitoring of two biogas plants and mechanical solid–liquid separation of fermentation residues. *Journal of Biotechnology*, *142*(1), 56-63. doi:10.1016/j.jbiotec.2009.01.016

Benabdallah El Hadj, T., Astals, S., Galí, A., Mace, S. et Mata-Álvarez, J. (2009). Ammonia influence in anaerobic digestion of OFMSW. *Water Science and Technology*, *59*(6), 1153-1158. doi:10.2166/wst.2009.100

Bernard, Y. et Hardy, M.-J. (2017). *Caractérisation des ordures ménagères et des résidus alimentaires d'immeubles de neuf logements et plus* (Rapport final nº 52086). Québec, Québec : Centre de Recherche Industrielle du Québec (CRIQ).

Bernstad, A. (2010). *Environmental Evaluation of Solid Household Waste Management – the Augustenborg Ecocity Example* (Thèse de licence, Université de Lund, Lund, Suède). Repéré à http://www.ekoistan.se/wp-content/uploads/2013/07/Kappa-Lic.pdf

Bernstad, A., Malmquist, L., Truedsson, C. et la Cour Jansen, J. (2013). Need for improvements in physical pretreatment of source-separated household food waste. *Waste Management*, *33*(3), 746-754. doi:10.1016/j.wasman.2012.06.012

Bisinella de Faria, A. B., Spérandio, M., Ahmadi, A. et Tiruta-Barna, L. (2015). Evaluation of new alternatives in wastewater treatment plants based on dynamic modelling and life cycle assessment (DM-LCA). *Water Research*, *84*, 99-111. doi:10.1016/j.watres.2015.06.048

Boldrin, A., Neidel, T. L., Damgaard, A., Bhander, G. S., Møller, J. et Christensen, T. H. (2011). Modelling of environmental impacts from biological treatment of organic municipal waste in EASEWASTE. *Waste Management*, *31*(4), 619-630. doi:10.1016/j.wasman.2010.10.025

Bollon, J., Le-hyaric, R., Benbelkacem, H. et Buffiere, P. (2011). Development of a kinetic model for anaerobic dry digestion processes: Focus on acetate degradation and moisture content. *Biochemical Engineering Journal*, *56*(3), 212-218. doi:10.1016/j.bej.2011.06.011

Boon, A. G. (1995). Septicity in sewers: Causes, consequences and containment. *Water Science and Technology*, *31*(7), 237-253.

Brunner, P. H., Allesch, A., Getzner, M., Huber-Humer, M., Pomberger, R., Müller, W., … Färber, B. (2015). *Benchmarking für die österreichische Abfallwirtschaft - Benchmarking for the Austrian waste management*. Vienne, Autriche : Technische Universität Wien, Institut für Wassergüte, Ressourcenmanagement und Abfallwirtschaft.

Brunner, P. H. et Rechberger, H. (2017). *Handbook of material flow analysis: For environmental, resource, and waste engineers* (2nd ed.). Boca Raton, Floride : CRC Press.

Camacho, C. et Prévot, C. (2015). La méthanisation des boues. Dans R. Moletta (dir.), *La méthanisation* (3e éd., p. 205-233). Paris, France : Lavoisier.

Cecchi, F., Traverso, P., Pavan, P., Bolzonella, D. et Innocenti, L. (2002). Characteristics of the OFMSW and behaviour of the anaerobic digestion process. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 141-179). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Corominas, L., Flores-Alsina, X., Snip, L. et Vanrolleghem, P. A. (2012). Comparison of different modeling approaches to better evaluate greenhouse gas emissions from whole wastewater treatment plants. *Biotechnology and Bioengineering*, *109*(11), 2854-2863. doi:10.1002/bit.24544

Daels, T., Willems, B., Vervaeren, H., Dejans, P., Maes, G., Dumoulin, A. et Hulle, S. W. H. V. (2009). Calibration and statistical analysis of a simplified model for the anaerobic digestion

of solid waste. *Environmental Technology*, *30*(14), 1575-1584. doi:10.1080/09593330903358278

Dalemo, M., Sonesson, U., Björklund, A., Mingarini, K., Frostell, B., Jönsson, H., … Thyselius, L. (1997). ORWARE – A simulation model for organic waste handling systems. Part 1: Model description. *Resources, Conservation and Recycling*, *21*(1), 17-37. doi:10.1016/S0921-3449(97)00020-7

de Gracia, M., Grau, P., Huete, E., Gómez, J., García-Heras, J. L. et Ayesa, E. (2009). New generic mathematical model for WWTP sludge digesters operating under aerobic and anaerobic conditions: Model building and experimental verification. *Water Research*, *43*(18), 4626-4642. doi:10.1016/j.watres.2009.07.014

de Gracia, M., Huete, E., Beltrán, S., Grau, P. et Ayesa, E. (2011). Automatic characterisation of primary, secondary and mixed sludge inflow in terms of the mathematical generalised sludge digester model. *Water Science and Technology*, *64*(3), 557-567. doi:10.2166/wst.2011.541

de Gracia, M., Sancho, L., García-Heras, J. L., Vanrolleghem, P. et Ayesa, E. (2006). Mass and charge conservation check in dynamic models: application to the new ADM1 model. *Water Science and Technology*, *53*(1), 225-240. doi:10.2166/wst.2006.025

Delgenès, J. P., Penaud, V. et Moletta, R. (2002). Pretreatments for the enhancement of anaerobic digestion of solid wastes. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 201-228). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Derbal, K., Bencheikh-lehocine, M., Cecchi, F., Meniai, A.-H. et Pavan, P. (2009). Application of the IWA ADM1 model to simulate anaerobic co-digestion of organic waste with waste activated sludge in mesophilic condition. *Bioresource Technology*, *100*(4), 1539-1543. doi:10.1016/j.biortech.2008.07.064

Dessau. (2010). *Préparation du plan de gestion des matières résiduelles. Rapport d'étape 5. Évaluation de la pertinence de traiter les boues d'épuration et de fosses septiques* (nº 052-P027190-0100-000-MR-0004-02). Laval, Québec : Dessau inc. Repéré à https://www.laval.ca/Documents/Pages/Fr/Citoyens/environnement-recyclage-et-collectes/preparation-plan-gestion-matieres-residuelles-rapport-5.pdf

Dewil, R., Baeyens, J., Roels, J. et Steene, B. V. D. (2008). Distribution of sulphur compounds in sewage sludge treatment. *Environmental Engineering Science*, *25*(6), 879-886. doi:10.1089/ees.2007.0143

Donoso-Bravo, A., Mailier, J., Martin, C., Rodríguez, J., Aceves-Lara, C. A. et Wouwer, A. V. (2011). Model selection, identification and validation in anaerobic digestion: A review. *Water Research*, *45*(17), 5347-5364. doi:10.1016/j.watres.2011.08.059

Du, W. et Parker, W. (2012). Modeling volatile organic sulfur compounds in mesophilic and thermophilic anaerobic digestion of methionine. *Water Research*, *46*(2), 539-546. doi:10.1016/j.watres.2011.11.043

Edelmann, W. (2002). Products, impacts and economy of anaerobic digestion of OFMSW. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 265-301). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Edjabou, M. E., Jensen, M. B., Götze, R., Pivnenko, K., Petersen, C., Scheutz, C. et Astrup, T. F. (2015). Municipal solid waste composition: Sampling methodology, statistical analyses, and case study evaluation. *Waste Management*, *36*(Supplement C), 12-23. doi:10.1016/j.wasman.2014.11.009

El-Fadel, M., Maroun, R., Eldeen, R. B. F. et Ghanimeh, S. (2012). ADM1 performance using SS-OFMSW with non-acclimated inoculums. *Water Science and Technology*, *66*(9), 1885-1892. doi:10.2166/wst.2012.395

Elser, J. et Bennett, E. (2011, 5 octobre). Phosphorus cycle: A broken biogeochemical cycle. *Nature*. Comments and Opinion. doi:10.1038/478029a

Environment Canada. (2013). *Technical document on municipal solid waste organics processing*. Repéré à http://publications.gc.ca/site/eng/436856/publication.html

Esposito, G., Frunzo, L., Panico, A. et d'Antonio, G. (2008). Mathematical modelling of disintegration-limited co-digestion of OFMSW and sewage sludge. *Water Science and Technology*, *58*(7), 1513-1519. doi:10.2166/wst.2008.509

Esposito, G., Frunzo, L., Panico, A. et Pirozzi, F. (2011). Modelling the effect of the OLR and OFMSW particle size on the performances of an anaerobic co-digestion reactor. *Process Biochemistry*, *46*(2), 557-565. doi:10.1016/j.procbio.2010.10.010

Esposito, Giovanni, Frunzo, L., Panico, A. et Pirozzi, F. (2012). Enhanced bio-methane production from co-digestion of different organic wastes. *Environmental Technology*, *33*(24), 2733-2740. doi:10.1080/09593330.2012.676077

Fairweather, R. J. et Barlaz, M. A. (1998). Hydrogen sulfide production during decomposition of landfill inputs. *Journal of Environmental Engineering*, *124*(4), 353-361. doi:10.1061/(ASCE)0733-9372(1998)124:4(353)

Fedorovich, V., Lens, P. et Kalyuzhnyi, S. (2003). Extension of Anaerobic Digestion Model No. 1 with processes of sulfate reduction. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, *109*(1-3), 33-45. doi:10.1385/ABAB:109:1-3:33

Flores-Alsina, X., Solon, K., Kazadi Mbamba, C., Tait, S., Gernaey, K. V., Jeppsson, U. et Batstone, D. J. (2016). Modelling phosphorus (P), sulfur (S) and iron (Fe) interactions for dynamic simulations of anaerobic digestion processes. *Water Research*, *95*(Supplement C), 370-382. doi:10.1016/j.watres.2016.03.012

Fuchs, W. et Drosg, B. (2013). Assessment of the state of the art of technologies for the processing of digestate residue from anaerobic digesters. *Water Science and Technology*, *67*(9), 1984-1993. doi:10.2166/wst.2013.075

Galí, A., Benabdallah, T., Astals, S. et Mata-Alvarez, J. (2009). Modified version of ADM1 model for agro-waste application. *Bioresource Technology*, *100*(11), 2783-2790. doi:10.1016/j.biortech.2008.12.052

García-Gen, S., Sousbie, P., Rangaraj, G., Lema, J. M., Rodríguez, J., Steyer, J.-P. et Torrijos, M. (2015). Kinetic modelling of anaerobic hydrolysis of solid wastes, including disintegration processes. *Waste Management*, *35*, 96-104. doi:10.1016/j.wasman.2014.10.012

Gernaey, K. V., Jeppsson, U., Vanrolleghem, P. A. et Copp, J. B. (2014). *Benchmarking of control strategies for wastewater treatment plants*. Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Girault, R., Bridoux, G., Nauleau, F., Poullain, C., Buffet, J., Steyer, J.-P., … Béline, F. (2012). A waste characterisation procedure for ADM1 implementation based on degradation kinetics. *Water Research*, *46*(13), 4099-4110. doi:10.1016/j.watres.2012.04.028

Götze, R., Pivnenko, K., Boldrin, A., Scheutz, C. et Astrup, T. F. (2016). Physico-chemical characterisation of material fractions in residual and source-segregated household waste in Denmark. *Waste Management*, *54*(Supplement C), 13-26. doi:10.1016/j.wasman.2016.05.009

Govasmark, E., Stäb, J., Holen, B., Hoornstra, D., Nesbakk, T. et Salkinoja-Salonen, M. (2011). Chemical and microbiological hazards associated with recycling of anaerobic digested residue intended for agricultural use. *Waste Management*, *31*(12), 2577-2583. doi:10.1016/j.wasman.2011.07.025

Grau, P., de Gracia, M., Vanrolleghem, P. A. et Ayesa, E. (2007). A new plant-wide modelling methodology for WWTPs. *Water Research*, *41*(19), 4357-4372. doi:10.1016/j.watres.2007.06.019

Gujer, W., Henze, M., Mino, T. et van Loosdrecht, M. C. M. (2000). Activated Sludge Model No. 3. Dans M. Henze, W. Gujer, T. Mino et M. van Loosdrecht (dir.), *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3* (p. 99-121). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Hansen, T. L., la Cour Jansen, J., Davidsson, Å. et Christensen, T. H. (2007). Effects of pre-treatment technologies on quantity and quality of source-sorted municipal organic waste for biogas recovery. *Waste Management*, *27*(3), 398-405. doi:10.1016/j.wasman.2006.02.014

Hartmann, H., Angelidaki, I. et Ahring, B. K. (2002). Co-digestion of the organic fraction of municipal waste with other waste types. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 181-199). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Hébert, M. (2015). *Guide sur le recyclage des matières résiduelles fertilisantes : Critères de référence et normes réglementaires* (éd. 2015). Québec. Repéré à http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/matieres/mat_res/fertilisantes/critere/guide-mrf.pdf

Henze, M., Gujer, W., Mino, T. et van Loosdrecht, M. (dir.). (2000). *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3*. Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Higgins, M. J., Chen, Y.-C., Yarosz, D. P., Murthy, S. N., Maas, N. A., Glindemann, D. et Novak, J. T. (2006). Cycling of volatile organic sulfur compounds in anaerobically digested

biosolids and its implications for odors. *Water Environment Research*, *78*, 243-252. doi:10.2175/106143005x90065

Hills, D. J. et Nakano, K. (1984). Effects of particle size on anaerobic digestion of tomato solid wastes. *Agricultural Wastes*, *10*(4), 285-295. doi:10.1016/0141-4607(84)90004-0

Hyaric, R. L., Benbelkacem, H., Bollon, J., Bayard, R., Escudié, R. et Buffière, P. (2012). Influence of moisture content on the specific methanogenic activity of dry mesophilic municipal solid waste digestate. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, *87*(7), 1032-1035. doi:10.1002/jctb.2722

Jakrawatana, N., Moore, S. et MacGill, I. (2009). Economic assessment of regional bioenergy systems in Australia: a flow analysis application. *International Journal of Environment and Pollution*, *39*(1-2), 61-73. doi:10.1504/IJEP.2009.027143

Jensen, M. B., Møller, J. et Scheutz, C. (2017). Assessment of a combined dry anaerobic digestion and post-composting treatment facility for source-separated organic household waste, using material and substance flow analysis and life cycle inventory. *Waste Management*, *66*, 23-35. doi:10.1016/j.wasman.2017.03.029

Jokela, J. P. Y., Vavilin, V. A. et Rintala, J. A. (2005). Hydrolysis rates, methane production and nitrogen solubilisation of grey waste components during anaerobic degradation. *Bioresource Technology*, *96*(4), 501-508. doi:10.1016/j.biortech.2004.03.009

Kiely, G., Tayfur, G., Dolan, C. et Tanji, K. (1997). Physical and mathematical modelling of anaerobic digestion of organic wastes. *Water Research*, *31*(3), 534-540. doi:10.1016/S0043-1354(96)00175-3

Kleerebezem, R. et Loosdrecht, M. C. M. V. (2006). Waste characterization for implementation in ADM1. *Water Science and Technology*, *54*(4), 167-174. doi:10.2166/wst.2006.538

Klinglmair, M., Vadenbo, C., Astrup, T. F. et Scheutz, C. (2017). An MFA-based optimization model for increased resource efficiency: Phosphorus flows in Denmark. *Resources, Conservation and Recycling*, *122*, 1-10. doi:10.1016/j.resconrec.2017.01.012

Knoop, C., Tietze, M., Dornack, C. et Raab, T. (2018). Fate of nutrients and heavy metals during two-stage digestion and aerobic post-treatment of municipal organic waste. *Bioresource Technology*, *251*, 238-248. doi:10.1016/j.biortech.2017.12.019

Koch, K., Lübken, M., Gehring, T., Wichern, M. et Horn, H. (2010). Biogas from grass silage – Measurements and modeling with ADM1. *Bioresource Technology*, *101*(21), 8158-8165. doi:10.1016/j.biortech.2010.06.009

Kupper, T., Bürge, D., Bachmann, H. J., Güsewell, S. et Mayer, J. (2014). Heavy metals in source-separated compost and digestates. *Waste Management*, *34*(5), 867-874. doi:10.1016/j.wasman.2014.02.007

Lauwers, J., Appels, L., Thompson, I. P., Degrève, J., Van Impe, J. F. et Dewil, R. (2013). Mathematical modelling of anaerobic digestion of biomass and waste: Power and limitations. *Progress in Energy and Combustion Science*, *39*(4), 383-402. doi:10.1016/j.pecs.2013.03.003

Levis, J. W. et Barlaz, M. A. (2013). *Anaerobic Digestion Process Model Documentation* (p. 44). Raleigh, NC : North Carolina State University.

Liotta, F., Chatellier, P., Esposito, G., Fabbricino, M., Frunzo, L., Hullebusch, E. D. van, … Pirozzi, F. (2015). Modified Anaerobic Digestion Model No.1 for dry and semi-dry anaerobic digestion of solid organic waste. *Environmental Technology*, *36*(7), 870-880. doi:10.1080/09593330.2014.965226

Liotta, F., d'Antonio, G., Esposito, G., Fabbricino, M., Frunzo, L., van Hullebusch, E. D., … Pirozzi, F. (2014). Effect of moisture on disintegration kinetics during anaerobic digestion of complex organic substrates. *Waste Management & Research*, *32*(1), 40-48. doi:10.1177/0734242X13513827

Lübken, M., Wichern, M., Schlattmann, M., Gronauer, A. et Horn, H. (2007). Modelling the energy balance of an anaerobic digester fed with cattle manure and renewable energy crops. *Water Research*, *41*(18), 4085-4096. doi:10.1016/j.watres.2007.05.061

Mata-Alvarez, J. (2003). Fundamentals of the anaerobic digestion process. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 1-20). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Mata-Alvarez, J., Dosta, J., Macé, S. et Astals, S. (2011). Codigestion of solid wastes: A review of its uses and perspectives including modeling. *Critical Reviews in Biotechnology*, *31*(2), 99-111. doi:10.3109/07388551.2010.525496

Mata-Alvarez, J., Dosta, J., Romero-Güiza, M. S., Fonoll, X., Peces, M. et Astals, S. (2014). A critical review on anaerobic co-digestion achievements between 2010 and 2013. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *36*, 412-427. doi:10.1016/j.rser.2014.04.039

Ministère du Développement durable, de l'Environnement et de la Lutte contre les changements climatiques [MDDELCC]. (2017). *Programme de traitement des matières organiques par biométhanisation et compostage (phase II)*. Repéré à http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/programmes/biomethanisation/cadre-normatif.pdf

Ministère du Développement durable, de l'Environnement et des Parcs [MDDEP]. (2011). *Politique québécoise de gestion des matières résiduelles. Plan d'action 2011-2015 : allier économie et environnement*. Repéré à http://www.mddelcc.gouv.qc.ca/matieres/pgmr/presentation.pdf

Miron, Y., Zeeman, G., van Lier, J. B. et Lettinga, G. (2000). The role of sludge retention time in the hydrolysis and acidification of lipids, carbohydrates and proteins during digestion of primary sludge in CSTR systems. *Water Research*, *34*(5), 1705-1713. doi:10.1016/S0043-1354(99)00280-8

Mottet, A., Ramirez, I., Carrère, H., Déléris, S., Vedrenne, F., Jimenez, J. et Steyer, J. P. (2013). New fractionation for a better bioaccessibility description of particulate organic matter in a modified ADM1 model. *Chemical Engineering Journal*, *228*, 871-881. doi:10.1016/j.cej.2013.05.082

Neset, T.-S. S., Bader, H.-P. et Scheidegger, R. (2006). Food consumption and nutrient flows: Nitrogen in Sweden since the 1870s. *Journal of Industrial Ecology*, *10*(4), 61-75. doi:10.1162/jiec.2006.10.4.61

NI Corporation. (2013). *Caractérisation des matières organiques et des ordures des secteurs résidentiels et ICI de quatre territoires de la Ville de Montréal* (Rapport final). Montréal, Québec.

NI Corporation. (2015). *Caractérisation des matières organiques et des ordures ménagères de l'agglomération de Montréal* (Rapport final). Montréal, Québec.

Pahl, O., Firth, A., MacLeod, I. et Baird, J. (2008). Anaerobic co-digestion of mechanically biologically treated municipal waste with primary sewage sludge – A feasibility study. *Bioresource Technology*, *99*(9), 3354-3364. doi:10.1016/j.biortech.2007.08.027

Parker, W. J. et Wu, G.-H. (2006). Modifying ADM1 to include formation and emission of odourants. *Water Science & Technology*, *54*, 111-. doi:10.2166/wst.2006.532

Peu, P., Picard, S., Diara, A., Girault, R., Béline, F., Bridoux, G. et Dabert, P. (2012). Prediction of hydrogen sulphide production during anaerobic digestion of organic substrates. *Bioresource Technology*, *121*, 419-424. doi:10.1016/j.biortech.2012.06.112

Poggio, D. (2015). *Modification and experimental calibration of ADM1 for modelling the anaerobic digestion of solid wastes in demand driven applications* (Thèse de doctorat, University of Leeds, Leeds, Royaume-Uni). Repéré à http://etheses.whiterose.ac.uk/13299/

Poggio, D., Walker, M., Nimmo, W., Ma, L. et Pourkashanian, M. (2016). Modelling the anaerobic digestion of solid organic waste – Substrate characterisation method for ADM1 using a combined biochemical and kinetic parameter estimation approach. *Waste Management*, *53*, 40-54. doi:10.1016/j.wasman.2016.04.024

Pognani, M., Barrena, R., Font, X. et Sánchez, A. (2012). A complete mass balance of a complex combined anaerobic/aerobic municipal source-separated waste treatment plant. *Waste Management*, *32*(5), 799-805. doi:10.1016/j.wasman.2011.12.018

Raposo, F., De la Rubia, M. A., Fernández-Cegrí, V. et Borja, R. (2012). Anaerobic digestion of solid organic substrates in batch mode: An overview relating to methane yields and experimental procedures. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *16*(1), 861-877. doi:10.1016/j.rser.2011.09.008

Riber, C., Petersen, C. et Christensen, T. H. (2009). Chemical composition of material fractions in Danish household waste. *Waste Management*, *29*(4), 1251-1257. doi:10.1016/j.wasman.2008.09.013

Rosén, C. et Jeppsson, U. (2005). *Aspects on ADM1 implementation within the BSM2 framework* (TEIE; Vol. 7224). Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund Institute of Technology.

Rosen, C., Vrecko, D., Gernaey, K. V., Pons, M. N. et Jeppsson, U. (2006). Implementing ADM1 for plant-wide benchmark simulations in Matlab/Simulink. *Water Science and Technology*, *54*(4), 11-19. doi:10.2166/wst.2006.521

Sanders, W. T. M., Geerink, M., Zeeman, G. et Lettinga, G. (2000). Anaerobic hydrolysis kinetics of particulate substrates. *Water Science and Technology*, *41*(3), 17-24.

Sanders, W. T. M., Veeken, A. H. M., Zeeman, G. et van Lier, J. B. (2002). Analysis and optimisation of the anaerobic digestion of the organic fraction of municipal solid waste. Dans J. Mata-Alvarez (dir.), *Biomethanization of the organic fraction of municipal solid wastes* (p. 63-89). Londres, Royaume-Uni : IWA Publishing.

Saveyn, H. et Eder, P. (2014). *End-of-waste criteria for biodegradable waste subjected to biological treatment (compost & digestate): Technical proposals* (EUR - Scientific and Technical Research Reports nº EUR 26425 EN). Séville, Espagne : Institute for Prospective Technological Studies, Joint Research Centre, European Commission. Repéré à http://ftp.jrc.es/EURdoc/JRC87124.pdf

Senthilkumar, K., Mollier, A., Delmas, M., Pellerin, S. et Nesme, T. (2014). Phosphorus recovery and recycling from waste: An appraisal based on a French case study. *Resources, Conservation and Recycling*, *87*, 97-108. doi:10.1016/j.resconrec.2014.03.005

Smet, E., Van Langenhove, H. et De Bo, I. (1999). The emission of volatile compounds during the aerobic and the combined anaerobic/aerobic composting of biowaste. *Atmospheric Environment*, *33*(8), 1295-1303. doi:10.1016/S1352-2310(98)00260-X

Smith, S. R. (2009). A critical review of the bioavailability and impacts of heavy metals in municipal solid waste composts compared to sewage sludge. *Environment International*, *35*(1), 142-156. doi:10.1016/j.envint.2008.06.009

Solon, K., Flores-Alsina, X., Kazadi Mbamba, C., Ikumi, D., Volcke, E. I. P., Vaneeckhaute, C., … Jeppsson, U. (2017). Plant-wide modelling of phosphorus transformations in wastewater treatment systems: Impacts of control and operational strategies. *Water Research*, *113*, 97-110. doi:10.1016/j.watres.2017.02.007

Starkey, R. L. et Temple, K. L. (1956). Transformations of sulfur by microorganisms. *Industrial & Engineering Chemistry*, *48*(9), 1429-1437. doi:10.1021/ie51400a022

Tetra Tech EBA Inc. (2015). *Residential Food Waste Composition Study* (Document nº ENVSWM03477-02). Colombie-Britannique.

Thanh, P. M., Ketheesan, B., Yan, Z. et Stuckey, D. (2016). Trace metal speciation and bioavailability in anaerobic digestion: A review. *Biotechnology Advances*, *34*(2), 122-136. doi:10.1016/j.biotechadv.2015.12.006

Tonini, D., Dorini, G. et Astrup, T. F. (2014). Bioenergy, material, and nutrients recovery from household waste: Advanced material, substance, energy, and cost flow analysis of a waste refinery process. *Applied Energy*, *121*, 64-78. doi:10.1016/j.apenergy.2014.01.058

Treadwell, J. L., Clark, O. G. et Bennett, E. M. (2018). Dynamic simulation of phosphorus flows through Montreal's food and waste systems. *Resources, Conservation and Recycling*, *131*, 122-133. doi:10.1016/j.resconrec.2017.12.018

Trzcinski, A. P. et Stuckey, D. C. (2012). Determination of the hydrolysis constant in the biochemical methane potential test of municipal solid waste. *Environmental Engineering Science*, *29*(9), 848-854. doi:10.1089/ees.2011.0105

Vaneeckhaute, C., Lebuf, V., Michels, E., Belia, E., Vanrolleghem, P. A., Tack, F. M. G. et Meers, E. (2017). Nutrient vecovery from digestate: Systematic technology review and product classification. *Waste and Biomass Valorization*, *8*(1), 21-40. doi:10.1007/s12649-016-9642-x

Vavilin, V. A., Fernandez, B., Palatsi, J. et Flotats, X. (2008). Hydrolysis kinetics in anaerobic degradation of particulate organic material: An overview. *Waste Management*, *28*(6), 939-951. doi:10.1016/j.wasman.2007.03.028

Ville de Laval. (s.d.). *Projet de Plan de gestion des matières résiduelles 2012-2017 : document de consultation*. Service de l'environnement et Service de la vie communautaire, de la culture et des communications. Repéré à https://www.laval.ca/Documents/Pages/Fr/Citoyens/environnement-recyclage-et-collectes/projet-plan-gestion-matieres-residuelles-2012-2017-document-consultation.pdf

Ville de Montréal. (2009). *Plan directeur de gestion des matières résiduelles de l'agglomération de Montréal 2010-2014*. Service des infrastructures, transport et environnement, Direction de l'environnement et du développement durable, Division de la gestion des matières

résiduelles. Repéré à http://ville.montreal.qc.ca/pls/portal/docs/PAGE/ENVIRO_FR/MEDIA/DOCUMENTS/PDGMR_2010_2014_FR.PDF

Ville de Montréal. (2017). *Portrait 2016 des matières résiduelles de l'Agglomération de Montréal. Réduire pour mieux grandir.* Service de l'environnement, Direction de la gestion des matières résiduelles. Repéré à http://ville.montreal.qc.ca/pls/portal/docs/PAGE/ENVIRO_FR/MEDIA/DOCUMENTS/PORTRAIT2016_MATIERESRESIDUELLES.PDF

Wichern, M., Gehring, T., Fischer, K., Andrade, D., Lübken, M., Koch, K., … Horn, H. (2009). Monofermentation of grass silage under mesophilic conditions: Measurements and mathematical modeling with ADM 1. *Bioresource Technology*, *100*(4), 1675-1681. doi:10.1016/j.biortech.2008.09.030

Yasui, H., Goel, R., Li, Y. Y. et Noike, T. (2008). Modified ADM1 structure for modelling municipal primary sludge hydrolysis. *Water Research*, *42*(1), 249-259. doi:10.1016/j.watres.2007.07.004

Zaher, U., Buffiere, P., Steyer, J.-P. et Chen, S. (2009). A procedure to estimate proximate analysis of mixed organic wastes. *Water Environment Research*, *81*(4), 407–415. doi:10.2175/106143008X370548

Zaher, U., Li, R., Jeppsson, U., Steyer, J.-P. et Chen, S. (2009). GISCOD: General Integrated Solid Waste Co-Digestion model. *Water Research*, *43*(10), 2717-2727. doi:10.1016/j.watres.2009.03.018

ANNEXE A – ÉQUATIONS DU MODÈLE

Processus

$$\rho_0 = k_{\mathrm{dis}} \cdot X_{\mathrm{xc}}$$

$$\rho_1 = k_{\mathrm{hyd,ch}} \cdot X_{\mathrm{ch}}$$

$$\rho_2 = k_{\mathrm{hyd,pr}} \cdot X_{\mathrm{pr}}$$

$$\rho_3 = k_{\mathrm{hyd,li}} \cdot X_{\mathrm{li}}$$

$$\rho_4 = k_{\mathrm{m,su}} \cdot \frac{S_{\mathrm{su}}}{K_{\mathrm{S,su}} + S_{\mathrm{su}}} \cdot X_{\mathrm{su}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}}$$

$$\rho_5 = k_{\mathrm{m,aa}} \cdot \frac{S_{\mathrm{aa}}}{K_{\mathrm{S,aa}} + S_{\mathrm{aa}}} \cdot X_{\mathrm{aa}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}}$$

$$\rho_6 = k_{\mathrm{m,fa}} \cdot \frac{S_{\mathrm{fa}}}{K_{\mathrm{S,fa}} + S_{\mathrm{fa}}} \cdot X_{\mathrm{fa}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{h2,fa}}$$

$$\rho_7 = k_{\mathrm{m,c4}} \cdot \frac{S_{\mathrm{va}}}{K_{\mathrm{S,c4}} + S_{\mathrm{va}}} \cdot X_{\mathrm{c4}} \cdot \frac{S_{\mathrm{va}}}{S_{\mathrm{va}} + S_{\mathrm{bu}} + 10^{-6}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{h2,c4}} \cdot I_{\mathrm{IS,c4}}$$

$$\rho_8 = k_{\mathrm{m,c4}} \cdot \frac{S_{\mathrm{bu}}}{K_{\mathrm{S,c4}} + S_{\mathrm{bu}}} \cdot X_{\mathrm{c4}} \cdot \frac{S_{\mathrm{bu}}}{S_{\mathrm{va}} + S_{\mathrm{bu}} + 10^{-6}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{h2,c4}} \cdot I_{\mathrm{IS,c4}}$$

$$\rho_9 = k_{\mathrm{m,pro}} \cdot \frac{S_{\mathrm{pro}}}{K_{\mathrm{S,pro}} + S_{\mathrm{pro}}} \cdot X_{\mathrm{pro}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{h2,pro}} \cdot I_{\mathrm{IS,pro}}$$

$$\rho_{10} = k_{\mathrm{m,ac}} \cdot \frac{S_{\mathrm{ac}}}{K_{\mathrm{S,ac}} + S_{\mathrm{ac}}} \cdot X_{\mathrm{ac}} \cdot I_{\mathrm{pH,ac}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{nh3}} \cdot I_{\mathrm{IS,ac}}$$

$$\rho_{11} = k_{\mathrm{m,h2}} \cdot \frac{S_{\mathrm{h2}}}{K_{\mathrm{S,h2}} + S_{\mathrm{h2}}} \cdot X_{\mathrm{h2}} \cdot I_{\mathrm{pH,h2}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{IS,h2}}$$

$$\rho_{12} = k_{\mathrm{m,so4}} \cdot \frac{S_{\mathrm{so4}}}{K_{\mathrm{S,so4}} + S_{\mathrm{so4}}} \cdot \frac{S_{\mathrm{h2}}}{K_{\mathrm{S,sh2}} + S_{\mathrm{h2}}} \cdot X_{\mathrm{so4}} \cdot I_{\mathrm{pH,aa}} \cdot I_{\mathrm{IN,lim}} \cdot I_{\mathrm{IP,lim}} \cdot I_{\mathrm{IS,so4}}$$

$$\rho_{13} = k_{\mathrm{dec,Xsu}} \cdot X_{\mathrm{su}}$$

$$\rho_{14} = k_{\mathrm{dec,Xaa}} \cdot X_{\mathrm{aa}}$$

$$\rho_{15} = k_{\mathrm{dec,Xfa}} \cdot X_{\mathrm{fa}}$$

$$\rho_{16} = k_{\mathrm{dec,Xc4}} \cdot X_{\mathrm{c4}}$$

$$\rho_{17} = k_{\mathrm{dec,Xpro}} \cdot X_{\mathrm{pro}}$$

$$\rho_{18} = k_{\mathrm{dec,Xac}} \cdot X_{\mathrm{ac}}$$

$$\rho_{19} = k_{\mathrm{dec,Xh2}} \cdot X_{\mathrm{h2}}$$

$$\rho_{20} = k_{\mathrm{dec,Xso4}} \cdot X_{\mathrm{so4}}$$

$$\rho_{21} = k_{\mathrm{A,Bva}} \cdot \left(S_{\mathrm{hva}} \cdot K_{\mathrm{a,va}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{va-}}\right)$$

$$\rho_{22} = k_{\mathrm{A,Bbu}} \cdot \left(S_{\mathrm{hbu}} \cdot K_{\mathrm{a,bu}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{bu-}}\right)$$

$$\rho_{23} = k_{\mathrm{A,Bpro}} \cdot \left(S_{\mathrm{hpro}} \cdot K_{\mathrm{a,pro}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{pro-}}\right)$$

$$\rho_{24} = k_{\mathrm{A,Bac}} \cdot \left(S_{\mathrm{hac}} \cdot K_{\mathrm{a,ac}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{ac-}}\right)$$

$$\rho_{25} = k_{\mathrm{A,Bco2}} \cdot \left(S_{\mathrm{co2}} \cdot K_{\mathrm{a,co2}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{hco3-}}\right)$$

$$\rho_{26} = k_{\mathrm{A,BIN}} \cdot \left(S_{\mathrm{nh4}} \cdot K_{\mathrm{a,IN}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{nh3}}\right)$$

$$\rho_{27} = k_{\mathrm{A,BIP}} \cdot \left(S_{\mathrm{h2po4-}} \cdot K_{\mathrm{a,IP}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{hpo4=}}\right)$$

$$\rho_{28} = k_{\mathrm{A,Bh2s}} \cdot \left(S_{\mathrm{h2s}} \cdot K_{\mathrm{a,h2s}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{hs-}}\right)$$

$$\rho_{29} = k_{\mathrm{A,Bh2o}} \cdot \left(K_{\mathrm{w}} - S_{\mathrm{h+}} \cdot S_{\mathrm{oh-}}\right)$$

$$\rho_{30} = k_{\mathrm{L}}a \cdot \left(S_{\mathrm{h2}} - 16 \cdot K_{\mathrm{H,h2}} \cdot p_{\mathrm{gas,h2}}\right)$$

$$\rho_{31} = k_{\mathrm{L}}a \cdot \left(S_{\mathrm{ch4}} - 64 \cdot K_{\mathrm{H,ch4}} \cdot p_{\mathrm{gas,ch4}}\right)$$

$$\rho_{32} = k_{\mathrm{L}}a \cdot \left(S_{\mathrm{co2}} - K_{\mathrm{H,co2}} \cdot p_{\mathrm{gas,co2}}\right)$$

$$\rho_{33} = k_{\mathrm{L}}a \cdot \left(S_{\mathrm{h2s}} - 64 \cdot K_{\mathrm{H,h2s}} \cdot p_{\mathrm{gas,h2s}}\right)$$

$$\rho_{34} = k_{\mathrm{M}}a \cdot \frac{p_{\mathrm{gas,h2o}} - p_{\mathrm{sat,h2o}}}{R \cdot T_{op}} \cdot 18$$

Ajustement des paramètres physico-chimiques pour la température

$$K_{\mathrm{a},i} = 10^{-pK_{\mathrm{a},i,\mathrm{base}}} \cdot \exp\left(\frac{\Delta H_i^0}{100R}\left(\frac{1}{T_{\mathrm{base}}} - \frac{1}{T_{\mathrm{op}}}\right)\right) \quad \text{pour } K_{\mathrm{a,co2}}, K_{\mathrm{a,IN}}, K_{\mathrm{a,IP}}, K_{\mathrm{a,h2s}}, K_{\mathrm{w}}$$

$$K_{\mathrm{a},i} = 10^{-pK_{\mathrm{a},i,\mathrm{base}}} \quad \text{pour } K_{\mathrm{a,va}}, K_{\mathrm{a,bu}}, K_{\mathrm{a,pro}}, K_{\mathrm{a,ac}}$$

$$K_{\mathrm{H},i} = K_{\mathrm{H},i,\mathrm{base}} \cdot \exp\left(\frac{\Delta H_i^0}{100R}\left(\frac{1}{T_{\mathrm{base}}} - \frac{1}{T_{\mathrm{op}}}\right)\right) \quad \text{pour } K_{\mathrm{H,co2}}, K_{\mathrm{H,h2}}, K_{\mathrm{H,ch4}}, K_{\mathrm{a,h2s}}$$

$$p_{\mathrm{sat,h2o}} = p_{\mathrm{sat,h2o,base}} \cdot \exp\left(5290\left(\frac{1}{T_{base}} - \frac{1}{T_{op}}\right)\right)$$

Termes d'inhibition

$$K_{\mathrm{pH,aa}} = 10^{-\frac{(pH_{\mathrm{UL,aa}} + pH_{\mathrm{LL,aa}})}{2}}$$

$$K_{\mathrm{pH,ac}} = 10^{-\frac{(pH_{\mathrm{UL,ac}} + pH_{\mathrm{LL,ac}})}{2}}$$

$$K_{\mathrm{pH,h2}} = 10^{-\frac{(pH_{\mathrm{UL,h2}} + pH_{\mathrm{LL,h2}})}{2}}$$

$$n_{\mathrm{aa}} = \frac{3}{pH_{\mathrm{UL,aa}} - pH_{\mathrm{LL,aa}}}$$

$$n_{\mathrm{ac}} = \frac{3}{pH_{\mathrm{UL,ac}} - pH_{\mathrm{LL,ac}}}$$

$$n_{\mathrm{h2}} = \frac{3}{pH_{\mathrm{UL,h2}} - pH_{\mathrm{LL,h2}}}$$

$$I_{\mathrm{pH,aa}} = \frac{\left(K_{\mathrm{pH,aa}}\right)^{n_{\mathrm{aa}}}}{(S_{\mathrm{h+}})^{n_{\mathrm{aa}}} + \left(K_{\mathrm{pH,aa}}\right)^{n_{\mathrm{aa}}}}$$

$$I_{\mathrm{pH,ac}} = \frac{\left(K_{\mathrm{pH,ac}}\right)^{n_{\mathrm{ac}}}}{(S_{\mathrm{h+}})^{n_{\mathrm{ac}}} + \left(K_{\mathrm{pH,ac}}\right)^{n_{\mathrm{ac}}}}$$

$$I_{\mathrm{pH,h2}} = \frac{\left(K_{\mathrm{pH,h2}}\right)^{n_{\mathrm{h2}}}}{(S_{\mathrm{h+}})^{n_{\mathrm{h2}}} + \left(K_{\mathrm{pH,h2}}\right)^{n_{\mathrm{h2}}}}$$

$$I_{\mathrm{IN,lim}} = \frac{1}{1 + \frac{K_{\mathrm{S,IN}}}{S_{\mathrm{nh3}} + S_{\mathrm{nh4}} + 10^{-6}}}$$

$$I_{\mathrm{h2,fa}} = \frac{1}{1 + \frac{S_{\mathrm{h2}}}{K_{\mathrm{I,h2,fa}}}}$$

$$I_{\mathrm{h2,c4}} = \frac{1}{1 + \frac{S_{\mathrm{h2}}}{K_{\mathrm{I,h2,c4}}}}$$

$$I_{\mathrm{h2,pro}} = \frac{1}{1 + \frac{S_{\mathrm{h2}}}{K_{\mathrm{I,h2,pro}}}}$$

$$I_{\mathrm{nh3}} = \frac{1}{1 + \frac{S_{\mathrm{nh3}}}{K_{\mathrm{I,nh3}}}}$$

$$I_{\mathrm{IP,lim}} = \frac{1}{1 + \frac{K_{\mathrm{S,IP}}}{S_{\mathrm{hpo4=}} + S_{\mathrm{h2po4\text{-}}} + 10^{-6}}}$$

Équations algébriques

$$p_{\mathrm{gas,h2}} = G_{\mathrm{h2}} \cdot \frac{RT_{\mathrm{op}}}{16}$$

$$p_{\mathrm{gas,ch4}} = G_{\mathrm{ch4}} \cdot \frac{RT_{\mathrm{op}}}{64}$$

$$p_{\mathrm{gas,co2}} = G_{\mathrm{co2}} \cdot RT_{\mathrm{op}}$$

$$p_{\mathrm{gas,h2s}} = G_{\mathrm{h2s}} \cdot \frac{RT_{\mathrm{op}}}{64}$$

$$p_{\mathrm{gas,h2o}} = G_{\mathrm{h2o}} \cdot \frac{RT_{\mathrm{op}}}{18}$$

$$P_{\mathrm{gas}} = p_{\mathrm{gas,h2}} + p_{\mathrm{gas,ch4}} + p_{\mathrm{gas,co2}} + p_{\mathrm{gas,h2s}} + p_{\mathrm{gas,h2o}}$$

$$q_{\mathrm{gas}} = k_{\mathrm{P}} \cdot \left(P_{\mathrm{gas}} - P_{\mathrm{atm}}\right) \cdot \frac{P_{\mathrm{gas}}}{P_{\mathrm{atm}}}$$

Équations différentielles des composés particulaires par matière k

$$\frac{dM_{i,k}}{dt} = \dot{X}_{\mathrm{in},i_k} - X_{i_k} q_{\mathrm{out}} + V_{\mathrm{liq}} \sum_{k=0}^{n_k} \sum_{j=1}^{3} \rho_{j,k} v_{i,j_k}$$

$$M_{i,k} = X_{i,k} \cdot V_{\mathrm{liq}}$$

$$V_{\text{liq}} = \frac{S_{\text{h2o}}}{\rho_{\text{h2o}}}$$

Équations différentielles des composés ADM1

$$\frac{dM_i}{dt} = \dot{S}_{\text{in},i} - S_i q_{\text{out}} + V_{\text{liq}} \sum_{j=0-34} \rho_j v_{i,j} + V_{\text{liq}} \sum_{k=0}^{n_k} \sum_{j=1}^{3} \rho_{j,k} v_{i,j_k}$$

$$M_i = S_i \cdot V_{\text{liq}}$$

$$V_{\text{liq}} = \frac{S_{\text{h2o}}}{\rho_{\text{h2o}}}$$

$$\frac{dS_{\text{h2o}}}{dt} = \dot{S}_{\text{in,h2o}} - \rho_{\text{h2o}} q_{\text{out}} + V_{\text{liq}} \sum_{j=0-34} \rho_j v_{\text{h2o},j} + V_{\text{liq}} \sum_{k=0}^{n_k} \sum_{j=1}^{3} \rho_{j,k} v_{i,j_k}$$

Tableau 5.1 : Matrice des coefficients stœchiométriques (matrice de Petersen)

Composé →		***i***	S_{su}	S_{aa}	S_{fa}	S_{hva}	S_{va-}	S_{hbu}	S_{bu-}	S_{hpro}	S_{pro-}
j	**Processus ↓**		$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDC}{m^3}$	$\frac{kgDC}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$
0	Désintégration										
1	Hydrolyse carbohydrates		1								
2	Hydrolyse protéines			1							
3	Hydrolyse lipides		$1\text{-}f_{fa,li}$		$f_{fa,li}$						
4	Absorption de sucre		-1					$(1\text{-}Y_{su})f_{bu,su}$		$(1\text{-}Y_{su})f_{pro,su}$	
5	Absorption d'acides aminés			-1		$(1\text{-}Y_{aa})f_{va,aa}$		$(1\text{-}Y_{aa})f_{bu,aa}$		$(1\text{-}Y_{aa})f_{pro,aa}$	
6	Absorption d'AGLC				-1						
7	Absorption de valérate					-1				$(1\text{-}Y_{c4})0.54$	
8	Absorption de butyrate							-1			
9	Absorption de propionate									-1	
10	Absorption d'acétate										
11	Absorption d'hydrogène										
12	Réduction du sulfate										
13	Lyse X_{su}										
14	Lyse X_{aa}										
15	Lyse X_{fa}										
16	Lyse X_{c4}										
17	Lyse X_{pro}										
18	Lyse X_{ac}										
19	Lyse X_{h2}										
20	Lyse X_{so4}										
21	Valérate acide-base					-1	1				
22	Butyrate acide-base							-1	1		
23	Propionate acide-base									-1	1
24	Acétate acide-base										
25	C acide-base										
26	N acide-base										
27	P acide-base										
28	S acide-base										
29	Équilibre H+/OH-										
30	H_2 liquide-gaz										
31	CH_4 liquide-gaz										
32	CO_2 liquide-gaz										
33	H_2S liquide-gaz										
34	H_2O évaporation										

Composé →	***i***	S_{hac}	S_{ac-}	S_{co2}	S_{hco3-}	S_{nh4+}	S_{nh3}	$S_{hpo4=}$	S_{h2po4-}
j	**Processus ↓**	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kmolC}{m^3}$	$\frac{kmolC}{m^3}$	$\frac{kmolN}{m^3}$	$\frac{kmolN}{m^3}$	$\frac{kmolP}{m^3}$	$\frac{kmolP}{m^3}$
0	Désintégration			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,0}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,0}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,0}$	
1	Hydrolyse carbohydrates			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,1}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,1}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,1}$	
2	Hydrolyse protéines			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,2}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,2}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,2}$	
3	Hydrolyse lipides			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,3}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,3}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,3}$	
4	Absorption de sucre	$(1-Y_{su})f_{ac,su}$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,4}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,4}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,4}$	
5	Absorption d'acides aminés	$(1-Y_{aa})f_{ac,aa}$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,5}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,5}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,5}$	
6	Absorption d'AGLC	$(1-Y_{fa})0.7$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,6}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,6}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,6}$	
7	Absorption de valérate	$(1-Y_{c4})0.31$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,7}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,7}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,7}$	
8	Absorption de butyrate	$(1-Y_{c4})0.8$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,8}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,8}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,8}$	
9	Absorption de propionate	$(1-Y_{pro})0.57$		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,9}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,9}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,9}$	
10	Absorption d'acétate	-1		$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,10}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,10}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,10}$	
11	Absorption d'hydrogène			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,11}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,11}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,11}$	
12	Réduction du sulfate			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,12}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,12}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,12}$	
13	Lyse X_{su}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,13}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,13}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,13}$	
14	Lyse X_{aa}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,14}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,14}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,14}$	
15	Lyse X_{fa}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,15}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,15}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,15}$	
16	Lyse X_{c4}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,16}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,16}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,16}$	
17	Lyse X_{pro}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,17}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,17}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,17}$	
18	Lyse X_{ac}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,18}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,18}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,18}$	
19	Lyse X_{h2}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,19}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,19}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,19}$	
20	Lyse X_{so4}			$-\sum_i \beta_{C,i} v_{i,20}$		$-\sum_i \beta_{N,i} v_{i,20}$		$-\sum_i \beta_{P,i} v_{i,20}$	
21	Valérate acide-base								
22	Butyrate acide-base								
23	Propionate acide-base								
24	Acétate acide-base	-1	1						
25	C acide-base			-1	1				
26	N acide-base					-1	1		
27	P acide-base							1	-1
28	S acide-base								
29	Équilibre H+/OH-								
30	H_2 liquide-gaz								
31	CH_4 liquide-gaz								
32	CO_2 liquide-gaz			-1					
33	H_2S liquide-gaz								
34	H_2O évaporation								

Composé →	***i***	S_{h2s}	S_{hs-}	S_{so4}	S_{h+}	S_{oh-}	S_{h2}	S_{ch4}	S_{I}	X_{xc}
j	**Processus ↓**	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kmolS}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kmol}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$	$\frac{\text{kgDCO}}{\text{m}^3}$
0	Désintégration				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,0}$				$f_{sI,xc}$	-1
1	Hydrolyse carbohydrates				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,1}$					
2	Hydrolyse protéines				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,2}$					
3	Hydrolyse lipides				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,3}$					
4	Absorption de sucre				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,4}$		$(1-Y_{su})f_{h2,su}$			
5	Absorption d'acides aminés				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,5}$		$(1-Y_{aa})f_{h2,aa}$			
6	Absorption d'AGLC				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,6}$		$(1-Y_{fa})0.3$			
7	Absorption de valérate				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,7}$		$(1-Y_{c4})0.15$			
8	Absorption de butyrate				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,8}$		$(1-Y_{c4})0.2$			
9	Absorption de propionate				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,9}$		$(1-Y_{pro})0.43$			
10	Absorption d'acétate				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,10}$			$1-Y_{ac}$		
11	Absorption d'hydrogène				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,11}$		-1	$1-Y_{h2}$		
12	Réduction du sulfate	$1-Y_{so4}$		$\frac{-(1-Y_{so4})}{64}$	$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,12}$		-1			
13	Lyse X_{su}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,13}$					1
14	Lyse X_{aa}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,14}$					1
15	Lyse X_{fa}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,15}$					1
16	Lyse X_{c4}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,16}$					1
17	Lyse X_{pro}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,17}$					1
18	Lyse X_{ac}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,18}$					1
19	Lyse X_{h2}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,19}$					1
20	Lyse X_{so4}				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,20}$					1
21	Valérate acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,21}$					
22	Butyrate acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,22}$					
23	Propionate acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,23}$					
24	Acétate acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,24}$					
25	C acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,25}$					
26	N acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,26}$					
27	P acide-base				$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,27}$					
28	S acide-base	-1	1		$-\sum_i \beta_{Ch,i} v_{i,28}$					
29	Équilibre H+/OH-				1	1				
30	H_2 liquide-gaz						-1			
31	CH_4 liquide-gaz							-1		
32	CO_2 liquide-gaz									
33	H_2S liquide-gaz	-1								
34	H_2O évaporation									

Composé →	***i***	X_{ch}	X_{pr}	X_{li}	X_{su}	X_{aa}	X_{fa}	X_{c4}	X_{pro}	X_{ac}	X_{h2}	X_{so4}
j	**Processus ↓**	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$
0	Désintégration	$f_{ch,xc}$	$f_{pr,xc}$	$f_{li,xc}$								
1	Hydrolyse carbohydrates	-1										
2	Hydrolyse protéines		-1									
3	Hydrolyse lipides			-1								
4	Absorption de sucre				Y_{su}							
5	Absorption d'acides aminés					Y_{aa}						
6	Absorption d'AGLC						Y_{fa}					
7	Absorption de valérate							Y_{c4}				
8	Absorption de butyrate							Y_{c4}				
9	Absorption de propionate								Y_{pro}			
10	Absorption d'acétate									Y_{ac}		
11	Absorption d'hydrogène										Y_{h2}	
12	Réduction du sulfate											Y_{so4}
13	Lyse X_{su}				-1							
14	Lyse X_{aa}					-1						
15	Lyse X_{fa}						-1					
16	Lyse X_{c4}							-1				
17	Lyse X_{pro}								-1			
18	Lyse X_{ac}									-1		
19	Lyse X_{h2}										-1	
20	Lyse X_{so4}											-1
21	Valérate acide-base											
22	Butyrate acide-base											
23	Propionate acide-base											
24	Acétate acide-base											
25	C acide-base											
26	N acide-base											
27	P acide-base											
28	S acide-base	X_{ch}										
29	Équilibre H+/OH-											
30	H_2 liquide-gaz	$f_{ch,xc}$										
31	CH_4 liquide-gaz	-1										
32	CO_2 liquide-gaz											
33	H_2S liquide-gaz											
34	H_2O évaporation											

Composé →	***i***	X_I	G_{co2}	G_{h2}	G_{ch4}	G_{h2s}	G_{h2o}	S_{h2o}
j	**Processus ↓**	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kmolC}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kgDCO}{m^3}$	$\frac{kg}{m^3}$	kg
0	Désintégration	$f_{xI,xc}$						$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,0}$
1	Hydrolyse carbohydrates							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,1}$
2	Hydrolyse protéines							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,2}$
3	Hydrolyse lipides							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,3}$
4	Absorption de sucre							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,4}$
5	Absorption d'acides aminés							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,5}$
6	Absorption d'AGLC							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,6}$
7	Absorption de valérate							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,7}$
8	Absorption de butyrate							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,8}$
9	Absorption de propionate							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,9}$
10	Absorption d'acétate							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,10}$
11	Absorption d'hydrogène							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,11}$
12	Réduction du sulfate							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,12}$
13	Lyse X_{su}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,13}$
14	Lyse X_{aa}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,14}$
15	Lyse X_{fa}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,15}$
16	Lyse X_{c4}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,16}$
17	Lyse X_{pro}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,17}$
18	Lyse X_{ac}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,18}$
19	Lyse X_{h2}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,19}$
20	Lyse X_{so4}							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,20}$
21	Valérate acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,21}$
22	Butyrate acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,22}$
23	Propionate acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,23}$
24	Acétate acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,24}$
25	C acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,25}$
26	N acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,26}$
27	P acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,27}$
28	S acide-base							$-\sum_i \beta_{H,i} v_{i,28}$
29	Équilibre H+/OH-							-18
30	H_2 liquide-gaz			1				
31	CH_4 liquide-gaz				1			
32	CO_2 liquide-gaz		1					
33	H_2S liquide-gaz					1		
34	H_2O évaporation						1	-1

Tableau 5.2 : Fractions massiques des éléments dans les composés (kg/kg)

Composé	C	H	O	N	P	S	charge
S_{su}	0.4000	0.0671	0.5328	0	0	0	0
S_{aa}	0.5497	0.0704	0.2197	0.1603	0	0	0
S_{fa}	0.7494	0.1258	0.1248	0	0	0	0
S_{hva}	0.5880	0.0987	0.3133	0	0	0	0
S_{va-}	0.5939	0.0897	0.3164	0	0	0	-0.0099
S_{hbu}	0.5453	0.0915	0.3632	0	0	0	0
S_{bu-}	0.5516	0.0810	0.3674	0	0	0	-0.0115
S_{hpro}	0.4864	0.0816	0.4319	0	0	0	0
S_{pro-}	0.4931	0.0690	0.4379	0	0	0	-0.0137
S_{hac}	0.4000	0.0671	0.5328	0	0	0	0
S_{ac-}	0.4068	0.0512	0.5419	0	0	0	-0.0169
S_{co2}	0.2729	0	0.7271	0	0	0	0
S_{hco3-}	0.1969	0.0165	0.7866	0	0	0	-0.0164
S_{nh4+}	0	0.2235	0	0.7765	0	0	0.0554
S_{nh3}	0	0.1776	0	0.8224	0	0	0
$S_{hpo4=}$	0	0.0105	0.6668	0	0.3227	0	-0.0208
S_{h2po4-}	0	0.0208	0.6598	0	0.3194	0	-0.0103
S_{h2s}	0	0.0592	0	0	0	0.9408	0
S_{hs-}	0	0.0305	0	0	0	0.9695	-0.0302
S_{so4}	0	0	0.6662	0	0	0.3338	-0.0208
S_{h+}	0	1.0000	0	0	0	0	0.9921
S_{oh-}	0	0.0593	0.9407	0	0	0	-0.0588
S_{h2}	0	1.0000	0	0	0	0	0
S_{ch4}	0.7487	0.2513	0	0	0	0	0
S_{I}	0.6400	0.0700	0.2800	0	0.0100	0	0
X_{xc}	0.5950	0.0550	0.2800	0.0600	0.0100	0	0
X_{ch}	0.4401	0.0608	0.4890	0	0.0100	0	0
X_{pr}	0.5497	0.0704	0.2197	0.1603	0	0	0
X_{li}	0.7520	0.1201	0.1180	0	0.0100	0	0
X_{su}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{aa}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{fa}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{c4}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{pro}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{ac}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{h2}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0
X_{so4}	0.5155	0.0592	0.2750	0.1203	0.0300	0	0

X_{I}	0.5575	0.0600	0.2800	0.0925	0.0100	0	0
G_{co2}	0.2729	0	0.7271	0	0	0	0
G_{h2}	0	1.0000	0	0	0	0	0
G_{ch4}	0.7487	0.2513	0	0	0	0	0
G_{h2s}	0	0.0592	0	0	0	0.9408	0
G_{h2o}	0	0.1119	0.8881	0	0	0	0
S_{h2o}	0	0.1119	0.8881	0	0	0	0

Tableau 5.3 : Paramètres du modèle

Paramètre	**Valeur**	**Unité**	**Référence**
$f_{\mathrm{sI,xc}}$	0.1	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{xI,xc}}$	0.2	-	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$f_{\mathrm{ch,xc}}$	0.2	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{pr,xc}}$	0.2	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{li,xc}}$	0.3	-	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$f_{\mathrm{fa,li}}$	0.95	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{h2,su}}$	0.19	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{bu,su}}$	0.13	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{pro,su}}$	0.27	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{ac,su}}$	0.41	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{h2,su}}$	0.06	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{va,aa}}$	0.23	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{bu,aa}}$	0.26	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{pro,aa}}$	0.05	-	(Batstone et al., 2002a)
$f_{\mathrm{ac,aa}}$	0.4	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{su}	0.1	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{aa}	0.08	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{fa}	0.06	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{c4}	0.06	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{pro}	0.04	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{ac}	0.05	-	(Batstone et al., 2002a)
Y_{h2}	0.06	-	(Batstone et al., 2002a)
k_{dis}	0.5	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{\mathrm{hyd,ch}}$	10	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{\mathrm{hyd,pr}}$	10	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{\mathrm{hyd,li}}$	10	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{\mathrm{S,IN}}$	0.0001	M	(Batstone et al., 2002a)
$k_{\mathrm{m,su}}$	30	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)

$K_{S,su}$	0.5	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{UL,aa}$	5.5	-	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{LL,aa}$	4	-	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,aa}$	50	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,aa}$	0.3	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,fa}$	6	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,fa}$	0.4	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{I,h2,fa}$	0.000005	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,c4}$	20	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,c4}$	0.2	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{I,h2,c4}$	0.00001	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,pro}$	13	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,pro}$	0.1	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{I,h2,pro}$	3.5E-06	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,ac}$	8	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,ac}$	0.15	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{I,nh3}$	0.0018	M	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{UL,ac}$	7	-	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{LL,ac}$	6	-	(Batstone et al., 2002a)
$k_{m,h2}$	35	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{S,h2}$	0.000007	kg DCO m^{-3}	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{UL,h2}$	6	-	(Batstone et al., 2002a)
$pH_{LL,h2}$	5	-	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xsu}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xaa}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xfa}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xc4}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xpro}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xac}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$k_{dec,Xh2}$	0.02	j^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
R	0.083145	bar M^{-1} K^{-1}	-
T_{base}	298.15	K	-
T_{op}	308.15	K	-
$pK_{w,base}$	14	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,va,base}$	4.86	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,bu,base}$	4.82	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,pro,base}$	4.88	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,ac,base}$	4.76	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,co2,base}$	6.35	-	(Batstone et al., 2002a)
$pK_{a,IN,base}$	9.25	-	(Batstone et al., 2002a)
$k_{A,Bva}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)

$k_{A,Bbu}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$k_{A,Bpro}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$k_{A,Bac}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$k_{A,Bco2}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$k_{A,BIN}$	1E+10	M^{-1} j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
P_{atm}	1.013	bar	-
$k_L a$	200	j^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$K_{H,h2o,base}$	0.0313	M_{liq} bar^{-1}	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$K_{H,co2,base}$	0.035	M_{liq} bar^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{H,ch4,base}$	0.0014	M_{liq} bar^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$K_{H,h2,base}$	0.00078	M_{liq} bar^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
K_P	50000	m3/day/bar	(Rosén et Jeppsson, 2005)
$k_{m,so4}$	50	j^{-1}	(Batstone, 2006)
$K_{S,so4}$	0.0001	kg DCO m^{-3}	(Batstone, 2006)
$K_{S,sh2}$	4.00E-06	kg DCO m^{-3}	(Batstone, 2006)
Y_{so4}	0.08	-	(Batstone, 2006)
$pK_{a,h2s,base}$	7.05	-	(Batstone, 2006)
$K_{H,h2s,base}$	0.105	M_{liq} bar^{-1}	(Batstone, 2006)
$K_{A,Bh2s}$	1.00E+10	M^{-1} day^{-1}	Estimé
$k_{dec,Xso4}$	0.02	j^{-1}	Estimé
$K_{I,IS,so4,h2}$	7.80E-03	M	(Fedorovich et al., 2003)
$K_{I,IS,c4}$	7.53E-03	M	(Fedorovich et al., 2003)
$K_{I,IS,pro}$	7.53E-03	M	(Fedorovich et al., 2003)
$K_{I,IS,ac}$	7.19E-03	M	(Fedorovich et al., 2003)
$K_{I,IS,h2}$	6.25E-03	M	(Fedorovich et al., 2003)
$pK_{a,IP,base}$	7.2	-	(de Gracia et al., 2009)
$p_{sat,h2o,base}$	3.13E-02	bar	-
$k_M a$	2.00E+02	j^{-1}	Estimé
$k_{A,Bh2o}$	1.00E+10	M^{-1} j^{-1}	Estimé
ρ_{h2o}	1.00E+03	kg m^{-3}	-
$k_{A,BIP}$	1.00E+10	j^{-1}	Estimé
$K_{S,IP}$	2.00E-05	M	(Flores-Alsina et al., 2016)
$\Delta H^0_{a,h2o}$	55900	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{a,co2}$	7646	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{a,IN}$	51965	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{a,IP}$	4200	J mol^{-1}	(de Gracia et al., 2009)
$\Delta H^0_{a,h2s}$	21670	J mol^{-1}	(Batstone, 2006)
$\Delta H^0_{H,h2}$	-4180	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{H,ch4}$	-14240	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{H,co2}$	-19410	J mol^{-1}	(Batstone et al., 2002a)
$\Delta H^0_{H,h2s}$	-19180	J mol^{-1}	(Batstone, 2006)

ANNEXE B – COMPOSITION DES MATIÈRES RÉSIDUELLES

Ceux dont la concentration en oxygène n'est pas disponible, elle est estimée par :

$$y_O = VS - y_C - y_H - y_N - y_S$$

Tableau 5.4 : Provenance des données utilisées

Fraction de matières residuelles (Biens)	Teneur en eau	Composition élémentaire
Autres contaminants	*Other non-combustibles* [1]	*Other non-combustibles* [2]
Cosmétique	*Other non-combustibles* [1]	*Other non-combustibles* [2]
Couches	*Diapers and tampons* [1]	*sanitary products* [2]
Litière	Moyenne pondérée selon la teneur dans les ordures (base humide) [3] de *cat gravel* [1] et d'*animals etc.* [1]	Moyenne pondérée selon la teneur dans les ordures (base humide) [3] et de la teneur en solides [1] de *cat litter* [2] et d'*animal excrements-cat* [2]
Particules fines	*Vacuum cleaner bags* [1]	*Vacuum cleaner bags* [2]
RDD	*Batteries* [1]	*Batteries* []
Textile	*Textiles* [1]	*Textiles, leather, rubber* [2]
Alimentaire - végétal	*Veg. food* [1]	*Vegetable food waste* [2]
Alimentaire - animal	*Animal food* [1]	*Animal-derived food waste* [2]
Résidus verts	*Yard waste* [1]	*Plant material* [2]
Branches	*Wood* [1]	*Woody plant material* [2]
Fibres non souillées	*Newsprint* [1]	*Newsprint* [2]
Fibres souillées	*Dirty paper* [1]	*Newsprint* [2]
Métal	*Metal containers* [1]	*Metal packaging-non-ferrous* [2]
Plastique et polystyrène	*Hard plastic* [1]	*Plastic packaging-no label* [2]
Sac plastique	*Soft plastic* [1]	*Plastic packaging-identification code 7-19* [2]
Verre	*Other glass* [1]	*Other/special glass* [2]

[1] (Riber et al., 2009)
[2] (Götze et al., 2016)
[3] (Edjabou et al., 2015)

Tableau 5.5 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau

	Autres contaminants	Cosmétique	Couches	Litière	Particules fines	RDD	Textile
Eau	0.3662	0.3662	0.4552	0.3312	0.2918	0.089	0.0600
C	134000	134000	510000	62400	184000	115000	499000
H	4090	4090	80800	17500	25800	14600	64800
O	0[1]	0[1]	257000	48300	169000	35700	319000
N	1830	1830	11900	9090	15000	1320	19600
S	3850	3850	3710	2890	9080	2180	5940
P	558	558	1190	6890	3180	10.0	378
As	2.77	2.77	2.70	5.00	3.58	83.0	8.24
Co	0.420	0.420	2.28	0.921	4.25	0[1]	1.46
Cr	6.26	6.26	7.07	7.08	49.0	33.4	372
Cu	15.0	15.0	9.78	13.8	70.0	4960	252
Mo	0.608	0.608	0.652	0.845	2.27	10.4	1.40
Ni	10.8	10.8	11.0	9.34	21.2	4.00	12.4
Se	48.4	48.4	49.1	52.2	48.0	0[1]	48.6
Zn	66.6	66.6	101	256	343	262000	2410
Cd	0.179	0.179	0.478	0.113	1.42	1.00	0.736
Hg (ug/kg)	5.53	5.53	9.30	16.3	160	0[1]	27.6
Pb	2.82	2.82	1.34	28.8	19.3	230	78.5
Mg	1770	1770	614	11300	6580	196	2010
K	590	590	3580	11100	26500	39700	993
Ca	367000	367000	11300	16800	80600	876	20300
Cl	1530	1530	3020	2210	7710	15800	6570
Autre	485000	485000	117000	811000	472000	507000	58300

[1] La composition a été posée à 0 puisque la concentration en cet élément n'a pas été mesurée

Tableau 5.6 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau (suite)

	Alimentaire - végétal	Alimentaire - animal	Résidus verts	Branches	Fibres non souillées	Fibres souillées
Eau	0.7699	0.5714	0.4821	0.1586	0.1295	0.2447
C	424000	407000	268000	443000	447000	447000
H	69000	66700	38800	60200	64100	64100
O	372000	241000	242000	394000	375000	375000
N	19600	38600	16500	12100	3790	3790
S	5210	6110	3910	1150	937	937
P	2210	11800	3150	1340	112	112
As	2.60	2.64	14.3	6.66	1.30	1.30
Co	0.779	5.35	2.46	0.618	0.458	0.458
Cr	14.1	4.52	38.9	13.4	3.59	3.59
Cu	16.8	5.10	50.1	20.5	73.7	73.7
Mo	1.18	0.891	3.00	2.38	0.529	0.529
Ni	11.0	11.5	12.1	3.96	1.54	1.54
Se	47.3	48	57.6	65.1	35.3	35.3
Zn	39.3	57.3	274	67.8	17.4	17.4
Cd	0.059	0.0864	1.67	0.391	0.124	0.124
Hg (ug/kg)	9.23	5.90	48.8	24.3	7.83	7.83
Pb	2.00	0.822	12.8	9.85	3.32	3.32
Mg	1120	1230	2640	1030	645	645
K	11000	4730	13900	6180	698	698
Ca	11000	83800	32800	9890	27100	27100
Cl	6410	9260	4790	1890	505	505
Autre	77500	130000	374000	68800	80300	80300

[1] La composition a été posée à 0 puisque la concentration en cet élément n'a pas été mesurée

Tableau 5.7 : Composition élémentaire des biens (mg/kg) et leur teneur en eau (suite)

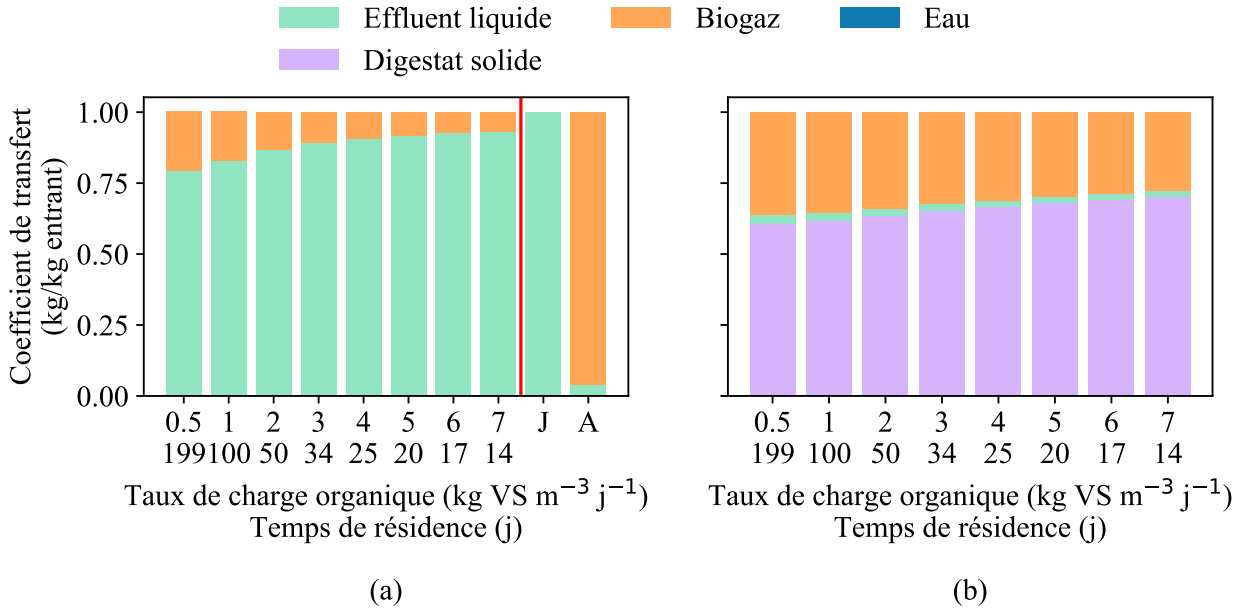
	Métal	Plastique et polystyrène	Sac plastique	Verre
Eau	0.1318	0.0325	0.1411	0.1035
C	76000	682000	803000	30600
H	12900	81400	142000	3250
O	14000	213000	34900	11200
N	3020	1800	1600	769
S	217	388	212	1920
P	237	172	44.4	115
As	1.79	2.13	2.08	6.87
Co	2.68	3.34	2.32	1.23
Cr	167	38.4	4.22	26.0
Cu	913	34.8	1.19	20.6
Mo	3.12	0.877	0.295	2.10
Ni	63.9	19.2	7.97	8.02
Se	64.6	0[1]	0[1]	65.7
Zn	261	58.6	62.7	445
Cd	0.202	0.847	0.440	0.462
Hg (ug/kg)	2.67	2.40	2.40	2.40
Pb	18.6	1.19	6.25	41.2
Mg	6320	213	63.2	8640
K	822	202	197	5420
Ca	759	3190	577	64100
Cl	3160	16100	222	339
Other	881000	1550	17400	873000

[1] La composition a été posée à 0 puisque la concentration en cet élément n'a pas été mesurée

ANNEXE C – VALIDATION MFA

Tableau 5.8 : Coefficients de transfert utilisés dans la MFA d'Allesch et Brunner (2017)

	Biens	C	N	P	Cd	Fe	Cr	Cu	Hg	Ni	Pb	Zn
Émissions à l'air	0.02	0.01	0.04	0	0	0	0	0	0.02	0.02	0	0
Biogaz	0.12	0.54	0	0	0	0	0	0	0.12	0.12	0	0
Effluent liquide	0.79	0.4	0.95	0.96	0.32	0	0.95	0.65	0.79	0.79	0.52	0.72
Digestat solide	0.02	0.04	0.01	0.04	0.07	0	0.05	0.06	0.02	0.02	0.04	0.05
Rejets vers l'incinération (GF)	0.02	0	0	0	0.23	0	0	0.11	0.02	0.02	0.16	0.09
Rejets vers l'incinération (FBC)	0.02	0	0	0	0.23	0	0	0.11	0.02	0.02	0.16	0.09
Rejets vers le broyeur	0.01	0	0	0	0.15	1	0	0.07	0.01	0.01	0.11	0.06
Rejet du crible vers l'incinération	0	0	0	0	0.01	0	0	0	0	0	0.01	0
Somme	1	0.99	1	1	1.01	1	1	1	1	1	1	1.01



(a) (b)

Figure 5.1 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de charge organique et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre

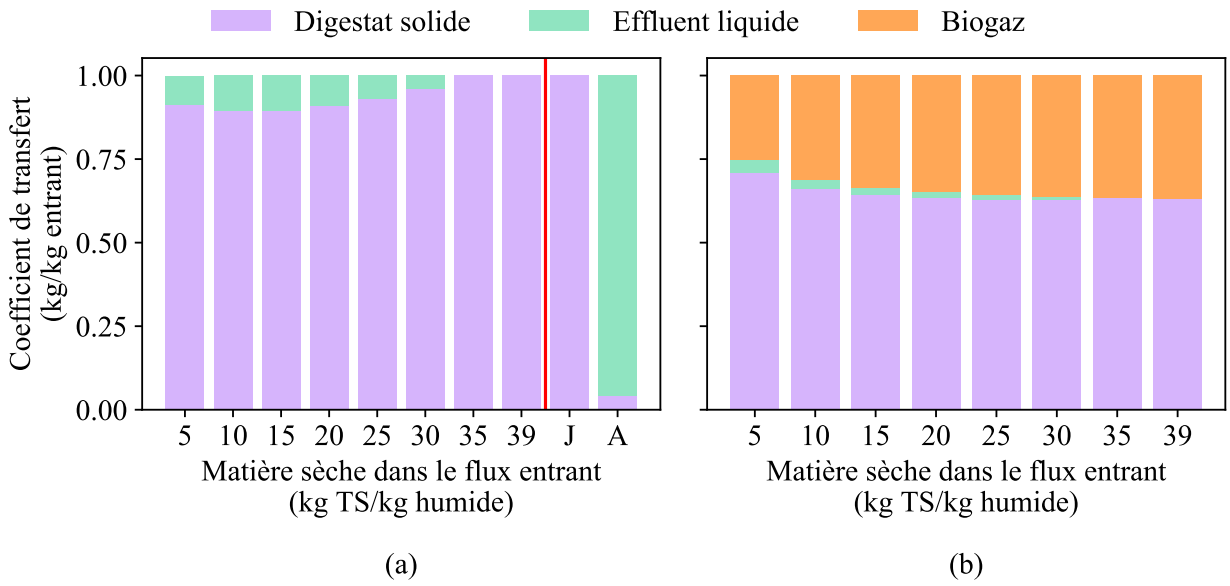


Figure 5.2 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de dilution de l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre

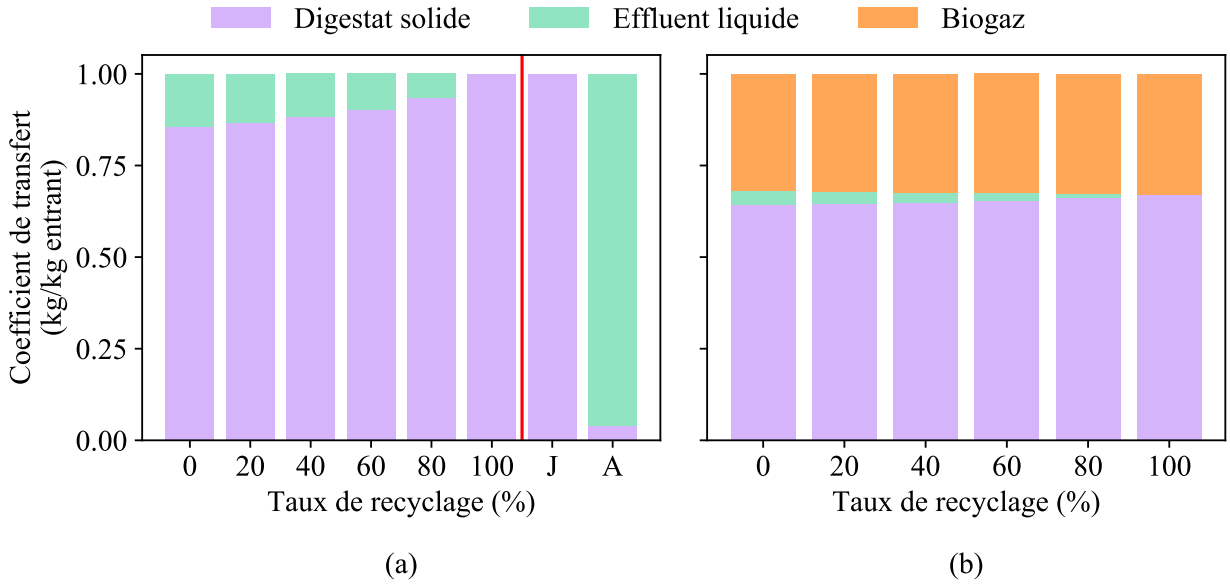


Figure 5.3 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction du taux de recyclage de l'effluent liquide et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre

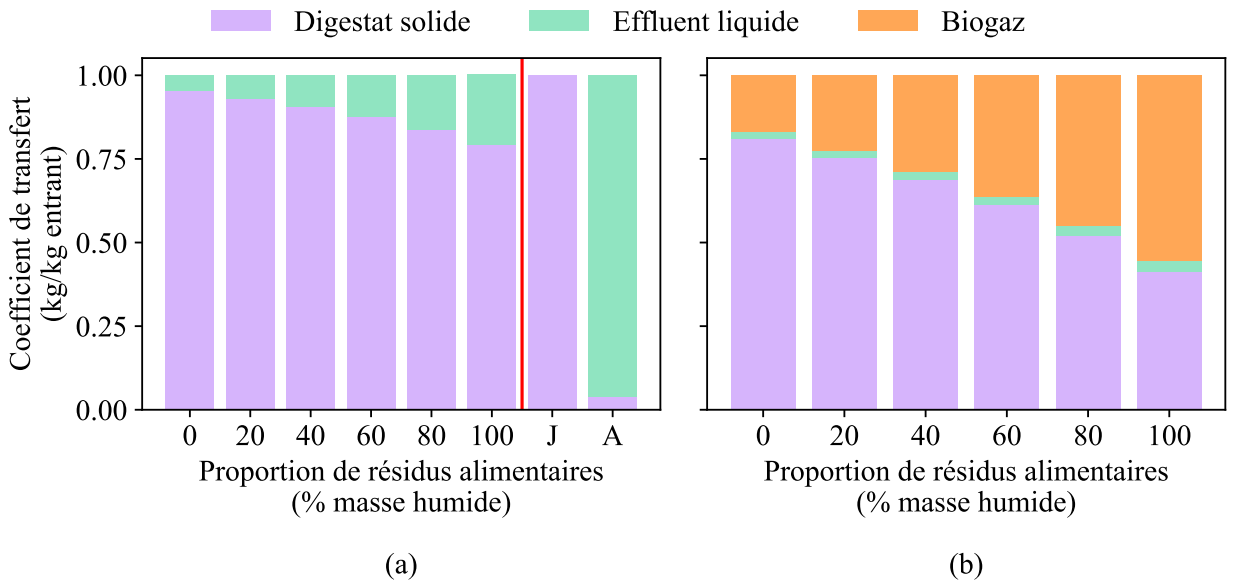


Figure 5.4 : Coefficients de transfert obtenus par simulation en fonction de la proportion de résidus alimentaires dans l'intrant et coefficients obtenus de la littérature (a) pour le phosphore et (b) pour le soufre

ANNEXE D – MODÈLE DE COMPOSTAGE

Le procédé de compostage est modélisé par coefficient de transfert. Le procédé est instantané et sans volume. Les coefficients de transfert sont calculés à partir de la MFA de Knoop et al. (2018), ils sont présentés dans le Tableau 5.9. Les auteurs ont analysé une usine allemande de traitement des OFMSW triées à la source par biométhanisation suivi d'un post-traitement par compostage. Les coefficients de transfert du C, N, P et S sont prises de leur MFA. La teneur en eau dans le compost est supposée égale à celle mesurée par Knoop et al. (2018). Cependant, pas tous les éléments suivis dans les études de cas présentés dans ce mémoire ont été mesurés par Knoop et al. (2018). Donc, puisque les coefficients de transfert des éléments inorganiques dans les émissions liquides et gazeuses sont très faibles, il est supposé que tous les éléments inorganiques (As, Cd, Co, Cr, Cu, Hg, Mo, Ni, Pb, Se, Zn) se retrouvent dans le digestat solide. Un intrant d'agent structurant en raison de 0.05 kg (kg digestat)$^{-1}$ est supposé, en prenant la composition élémentaire et la teneur en eau des branches (Annexe B). Comme les coefficients de transfert pour O et H n'ont pas été mesurés, ils sont supposés égales et sont calculés à partir de la teneur en eau et du coefficient de transfert de la masse humide mesurés par Knoop et al. (2018) :

$$TC_{\mathrm{H,O,comp}} = \frac{\left(\dot{M}_{\mathrm{dig}} + \dot{M}_{\mathrm{bulk}}\right) \cdot TC_{\mathrm{m,\,comp}} - \sum_{e}^{n_e}\left(\dot{Y}_{e,\mathrm{dig}} + \dot{Y}_{e,\mathrm{bulk}}\right) - \left(\dot{X}_{\mathrm{h2o,dig}} + \dot{X}_{\mathrm{h2o,bulk}}\right) \cdot TC_{\mathrm{h2o,\,comp}}}{\left(\dot{Y}_{\mathrm{H\text{-}O,dig}} + \dot{Y}_{\mathrm{H\text{-}O,bulk}}\right)}$$

Où,

$TC_{\mathrm{H,O,comp}}$: Coefficient de transfert de H et O vers le compost;

$TC_{\mathrm{m,\,comp}}$: Coefficient de transfert de la masse humide en compost;

$TC_{\mathrm{h2o,\,comp}}$: Coefficient de transfert de l'eau vers le compost;

$\dot{M}_{\mathrm{dig}}, \dot{M}_{\mathrm{bulk}}$: Débit massique de digestat et d'agent structurant, respectivement;

$\dot{X}_{\mathrm{h2o,dig}} + \dot{X}_{\mathrm{h2o,bulk}}$: Débit massique d'eau du digestat et de l'agent structurant, respectivement;

$\dot{Y}_{e,\mathrm{dig}} + \dot{Y}_{e,\mathrm{bulk}}$: Débit massique d'éléments *e* du digestat et de l'agent structurant, respectivement, sans prendre en compte la substance H_2O;

$\dot{Y}_{\text{H-O,dig}} + \dot{Y}_{\text{H-O,bulk}}$: Débit massique de H et de O du digestat et de l'agent structurant, respectivement, sans prendre en compte la substance H_2O.

Tableau 5.9 : Coefficients de transfert utilisés pour le procédé de compostage

Coefficient de transfert (TC)	Digestat	Émissions	Compost
m	-1	0.55	0.45
h2o	-1	0.63	0.37
C	-1	0.49	0.51
N	-1	0.27	0.73
P	-1	0	1
S	-1	0.28	0.72
As	-1	0	1
Cd	-1	0	1
Co	-1	0	1
Cr	-1	0	1
Cu	-1	0	1
Hg	-1	0	1
Mo	-1	0	1
Ni	-1	0	1
Pb	-1	0	1
Se	-1	0	1
Zn	-1	0	1