

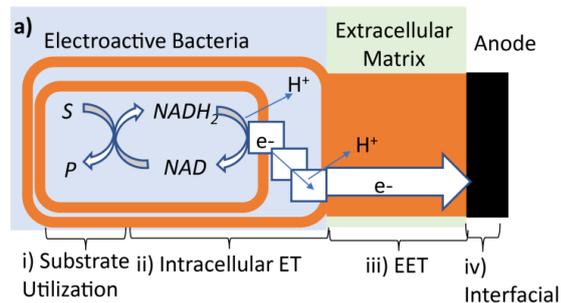
Modélisation d'un procédé électrochimique microbien

Etat de l'art et objectifs du stage

Les systèmes électrochimiques microbiens sont des procédés électrochimiques dans lesquels la réaction d'oxydation à l'anode et/ou de réduction à la cathode est catalysée par des microorganismes dits « électroactifs ». En effet, ces microorganismes sont capables d'échanger des électrons avec les électrodes qu'ils utilisent comme accepteur d'électrons dans le cas de réactions d'oxydation à l'anode, ou comme donneur d'électrons dans le cas de réactions de réduction à la cathode. Ils se structurent généralement sous la forme d'un biofilm.

Ces systèmes font l'objet d'un intérêt croissant depuis une quinzaine d'années pour la production d'énergie, d'hydrogène ou de molécules bio-ressourcées. Au sein de l'équipe d'accueil, nous explorons également leur potentiel pour le traitement des eaux usées domestiques à moindre coût énergétique (projet Biotuba - ANR-17-CE06-0015-01).

Les mécanismes de transfert d'électrons aux électrodes sont multiples et impliquent quatre étapes principales (cf. figure ci-dessous) : 1) génération d'électrons par la consommation d'un substrat, 2) transfert d'électrons intracellulaire, 3) transfert d'électrons externe au sein de la matrice du biofilm microbien et enfin 4) transfert interfacial à l'électrode.



Représentation schématique des échanges d'électrons intra- et extracellulaires au sein d'un système biofilm-anode (Desmond-Le Quéméner et al., 2021).

Plusieurs approches ont été proposées et mises en œuvre dans la littérature pour décrire l'activité de bio-anaodes :

- i. Une approche purement empirique consistant à ajuster les paramètres des équations électrochimiques, comme par exemple Nernst-Monod (Kato Marcus et al., 2007) ou Butler-Vomer-Monod (Hamelers et al., 2011), sur des courbes de densité de courant ou de potentiel électrique.
- ii. Une approche plus mécaniste nécessitant une représentation physique du biofilm microbien (en 1 dimension) et des différents échanges d'électrons dont il est le siège (Korth et al., 2015).

Dans la plupart des cas d'étude, les modèles ont été appliqués à des systèmes opérés avec des substrats modèles (acétate, glucose, etc.) et on compte très peu d'exemples d'application de ces modèles sur des systèmes opérés avec des effluents réels et sur des durées longues intégrant des phénomènes de vieillissement du biofilm. Or, l'utilisation d'un effluent réel (contenant un mélange de substrats), et à fortiori sur des périodes longues, favorise la diversité des souches microbiennes et leur dynamique au cours du temps. Ceci a pour effet d'influer sur les performances électroactives des systèmes et sur les paramètres des modèles qui leur sont appliqués.

Une évaluation des modèles sur des données représentatives des mécanismes pouvant avoir lieu à l'échelle industrielle est donc nécessaire.

Le stage proposé porte sur la modélisation du fonctionnement d'un réacteur électrochimique microbien et a pour objectifs :

- Dans un premier temps, l'évaluation de la capacité de modèles cinétiques à décrire la dynamique des paramètres de fonctionnement du réacteur (abattement de la matière organique, densité de courant notamment)
- Dans un second temps, la formalisation d'un modèle de biofilm microbien électroactif sur une plateforme de simulation numérique (modèle mécanistique aux équations différentielles ordinaires).

Références : DESMOND-LE QUÉMÉNER, E. *et al.* Current Opinion in Biotechnology, 67, 49-57 / HAMELERS, H. V. M. *et al.* Bioresource Technology, 102, 381-387 / KATO MARCUS, A. *et al.* Biotechnology and Bioengineering, 98, 1171-1182 / KORTH, B. *et al.* Bioelectrochemistry, 106, 194-206.

Déroulement du stage

Les principales étapes de ce stage sont :

1. Analyse bibliographique permettant d'assimiler les concepts de modélisation des procédés électrochimiques microbiens
2. Formation à l'utilisation du logiciel de simulation
3. Formalisation du modèle empirique (écriture des équations) et estimation des paramètres du modèle à différents moments de fonctionnement du réacteur (du développement initial du biofilm à sa phase de maturation). L'objectif étant d'identifier s'il est possible de représenter le fonctionnement du réacteur avec un même jeu de paramètres. Dans le cas contraire, il sera nécessaire de mettre en œuvre une approche de modélisation mécanistique.
4. En fonction de l'avancement des travaux et des premiers résultats de simulation, il peut être envisagé de procéder au développement d'un modèle mécanistique, plus complexe, sur le même logiciel.
5. Mise en forme, analyse et discussion des résultats obtenus
6. Rédaction du rapport de stage.

Profil Souhaité

- Elève Ingénieur / Master 2
- Goût et bonnes aptitudes pour la modélisation et l'informatique
- Culture scientifique de base en biologie, physique et génie des procédés
- Connaissance en langage de programmation (Matlab, Comsol)

Contacts

Théodore Bouchez (theodore.bouchez@inrae.fr) et Ahlem Filali (ahlem.filali@inrae.fr)

Informations complémentaires

Début de stage prévu le 1^{er} semestre 2023, durée de stage de 6 mois, gratification de stage d'environ 554 €/mois, lieu d'accueil : Inrae d'Antony (92) au sein de l'unité Prose (<https://www6.jouy.inrae.fr/prose/>).