

MODELISATION MATHÉMATIQUE DE LA FERMENTATION

Ce chapitre décrit comment la fermentation peut être modélisée mathématiquement. Il n'est à ce titre pas lisible par tout le monde.

D'après Monod [1], la consommation de sucre par les levures est donnée par :

$$\frac{dx}{dt} = p \frac{S}{S+K} x$$

où x est la concentration de levures et S celle de sucre, p et K sont des constantes. La fermentation est donc généralement modélisée [2, 3, 4] :

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{dx}{dt} - mx \\ \frac{dx}{dt} = p \frac{S}{S+K} x \end{cases}$$

Dans le plan de phase

Le système d'équations ne peut pas être résolu analytiquement mais j'ai obtenu un résultat dans le plan de phase (qui est joliment inutilisable) :

$$\frac{dS}{dx} = \frac{\frac{dS}{dt}}{\frac{dx}{dt}} = \frac{-\frac{1}{Y} \frac{dx}{dt} - mx}{\frac{dx}{dt}} = -\left(\frac{1}{Y} + \frac{m}{p}\right) - \frac{mK}{pS}$$

On commence par séparer les variables (x et S) :

$$dS \frac{S}{S + \frac{mKY}{p+mY}} = -\frac{p+mY}{pY} dx$$

On pose $\sigma = \frac{mKY}{p+mY}$ et $\chi = \frac{pY}{p+mY} = \frac{p}{mK} \sigma$:

$$\begin{aligned} dS - \sigma \frac{dS}{S+\sigma} &= -\frac{dx}{\chi} \\ \Leftrightarrow (S - S_0) - \sigma \ln \frac{S+\sigma}{S_0+\sigma} &= -\frac{1}{\chi} (x - x_0) \end{aligned}$$

On a donc finalement

$$\boxed{-\Delta S + \sigma \ln \left(1 + \frac{\Delta S}{S_0 + \sigma}\right) = \frac{\Delta x}{\chi}}$$

avec $\Delta S = S - S_0$; $\Delta x = x - x_0$; $\sigma = \frac{mKY}{p+mY}$; $\chi = \frac{pY}{p+mY} = \frac{p}{mK} \sigma$.

J. Alvarez et J. Ricaño donnent pour les constantes à 37,5°C et pH = 4 [4] :

$$p = 0,17 \text{ heure}^{-1}$$

$$Y = 0,35$$

$$K = 0,01 \text{ g/L}$$

Erickson trouve [3] : $p = 0,1 \text{ heure}^{-1}$ à 48°C . Il montre aussi que p (entre 48°C et 60°C) suit une loi d'Arrhénius : $p = p_0 e^{\frac{E_a}{kT}}$. Si on extrapole p à 20°C on trouve $p = 0,005 \text{ heure}^{-1}$.

Avec inhibition due à l'éthanol

Les équations ci-dessus ne tiennent pas compte de l'inhibition due à la présence d'éthanol (la fermentation devient moins active quand le taux d'alcool augmente). Elles peuvent être modifiées [5] :

$$\begin{cases} \frac{dS}{dt} = -\frac{1}{Y} \frac{dx}{dt} - mx \\ \frac{dx}{dt} = p \frac{S}{(S+K)(1+E/K')} \\ \frac{dE}{dt} = -\frac{2M_a}{M_s} \frac{dS}{dt} \end{cases}$$

où E est la concentration en éthanol et K' une constante.

On peut faire le même genre de travail que précédemment dans le plan de phase et écrire que :

$$-\frac{dS}{dx} = \frac{1}{Y} + \frac{m}{p} \frac{S+K}{S} \left(1 + \frac{E}{K'}\right)$$

E peut être facilement trouvé en fonction de S :

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{2M_a}{M_s} \frac{dS}{dt} \Rightarrow E = -\alpha \Delta S$$

en posant $\alpha = \frac{2M_a}{M_s}$. D'où l'équation reliant x et S (temps et éthanol ayant disparu) :

$$-\frac{dS}{dx} = \frac{1}{Y} + \frac{m}{p} \left(1 + \frac{K}{S}\right) \left(1 + \frac{\alpha}{K'} S_0 - \frac{\alpha}{K'} S\right)$$

On fait ensuite comme précédemment :

$$\begin{aligned} -\frac{dS}{dx} &= \frac{p+mY \left[1 + \frac{\alpha}{K'} (S_0 - K)\right]}{pY} + \frac{m}{p} \left(1 + \frac{\alpha}{K'} S_0\right) \frac{K}{S} - \frac{m}{p} \frac{\alpha}{K'} S \\ &= \frac{1}{\chi'} \left[1 + \frac{\sigma'}{S} \left(1 + \frac{\alpha}{K'} S_0\right) - \frac{m}{p} \chi' \frac{\alpha}{K'} S\right] \end{aligned}$$

avec

$$\chi' = \frac{pY}{p+mY \left[1 + \frac{\alpha}{K'} (S_0 - K)\right]}$$

et

$$\sigma' = \frac{mKY}{p+mY \left[1 + \frac{\alpha}{K'} (S_0 - K)\right]} = \frac{mK}{p} \chi'$$

En séparant les variables et en réduisant la fraction rationnelle on a :

$$\frac{dx}{\chi'} = - \frac{S dS}{\sigma' \left(1 + \frac{\alpha}{K'} S_0 \right) + S - \frac{\sigma' \alpha}{K} S^2} = - \frac{S_0}{\varepsilon} \frac{1}{S_2 - S_1} \left(\frac{S_1}{S - S_1} - \frac{S_2}{S - S_2} \right) dS$$

avec $\varepsilon = \frac{\alpha \sigma' S_0}{K K'}$ et S_1 et S_2 racines de $\sigma' \left(1 + \frac{\alpha}{K'} S_0 \right) + S - \frac{\sigma' \alpha}{K} S^2$:

$$S_1 = \frac{S_0}{2\varepsilon} - \frac{S_0}{2\varepsilon} \sqrt{1 + 4 \frac{\varepsilon}{S_0} \sigma' \left(1 + \frac{K}{\sigma'} \varepsilon \right)} = \frac{S_0}{2\varepsilon} - \frac{1}{2} (S_2 - S_1)$$

$$S_2 = \frac{S_0}{2\varepsilon} + \frac{S_0}{2\varepsilon} \sqrt{1 + 4 \frac{\varepsilon}{S_0} \sigma' \left(1 + \frac{K}{\sigma'} \varepsilon \right)} = \frac{S_0}{2\varepsilon} + \frac{1}{2} (S_2 - S_1)$$

On peut maintenant réécrire le membre de droite comme une différentielle :

$$\frac{dx}{\chi'} = \frac{S_0}{\varepsilon} \frac{1}{S_2 - S_1} d(S_2 \ln|S - S_2| - S_1 \ln|S - S_1|).$$

En remplaçant S_1 et S_2 par leur valeur on obtient

$$\frac{2\varepsilon}{S_0} \frac{dx}{\chi'} = \frac{1}{S_2 - S_1} \left[\frac{S_0}{\varepsilon} + (S_2 - S_1) \right] d \ln|S - S_2| + \frac{1}{S_2 - S_1} \left[-\frac{S_0}{\varepsilon} + (S_2 - S_1) \right] d \ln|S - S_1|$$

puis on intègre :

$$\boxed{2 \frac{\varepsilon}{S_0} \frac{\Delta x}{\chi'} = \ln \left| \frac{S - S_1}{S_0 - S_1} \right| + \ln \left| \frac{S - S_2}{S_0 - S_2} \right| + \left[1 + 4 \frac{\varepsilon}{S_0} \sigma' \left(1 + \frac{K}{\sigma'} \varepsilon \right) \right]^{\frac{1}{2}} \left(\ln \left| \frac{S - S_2}{S - S_1} \right| - \ln \left| \frac{S_0 - S_2}{S_0 - S_1} \right| \right)}$$

Les constantes données par Boulton sont [4] :

$$p = 0,11 \text{ heure}^{-1}$$

$$m = 0,01 \text{ heure}^{-1}$$

$$Y = 0,1$$

$$K = 112 \text{ g/L} \quad (\text{correspond à une } d_i = 1,040)$$

$$K' = 40 \text{ g/L} \quad (\text{correspond à une } d_i = 1,014)$$

Ce qui donne $\sigma \approx \sigma' \approx 1 \text{ g/L}$, $\chi \approx 0,1$ et $\varepsilon \approx 1/30$. Si on compare avec et sans inhibition (figure 1), on constate que l'inhibition due à l'alcool double le temps de fermentation.

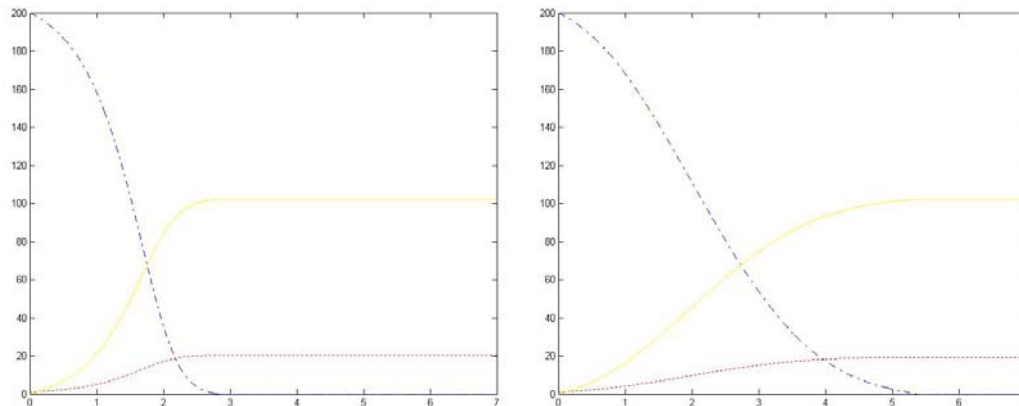


Figure 1 : Taux de sucre (trait mixte bleu), taux d'alcool (trait continu jaune) et concentration de levures (trait pointillé rouge) en fonction du temps. A gauche sans inhibition due à l'éthanol, à droite avec inhibition. Les constantes utilisées sont celles citées par Boulton [4].

Bibliographie

- [1] Monod J. : *Recherche sur la croissance des cultures bactériennes*, Hermann (1941) *Un travail fondateur sur la levure, notamment pour la vitesse de croissance de levures et leur consommation du sucre.*
- [2] Smart K (ed.) : *Brewing yeast fermentation performance*, Blackwell (2000)
- [3] Erickson L. E. et Fung D. : *Handbook of anaerobic fermentations*, Dekker (1988)
- [4] Armiger W. B. (ed.) : *Computer applications in fermentation technology*, Wiley (1978)
- [5] Pirt S. J. : *Principles of microbe and cell cultivation*, Blackwell (1975)