

Projet Zeus – LIFE

Tâche B7-1

Notice d'utilisation outil Excel de répliquabilité

Partenaire responsable : INSA Toulouse

Rédaction : Mathilde Besson

Vérification : Elise Blanchet

Date (VF) : 05/02/26



Avec le soutien financier des agences de l'eau Adour-Garonne, Loire-Bretagne et Rhône Méditerranée Corse.

Table des matières

1. Introduction.....	3
2. Préconisations	3
2.1. Activer les macros	3
2.2. Activer le calcul itératif.....	3
2.3. Pages cachées en cours de mise en place	4
3. Présentation générale	4
3.1. Objectifs de l'outil	4
3.2. Construction de l'outil.....	5
3.3. Code couleur	5
4. Guide pas-à-pas.....	5
4.1. Onglet Caractérisation influent	5
4.2. Onglet MFT	6
4.3. Onglet NF.....	6
4.4. Onglet OI et GAC	8
4.5. Onglet MonteCarlo.....	8
4.6. Onglet Synthèse	9
4.1. Onglet Flowsheet.....	10
4.2. Onglet MoninComp.....	10
5. Exemple avec le cas Monin	10
5.1. Comparaison des résultats expérimentaux et du modèle	10
5.2. Utilisation pour de l'extrapolation	15

1. Introduction

Cette notice a pour objectif de détailler l'utilisation de l'outil Excel pour la répliquabilité de la filière Zeus à d'autres industriels.

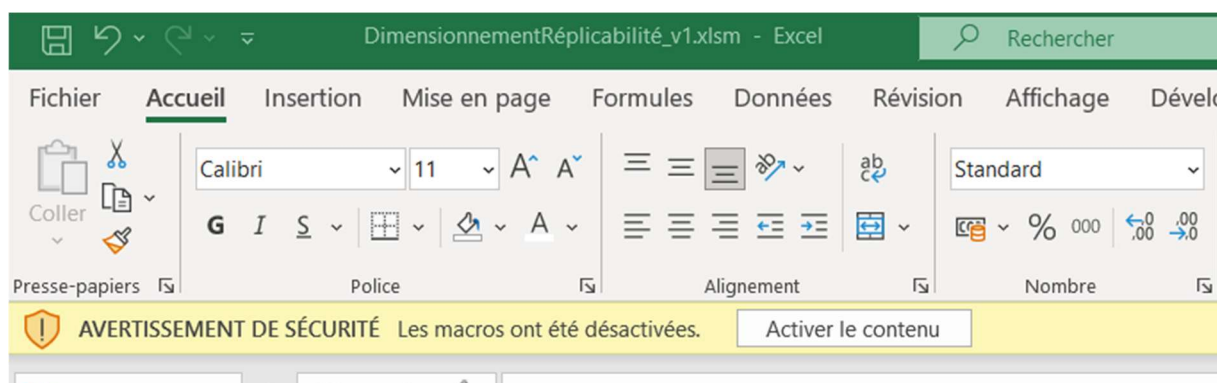
Cadre d'étude : cet outil a été réalisé à partir d'essais expérimentaux avec des effluents de l'industrie agroalimentaire riches en sucres et sels mais pauvres en matières grasses. Les industries associées sont plutôt l'industrie de la boisson et de la préparation de fruits.

Validité des modèles : Les modèles développés sont dépendants des membranes utilisées soit une microfiltration tangentielle « Crystar » en carbure de silicium (St Gobain) et une nanofiltration NF90 (Dow – Filmtec).

2. Préconisations

2.1. Activer les macros

Cet outil Excel utilise des macros, il est indispensable pour les utiliser de les activer à l'ouverture du fichier en cliquant sur « activer le contenu » :

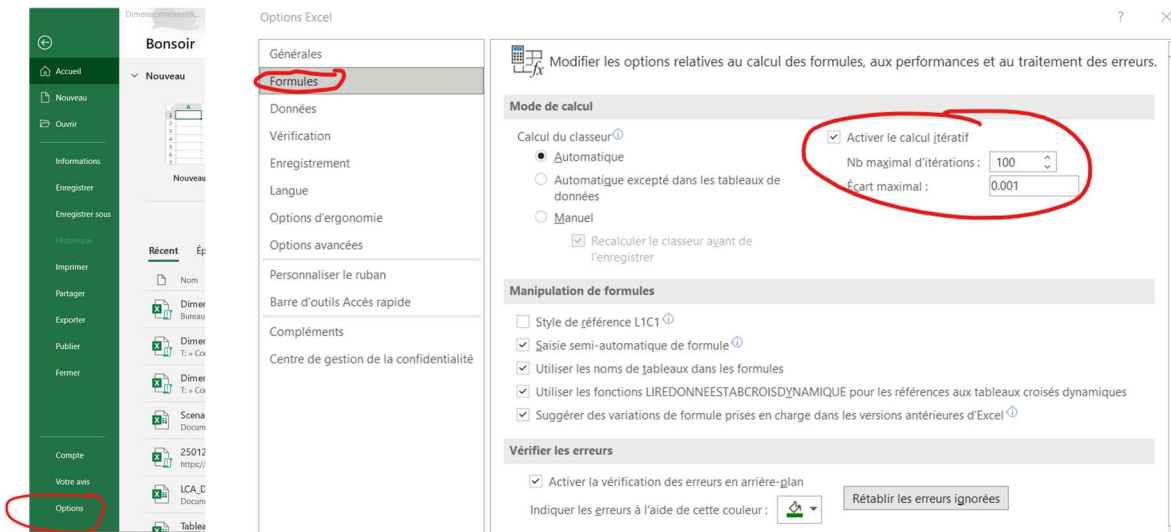


L'utilisation de macro dépend du positionnement des cellules : **NE PAS MODIFIER L'AGENCEMENT DES FEUILLES.**

2.2. Activer le calcul itératif

Aller dans Fichier / Option puis dans la fenêtre qui s'affiche dans Formule cocher « activer le calcul itératif »

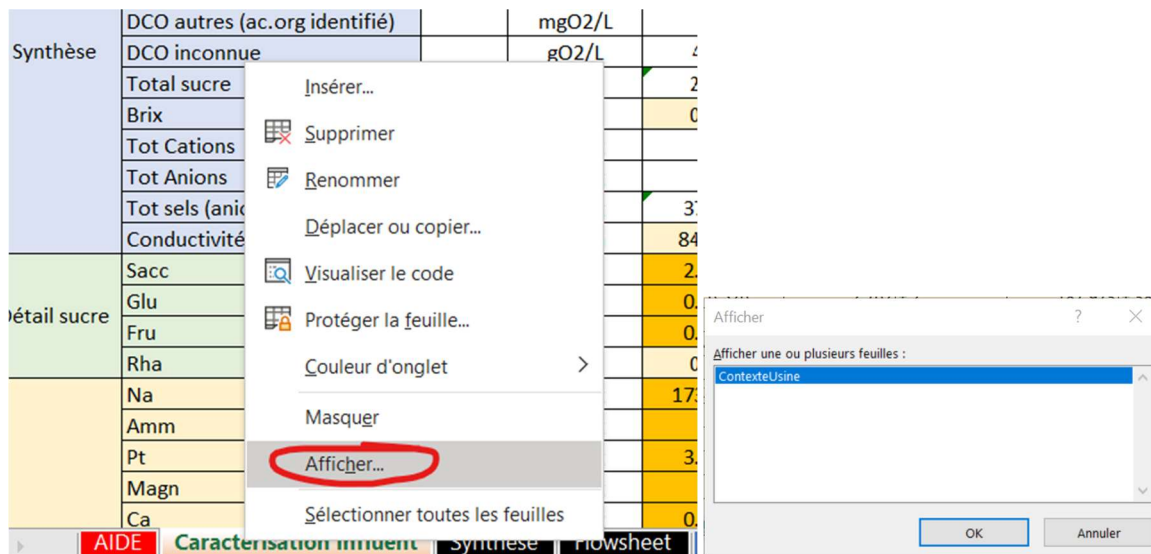
Ce calcul itératif est nécessaire uniquement pour le calcul du module d'Osmose Inverse (OI).



2.3. Pages cachées en cours de mise en place

Certains onglets ne sont pas visibles automatiquement car encore en cours de développement et donc non fonctionnel.

Pour les visualiser : clic droit sur un onglet puis « Afficher ». Un onglet est actuellement caché



3. Présentation générale

3.1. Objectifs de l'outil

Cet outil a pour but d'étudier la traitabilité de l'effluent pour sa réutilisation avec la filière testée dans le projet LIFE-Zeus : microfiltration tangentielle + nanofiltration. Deux étapes supplémentaires complètent la filière (osmose inverse et charbon actif) mais sont issues de calculs théoriques et n'ont pas été confrontées à des résultats expérimentaux.

Il n'est pas possible de changer cet enchainement d'opérations unitaires. Par contre, on peut décider de ne garder, par exemple, que les deux premières étapes.

3.2. Construction de l'outil

L'outil se présente en 6 parties avec les onglets colorés :

- Un onglet d'aide reprenant ce guide (en **rouge**).
- Une partie de caractérisation du cas d'étude (en **orange**) qui doit être complétée grâce aux analyses effectuées sur l'effluent à traiter, et, à terme, un onglet « contexte Usine » (actuellement masqué) sur les caractéristiques du site et le contexte environnemental pour permettre une pré-évaluation environnementale.
- Une synthèse de la filière proposée (en **noir**) avec un tableau de synthèse de flux et concentration attendues ainsi que les éléments de pré-dimensionnement. **< ! > Attention à ce stade ces éléments sont surtout comparatif par rapport à la solution mise en place chez Monin. Des essais réels sont indispensables avant un dimensionnement.**
(Un onglet flowsheet reprend également le bilan des flux sous format visuel).
- Une partie de dimensionnement des opérations unitaires (en **bleu**) avec la microfiltration tangentielle (MFT), la nanofiltration (NF), l'osmose inverse (OI) et le charbon actif. Ces onglets ont pour objectif de visualiser les résultats obtenus selon les données d'entrée (caractérisation effluent et taux de recyclage visé) pour chaque opération unitaire.
- Une partie de modèle et de calcul (en **vert**). Un onglet pour la MFT et un second pour la NF. Ces onglets n'ont pas à être modifiés mais peuvent être étudiés pour comprendre le fonctionnement au cours du temps des batchs.
- Une dernière partie sur la propagation d'incertitude (en **gris**).

3.3. Code couleur

Dans l'ensemble des onglets un code couleur a été instauré :

Les cases jaunes	sont des données d'entrées à remplir par l'utilisateur
Les cases jaunes claires	sont des données d'entrée à titre indicatif mais ne sont pas essentielles au calcul.
Les cases blanches	sont des calculs et ne doivent pas être modifiées

4. Guide pas-à-pas

Cette partie détaille les étapes et les onglets à remplir et/ou analyser afin d'utiliser l'outil.

4.1. Onglet Caractérisation influent

Les données en jaune doivent être remplies, si les concentrations de certaines molécules ne sont pas connues, le cas peut être vide ou égale à zéro.

A titre de comparaison l'effluent Monin est présenté en colonne G.

La ligne 43 indique la pente du test FlowerSep (FPT). Ce test permet de discriminer si le modèle de MFT peut être utilisé pour prédire le flux.

Le débit à traiter doit être indiqué en L/h dans la cellule E7.

4.2. Onglet MFT

La microfiltration tangentielle (MFT) est modélisée par un procédé batch, c'est-à-dire intermittent. La MFT va fonctionner avec un volume donné à traiter, jusqu'à obtenir une concentration de ce volume dans le concentrat.

L'objectif de Facteur de concentration volumique (FCV) en fin de batch doit être choisi en cellule B8. Le taux de recyclage équivalent est indiqué en dessous ainsi que les débits de perméat et rétentat associés. Le choix du FCV dépend des objectifs de réutilisation d'eau, des concentrations acceptables dans le concentrat mais aussi des consommations énergétiques associées.

Constantes		
R=	8.3145	J/mol/K
T=	298.15	K
Bilan matière		
Débit à traiter	100	L/h
Objectif FCV	33.9	
FCV choisi méthode	33.00	
Taux de recyclage de l'eau	97%	
Débit de perméat	97.0	L/h
Débit de rétentat	3.0	L/h
Q _{in}	100	L/h
Turbi initiale	8	NTU
Paramètres opératoires (fonctionnement batch)		
Méthode simplifiée : Flux = f(FCV)		
Pente FPT	2.40E+11	-
MODELE VALIDE		
Flux de travail intégré à PTM=1		

La partie « paramètres opératoires » utilise le modèle de flux de perméat calculé à partir du FCV. Ce modèle a pu être validé uniquement dans une gamme de pente du Flowersep (FPT). Si l'encadré vert « Modèle Valide » s'affiche, le modèle peut s'appliquer en première approche, sinon des essais expérimentaux sont indispensables pour qualifier le flux de perméat au cours du temps.

Il est de toute façon fortement recommandé de réaliser des essais pour qualifier le flux de perméat obtenu pour la MFT, car le modèle présente une forte incertitude.

4.3. Onglet NF

La module de nanofiltration est considéré également en fonctionnement batch jusqu'à obtenir une valeur cible de FCV, qui doit être indiquée en cellule B8.

Le choix du FCV dépend des besoins de volumes d'eaux réutilisés mais aussi des concentrations acceptables dans le perméat et les concentrations minimales dans le concentrat. Les concentrations de ces différents flux peuvent être retrouvées dans les colonnes J/K et M/N. La première colonne correspond à la valeur calculée avec la valeur moyenne des paramètres incertains, tandis que la seconde colonne correspond à la moyenne des simulations Monte Carlo. En effet, l'outil peut être utilisé pour quantifier la propagation des incertitudes du modèle sur la qualité des sorties. Pour cela, une approche Monte-Carlo a été utilisée, consistant à réaliser plusieurs fois le calcul avec des jeux de

paramètres incertains. Les concentrations des perméats et concentrat sont donc obtenus avec une valeur moyenne et un écart type. Plus d'information est disponible dans le paragraphe 4.5.

Constantes		
R=	8.3145	J/mol/K
T=	298.15	K
Bilan matière		
Débit à traiter	97.0	L/h
FCV	17.79	
FCV choisi	17.0	
Taux de recyclage de l'eau	94.1%	
Débit de perméat	91.26559715	L/h
Débit de rétentat	5.7	L/h
taux de réutilisation global MFT + NF	91.3%	
FCV global	11.45	

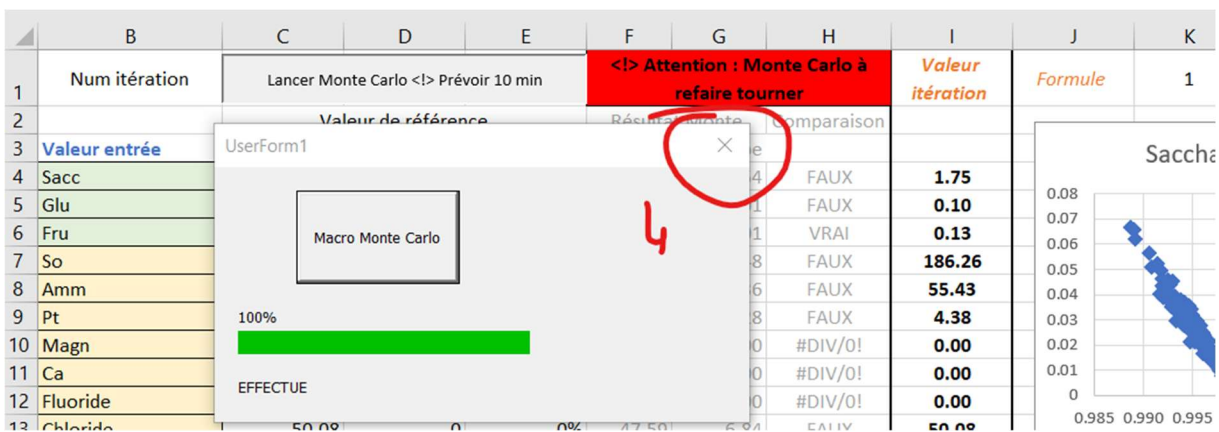
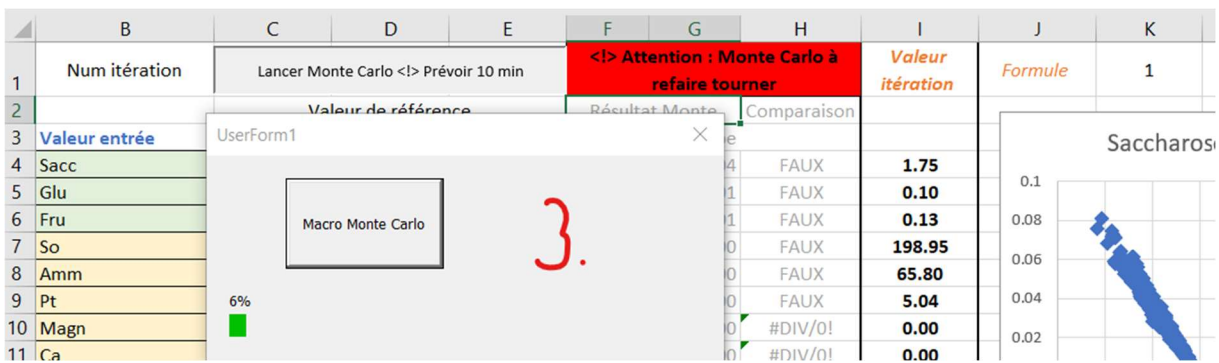
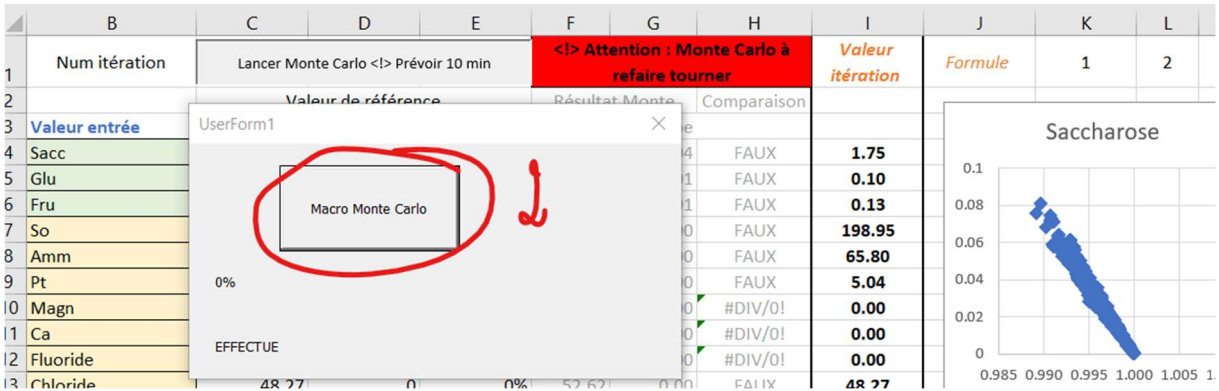
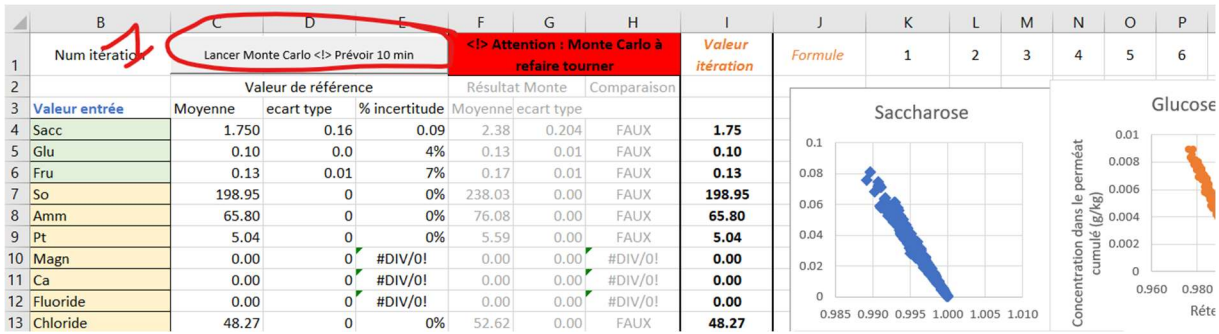
On doit ensuite choisir le mode d'ajustement de la pression en cellule B22 : soit variable soit moyenne. De manière générale une pression constante est à privilégier (remplir cellule F19, et supprimer les valeurs du tableau de PTM variable), mais dans des cas de comparaison avec des suivis expérimentaux, il peut être utile de pouvoir modéliser des paliers de pression.

Paramètres opératoires		
Δ posm alim	0.7	bar
Δ posm fin cycle	10.1	bar
Perméabilité intégrée	2.21	L/h/m ² /bar
PTM	variable	
Flux de travail moyen	moyenne	
S membrane	variable	
Vitesse tangentielle visée	1	m/s

Dans le cas de pression PTM variable, le tableau à droite doit être rempli avec les pressions associées à chaque palier.

Paramètres opératoires		
Δ posm alim	0.7	bar
Δ posm fin cycle	10.1	bar
Perméabilité intégrée	2.21	L/h/m ² /bar
PTM	variable	
Flux de travail moyen	22.5	L/h/m ²
S membrane	4.0	m ²
Vitesse tangentielle visée	1	m/s

Remplir tableau ci dessous	FCV min	FCV Max	PTM
	1	4.6	10
	4.6	7.8	14
	7.8	14.9	16
	14.9	50	20



4.6. Onglet Synthèse

Cet onglet récapitule les résultats de toutes les feuilles précédentes avec les résultats présentés sous forme de flux et de concentrations.

4.1. Onglet Flowsheet

Cet onglet permet de visualiser les résultats de la synthèse sous forme de flowsheet c'est-à-dire de diagramme de flux où l'épaisseur des traits est proportionnelle à la valeur du flux.

Deux flowsheets sont disponibles soit la répartition de la DCO (sucre, autres) soit par composés (saccharose, glucose, AGV...). Pour les mettre à jour, cliquer sur le bouton correspondant intitulé « MAJ Flowsheet ».

4.2. Onglet MoninComp

Cet onglet sert d'exemple pour illustrer une comparaison entre des résultats expérimentaux et les résultats du modèle. Les résultats expérimentaux affichés sont ceux des essais avec l'effluent Monin.

Les résultats du modèle se mettent à jour automatiquement, et il faut donc avoir mis dans l'onglet « Caractérisation influent » les caractéristiques de l'effluent de Monin, puis avoir fait tourner l'ensemble des macros précédentes.

5. Exemple avec le cas Monin

Le cas Monin est utilisé comme exemple. Cependant, en raison d'une inversion (hydrolyse) du saccharose en glucose/fructose pendant la MFT, la caractérisation du perméat de MFT a été utilisée en entrée du modèle au lieu de la caractérisation de l'effluent réel à traiter. (Les données sont disponibles en colonne H de l'onglet « Caractérisation influent »).

5.1. Comparaison des résultats expérimentaux et du modèle

Dans cette première partie, l'outil est utilisé pour comparer les résultats du modèle avec les résultats expérimentaux. Les mêmes conditions opératoires vont donc être appliquées (FCV, pression, etc...)

Pour commencer les données de caractérisation sont intégrées dans l'onglet « Caractérisation influent », comme ci-dessous.

	A	B	C	D	E
1	Caractérisation Influent				
2					
3					Monin - Perméat MFT
4					Essai 7 -8
5					Eff2104
6		Paramètres	Eq DCO	Unité	Valeurs
7		Débit		L/h	100.0
8		pH		pH	7.66
9	Synthèse	Masse sèche		g/kg	7.1
10		Matières en suspension		g/L	0.1
11		Turbidité		NTU	2
12		DCO Totale		mgO2/L	7 640
13		DCO sucre		mgO2/L	6818
14		DCO autres (ac.org identifié)		mgO2/L	247
15		DCO inconnue		gO2/L	575
16		Total sucre		g/kg	6.28
17		Brix			0.30
18		Tot Cations		mg/kg	
19		Tot Anions		mg/kg	
20	Tot sels (anions + cations)		mg/kg	237.2	
21	Conductivité		µS/cm	496.00	
22	Détail sucre	Sacc	1.12	g/kg	1.960
23		Glu	1.07	g/kg	1.940
24		Fru	1.07	g/kg	2.380
25		Na		mg/kg	127.437

Dans l'onglet « MFT », l'objectif de FCV est fixé à 10.9 comme la fin de l'expérience. A noter que le calcul se fait pour un FCV arrondi à l'inférieur, ici FCV =10, soit un taux de recyclage de 90%.

Sur la durée de l'expérience, le modèle calcule un flux moyen de perméat de 109.7 L/h/m², et une surface de 0.8 m² pour traiter 100 L/h.

	A	B	C	D
1	Constantes			
2	R=	8.3145	J/mol/K	
3	T=	298.15	K	
4				
5	Bilan matière			
6	Débit à traiter	100	L/h	
7				
8	Objectif FCV	10.9		
9	FCV choisi méthode	10.00		
10	Taux de recyclage de l'eau	90%		
11				
12	Débit de perméat	90.0	L/h	
13	Débit de rétentat	10.0	L/h	
14	Q _{in}	100	L/h	
15	Turbi initiale	2	NTU	
16				
17	Paramètres opératoires (fonctionnement batch)			
18				
19	Méthode simplifiée : Flux = f(FCV)			
20	Pente FPT	2.40E+11	-	
21	MODELE VALIDE			
22	Flux de travail intégré à PTM=1 bar	109.7	L/h/m ²	
23	S membrane	0.8	m ²	

Pour la nanofiltration, le FCV est de 18 soit 94.4% de taux de recyclage de l'eau. La PTM a varié pendant l'essai, le tableau est ainsi mis à jour.

Pendant les essais, il n'y a pas eu d'essai avec une OI supplémentaire. La recirculation de l'OI vers la NF est donc mise à 0.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Constantes								
2	R=	8.3145	J/mol/K						
3	T=	298.15	K						
4									
5	Bilan matière								
6	Débit à traiter	90.0	L/h						
7	FCV	18.00							
8	FCV choisi	18.0							
9	Taux de recyclage de l'eau	94.4%							
10								Q alim = 90.0	
11									
12	Débit de perméat	85	L/h						
13	Débit de rétentat	5.0	L/h						
14									
15	taux de réutilisation global MFT + NF	85.0%							
16	FCV global	6.67							
17									
18	Paramètres opératoires								
19	Δposm alim	0.9	bar						
20	Δposm fin cycle	15.7	bar						
21	Perméabilité intégrée	1.50	L/h/m ² /bar	attention risque d					
22	PTM	variable							
23	Flux de travail moyen	16.3	L/h/m ²						
24	S membrane	5.2	m ²						
25	Vitesse tangentielle	1	m/s						
26									
27	Concentration								
28	Recirculation OI (0)	Recirculation OI							
29	0	36.342	OK						
30	Paramètres	Conc molaire g/l	Eq DCO	Unité		Permeat MFT	Recir OI Conc	Alim	Alim MonteCarlo Pe
31	P osmotique			bar		0.92	0.21	0.9	0.9

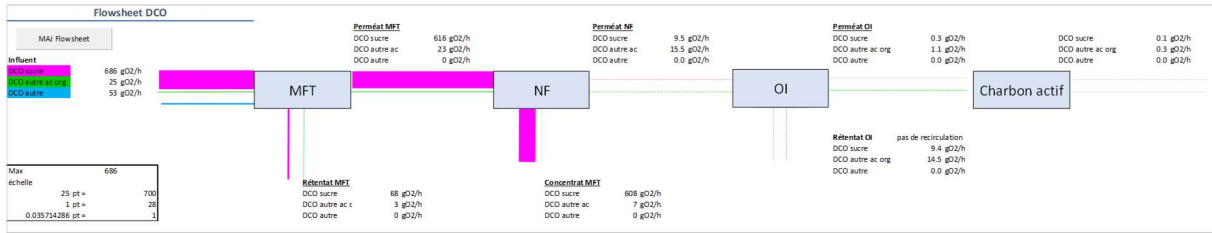
Les résultats montrent que la combinaison MFT+NF permet de récupérer 85% de l'eau traitée (cellule B15)

L'analyse Monte Carlo est ensuite mise en œuvre.

A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	Num itération	Lancer Monte Carlo <> Prévoir 10 min			Monte Carlo déjà exécuté			Valeur itération
2		Valeur de référence			Résultat Monte		Comparaison	
3	Valeur entrée	Moyenne	ecart type	% incertitude	Moyenne	ecart type		
4	Sacc	1.960	0.17	0.09	1.96	0.174	VRAI	1.96
5	Glu	1.94	0.1	4%	1.94	0.08	VRAI	1.94
6	Fru	2.38	0.14	6%	2.39	0.14	VRAI	2.38
7	So	127.44	0	0%	127.44	0.00	VRAI	127.44
8	Amm	5.60	0	0%	5.60	0.00	VRAI	5.60
9	Pt	3.97	0	0%	3.97	0.00	VRAI	3.97
10	Magn	0.34	0	0%	0.34	0.00	VRAI	0.34
11	Ca	6.84	0	0%	6.84	0.00	VRAI	6.84
12	Fluoride	0.00	0	#DIV/0!	0.00	0.00	#DIV/0!	0.00
13	Chloride	13.05	0	0%	13.05	0.00	VRAI	13.05
14	Nitrite	4.25	0	0%	4.25	0.00	VRAI	4.25
15	Sulfate	47.61	0	0%	47.61	0.00	VRAI	47.61
16	Bromide	0.00	0	#DIV/0!	0.00	0.00	#DIV/0!	0.00

Les résultats peuvent être analysés dans les onglets « Synthèse », « Flowsheet » (après avoir mis à jour les diagrammes en appuyant sur les 2 boutons) et « MoninComp ».

Bien que l'OI et le charbon actif n'aient pas été testés, le modèle calcule leur efficacité et ils sont donc représentés dans les flowsheet (voir exemple ci-dessous).



Les résultats montrent que 98,5% du flux de sucre se retrouve dans les rétentats NF et MFT. Les plus petites molécules comme les alcools, les AGVs traversent plus la nanofiltration puisque seulement 40% sont retenus dans les rétentats NF et MFT. En analysant les flux par composé, l'éthanol est la principale fuite puisque 78% se retrouve dans le perméat NF.

Les résultats de l'onglet « Synthèse » montrent également des écarts-types relatifs beaucoup plus importants sur la composition du perméat (environ 100%) que sur la composition du rétentat de NF (environ 17%). Toutefois les valeurs absolues des écarts-types sont plus faibles pour le perméat que pour le rétentat du fait de beaucoup plus faibles valeurs de concentrations.

Flux

Paramètres	Unité	Influent	Perméat MFT	Rétentat MFT	Perméat NF	Rétentat NF	Perméat OI	Rétentat OI	DCO autres	Rétentat AC	Effluent	Rétentat NF + OI
DCO sucrose	gO ₂ /h	25	9.5	608	616	0	0	0	0	0	0	0
DCO autres ac	gO ₂ /h	53	15.5	7	15.5	0	0	0	0	0	0	0

Concentrations

Eq DCO	Unité	Influent	Perméat MFT	Rétentat MFT	Perméat NF	Rétentat NF	Perméat OI	Rétentat OI	DCO autres	Rétentat AC	Effluent	Rétentat NF + OI
DCO sucrose	gO ₂ /h	25	9.5	608	616	0	0	0	0	0	0	0
DCO autres ac	gO ₂ /h	53	15.5	7	15.5	0	0	0	0	0	0	0

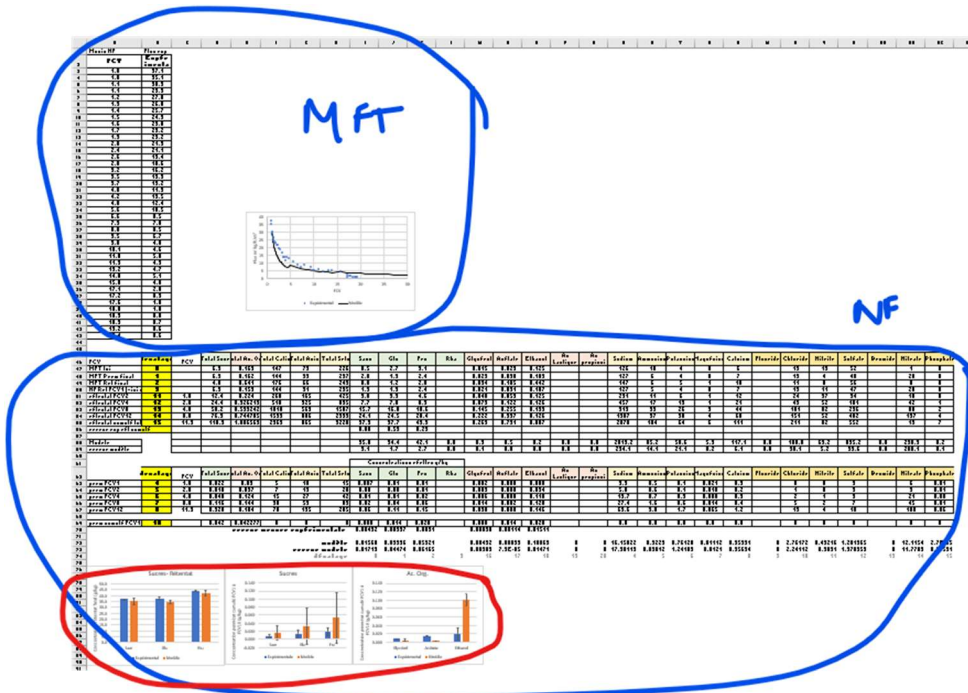
S&B

DCO

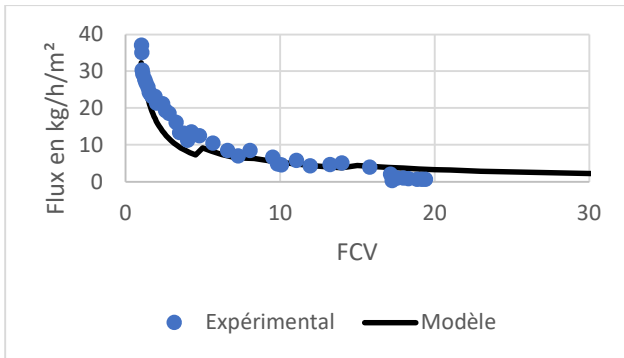
Concentration Perméat NF (sucrose et ac. Org)

Concentration Rétentat NF (sucrose et ac. Org)

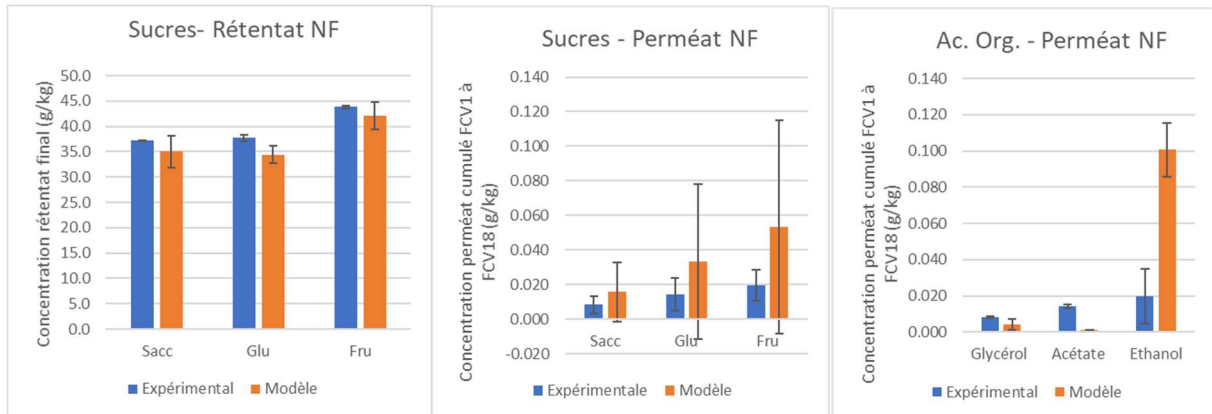
Enfin, l'onglet « MoninComp » permet de comparer directement les résultats expérimentaux et les résultats du modèle. Une première partie concerne les résultats de la MFT puis une seconde partie, les résultats de la NF.



On voit ainsi que le flux de perméat de la MFT est correctement modélisé même si manquant de précision sur la première partie de la manipulation.



Côté NF, le modèle représente relativement bien les concentrations dans le rétentat avec une légère tendance à sous-estimer. Tandis que la précision des concentrations de sucre dans le perméat est faible même si incluant les valeurs mesurées. Les valeurs des acides organiques sont moins bien représentées notamment l'acétate et l'éthanol. Ces deux composés ont été identifiés comme ayant des comportements plus difficiles à modéliser.



5.2. Utilisation pour de l'extrapolation

L'outil peut être aussi utilisé pour extrapoler des situations futures comme :

- Une réduction des sels de l'effluent à traiter en raison de la recirculation d'eaux osmosées à la place d'eau potable du réseau
- Une augmentation de la quantité d'eau produite en jouant sur les FCV
- Déterminer les FCV minimum pour atteindre une concentration dans le rétentat en mélange
- ...

L'outil a vocation à être utilisé par les équipes INSA, et notamment les deux CRITTs (Procédés & Environnement et Bio-Industries) dans le cadre d'études de faisabilité de recyclage d'eau soumises par des entreprises.