

50376
1988
259



50376
1988
259

N° d'ordre : 296

THESE

présentée à

**L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE
FLANDRES ARTOIS**

pour l'obtention du titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité: Productique, Automatique et Informatique Industrielle
par

Abdelaziz NAKRACHI

CONTRIBUTION A LA MODELISATION ET L'IDENTIFICATION DE LA FERMENTATION METHANIQUE

Soutenu le 20 décembre 1988 devant la commission d'Examen :

MR P. VIDAL
Mme A. CHERUY
MM. R. LAURENT
L. POVY
J. GUILLAUME
J.G. POSTAIRE
P. MALLART

Président
Rapporteur
Rapporteur
Directeur de Recherche
Examineur
Examineur
Invité

AVANT - PROPOS

Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au centre d'Automatique de l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois.

Je tiens à remercier Monsieur le professeur Pierre VIDAL pour l'accueil qu'il m'a réservé dans son laboratoire et pour l'honneur qu'il me fait de présider le jury de cette thèse.

Je tiens à exprimer mes remerciements et ma profonde reconnaissance à Monsieur le professeur Lucien POVY pour son rôle stimulant qui a permis la valorisation de ce travail et pour son attention toujours soutenue, tant sur le plan humain que sur le plan scientifique.

J'adresse mes vifs remerciements à Monsieur Robert LAURENT, maître de conférence à l'Université de Lille1, pour ses encouragements et ses conseils permanents. Sa participation au jury m'honore grandement.

Que Madame Arlette CHERUY, professeur à l'Institut National Polytechnique de Grenoble, accepte mes vifs remerciements pour ces remarques enrichissantes et pour avoir accepté de juger ce travail.

J'ai été sensible à l'honneur que me fait Monsieur Jean GUILLAUME, professeur à l'Université de Lille1, de participer au jury. Je le remercie sincèrement.

La présence dans le jury de Monsieur Jacques-Gérard POSTAIRE, professeur à l'Université de Lille1, me fait grandement plaisir. Je tiens à lui exprimer ma profonde reconnaissance pour l'intérêt qu'il porte à ce travail.

A Monsieur Patrice MALLART, directeur scientifique de Gist - Brocades, j'adresse mes remerciement pour sa participation au jury.

Enfin, je remercie Mademoiselle Christine DEPAUW pour son soutien moral et son aide linguistique. Je remercie également tous les amis avec qui j'ai passé de très bons moments.

PREMIERE PARTIE

LE PROCESSUS

HISTORIQUE	3
I - PRESENTATION DU PROCESSUS	
I.1- INTRODUCTION	6
I.2- LIQUEFACTION ACIDOGENE	8
I.2.1- Hydrolyse enzymatique	8
I.2.2- l'acidogénèse	8
I.3- L'ACETOGENESE	9
I.4- LA METHANOGENESE	9
II- INFLUENCE DE QUELQUES FACTEURS SUR LA FERMENTATION METHANIQUE	
II.1- FACTEURS CHIMIQUES	11
II.1.1- les Acides Gras Volatils	11
II.1.2- le pH	11
II.1.3- les cations	12
II.1.4- l'amoniac	12
II.1.5- le gaz carbonique	12
II.2- FACTEURS PHYSIQUES	13
II.2.1- La température	13
II.2.2- L'hydrogène	14
II.2.3- Le temps de séjour hydraulique	14
II.2.4- L'agitation	15
III- TECHNIQUES DE MESURES ET PROCEDES	
III.1- INTRODUCTION	16
III.2- LES TECHNIQUES DE MESURES	16
III.2.1- Les substrats	16
III.2.1.1- La D.C.O.	17
III.2.1.2- Matière sèche et matière organique	17
III.2.1.3- Méthode de VAN SOEST	17
III.2.2- Les acides gras volatils	18
III.2.3- Le biogaz	18
III.2.4- Les populations bactériennes	19
III.2.5- Le pH et la température	20
III.3- LES PROCEDES	21
III.3.1- Grandeurs caractérisant une installation	21
III.3.2- Type de fermenteurs	22
III.3.2.1- Première génération	22
III.3.2.2- Seconde génération	23
III.3.3- Séparation des phases	24
CONCLUSION	25
BIBLIOGRAPHIE	26

DEUXIEME PARTIE
LA MODELISATION

PREAMBULE	30
I- MODELISATION DES PROCESSUS	
I.1- BUT DE LA MODELISATION	32
I.1.1- Modèle de connaissance	33
I.1.2- Modèle de conduite	33
II- LA MODELISATION EN BIOTECHNOLOGIE	
II.1- CINETIQUE ENZYMATIQUE	35
II.1.1- Sans inhibition	35
II.1.2- Avec inhibition	37
II.1.2.1- Inhibition compétitive	37
II.1.2.2- Inhibition par le substrat	38
II.2- CINETIQUE DE CROISSANCE	38
II.2.1- Sans inhibition	40
II.2.1.1- Modèle de TEISSIER	40
II.2.1.2- Modèle de MONOD	41
II.2.1.3- Loi logistique	43
II.2.1.4- Modèle de CONTOIS	44
II.2.2- Avec inhibition	45
II.2.2.1- Modèle d'ANDREWS	45
II.2.2.2- Modèle de HILL et BARTH	46
III. MODELISATION DE LA FERMENTATION METHANIQUE	
III.1- ETUDE GRAPHIQUE DE L'ACIDOGENESE	49
III.1.1- La croissance des micro-organismes	53
III.1.2- La dégradation du substrat	60
III.1.3- La biosynthèse du produit	62
III.2- LA METHANOGENESE	64
III.2.1- La croissance des micro-organismes et la biosynthèse de produit	66
III.2.2- Modèle de dégradation	66
III.2.3- Application à la méthanogénèse	68
III.3- LA FERMENTATION EN CONTINU	69
CONCLUSION	70
BIBLIOGRAPHIE	71

TROISIEME PARTIE
IDENTIFICATION DES PARAMETRES

INTRODUCTION	74
IDENTIFIABILITE	74
I- METHODES PARAMETRIQUES	
I.1- Méthodes stochastiques.....	76
I.2- Méthodes graphiques	77
I.3- Méthodes du modèle.....	77
I.3.1- Critère.....	78
I.3.2- Mécanisme d'ajustement.....	78
I.3.3- Programmation non linéaire	79
II- MINIMISATIONS UNIDIMENSIONNELLES	
II.1- Méthodes utilisant les dérivées	80
II.2- Sans calcul de dérivées.....	81
II.3- Recherches unidimensionnelles économiques	81
III- MINIMISATION SANS DERIVATION	
III.1- Méthodes de scrutations cyclique (Axe par Axe).....	83
III.2- Méthodes de Powell	84
Conclusion	86
IV- DERIVATION DU CRITERE	
Introduction	87
IV.1- Méthode de calcul des dérivées.....	88
IV.2- Calcul des équations aux variations.....	89
V- METHODES AVEC CALCUL DES DERIVEES	
V.1- Méthodes de plus forte pente.....	92
V.2- Méthodes des directions conjuguées	93
V.3- Méthodes de métriques variables	95
V.4- Applications	96
Conclusion	99
VI- DECOMPOSITION DYNAMIQUE DE L'ESPACE PARAMETRIQUE	
VI.1- Les fonctions de sensibilités.....	100
VI.2- Coefficient de ressemblance.....	105
VI.3- Détermination dynamique des sous-espaces.....	106
VI.4- Algorithme d'identification	112
VI.5- Applications	113
Conclusion	127
BIBLIOGRAPHIE	128
CONCLUSION	131
ANNEXE	133

INTRODUCTION

Du point de vue écologique, le processus de fermentation méthanique est très utile par ces capacités d'épuration. En effet, il permet d'éliminer des déchets organiques liquides ou solides dont le rejet automatique dans la nature nuirait à bon nombre d'êtres vivants. En outre, cette élimination s'accompagne de dégagement d'un mélange gazeux combustible, donc utilisable en tant que source d'énergie. Néanmoins, la fermentation méthanique reste un système très complexe. D'abord, elle fait intervenir les trois états de la matière (gaz, liquide et solide) et, de plus, les populations de micro-organismes qui s'y rencontrent sont très diverses et exigent des conditions physico-chimiques très strictes.

L'exploitation de ce phénomène se fait généralement en continu et s'organise de mieux en mieux. La tendance actuelle va vers son automatisation. Cependant, la majorité des auteurs qui s'intéressent aux problèmes de commande de cette fermentation utilisent principalement le modèle de Monod ou celui d'Andrews, qu'ils complètent par deux équations proportionnelles à la première pour représenter la dégradation du substrat et la biosynthèse de produit [42]. Or, l'examen d'une fermentation en batch nous a incité à remettre en cause cette représentation et à reconsidérer l'étude de la fermentation méthanique depuis le début, à savoir, la mise en équation à l'échelle du laboratoire avant de passer au stade supérieur où l'automatisation fait intervenir, entre autres, l'étude de la partie hydraulique (agitation ou brassage, décantation, recyclage, etc...). Dès lors, la caractérisation du processus devient primordiale. Elle s'effectue comme suit :

L'observation du processus qui fait l'objet de la première partie de ce travail, fait apparaître la complexité des phénomènes qui régissent cette fermentation ainsi que le manque de connaissances et de possibilités d'observations qui en résulte.

La deuxième partie traite de la modélisation d'un tel processus. Dans cette partie, nous passons en revue quelques modèles en indiquant leur insuffisance à représenter cette fermentation. Ensuite, nous abordons la modélisation à laquelle nous nous sommes risqués malgré le peu d'observations dont nous disposions.

Enfin, avec la troisième partie réservée à l'identification des paramètres contenus dans les expressions des modèles obtenus, nous proposons une dérivation analytique du critère de minimisation ainsi qu'un algorithme de décomposition dynamique de l'espace paramétrique.

PREMIERE PARTIE

LE PROCESSUS

HISTORIQUE [3],[4],[5]

Le dégagement naturel du méthane dans les sédiments des lacs et des mares est un phénomène observé depuis bien longtemps, mais c'est SHERLEY qui, en 1667, en fera officiellement la découverte. Un siècle plus tard, VOLTA mentionnera la présence du phénomène dans le gaz des marais et découvrira la relation entre la biodégradabilité de la végétation et l'apparition de combustible gazeux. Ce ne sera pourtant qu'au début du XIX^{ème} siècle que l'homme commencera à exploiter ce phénomène pour atteindre différents objectifs :

- 1808, le chimiste anglais Hymphrey DAVY récupère du méthane par digestion anaérobie à partir du lisier de bovins, alors qu'il était plutôt intéressé par la comparaison des valeurs fertilisantes respectivement de lisiers digérés et de lisiers non digérés.

- 1857, construction aux Indes, dans une léproserie près de Bombay, de la première installation de production de gaz combustible par fermentation. Cette installation était à proximité des fumiers en décomposition.

- 1884, Louis PASTEUR présente à l'Académie des Sciences, les travaux de son élève Ulysse GAYON . Celui-ci a réalisé la fermentation anaérobie d'un mélange de fumier et d'eau à 35°C et a mis en évidence l'action sur le fumier et la cellulose pure "d'organismes infiniment petits et anaérobies provoquant le dégagement d'acide carbonique (CO₂) et de protocarbure d'hydrogène (CH₄)" [18]. Ulysse GAYON en a conclu que cette fermentation pourrait devenir une source d'énergie utilisable pour le chauffage et l'éclairage.

- 1895, Donald CAMERON construit le premier digesteur de boues des eaux résiduaires de la ville d'Exter en Angleterre. Le gaz formé sert alors à éclairer les rues de la ville et à faire tourner des machines à vapeur. C'est dans le traitement de boues résiduaires des stations d'épuration que la fermentation méthanique a connu son plus important développement, puisque la digestion anaérobie est devenue le stade final du système d'épuration.

Le développement de ce processus biologique, en vue de produire de l'énergie, est resté jusqu'à présent assez limité bien que des installations de fermentations aient été

construites dans ce but. La réalisation entre autres exemples d'une installation basée sur un procédé de fermentation discontinu de fumier à l'école d'Alger vit le jour en 1949 grâce aux travaux d'ISMAN et DUCELLIER, travaux effectués entre 1940 et 1950. Le gaz formé était utilisé pour le fonctionnement d'un internat de 200 personnes, de deux voitures et deux tracteurs.

A la même époque ainsi qu'au cours des années qui suivirent, de nombreuses stations de digestion anaérobie ont vu le jour aux Etats Unis pour le traitement d'ordures ménagères. L'arrivée du pétrole abondant et bon marché a freiné par la suite cet élan et a causé l'abandon des centaines d'installations construites en France au cours des années cinquante. Cependant, vers les années soixante-dix, l'élevage a subi de profondes modifications structurelles qui ont engendré, par là même, des problèmes de pollution. Ajoutons à cela le choc pétrolier et les pays industrialisés décident alors de mettre en place des programmes de recherches et de développement dans ce domaine. Ainsi, depuis 1978 le C.O.M.E.S.(Commissariat à l'Energie Solaire) participe financièrement en France à de nombreuses recherches et à l'installation de digesteurs de fermentation méthanique.

De nos jours, le développement de petites unités de fermentation de fumier dans le but de produire de l'énergie reste lent et ce malgré l'apparition de procédés "modernes" de méthanisation de lisiers, commercialisés par de grandes sociétés telles que ELF Bioindustrie, Air Liquide etc... Cette lenteur provient certainement de problèmes d'investissements vu que l'achat d'une unité de fermentation reste assez onéreux pour un agriculteur moyen. Néanmoins, le nombre d'installations artisanales ne cesse d'augmenter dans certains pays en voie de développement. Ainsi, aux Indes et en Chine plusieurs millions de digesteurs assurent une partie du chauffage et de l'éclairage en zones rurales. En revanche, la digestion anaérobie connaît des progrès et des applications remarquables dans le domaine de la dépollution, son insertion dans la chaîne des opérations de traitement des eaux résiduaires permet, à partir du gaz produit, d'alléger les dépenses énergétiques des stations d'épuration. Ainsi l'usine d'épuration des eaux usées de la ville de Paris arrive à couvrir 70% de ses besoins énergétiques grâce aux 140.000 m³ de gaz produit quotidiennement dont 65% de méthane. En outre, le méthane de la station d'Achère faisait tourner 15 moteurs de 750 à 1500 CV, quelques uns d'entre eux étaient couplés avec des alternateurs de 850 à 1200 kW, ce qui fait que la station entière tirait son énergie de son propre méthane [30]. Par ailleurs, de nombreux laboratoires travaillent à la mise au point de procédés nouveaux pour traiter de nombreux effluents d'industries alimentaires, effluents riches en matières organiques biodégradables. Dans ce but, plusieurs laboratoires ont mené divers essais :

- pour le traitement d'effluents d'abattoirs
- pour le traitement d'eaux résiduaires de distilleries [10].
- et la station de l'I.N.R.A. à Villeneuve d'Ascq, pour le traitement d'effluent de conserveries et d'effluents de levureries ([1],[6],[26]).

Pour l'instant cependant, ces essais se heurtent à des problèmes de stabilisation du procédé pouvant parfois conduire à un arrêt total de la méthanogénèse. De plus, ce sont les problèmes soulevés par la mise au point de digesteurs de taille industrielle qui, en partie, ont incité des biochimistes et des microbiologistes à s'intéresser aux phénomènes biologiques et biochimiques qui régissent ce processus. Plus récemment encore, et à cause des difficultés de régulation, des équipes d'autres disciplines se sont jointes à ces chercheurs pour pallier ces difficultés.

Notons, pour conclure que cet historique, à défaut d'être exhaustif, a le mérite de montrer l'intérêt que porte l'homme à l'utilisation de ce phénomène, utilisation qui est restée comme nous l'avons dit empirique jusqu'à un passé récent. Dans la partie suivante, nous allons présenter l'état actuel des connaissances sur la fermentation méthanique, où l'on se rendra compte que de nombreux points restent obscurs dans la compréhension d'un phénomène qui n'est l'objet de recherches fondamentales que depuis une vingtaines d'années.

I PRESENTATION DU PROCESSUS

I.1- INTRODUCTION

Toute substance organique est susceptible de subir un certain nombre de transformations complexes appelées fermentations. Celles-ci peuvent être considérées d'un point de vue biotechnologique comme étant l'action de micro-organismes sur un substrat dont les principaux aspects sont : [16]

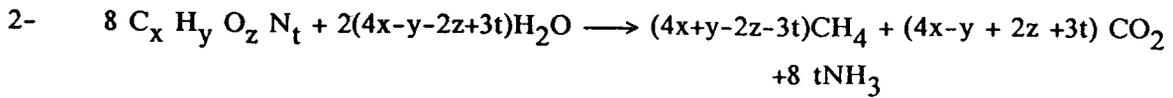
- Elimination de substrat
- Production de biomasse
- Biosynthèse de produit.

Cette substance organique possède une énergie potentielle qui peut être libérée totalement ou partiellement par son oxydation. En l'occurrence nous pouvons donner de la fermentation méthanique cette définition : [33]

"En l'absence complète d'oxygène, une communauté microbienne composée de populations d'espèces différentes agissant en symbiose, est capable de récupérer et de conserver cette énergie potentielle d'oxydoréduction par un jeu complexe de réactions biochimiques. Dans lesquelles une partie de la matière organique est oxydée en anhydride carbonique (CO₂), tandis qu'une autre partie est réduite en méthane".

Cette transformation peut se résumer en l'une ou l'autre de ces équations suivant la nature de la matière organique : [14],[15]





D'autres équations ont été proposées dont l'une tient compte de la DCO (Demande Chimique en Oxygène) [17]. Cependant, quelle que soit l'équation retenue, trois phases sont nécessaires à la réalisation totale de cette transformation (fig A.1)

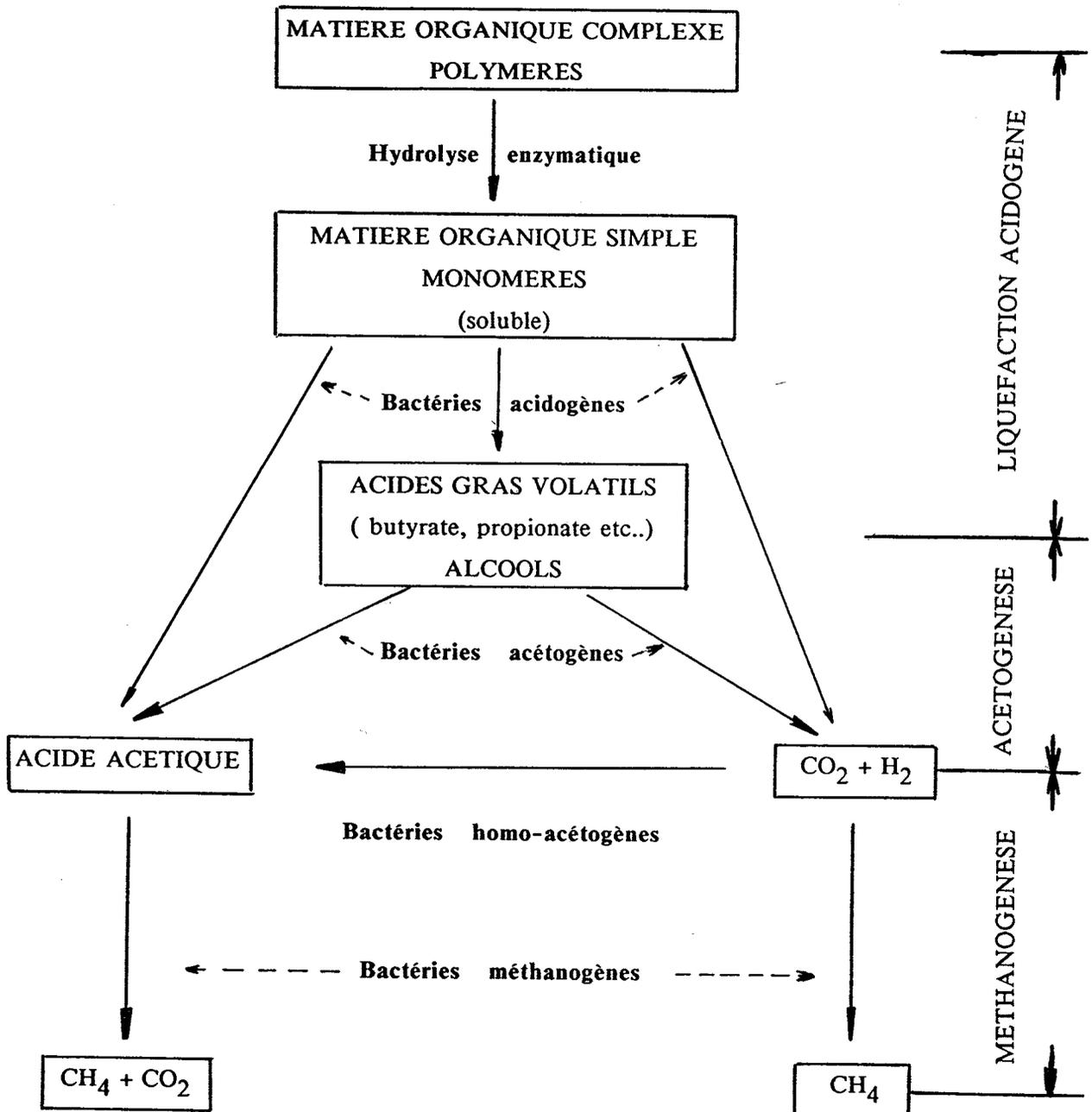


Figure A.1 : Schéma générale de la fermentation méthanique

I.2- LIQUEFACTION ACIDOGÈNE

Les bactéries responsables de cette phase sont des anaérobies facultatives, elles peuvent vivre en présence ou en absence d'oxygène. Nous pouvons considérer celle-ci comme étant le résultat de deux sous-phases généralement indissociables : l'hydrolyse enzymatique et l'acidogénèse.

I.2.1- Hydrolyse enzymatique

Les bactéries acidogènes ne peuvent assimiler que des molécules simples (monomères) pour leur croissance. Mais comme elles sont généralement en présence de molécules complexes ou polymères telles que la cellulose et les hémicelluloses, une transformation de ces dernières s'avère nécessaire à leur assimilation. À cette fin, un certain nombre de bactéries acidogènes sont capables de produire des enzymes catalysant l'hydrolyse des polymères en monomères solubles, transportables au travers des membranes de bactéries. Cette dégradation est un processus complexe qui nécessite la participation de nombreux enzymes. Ce qui fait que, dans bon nombre de cas, le mécanisme reste mal défini.

I.2.2- L'acidogénèse

Ce sont ces mêmes bactéries acidogènes qui utilisent les monomères résultant de l'hydrolyse comme substrat pour leur développement. Cette communauté bactérienne produit une grande variété de métabolites. En outre, si l'on tient compte des voies de transformation empruntées par chacun d'eux, on peut les classer en deux catégories.

a - Une première catégorie comprend l'acétate, le dioxyde de carbone (CO_2), l'hydrogène et éventuellement le méthanol et le formiate. Notons que ces deux derniers produits n'apparaissent qu'en très faible quantité.

b - La seconde catégorie concerne les acides gras volatils à longues chaînes carbonées : Propionate, butyrate, valérate, etc...

Cette deuxième catégorie constitue le principal métabolite intermédiaire de la fermentation méthanique.

I.3- L'ACETOGENESE

Pendant longtemps, on a considéré que les bactéries méthanogènes pouvaient assimiler l'ensemble des métabolites intermédiaires issus de l'acidogénèse. Mais progressivement, des études microbiologiques sur les bactéries méthanogènes ont clairement montré que celles-ci ne peuvent utiliser, comme substrat en culture pure, que l'acétate et le formiate pour les acides, le méthanol pour les alcools et le mélange H_2-CO_2 [12]. Cela présumait l'existence de bactéries capables de transformer les A.G.V. à longues chaînes en acétate, formiate et H_2-CO_2 . Effectivement, l'existence de ces bactéries acétogènes a été mise en évidence et elles sont désormais appelées O.H.P.A.: Obligat Hydrogen Producing Acetogenic bacteria (Bactéries Acétogènes Productrices Obligées d'Hydrogène).

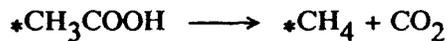
Les réactions d'acétogénèse qui transforment les A.G.V., ne sont thermodynamiquement favorables que lorsque la pression partielle d'hydrogène est très basse. La réalisation de cette condition nécessite la présence d'autres bactéries utilisatrices d'hydrogène, telles que les méthanogènes, et pouvant se développer en symbiose avec les acétogènes. Ceci engendre des difficultés pour isoler ces bactéries en culture pure, ce qui explique en conséquence qu'elles soient mal connues et très peu étudiées des microbiologistes. L'étude de cette phase n'est pas suffisamment développée certes, mais on sait d'ores et déjà qu'elle joue un rôle primordial dans la régulation de l'ensemble du processus. En effet, la présence de ces bactéries acétogènes évite l'accumulation des acides gras volatils autres que l'acétate, acides dont l'effet inhibiteur sur la méthanogénèse est à restreindre.

I.4- LA METHANOGENESE

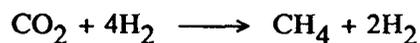
La méthanogénèse est la phase ultime de la fermentation méthanique. Les bactéries méthanogènes, qui en sont responsables, sont des bactéries anaérobies strictes. Une très faible quantité d'oxygène suffit à inhiber complètement leur croissance. Elles ont en outre la particularité de n'utiliser qu'une gamme très limitée de substrat pour produire du méthane et du gaz carbonique.

Deux voies de production du méthane sont possibles :

a - La première est que 60 à 70% du méthane produit dans un fermenteur provient de la décarboxylation de l'acétate selon l'équation : [24]



b - L'autre voie est moins conséquente mais a une cinétique beaucoup plus rapide. Elle consiste en la réduction du CO₂ par l'hydrogène suivant la réaction :



où l'hydrogène joue le rôle de donneur d'électrons [39].

En général, ces deux voies métaboliques coexistent, mais l'emprunt de l'une ou l'autre dépend des espèces de bactéries méthanogènes présentes dans le fermenteur.

Une partie des mécanismes qui régissent la méthanogénèse a été élucidée par un certain nombre de travaux, notamment la découverte du co-enzyme F₄₂₀, qui possède la caractéristique d'être fluorescent sous sa forme oxydée. Cette propriété permet de l'utiliser pour une estimation de la flore méthanogène présente dans un digesteur. Deux autres co-enzymes ont été mis en évidence plus récemment (le F₃₄₂ et le F₄₃₀), mais on ignore encore leur rôle exact dans la méthanogénèse.

Il existe une autre population de micro-organismes appelée, bactéries homoacétogènes. Elle est connue pour sa faculté de transformer du CO₂ et H₂ en acide acétique, transformation qui est généralement à éviter.

II INFLUENCE DE QUELQUES FACTEURS SUR LA FERMENTATION METHANIQUE

II.1- FACTEURS CHIMIQUES

II.1.1- Les Acides Gras Volatils

Les A.G.V. étaient utilisés depuis longtemps pour inhiber l'activité bactérienne, et notamment en tant qu'agent désinfectant. Dans le cas de la fermentation méthanique, l'observation de l'inhibition de l'activité méthanogène par les A.G.V. date de 1939 [13]. Par la suite, d'autres expériences ont montré que quelques effets néfastes pouvant entraîner l'arrêt de la fermentation sont à mettre au compte des acides gras volatils qui forment, comme nous l'avons vu, le principal produit intermédiaire dans la chaîne métabolique conduisant au méthane. En outre, ils participent à l'équilibre ionique du milieu. De ce fait, leur concentrations peuvent modifier le pH du milieu.

Par ailleurs, ANDREWS [2] a émis l'hypothèse que ce serait la fraction non ionisée des A.G.V. qui inhiberait l'activité des méthanogènes. Cette hypothèse s'est trouvée confirmée par HINO et ANDO [23] qui ont montré que les A.G.V. inhiberaient le prélèvement du phosphate et la synthèse de l'A.T.P.¹ lors de l'incubation des boues activées, et que cet effet d'inhibition est d'autant plus important que la chaîne de carbone de l'acide est longue.

II.1.2- Le pH

La valeur du pH peut orienter le métabolisme d'un substrat vers des voies métaboliques différentes. En outre, les bactéries acidogènes et méthanogènes n'ont pas les mêmes valeurs optimales du pH. En effet, la valeur optimale du pH des méthanogènes en culture pure est élevée et se situe entre 6 et 9 ([6], [32], [38]), alors que

1 Adénosine - TriPhosphate

celle des acidogènes est comprise entre 5,5 et 7 ([29], [41]). Par ailleurs, les acétogènes ont un pH optimal voisin de 7,2 [25]. Cette particularité peut servir avec d'autres facteurs à la séparation des phases en inhibant l'activité d'une ou plusieurs populations bactériennes

Cependant, une valeur du pH proche de la neutralité satisfait l'ensemble de la flore présente dans un fermenteur. C'est pourquoi quelques auteurs maintiennent cette valeur du pH constante par ajouts d'une base (NaOH, KOH) [5], de la chaux ou encore de l'ammoniac. Cette solution est cependant limitée par les effets toxiques de certains cations qui résultent de ces ajouts.

II.1.3- Les cations

La présence de cations dans un fermenteur ou plus généralement dans un milieu de culture peut avoir trois effets : Toxicité, Stimulation ou Antagonisme. Si leur concentration reste faible, ils peuvent stimuler l'activité bactérienne. Par contre, dès que leur concentration dépassent un certain seuil, ils deviennent inhibiteurs et peuvent même produire des effets toxiques. Cependant, l'adjonction ou la présence d'un deuxième cation peut diminuer la toxicité du premier, c'est l'effet antagoniste, comme il peut la stimuler et c'est l'effet synergique. Cette toxicité dépend des types de cations présents dans le fermenteur et de leurs concentrations respectives [5].

En ce qui concerne la digestion anaérobie, c'est la flore méthanogène qui est la plus sensible à la présence de cations. Par ailleurs, l'addition d'un mélange d'acide aminé stimule l'activité des méthanogènes [12].

II.1.4- L'ammoniac

Si le substrat originel est riche en azote comme les fientes de volailles, l'ammoniac peut être produit en sus du méthane et du gaz carbonique. BRAUN et Al [11] ont récemment montré que l'ammoniac libre (NH_3) était inhibiteur et parfois même toxique, ce dont HILL et BARTH [22] tiennent compte dans leur modélisation.

II.1.5- Le CO₂

Le gaz carbonique représente 20 à 30% du biogaz produit dans une fermentation méthanique. Cependant, il intervient à plusieurs niveaux de la fermentation :

- Le CO₂ gaz est en équilibre avec le CO₂ dissous
- Le CO₂ dissous possède une double fonction acide.
- Du point de vue biologique, le CO₂ est produit par les bactéries acidogènes et acétogènes et est consommé en partie par les méthanogènes.

Par ailleurs, il a été établi qu'au delà d'une valeur seuil, la pression partielle du CO₂ inhibe la dégradation de l'acétate par les méthanogènes [5].

II.2- FACTEURS PHYSIQUES

II.2.1- La température

La digestion anaérobie peut s'effectuer plus ou moins facilement à n'importe quelle température comprise entre 10° et 70°C. Néanmoins on distingue généralement trois zones :

1- Zone psychrophile	autour de 10°C
2- Zone mésophile	de 35 à 40°C
3- Zone thermophile	de 55 à 65°C

Chacune de ces trois zones est caractérisée par un optimum local dans lequel la fermentation se fait relativement bien.

Notons cependant que la température est un facteur dont l'importance est incontestable. Elle influence, hormis la vitesse de dégradation, l'activité bactérienne dans le fermenteur. En effet, en fonction de sa valeur, elle peut inhiber comme elle peut stimuler cette activité bactérienne. En outre, les bactéries thermophiles se distinguent par des taux de croissance et des vitesses de réaction plus rapides [40]. En effet, le traitement par procédé thermophile permet d'atteindre des vitesses d'hydrolyse de l'ordre de 4 à 5 fois celles obtenues par des procédés mésophiles [20]. D'autres expériences menées sur la digestion de déchets solides composés principalement de cellulose, ont montré que le gain en vitesse de conversion et en production de biogaz rendent envisageable l'utilisation de la digestion anaérobie en zone thermophile [28]. Cependant, le coût d'un tel procédé peut devenir très onéreux si l'on ne dispose pas d'effluents chauds [35]. En outre, la

fermentation méthanique en thermophilie reste un processus instable difficile à maîtriser, ce qui empêche son application à l'échelle industrielle. En effet, la plupart des fermenteurs à l'échelle industrielle fonctionnent à une température supposée optimale dans la zone mésophile

II.2.2- L'hydrogène

L'hydrogène n'apparaît que rarement dans le biogaz et en très faible quantité. Cependant, il joue un rôle important dans la composition des métabolites intermédiaires (les A.G.V.). En effet, si la pression partielle d'hydrogène est basse, c'est l'acétate qui formé en grande quantité par les acidogènes. Par contre, s'il y a carence de consommateur d'hydrogène, celui-ci s'accumule et c'est la formation d'autres acides tels que l'acide propionique, butyrique ou des alcools qui est observée. Or pour transformer ces produits en acétate par les acétogènes, la pression partielle d'hydrogène doit baisser si non, on risque de constater un arrêt total de la fermentation ([5], [9], [33]).

II.2.3- Le Temps de Séjour Hydraulique

Le T.S.H. ou encore le temps de rétention est un facteur important dans le cas des fermentations en continu. Il correspond au temps moyen que reste chaque partie infinitésimale de moût dans le digesteur. Il est défini comme l'inverse du taux de dilution :

$$\text{T.S.H. [J]} = \frac{V [M^3]}{Q [M^3/J]}$$

Où V est le volume utile du digesteur et Q le débit journalier.

Généralement le T.S.H. est fixé de façon empirique à une valeur constante qui dépend entre autre du type du fermenteur, de la biodégradabilité des substrats présents, du degré d'adaptation de la flore, du temps de dédoublement des bactéries impliquées, ainsi que de la température. Il dépend aussi du but recherché (production maximale de biogaz ou élimination de la matière organique). Par exemple, pour un fermenteur infiniment mélangé en zone thermophile et en monoétape, le T.S.H. doit dépasser les 7-10 jours, si non, il y a risque de diminution (dilution) de la flore méthanogène.

Enfin, notons que le potentiel d'oxydo-réduction (Redox) doit être maintenu à une valeur inférieure à -360 mV, à cause de la grande sensibilité à l'oxygène des bactéries méthanogènes qui exigent un milieu très réduit

II.2.4- L'agitation

Le rôle de l'agitation dans la fermentation méthanique est d'homogénéiser le milieu, évitant ainsi des écarts de température ou de concentration. Un simple brassage ou une recirculation du biogaz peuvent suffire. Cependant, une agitation excessive peut empêcher les contacts enzyme-substrat.

III

TECHNIQUES DE MESURES ET PROCÉDES

III.1- INTRODUCTION

Après la présentation succincte du processus nous allons voir les possibilités d'observations quantitatives que l'on peut tenter de faire sur les différentes grandeurs. En effet, les possibilités d'observer les grandeurs (variables d'états ou non) d'un processus facilitent, en partie, sa modélisation ainsi que son automatisation éventuelle, c'est à dire l'établissement d'une stratégie de contrôle-commande en temps réel. Cette réalité nous amène à discuter des techniques de mesures que l'on peut effectuer pour l'observation des variables du processus de fermentation méthanique. Ces variables peuvent être :

- La concentration en substrat
- La concentration en acides gras volatils et alcools.
- Les concentrations des populations bactériennes (acidogènes, méthanogènes et acétogènes éventuellement).
- Le débit du biogaz produit et sa composition (CH_4 , CO_2 et H_2).

Nous pouvons ajouter à ces variables d'autres grandeurs telles que le pH, la température, le potentiel Redox et la pression partielle d'hydrogène. A notre connaissance, il n'existe aucun modèle mathématique représentant la digestion anaérobie, qui considère l'ensemble de ces grandeurs comme variables d'états. Néanmoins, quelques unes d'entre elles, sont toujours prises en compte par les auteurs. Nous allons les passer en revue en nous intéressant davantage aux possibilités de mesures et éventuellement aux temps de réponse des capteurs.

III.2- LES TECHNIQUES DE MESURES

III.2.1- Les substrats

L'évaluation, en ligne, des concentrations en substrats dans un fermenteur en est encore au stade de la recherche. Cependant, des mesures peuvent être

effectuées, ne serait-ce que pour avoir une idée de la composition chimique du résidu à traiter. Ces mesures peuvent se faire par diverses méthodes plus au moins délicates à réaliser.

III.2.1.1- La D.C.O. (Demande Chimique en Oxygène)

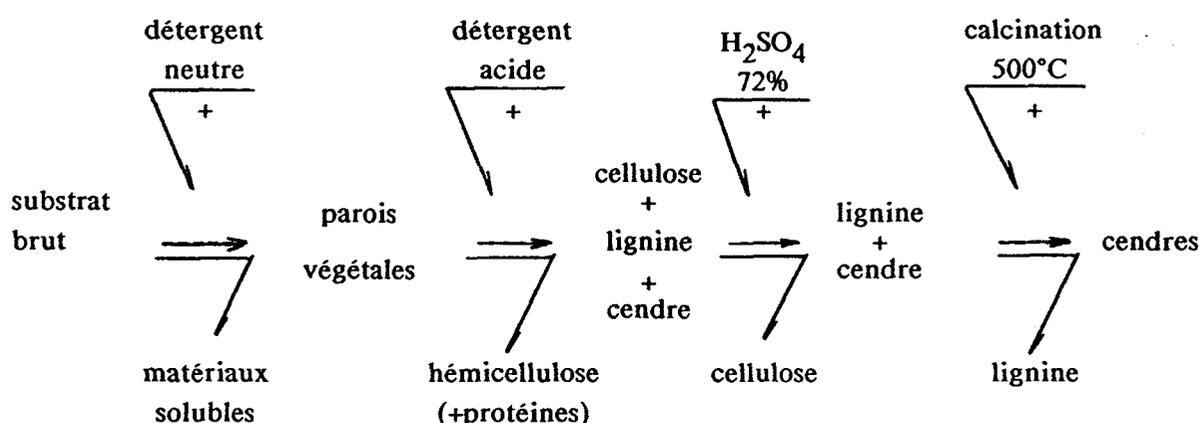
La mesure de cette grandeur est surtout adoptée lorsqu'il s'agit d'une station d'épuration d'eaux usées. Elle permet d'avoir une idée sur la pureté de l'eau traitée. En effet, la DCO permet de mesurer la quantité d'oxygène nécessaire à l'oxydation des matières organiques (à éliminer) présentes dans le milieu (fermenteur). Elle peut être mesurée en plongeant une cathode dans le milieu; l'oxydation de celle-ci permet alors de connaître la D.C.O. (mesurée en grammes d'oxygène par litre). La valeur fournie par l'appareillage est sous forme électrique ce qui laisse supposer la possibilité de son intégration dans une chaîne de régulation automatique.

III.2.1.2- Matière sèche et matière organique

Cette méthode peut s'appliquer lorsqu'il s'agit de substrats mixtes (solide et/ou liquide). Elle n'est rien d'autre qu'une méthode d'analyse de laboratoire. Néanmoins, elle permet de mesurer la quantité de matière sèche et celle de la matière organique (biodégradable), contenues dans un échantillon du résidu à traiter. La technique consiste à chauffer un échantillon de substrat de masse connue à une température de 105°C jusqu'à masse constante, masse qui correspond à la matière sèche totale. Un deuxième chauffage à 550°C pendant dix minutes élimine la fraction de la matière organique contenue dans l'échantillon. Le résidu de cette calcination équivaut à la quantité de matières minérales.

III.2.1.3- Méthode de VAN SOEST [21]

D'autres dosages sont parfois nécessaires pour déterminer les constituants organiques d'un substrat, dont les principaux sont la cellulose, l'hémicellulose et la lignine. Cette dernière substance n'est pas ou, du moins, très difficilement, biodégradable. Une des méthodes utilisées à cette fin, est celle de Van Soest (fig A.2)



Le substrat brut peut être de la paille, de la fiente de volaille, des choux etc...

Figure A.2 : Détermination des constituants d'un substrat par la méthode de VAN SOEST.

Les matériaux solubles sont d'abord extraits par l'ajout d'un détergent neutre, puis l'adjonction d'un détergent acide permet d'avoir la fraction d'hémicellulose et de protéines contenues dans l'échantillon analysé. Dans un troisième temps, un apport d'acide sulfurique (H₂SO₄) permet d'évaluer la fraction de cellulose et, enfin, une calcination à 500°C détermine la quantité de lignine présente dans le substrat. Ces dosages peuvent être utiles pour la sélection de souches bactériennes spécifiques aux résidus à dégrader.

III.2.2- Les A. G. V.

Les acides gras volatils sont généralement dosés par Chromatographie en phase gazeuse, avec un détecteur à ionisation de flamme. Cette technique permet d'identifier les différents A.G.V. présents dans le fermenteur et leurs concentrations respectives. Les systèmes conçus pour ce type d'analyse sont de plus en plus automatisés, ce qui nous laisse entrevoir une facilité relative pour intégrer ces systèmes de mesures dans une chaîne d'acquisition de données. Le temps de réponse de tels capteurs peut varier de moins d'une minute à plus d'une demi-heure, suivant la volatilité des substances présentes

III.2.3- Le Biogaz

Le biogaz produit est aussi analysé par Chromatographie en phase gazeuse, mais avec un détecteur à conductivité thermique (le Catharomètre). Ceci permet de connaître la composition du biogaz, en l'occurrence le pourcentage du méthane par rapport au dioxyde de carbone. Par ailleurs, on peut songer à évaluer le volume du biogaz

dégagé en recourant à l'emploi d'un débitmètre adéquat. Notamment les débitmètres massiques qui permettent de s'affranchir de la pression, car ils mesurent une masse de gaz [20 bis].

III.2.4- Les populations bactériennes

Les concentrations des différentes populations bactériennes sont des grandeurs qui, encore de nos jours, posent des problèmes de mesures. Aujourd'hui encore, les principales installations industrielles de fermentations méthaniques se basent sur le débit du méthane en sortie pour estimer l'activité des bactéries méthanogènes. Ces deux grandeurs sont liées entre elles certes, mais aucune expression analytique, représentant cette liaison, n'a été proposée jusqu'ici hormis, la dépendance linéaire généralement adoptée par l'ensemble des auteurs. Néanmoins, un certain nombre de méthodes de mesures est déjà utilisé au niveau des laboratoires pour l'estimation de la biomasse active ou non.

Pour l'acidogénèse en culture pure la lecture de la densité optique (DO) est largement usitée. Celle-ci est proportionnelle, dans une zone de linéarité, à la concentration en bactéries acidogènes. Cependant, dès que le milieu de culture devient un peu trouble, et c'est le cas pour la fermentation méthanique en une seule étape, la densité optique perd toute sa signification. Toutefois, d'autres méthodes de mesures, telles que l'évaluation de la matière en suspension (M.E.S.), ou encore celle de la matière volatile en suspension (M.V.E.S.), sont appliquées pour avoir des informations sur la masse totale des bactéries (vivantes ou non) présentes dans un fermenteur. Le principe d'analyse est le même que celui utilisé pour l'évaluation de la concentration en matière sèche et de la matière organique. Avec cette seule différence que, après l'obtention d'un mélange homogène (homogénéisation), l'homogénat obtenu est refiltré sur fibre de verre WATHMAN GF/C qui est traité [31].

Depuis peu, d'autres techniques de mesures ont commencé à se développer, ces techniques sont basées sur les propriétés de fluorescence du co-enzyme F_{420} . Elles permettent ainsi une estimation de la concentration des méthanogènes par spectrofluorimétrie. En effet, le F_{420} émet de la lumière (fluorescence) à 470nm lorsqu'il est excité à 420nm. L'intensité de fluorescence, lue à 470nm, est exprimée en pourcentage par rapport à la fluorescence d'une solution de référence (fluorescéine). Ainsi, NYNS(1980) [37] estime qu'une micromole du F_{420} correspond à un gramme de biomasse méthanogène active. La figure A 3 représente la corrélation entre le poids sec de bactéries et l'intensité

de fluorescence d'une culture pure de *Méthanosarcina barkeri* [5]. Cependant, la fluorescence de certain jus de digestions posent parfois des problèmes d'interférences avec le F_{420} qui faussent les mesures [7].

III.2.5- Le pH et la température

La mesure de la température ne pose généralement pas de problème, on trouve même des thermomètres à base de capteurs à semi-conducteurs fournissant un courant proportionnel à la température absolue.

Par contre, la mesure du pH est un peu plus délicate à cause du colmatage des sondes. Néanmoins, il existe actuellement des sondes rétractables qui permettent de nettoyer, réétalonner et même de changer d'électrode en cours de fermentation [20 bis].

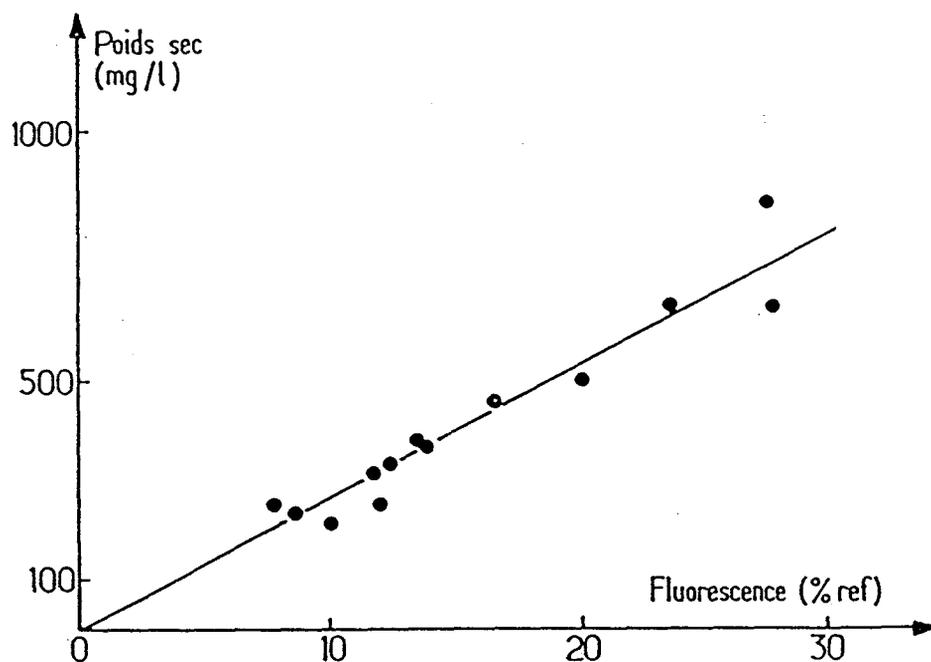


Figure 3 : Corrélation entre le poids sec de *Méthanosarcina* et l'intensité de fluorescence [5]

III.3- LES PROCEDES

La fermentation méthanique, nous l'avons vu, est un processus très complexe, et le passage à l'échelle industrielle ne fait qu'accentuer cette complexité. Néanmoins, l'un de ses avantages est que l'on peut y recourir pour le traitement de résidus très variés, tant au niveau de leurs compositions chimiques (cellulose, hémicellulose etc..), qu'au niveau de leurs natures physiques (solides ou liquides). Par ailleurs, malgré le manque de connaissances et de possibilités d'observations sur le processus lui même, la nécessité d'optimiser son fonctionnement a amené une certaine évolution dans la conception des fermenteurs.

III.3.1- Grandeurs caractérisant une installation

Cette perception des choses a incité des biotechnologues à concevoir des installations qui tiennent compte d'un certain nombre de paramètres (grandeurs mesurables) "importants", leur permettant de concevoir des installations types. Parmi ces paramètres, nous pouvons citer : [4]

- La charge volumique

Quantité de substrat introduite dans un réacteur par unité de volume (du réacteur) et par unité de temps.

- La charge massique

Quantité de substrat introduite dans le fermenteur par unité de M.V.E.S.(estimation de la biomasse) et par unité de temps.

- Le temps de séjour hydraulique (T.S.H)

- Le rendement biologique (Rdt Bio)

Quantité de biogaz produite par unité de "matière organique" introduite dans le fermenteur et par unité de temps. Il peut être exprimé par une multitude d'unités, les plus usitées sont :

- 1- Volume de biogaz/kg (de matière sèche introduite).
- 2- Volume de CH_4 /kg (de matière organique introduite)
- 3- Volume de biogaz/kg (de matière organique introduite)
- 4- Volume de CH_4 /kg (de matière organique introduite)

5- Volume de biogaz/kg de D.C.O. disparue

6- Volume de CH₄ /kg de D.C.O. disparue

- Le rendement technologique

Le rendement technologique (Rdt T) est utilisé pour représenter la production de biogaz (ou Méthane) par unité de temps et par unité de volume du fermenteur.

L'établissement d'une stratégie de contrôle-commande automatique visera, dans un premier temps, un compromis entre l'optimisation du Rdt T et du Rdt Bio, tout en tenant compte de contraintes telles que l'évacuation de la biomasse vivante et le temps de séjour hydraulique.

III.3.2- Types de fermenteurs [27]

Nous pouvons répartir les fermenteurs actuels en deux classes :

III.3.2.1- Première génération

a- Le type rural, simple, robuste et de conduite aisée. Ce type de fermenteur est caractérisé par une faible production de biogaz et par un temps de séjour important(30 à 60 jours).

b- L'infiniment mélangé, digesteur de conception classique (calqué sur les réacteurs chimiques). Il est caractérisé par :

- * Une homogénéisation du moût par une faible agitation (brassage) ou recirculation du biogaz.
- * Un chargement qui peut se faire en continu ou en discontinu.
- * L'absence de gradient de température ou de pH, ce qui "facilite" sa régulation.
- * Une perte de la biomasse vivante (pas de moyen de rétention des bactéries).
- * Un temps de séjour assez long, dont la limite inférieure est fixée par le temps de dédoublement des bactéries méthanogènes (minimum 7 jours).

Ces deux derniers points limitent l'utilisation de ce type de fermenteurs. Cependant, ce mode de méthanisation est bien adapté aux substrats à forte teneur en

matière sèche ($DCO > 50g O_2/l$), ou riches en solides inertes (fumiers, lisiers, ordures ménagères, drèches de brasseries).

III.3.2.2- Seconde génération

Les digesteurs de seconde génération sont conçus pour traiter des substrats très dilués ($DCO < 30g O_2/l$), comme les effluents d'industries agro-alimentaires. Ces digesteurs ont tous une caractéristique commune à savoir la rétention de la biomasse. Ils diffèrent cependant, entre eux par l'efficacité et la façon de piéger les populations bactériennes présentes dans le fermenteur. C'est cela, en fait, qui détermine leurs performances respectives. Voyons maintenant, quels sont les digesteurs les plus connus de cette génération

1- Le contact Anaérobie

La biomasse est retenue par décantation en sortie, ce qui permet son recyclage dans le fermenteur. Le temps de séjour hydraulique se trouve ainsi diminué et devient de l'ordre de 4 jours. Cependant, il se trouve limité par le faible pouvoir de décantation des agrégats bactériens [36].

2- Le lit de boue (ou U.A.S.B. Upflow Anaerobic Sludge Blanket)

Le maintien de la biomasse active se fait par la formation d'un lit fluidisé, à partir de boues granuleuses, dans la partie inférieure du réacteur. Le gaz produit assure l'agitation et est récupéré au moyen d'un séparateur de phases.

3- Le filtre anaérobie

Les bactéries sont maintenues sur un support inerte (alginates, céramiques ..). Le temps de séjour peut être réduit, avec ce type de procédé, à quelques heures seulement. L'inconvénient majeur est le risque de colmatage, si la concentration de la matière en suspension est trop élevée. D'autres procédés ont ainsi été mis au point : le réacteur à film fixé ou encore le réacteur à lit expansé.

Pour le traitement d'effluents d'industries agro-alimentaires, Albagnac et Verrier [1] proposent un abaque pour le choix du procédé "optimal" de méthanisation en monoétape, qui serait fonction des caractéristiques de l'effluent à traiter (Fig 4).

Cependant, dans la pratique et pour un même procédé, les performances susceptibles d'être obtenues sont très variables. En effet, la qualité de l'effluent est en cause, mais également le choix de certaines grandeurs technologiques telles que le taux de recirculation ou le type de support [31]. Néanmoins, les procédés de la seconde génération sont reconnus pour être plus performants que l'infiniment mélangé pour le traitement de substrats à faibles ou moyennes concentrations en DCO.

III.3.3- Séparation des phases

Les observations effectuées sur la fermentation méthanique nous montre la différence des conditions optimales de culture des populations microbiennes de chacune de ses phases (pH, Température etc ..) et en particulier le temps de dédoublement propre à chacune des populations de micro-organismes impliquées dans le processus. Le fait de maintenir chaque population (acidogène et méthanogène) dans son environnement optimal peut accélérer la fermentation et faciliter son contrôle, tout en réduisant le volume de l'installation [19]. Ceci a amené quelques auteurs à proposer un nouveau type de procédé, basé sur la mise en série d'un fermenteur pour l'hydrolyse enzymatique et d'un autre pour la méthanogénèse. L'addition d'inhibiteurs spécifiques a d'abord été utilisée pour séparer les phases. Cette solution a été écartée au profit de l'exploitation du temps de dédoublement des populations bactériennes. En effet, en ajustant le temps de séjour hydraulique du premier fermenteur à une valeur inférieure à celle du temps du dédoublement des bactéries méthanogènes, on arrive à empêcher leur développement. Elles sont alors acheminées vers le deuxième fermenteur qui, lui, répond aux conditions optimales de leur croissance. Quelques expérimentations montrent que ce type de procédures convient surtout aux effluents à fortes concentrations en matières organiques [8]. Ceci permet, par exemple, l'utilisation d'un réacteur infiniment mélangé pour la première phase et l'un des procédés de la seconde génération pour la méthanogénèse. Cette conception est attrayante certes, cependant et hormis le fait d'en être encore au stade expérimentale, elle ne résout pas la totalité des problèmes d'interactions entre les différentes populations bactériennes, en particulier le transfert d'hydrogène.

CONCLUSION

Cette présentation, nous permet d'entrevoir la complexité de ce processus et le manque de connaissances en ce qui concerne la compréhension des mécanismes réactionnels impliqués. Par ailleurs, les moyens d'observations sont limités; notamment à des analyses de laboratoires dont l'exploitation en ligne ne peut être envisagée. Enfin, le manque d'informations quantitatives ne nous permet pas d'envisager, actuellement, la prise en compte de grandeurs telles que le pH, la température etc., dans l'établissement d'un modèle mathématique.

BIBLIOGRAPHIE DE LA PREMIERE PARTIE

- [1] ALBAGNAC, G., VERRIER, D., (1983)
Méthanisation des effluents d'industries agro-alimentaires
Biomasse Actualités , Spécial N°2, 17-21. (cité par [31])
- [2] ANDREWS J. F., (1969)
Dynamic model of anaerobic digestion process
J. of the Sanitary Engineering Division.
Proceeding of the Am. Soc. of Civil Engineers. Febr., SA1, 95-116
- [3] ARCHIPRETRE M., (1984)
Méthanisation des résidus végétaux : Aspects cinétiques et microbiologiques
Thèse 3°Cycle U.S.T.L.F.A.
- [4] AUBART, C., (1982)
Digestion anaérobie des déchets d'élevages. Thèse Doct-Ing I.N.P.L. NANCY
- [5] BACHMAN, J.S., (1982)
Contribution à l'étude de la fermentation méthanique de la cellulose et des ligno-celluloses
Thèse Doct. Ing. I.N.P.L. NANCY.
- [6] BALCH W. E. and Al., (1979)
Methanogens : reevaluation of a unique biological group
Microbiol. Rev. , 43, 2, 260-296 (cp [34])
- [7] BINOT, R.A., NAVEAU, H.P., NYNS E.J., (1981)
Methanogenic potential activity of mixed liquors :
Fluorimetric monotoring
Biotechnol. Letters 3, 623-628 (cp [5])
- [8] BORIES, A., (1980)
Fermentation méthanique avec séparation des phases acidogène et méthanogène
appliquées aux traitement des effluents à forte charge polluante (distillerie)
Ann. Technol. Agric. 29, 509-528 (cp [31])
- [9] BORIES, A., (1981)
Méthanisation des eaux résiduaires de distilleries
Tri. Cebedeau 456, 475-483 (cp [31])
- [10] BORIES A, MAUGENET J., (1980)
Méthanisation et épuration des effluents d'industries agricoles et alimentaires.
Exemple des eaux résiduaires de distilleries
Colloque Inter. Agriculture et Energie, CENECA Paris
- [11] BRAUN R., HUBER P., MEYRATH J., (1981)
Amonia toxicity in liquid piggry manure digestion
Biotech. Letters, 3, 4, 159-164 (cp [5])

- [12] BRAYANT M.P., (1979)
Microbial methane production : Theoretical Aspects
J. of Animal Science, 48, n°1, 193-201 (cp [5])
- [13] BUSWELL A. M., (1939)
Anaerobic fermentations
Bull.n°32, Illinois State Water Survey (cp.[5])
- [14] BUSWELL A.M., MUELLER H.F., (1952)
Mechanism of methane fermentation
Ind. Eng. Chem., 44, 550-552. (cp.[5])
- [15] BUVET R., (1980)
Council of Europe
Intensive Course on Anaerobic Digestion. Dijon
- [16] COUPLET P., ALBAGNAC G., (1978)
La Digestion Anaérobie : Application aux Industries Agro-Alimentaires
Ann. Technol. Agri.,27,(2),533-564.
- [17] (by) ENCOM Associates (1980)
Methane generation and recovery from Landfills
Ann. Arbor Science
- [18] GAYON, U., (1884)
Recherches sur la fermentation de fumier
C.R des séances de l'Aca. des Sc., 528-531.(cp [3] [4])
- [19] GHOSH, S., CONRAD, J.R., and KLASS, D.L., (1975)
Anaerobic acidogenesis of wastewaters sludge
J.W.P.C.F. 47, pp 30-45. (cp [31])
- [20] GHOSH S., KLASS D.L., (1981)
Advanced digestion process development for methane production from biomass-
waste blends. Biomass as a non fossil fuel source
Am. Chem. Soc., 13, 251-278 (cp [34])
- [20 bis] GILLOT G., (1986)
Contrôle des fermentations : Les outils d'aujourd'hui
Le technoscope de Biofutur, n°2, Fermentation, Mai, 3-10.
- [21] GOERING H.K., VAN SOEST R.J., (1975)
Forage fiber analyses (Apparatus, Reagents, Procedures and some application)
A report of the Cornell University Agricultural Experiment Section. Agricultural
Handbook, n°379 . Agr. Research Ser., US Dep. of Agriculture. (cp [5])
- [22] HILL D.T., BARTH C.L., (1977)
A dynamic model for simulation of animal waste digestion
J. of Pollut. Control Fed., 9, 2129-2143
- [23] HINO S., ANDO F., (1980)
Inhibition of phosphate uptake and ATP synthesis with organic acid in activated
sludge
J. Ferment. Technol., 58, n°43, 267-273 (cp [5])

- [24] JERIS J.S., Mc CARTY P.L., (1965)
The Biochemistry of methane fermentation using C14 Tracer
J.W.P.C.F., 27, 178-192.(cp [31])
- [25] Mc INERNEY M. J., BRAYANT M. P., (1979)
Metabolic stages and energetics of microbial anaerobic digestion
1st Int. Symp. on Anaer. Digestion - Cardiff, 17-21 Sept.(cp [34])
- [26] MORFAUX J.N., ALBAGNAC G., TOUZEL J.P., (1981)
Epuración par fermentation méthanique des effluents de blancheur de petits pois
Sciences des Aliments, 1, n°2, 293-313
- [27] NYNS, E.J., and All., (1979)
DIGESTERS : - A world review
1st Int. Symp. on Anaer. Digestion - Cardiff, 17-21 Sept.(cp [4])
- [28] PFEFFER J. T., (1974)
Temperature effects on anaerobic fermentation of domestic refuse
Biotech. and Bioeng., 16, 771-787 (cp [5])
- [29] PIMPA P., (1982)
Fermentation acidogène et acétonobutylique: Contribution à l'étude cinétique et
stochiométrique ainsi qu'aux mécanismes d'inhibition limitant ces réactions
Thèse 3e Cycle I.N.S.A. de Toulouse.
- [30] PREVOT A. R., (1977)
Biosynthèse bactérienne du méthane et du pétrole pour l'an 2000
Ed. MALOINE.
- [31] ROY F., (1985)
Fermentation méthanique des déchets glucidiques solides et des lipides :
Expérimentation en fermenteurs pilotes
Thèse Doct-Ing U.S.T.L.F.A.
- [31bis] SCRIBAN R. et Al, (1984)
Biotechnologie . Tech. et Doc. Lavoisier, Paris
- [32] SHARER J. M., MOO Y., (1979)
Methane generation by anaerobic digestion of cellulose containing waste
Adv. Bioch. Eng., II, 85-101
- [33] SUYS J., AUQUIER C., BINOT R., DELAFONTAINE M., SPEGELAER P.,
NAVEAU H, NYNS E.J., (1979)
Perspectives nouvelles du recyclage d'effluents et de résidus organiques en méthane
par fermentation microbienne anaérobie: 1ère Partie
La Technique de l'Eau et de l'Assainissement, n°4, 387, 9-15
- [34] TAWFIKI HAJJI K., (1987)
Influence de quelques facteurs physico-chimiques sur la fermentation méthanique
et la physiologie des souches impliquées.
Thèse 3e Cycle U.S.T.L.F.A.

- [35] VERRIER D., (1984)
Méthanisation d'effluents agro-alimentaires en réacteurs à cellules fixées .
Exemples d'applications et facteurs conditionnant la fermentation et la structure
des biofilms. Thèse Doct. Ing. E.N.S.I.A.A. V.d'Ascq (cp [34])
- [36] VERRIER, D., MOLETTA, R., ALBAGNAC, G., (1983)
Anaerobic digestion of vegetable canning wastewaters by anaerobic contact process:
Operational experience
3rd Anaerobic Digestion Symposium BOSTON. (cp [3])
- [37] YEBOUA AKA F., (1984)
Dynamique de population méthanogène et étude des potentialités de l'étape
acidogène à partir de divers substrats
Thèse 3e Cycle I.N.S.A. de Toulouse.
- [38] ZEHNDER A. J. B., INGVORSEN K., MARTI T., (1982)
Microbiology of methane bacteria . Anaerobic digestion
2nd Int. Symp. on Anae. Digestion - Travemund, 6-11 Sept.
Elsevier Biom. Pres., R.F.A.(cp tawf)
- [39] ZEIKUS J.G., (1977)
The biology of methanogenic bacteria
Bacteriological Reviews, 41, n°2, 514-541 (cp [5])
- [40] ZEIKUS J. G., (1979)
Microbial population in anaerobic digesters
1st Int. Symp. on Anae. Digestion - Cardiff, 17-21 Sept.(c.p.[34])
- [41] ZOETMEYER R. J., VAN DEN HENVEL J. C., COHEN A., (1982)
pH influence on acidogenic dissimulation of glucose in an anaerobic digester
Wat. Rech., 16, 303-311

DEUXIEME PARTIE

LA MODELISATION

PREAMBULE

L'automaticien est amené, de nos jours, à mettre en oeuvre des stratégies de contrôle-commande pour des systèmes de plus en plus complexes (Centrales nucléaires, Processus biotechnologiques, ateliers flexibles etc..). En outre, il se voit doter d'un arsenal informatique dont les capacités de mémoire et de vitesse ne cessent de progresser. Ceci lui permet d'envisager l'application de techniques de commandes sophistiquées fondées sur des théories de commande optimale relativement récentes. Le Maximum de Pontriaguine, la Programmation dynamique ou encore la commande Auto-Adaptative, en passant par des techniques d'optimisation et des problèmes d'extremum d'une manière générale en sont les principaux exemples. Or, toutes ces théories et techniques supposent la connaissance de la dynamique du système étudié. Cependant, pour arriver à la connaissance d'une telle dynamique, il faut caractériser le système. Mais, avant d'entamer sa caractérisation, il faut procéder à son observation en considérant tout d'abord le contexte dans lequel il évolue. Cela peut se faire en examinant l'effet des grandeurs d'action (variables commandables) au travers des variables mesurables et en tenant compte des perturbations éventuelles. Cette phase permet généralement d'émettre un certain nombre d'hypothèses sur la dynamique du processus étudié (non-linéarité, continuité, paramètres localisés ou distribués, etc...). Ensuite, ces hypothèses serviront comme base pour la caractérisation du processus en question. En effet, la caractérisation d'un processus est une phase de son automatisation, souvent appelée identification, qui s'intéresse à l'étude de sa représentation mathématique. Elle se compose de trois étapes dont les deux principales sont :

- * Modélisation du processus.
- * Identification des paramètres.

Ces deux étapes peuvent être réalisées simultanément ou successivement, ce qui nous permet de distinguer les méthodes non paramétriques des méthodes paramétriques.

- Méthodes non paramétriques

Dans ce cas, les deux étapes sont faites simultanément et sans donner naissance à des expressions analytiques pour représenter le système. Ces méthodes permettent de caractériser le comportement dynamique du processus étudié par ses réponses temporelles ou fréquentielles.

Dans le domaine temporel, on utilise principalement la réponse impulsionnelle. Pour un système linéaire monovarié par exemple, cette réponse peut être calculée à partir de la résolution de l'intégrale de convolution, ou encore à partir de l'équation de Wiener. C'est au signal sinusoïdal que l'on recourt le plus souvent dans le domaine fréquentiel, car il permet d'obtenir les caractéristiques, gain et déphasage, sous forme graphique. Il faut noter que ces méthodes non paramétriques peuvent être très utiles, comme phase intermédiaire, dans l'élaboration de modèles paramétriques.

- Méthodes paramétriques

Lorsqu'on cherche une représentation intrinsèque du processus qui soit indépendante du type d'entrée, c'est à dire un modèle valable pour une large gamme de signaux d'excitation, la caractérisation d'un tel processus passe nécessairement par une étape qualitative : la modélisation, étape qui donne naissance à un modèle mathématique. Par ailleurs une seconde étape, quantitative cette fois, servira à l'identification des paramètres contenus dans les expressions du modèle obtenu.

Toute fois, quel que soit le type de méthode choisi, une troisième étape est toujours nécessaire avant de passer à l'élaboration d'une stratégie de contrôle-commande du processus. Il s'agit de l'étape qui concerne la simulation du modèle obtenu avec les paramètres identifiés afin de vérifier la validité du modèle en question, par rapport aux hypothèses émises, validité pour différentes excitations du processus étudié.

I BUT DE LA MODELISATION

Modéliser un processus ou un phénomène revient à se donner une représentation la plupart du temps mathématique qui, d'une part, rend compte de toutes les observations faites et, d'autre part, permet de prévoir le comportement du système considéré dans des conditions plus variées que celles qui ont donné naissance aux observations. Ce modèle peut être déterministe ou stochastique, discret ou continu, linéaire ou non linéaire et il doit permettre en outre :

- De mieux comprendre le phénomène examiné.
- De faire des simulations, remplaçant ainsi des expériences qui risqueraient d'être onéreuses.
- D'agir sur le processus de façon optimale.

L'établissement d'un modèle dépend bien sûr du but recherché, but qui diffère d'une discipline à une autre. Ainsi :

- Le biochimiste ou le microbiologiste cherche d'abord à comprendre les lois qui régissent un phénomène; pour eux, les paramètres du modèle doivent avoir une signification physique.

- Par contre, dans un domaine comme celui par exemple de l'aéronautique, l'obtention d'un simulateur de vol qui reproduit parfaitement les conditions d'un vol quelconque, est très apprécié. Ajoutons qu'il n'est pas nécessaire dans ce cas de tenir compte de la signification physique des paramètres contenus dans l'expression du modèle utilisé.

- Pour un automaticien enfin, il s'agit de pouvoir, en plus, établir une stratégie de commande automatique du processus.

Bien sûr, d'autres définitions de la modélisation ont été données ([6], [16], [27], [30], [32]). Cependant, quelle que soit la définition retenue, le modèle obtenu restera toujours une idéalisation de la réalité physique, du fait qu'on a émis des hypothèses pour l'obtenir. Par ailleurs, la recherche d'un modèle peut emprunter différentes directions, et

cela en fonction de l'objectif à atteindre, des moyens d'actions dont on dispose et de la nature ainsi que de la complexité du phénomène ou du processus en question. Ces directions sont limitées par deux classes de modèles extrêmes :

a- Modèle de connaissance

Ce type de modèles est ordinairement établi à partir des connaissances des lois internes qui régissent le processus. Ces lois sont des modèles bien établis tels que la loi d'Ohm, la loi de Kirchoff, ou encore la relation fondamentale de la dynamique, etc La transcription de ces lois aboutit à une (ou des) expression(s) analytique(s) d'un modèle dont les paramètres ont des significations physiques. Mais, cette classe de modèles ne peut concerner que des systèmes à structures simples.

b- Modèle de conduite

Le système est considéré, dans ce cas, comme une "boîte noire", et l'établissement du modèle se fonde sur les observations des Entrées/Sorties. Le modèle obtenu doit décrire, de la façon la plus appropriée, le comportement du processus (généralement autour d'un point de fonctionnement). Une définition de cette classe de modèles a été donnée par Zadeh [35] :

"L'identification d'un système est la détermination sur la base de la connaissance des entrées et des sorties de ce système, d'un modèle mathématique appartenant à une classe de modèles donnée, ce dernier soumis aux mêmes signaux tests, étant alors équivalent au système donné".

Cette classe concerne surtout des processus industriels complexes, où l'on ne s'intéresse qu'à la régulation. Bien entendu, la tendance sera d'opter pour des modèles intermédiaires "boîtes grises". Cette tendance concerne les processus dont :

1- Les lois physiques qui régissent le système sont connues mais, transcrites sous forme mathématique, elles aboutissent à des expressions analytiques inexploitable. Il sera alors nécessaire de simplifier, moyennant quelques hypothèses, ces expressions.

2- La connaissance interne du système n'est que partielle. C'est le cas de la majeure partie des processus complexes, en l'occurrence les processus biotechnologiques.

La partie inexpliquée peut être due au manque de possibilités d'observations et/ou à la méconnaissance d'une partie des phénomènes impliqués dans le processus. Nous pouvons, d'ailleurs, insérer celui de la fermentation méthanique dans cette deuxième catégorie.

Cet aperçu nous montre que la modélisation reste relativement empirique, et que la démarche à suivre dépend tout d'abord du phénomène étudié et de l'objectif à atteindre. Des essais de généralisation ont été faits à ce sujet, en l'occurrence par R. Thom [32] et L. V. Bertalanffy [4].

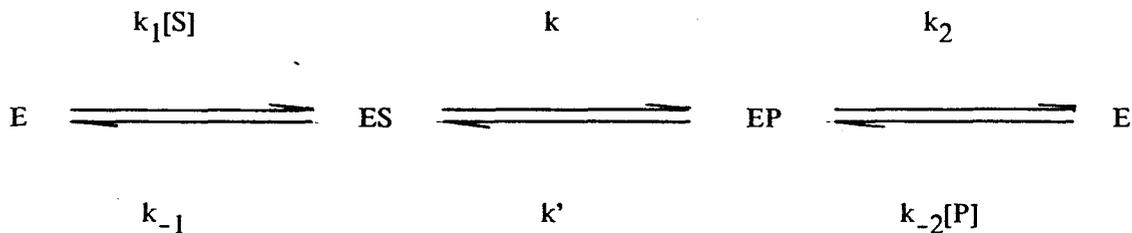
II LA MODELISATION EN BIOTECHNOLOGIE

Il nous semble intéressant d'indiquer brièvement quelques modèles de cinétiques enzymatiques et de croissance, avec ou sans inhibition.

II.1- CINETIQUE ENZYMATIQUE

II.1.1- Sans inhibition

Le mécanisme le plus simple d'une réaction enzymatique, à un substrat et un produit, peut être schématisée par :



Ce mécanisme renferme deux complexes centraux (ES et EP).

La vitesse de réaction correspondante s'écrit [29] :

$$v = V \frac{K[S] - V'K'[P]}{1 + K[S] + K'[P]} \quad (I)$$

où :

v est la vitesse de réaction

K et K' sont fonctions des constantes k_1 , k_{-1} , k_2 , k_{-2} , k et k'.

V et V' sont fonctions, en plus de ces constantes, de la concentration initiale en enzymes [E0]. [S] et [P] sont les concentrations en substrat et en produit.

L'étude de cas particuliers permet de simplifier l'expression (1).

a- 1^{er} cas

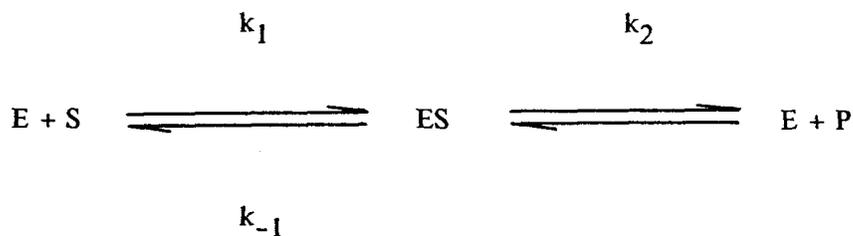
On suppose que le produit n'est présent qu'à faible concentration, dans le milieu réactionnel, au début de la réaction, l'équation (1) peut alors s'écrire :

$$v = V \frac{K[S]}{1 + K[S]} \quad (2)$$

où V est la vitesse apparente maximale de la réaction et K la constante apparente d'affinité de l'enzyme pour le substrat.

b- 2^{ème} cas

Lorsque, comme Michaelis et Menten [22], on suppose une absence de produit au début de la réaction, on peut alors écrire:



Avec $k_1 \gg k_2$ et $k_{-1} \gg k_2$

et l'on aboutit, pour la vitesse de réaction à l'expression :

$$v = V \frac{K[S]}{1 + K[S]} \quad (3)$$

Notons que cette expression (3) est formellement identique à l'expression (2), mais les paramètres V et K ont alors les significations suivantes :

V : vitesse maximale réelle de la réaction; $V = k_2[E_0]$

K : constante vraie d'affinité du substrat pour l'enzyme.

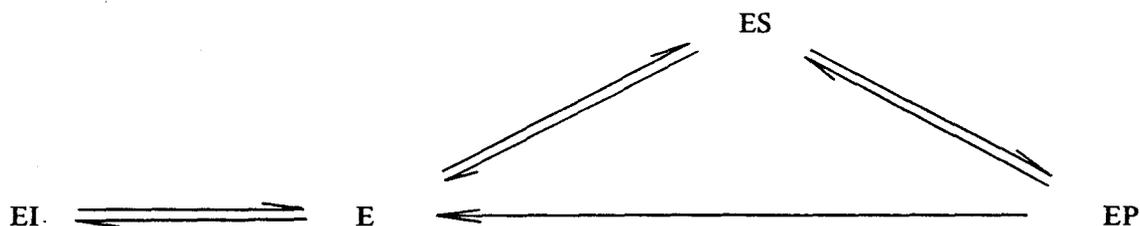
Remarquons enfin que, les équations (2) et (3) ne sont que des cas particuliers de l'équation (1). Considérons maintenant la cinétique enzymatique avec inhibition.

II.1.2- Avec inhibition

La présence de substances appelées modifieurs ou effecteurs peut activer comme elle peut inhiber les réactions enzymatiques. Le modifieur peut être le produit ou le substrat lui même. En outre, certains ligands¹ différents du substrat et du produit peuvent être aussi des inhibiteurs.

II.1.2.1- Inhibition compétitive

Un inhibiteur compétitif est un ligand qui se fixe au niveau du site actif de l'enzyme, et empêche ainsi la formation du complexe Enzyme-Substrat (ES). En l'absence du produit dans le milieu au début de la réaction, une telle situation peut se schématiser par :



On en revient ainsi, au niveau cinétique, à l'équation :

$$v = V \frac{K[S]}{1 + K[S] + K_I[I]} \quad (4)$$

¹ Ligand : toute substance organique susceptible de se fixer au substrat.

II.1.1.2- Inhibition par le substrat

Un cas particulier de l'inhibition non compétitive est celui où le modifieur est le substrat lui même, l'équation de la vitesse de réaction prend dans ce cas la forme suivante :

$$v = K_1 V \frac{[S]}{1 + k_2 [S] + k_3 [S]^2} \quad (5)$$

II.2- CINETIQUE DE CROISSANCE

Lorsqu'il s'agit de l'étude de cultures microbiennes, on ne parle plus de vitesse de réaction (type cinétique enzymatique), mais de vitesse de croissance de la matière vivante ou de croissance microbienne simplement. La courbe de croissance d'une population de micro-organismes dans un milieu de culture, a l'allure suivante :

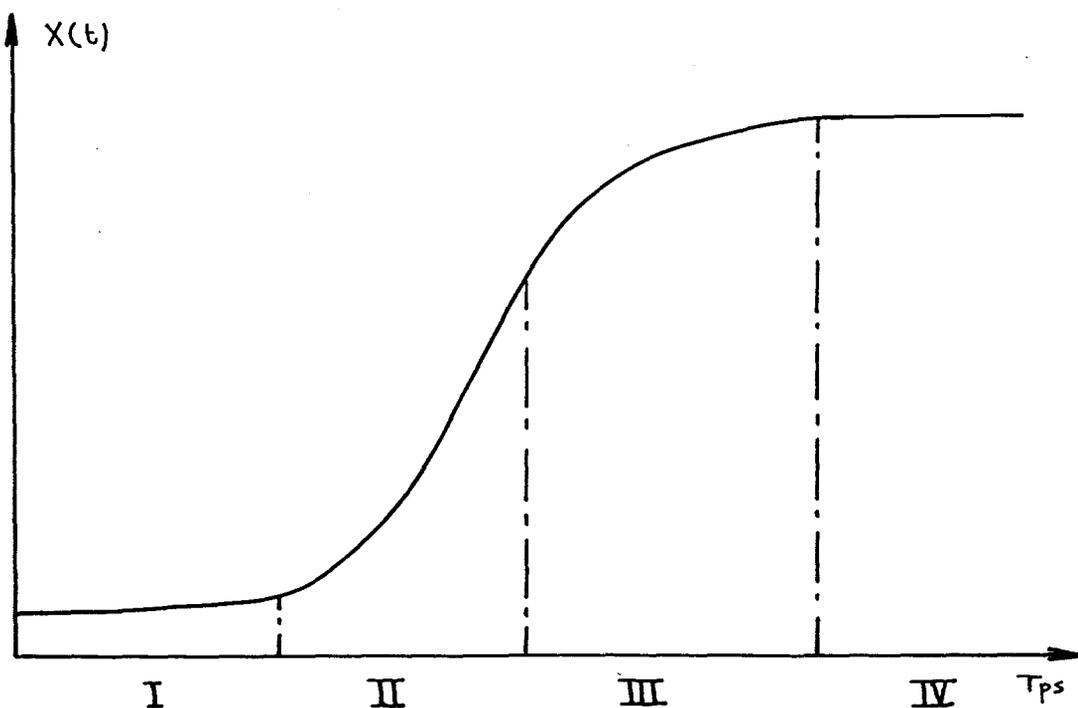


Figure B.1 : Phases de la croissance microbiennes

Actuellement, les auteurs s'accordent sur le fait que cette croissance se fait en plusieurs phases distinctes, dont les principales sont :

- Zone I : Phase de latence qui se compose en une partie à croissance nulle et une autre dite d'accélération du taux de croissance.
- Zone II : Phase exponentielle, où le taux de croissance est considéré constant.
- Zone III : Phase de ralentissement.
- Zone IV : Phase à taux de croissance nul et à la suite de laquelle, on constate généralement une diminution de la concentration en micro-organismes.

Une explication de ces différentes phases a été donnée par Monod (24) qui montre entre autres que la phase de latence est indépendante des autres phases. Ce qui est logique puisqu'il s'agit de l'équivalent d'un retard pur en physique.

Mais revenons aux expressions analytiques qui peuvent modéliser cette croissance. Si on part du principe que la vitesse de croissance d'une population quelconque est proportionnelle à la quantité (ou concentration) de cette même population, et que le milieu de culture est homogène alors, il est toujours possible d'écrire la loi de croissance d'une population sous la forme de l'équation différentielle suivante :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu X(t) \quad (6)$$

où $X(t)$ est la concentration en micro-organismes (en g/l) à l'instant t
et μ le taux de croissance en h^{-1}

Néanmoins, pour représenter une fermentation simple dans un fermenteur infiniment mélangé, il faut considérer au minimum le système suivant :

$$\begin{aligned} dX(t)/dt &= f(X(t), S(t), P(t)) \text{ Croissance microbienne} \\ dS(t)/dt &= g(X(t), S(t), P(t)) \text{ Elimination du substrat} \\ dP(t)/dt &= h(X(t), S(t), P(t)) \text{ Biosynthèse du produit} \end{aligned} \quad (7)$$

Avec les conditions initiales $X_0 = X(0)$, $S_0 = S(0)$ et $P_0 = P(0)$

Cependant, ce système d'équations différentielles risque d'être incomplet. En effet, il ne tient pas compte des variations d'autres grandeurs telles que le pH ou la température. Ceci est dû au fait qu'on les maintient généralement à des valeurs constantes, par une régulation adéquate. Bon nombre d'auteurs simplifient le système (7) en considérant l'existence d'une proportionnalité entre la vitesse de croissance, la dégradation du substrat et la production de métabolite, ce qui n'est pas toujours vrai. Ces considérations leurs permettent de réduire l'écriture du système (7) à :

$$\begin{aligned}dX(t)/dt &= f(X(t),S(t),P(t)) & (a) \\dS(t)/dt &= - k_1 dX(t)/dt & (b) \\dP(t)/dt &= k_2 dX(t)/dt & (c)\end{aligned} \tag{8}$$

Où k_1 et k_2 sont des constantes positives.

Ces considérations ramènent la modélisation d'un tel processus, à la recherche de l'expression analytique de $f(X,S,P)$. Cela explique certainement le nombre important de modèles proposés dans la littérature spécialisée à cet effet. Nous allons présenter, ci-après, quelques uns d'entre eux, tout en distinguant deux classes : l'une sans inhibition et l'autre avec inhibition.

II.2.1- Sans inhibition

Dans cette classe, on suppose que la croissance des micro-organismes n'est limitée que par l'épuisement du milieu en substrat.

II.2.1.1- Modèle de TEISSIER

Teissier part des hypothèses suivantes : (31)

- 1- Le rendement matériel du processus de croissance est constant, ce qui peut se traduire analytiquement par l'équation (8-b).
- 2- Le taux de croissance tend vers une limite lorsque la concentration en substrat augmente.
- 3- La variation du taux de croissance par rapport à la concentration du substrat est d'autant plus rapide qu'est plus grand l'écart entre le taux actuel(courant) et le taux maximum.

Cela peut être formulé par l'équation différentielle suivante:

$$\frac{d\mu}{dt} = \alpha (\mu_{\max} - \mu) \quad (9)$$

μ étant le taux de croissance; μ_{\max} le taux de croissance maximum et α une constante. En intégrant cette équation, on obtient l'expression de μ :

$$\mu = \mu_{\max} (1 - e^{-\alpha S}) \quad (10)$$

qui permet d'écrire l'expression du modèle proposé par TEISSIER, à savoir :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu_{\max} X(t) (1 - e^{-\alpha S(t)}) \quad (11)$$

II.2.1.2- Modèle de MONOD

Le modèle de Monod est le plus utilisé en raison de sa simplicité, mais aussi parce que Monod a donné des interprétations biologiques aux constantes contenues dans son modèle. Notons cependant, que l'on peut obtenir l'expression analytique de ce modèle de différentes façons.

a- Monod a d'abord tracé des courbes expérimentales de μ en fonction de la concentration du substrat (S) (fig B.2) , et guidé par des considérations et des commodités de vraisemblance, il a été amené à adopter une forme hyperbolique pour représenter l'évolution du taux de croissance en fonction de la concentration du substrat.

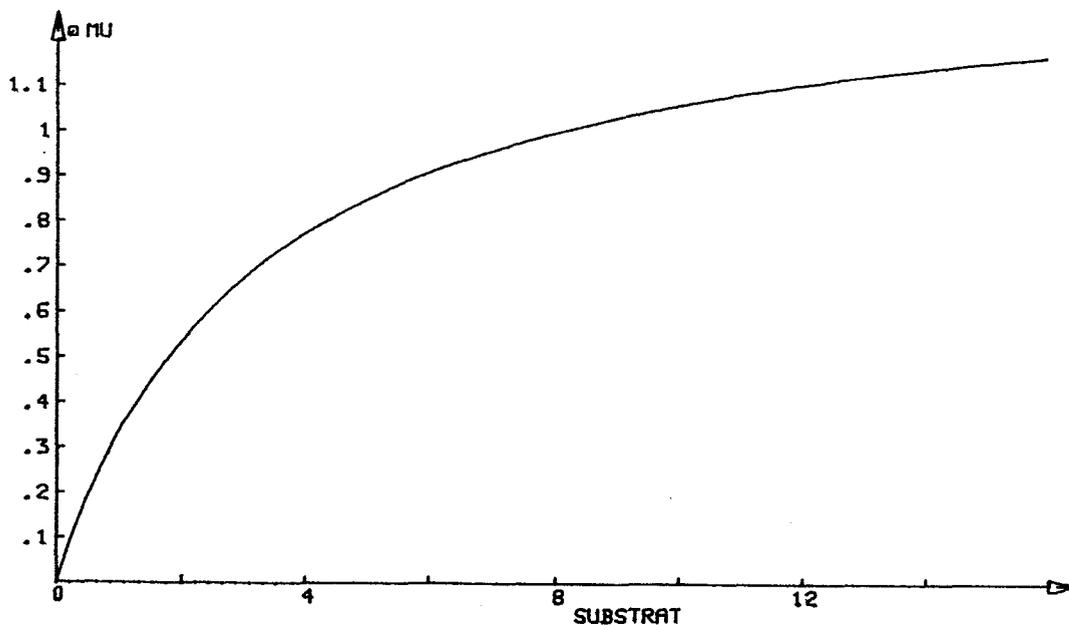


Figure B.2 : Courbe de MONOD

L'expression analytique de $\mu = f(S)$ prend alors la forme :

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S(t)}{k_s + S(t)} \quad (12)$$

et l'expression de la vitesse de croissance devient :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu_{\max} X(t) \frac{S(t)}{k_s + S(t)} \quad (13)$$

b- Dans un second temps, en partant du modèle de Teissier, et en approchant e^x par $(1+x)$, on obtient

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} X(t) \left(1 - \frac{1}{1 + \alpha S(t)} \right) \\ &= \mu_{\max} X(t) \frac{\alpha S(t)}{1 + \alpha S(t)} \end{aligned}$$

ou encore

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu_{\max} X(t) \frac{S(t)}{1/\alpha + S(t)} \quad (14)$$

On aboutit ainsi au modèle de Monod, qu'on peut considérer de la sorte comme une approximation de celui de Teissier.

c- La troisième façon d'aboutir au modèle de Monod, est de considérer l'analogie : Cinétique enzymatique - Taux de croissance, et de faire ainsi le rapprochement entre les équations (13) et (3).

II.2.1.3- Loi Logistique

Reprenons l'équation $dX/dt = f(X,S,P)$, et supposons que le second membre ne dépend que de X. Dans ce cas $f(X)$ peut être développé en série de Taylor :

$$dX/dt = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \dots \quad (15)$$

Comme il n'y a pas de génération spontanée, a_0 est nul. En outre, si nous arrêtons le développement à l'ordre un, nous obtenons [4], [21] :

$$dX/dt = a_1 X \quad (16)$$

Nous retrouvons ainsi la Loi de Malthus, qui peut correspondre à la phase exponentielle de la courbe de croissance (fig B.1). Cependant, cette loi ne peut continuer indéfiniment. Par contre, si nous considérons cette fois les deux premiers termes du développement en série de Taylor, nous aboutissons à l'équation (17), qui n'est autre qu'une expression de la Loi logistique, loi bien connue dans divers domaines.

$$dX/dt = a_1 X + a_2 X^2 \quad (17)$$

En effet, plusieurs auteurs tels que Verhulst (1844), Robertson (1921), Volterra (1935), Deschamps (1903) et Mc Kendrick (1911) ont considéré des hypothèses différentes et ont abouti, par divers cheminements, à cette même expression mathématique pour modéliser la croissance d'une population. Expression qu'ils ont proposée sous la forme suivante :

$$dX/dt = k X (a - X) \quad (18)$$

Une autre expression qui "généralise" la loi logistique, a été proposée par Dewitt (1943) [9], et était utilisée par Edwards, V.H. et Wilke, C.R. (1967) [10] afin d'ajuster au mieux leurs courbes expérimentales. Cette expression est de la forme :

$$dX/dt = - X (1 - X/k) F'(t) \quad (19)$$

et sous forme intégrée $X(t) = \frac{k}{1 + \exp(F(t))}$

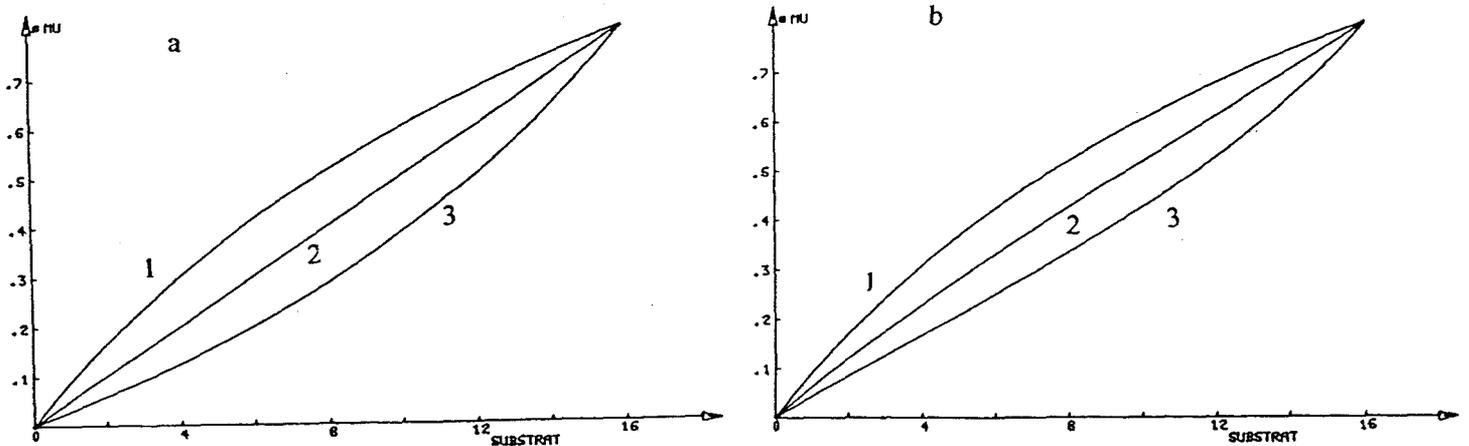
où $F(t)$ est un polynôme en t (t étant le temps)

II.2.1.4- Modèle de CONTOIS

Contois (1959) [8] quant à lui remplace le terme k_s du modèle de Monod par une fonction linéaire de la concentration en micro-organismes. L'expression du taux de croissance (μ) dans son modèle est :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S(t)}{k_c X(t) + S(t)} \tag{20}$$

Pour avoir l'allure de la courbe $\mu = f(S)$, il nous faut deux équations différentielles. Posons alors, $dx/dt = \mu(X,S) X(t)$, $\mu(X,S)$ étant l'expression (20) et posons $dX/dt = -\tau(X,S) X(t)$, où $\tau(X,S)$ représente le taux de dégradation du substrat.



Courbes (1) $\frac{k_c}{\tau_m} > 1$ courbes (2) $\frac{k_c}{\tau_m} = 1$ et courbes (3) $\frac{k_c}{\tau_m} < 1$

Figure B.3 : Courbes de Contois

La courbe (a) est tracée avec $\tau(X,S) = \mu(X,S) \cdot \tau_m$ alors que la courbe (b) est tracée avec $\tau(X,S) = \tau_m (1 - e^{-\alpha S})$. Nous remarquons que les allures se ressemblent dans les deux cas.

II.2.2- Avec inhibition

La prise en compte d'une inhibition éventuelle, par le substrat ou le produit ou encore par les deux ensemble, a été considérée dans l'établissement de bon nombre de modèles. Entre autres :

II.2.2.1- Modèle d'ANDREWS

Andrews (1969), part des considérations suivantes [1], [2] :

- La conversion des A.G.V. en méthane est une réaction limitante de la digestion anaérobie. Autrement dit, la phase méthanogène est la phase dont la vitesse de réaction est la plus lente.
- Cette transformation conditionne donc la vitesse globale de la fermentation méthanique. Andrews ne s'occupe alors que de la modélisation de celle-ci. En outre, il suppose que :
- La vitesse d'apparition des A.G.V. dans le digesteur est le paramètre dynamique le plus significatif pour le contrôle du processus.
- L'inhibition de la méthanogénèse est due à la partie non ionisée des Acides Gras Volatils.

De ce fait, Andrews propose une courbe de dépendance entre le taux de croissance et la concentration en substrat, plus complexe que celle proposée par Monod (fig B.3).

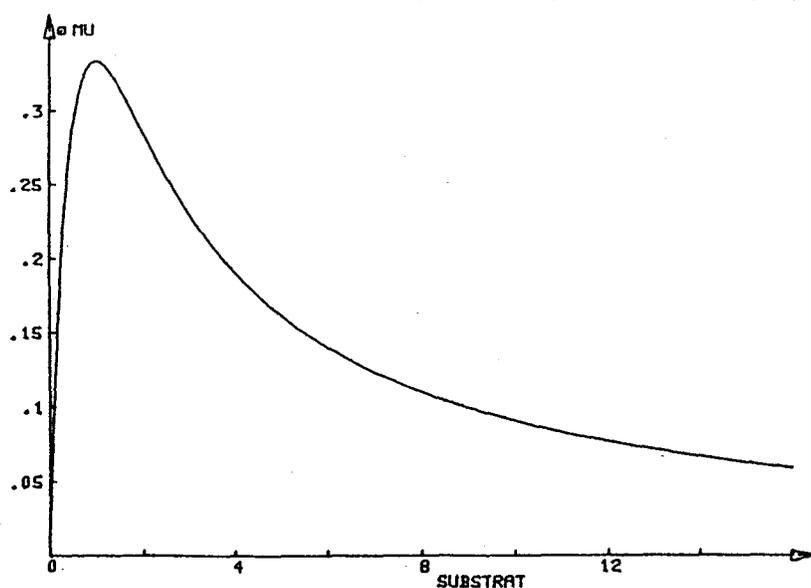


Figure B.4 : Courbe d'Andrews

L'expression proposée pour représenter cette courbe est de la forme

$$\mu = \mu_{\max} \frac{1}{1 + \frac{k_s}{S(t)} + \frac{S(t)}{k_i}} \quad (21)$$

où :

k_s est la constante de saturation,

k_i est la constante d'inhibition,

μ_m est le taux de croissance maximal pouvant être atteint,

S est la concentration de la fraction non ionisée de l'acide gras volatil.

Là encore, nous pouvons déduire cette expression du taux de croissance par analogie avec l'expression de la vitesse de réaction enzymatique avec inhibition par le substrat (5). En outre, Andrews et Buhr ont tenu compte de l'interaction entre les différentes phases (biologique, liquide et gazeuse) ainsi que du coefficient de décès des micro-organismes, qu'ils ont considéré constant.

II.2.2.2- Modèle de HILL et BARTH

Hill et Barth [13], qui travaillent sur le traitement de déchets à fortes concentrations en ammoniac, ajoutent un terme au modèle d'Andrews pour exprimer l'inhibition de la croissance des méthanogènes par la fraction non ionisée de l'ammoniac présente dans le digesteur. L'expression du taux de croissance devient alors :

$$\mu = \mu_{\max} \frac{1}{1 + \frac{k_s}{S(t)} + \frac{S(t)}{k_{is}} + \frac{NH_3}{k_{in}}} \quad (22)$$

Plus récemment, des expressions tenant compte de l'inhibition par le substrat et par le produit ont été proposées pour modéliser le taux de croissance des micro-organismes [20]. Notons celui proposé par Van Den Heuvel pour les acidogènes [33]. Le modèle est de la forme :

$$\mu = \mu_{\max} \frac{S(t) k_p}{\left(k_s + S(t) + \frac{S(t)^2}{k_i} \right) (k_p + P(t))} \quad (23)$$

Par ailleurs, l'étude de la fermentation alcoolique en continu a conduit une équipe du L.A.A.S. de Toulouse à proposer un modèle de conduite pour le contrôle en ligne de plusieurs fermenteurs mis en cascades. Cette équipe ne s'est intéressée qu'aux équations représentant la dégradation du substrat et l'apparition du produit. L'expression de leur modèle prend la forme suivante [5] :

$$\begin{aligned}\frac{dS(t)}{dt} &= \kappa S(t)^\alpha P(t)^\beta \\ \frac{dP(t)}{dt} &= -\delta \frac{dS(t)}{dt}\end{aligned}\tag{24}$$

Laurent R. et Povy L. ([17], [18]), quant à eux, ont abouti à un modèle de dégradation en se basant sur des considérations physiques seulement. Nous y reviendrons plus loin. Enfin, notons que d'autres auteurs incluent la température ou le coefficient de maintenance dans les expressions analytiques de leurs modèles [26], [28].

III

MODELISATION DE LA FERMENTATION METHANIQUE

Nous avons passé en revue les principales phases du processus ainsi que les possibilités d'observations des grandeurs induites. En outre, nous avons essayé de montrer les difficultés que tout cela engendre pour la modélisation d'un tel processus. En effet, la complexité des phénomènes impliqués nous a incités à adopter le schéma simplifié suivant :

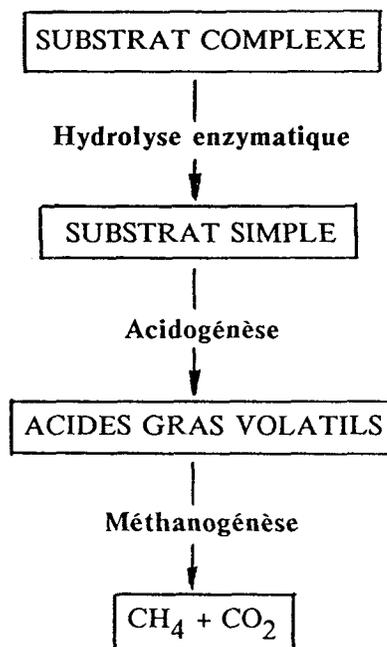


Figure B.4 : Schéma de modélisation de la fermentation méthanique

Par ailleurs, les problèmes d'évaluation des concentrations en micro-organismes dans les procédés monoétapes d'une part, et l'avenir des procédés en deux étapes d'autre part, nous ont incités à scinder le schéma de la figure (B.4) en trois parties :

- 1- L'hydrolyse enzymatique
- 2- L'acidogénèse
- 3- La méthanogénèse

Les mesures que nous avons en notre possession nous permettent d'étudier les deux

dernières parties. Ces mesures proviennent de la station de technologie de l'INRA à Villeneuve d'Ascq. Notons que les fermenteurs utilisés sont des infiniment mélangés.

III.1- ETUDE GRAPHIQUE DE L'ACIDOGENESE

Le schéma représentant cette phase se réduit à :

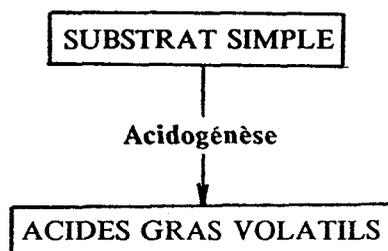


Figure B.6 : Schéma simplifié de l'acidogénèse

Nous présentons (Fig. B.6) deux expériences qui nous serviront d'illustration tout au long du développement. L'homogénéité du milieu nous permet d'écrire le modèle représentant cette phase sous la forme d'un système d'équations différentielles ordinaires. Autrement dit, l'acidogénèse sera considérée comme un système dynamique continue à observations discrètes :

$$\begin{aligned}
 dY(t)/dt &= F(Y, \Theta, t) && \text{avec } Y_0 = Y(0) \\
 S(t_i) &= C Y(t_i) && i = 0, 1, 2, \dots
 \end{aligned}
 \tag{25}$$

Nous avons considéré les grandeurs X (biomasse), S (substrats) et P (produit) comme variables d'état du système. Elles sont d'ailleurs toutes trois directement mesurables, ce qui nous permet de prendre la matrice d'observation C égale à la matrice d'identité. Le système d'équations s'écrit alors :

$$Y' = \begin{pmatrix} X' \\ S' \\ P' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(X, S, P, \Theta) \\ g(X, S, P, \Theta) \\ h(X, S, P, \Theta) \end{pmatrix} = F(Y(t), \Theta) \tag{26}$$

Avec les conditions initiales $X_0 = X(0)$, $S_0 = S(0)$ et $P_0 = P(0)$

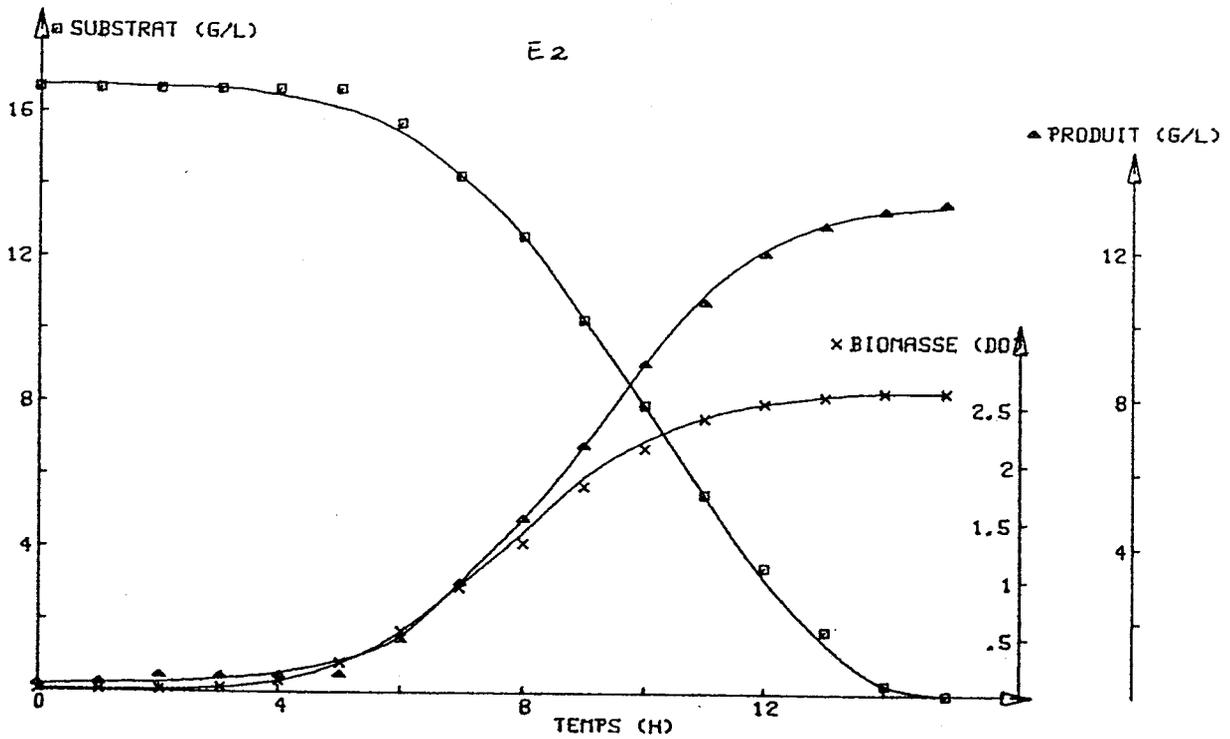
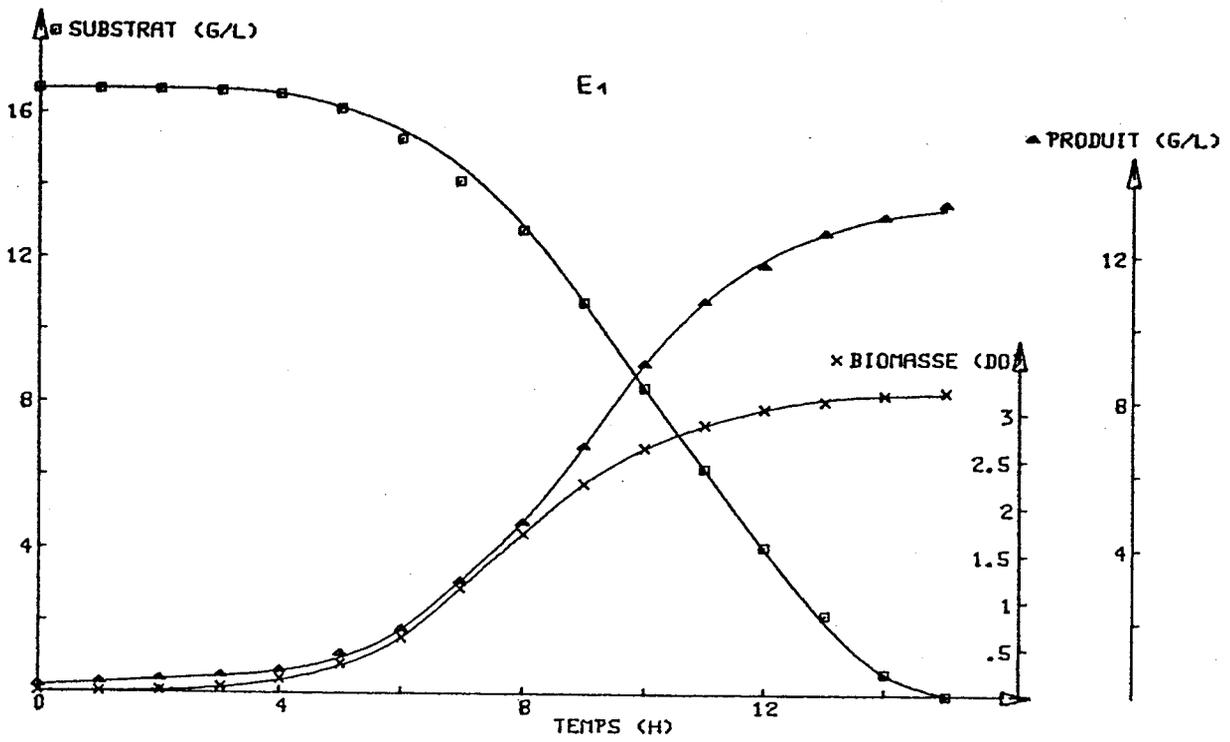


Figure B.7 (a) : Courbes expérimentales de cultures en batch

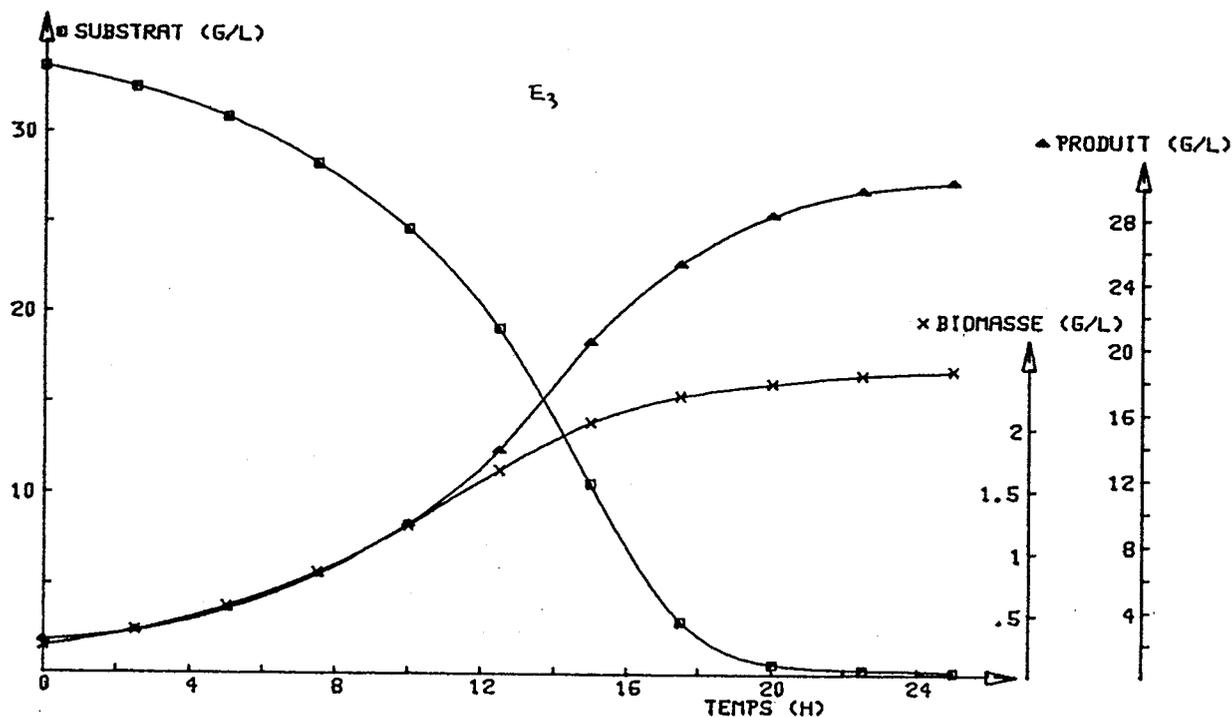


Figure B.7 (b): Courbes expérimentales de cultures en batch

Nous présentons trois expériences qui nous serviront de support tout au long de ce rapport. Dans les deux premières, la mesure de la concentration de la biomasse est exprimée en unité de densité optique, celle -ci étant faite par dilution ce qui la rend proportionnelle à la concentration de la biomasse exprimée en g/l. Pour la troisième expérience, toutes les mesures sont exprimées en g/l.

Dans un premier temps, nous avons testé le modèle d'Andrews en considérant le produit comme inhibiteur. Le résultat n'a guère été convaincant. Nous avons procédé alors à une étude graphique à l'image de celle faite par Monod. Notre objectif consistait à comparer les courbes des taux de croissance expérimentaux ($1/X * dX/dt$) aux diverses courbes théoriques proposées dans la littérature, par Monod, Andrews et Contois notamment. Pour atteindre cet objectif, il s'avère nécessaire :

- 1- De déterminer les courbes représentant les différentes dérivées.
- 2- De calculer d'une manière précise l'ensemble des valeurs numériques qui en découlent.

Dans le but de respecter ces deux contraintes, nous avons procédé à un lissage des points expérimentaux par des fonctions splines cubiques d'ajustement. Celles-ci permettent d'avoir des courbes continues et dérivables à partir d'un réseau de couples de

points(annexe). Cette technique de lissage nous facilite le traçage des vitesses expérimentales de dégradation de substrat, de la croissance des micro-organismes et de la biosynthèse de produit.

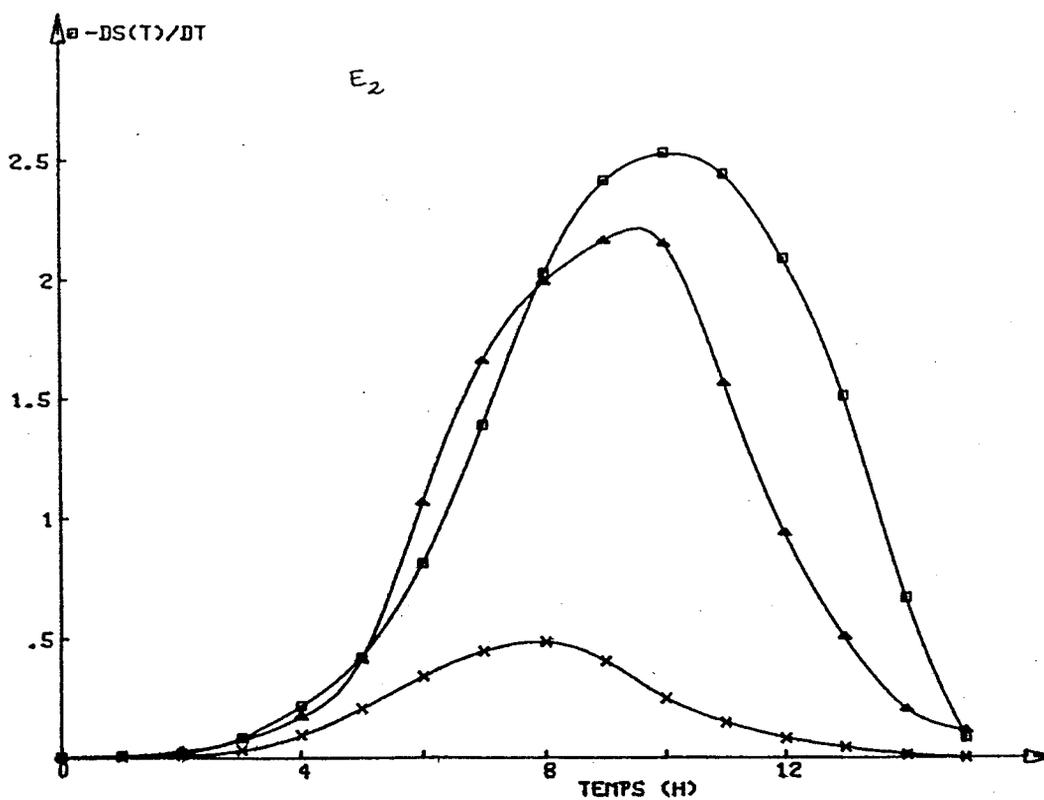
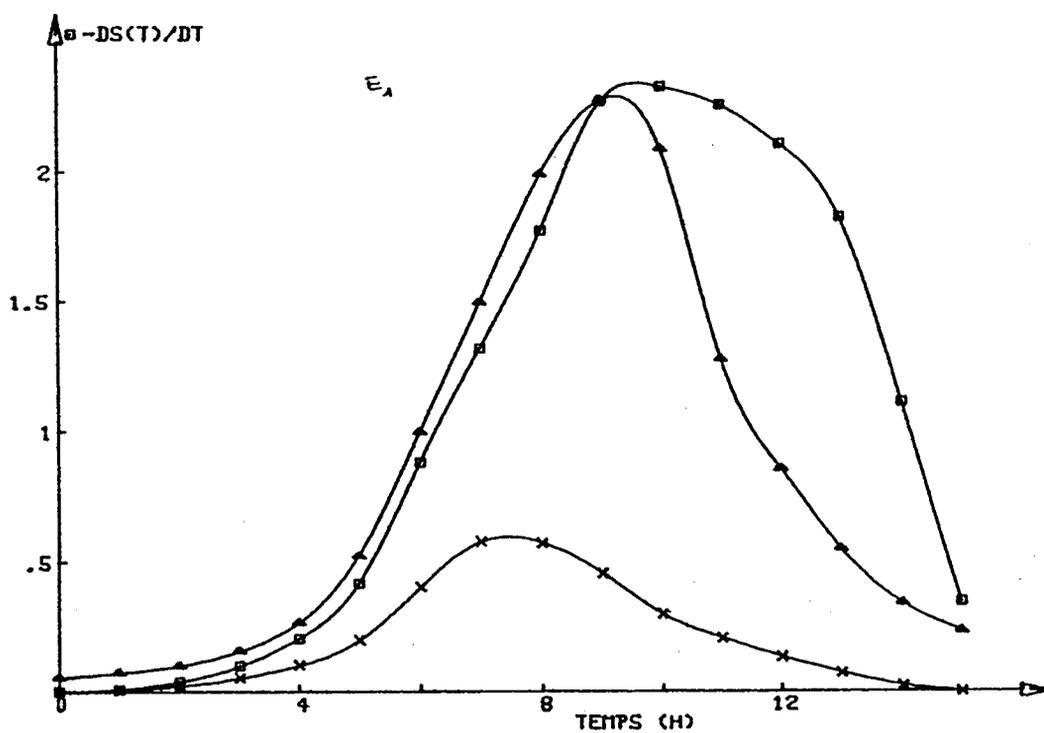


Figure B.8 (a) : Courbes des vitesses calculées par des splines cubiques

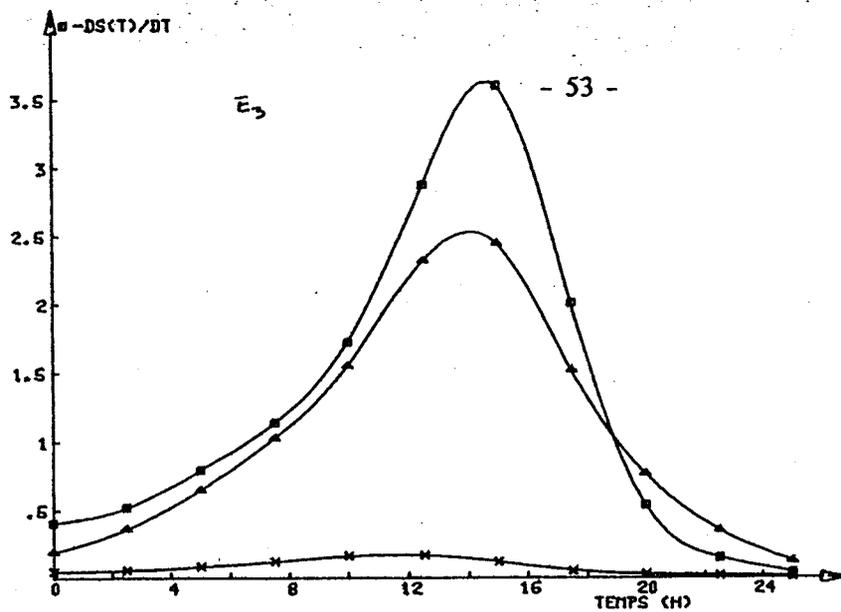


Figure B.8 (b) : Courbes des vitesse calculées par des splines cubiques

Nous constatons effectivement que les vitesses de disparition de substrat et de production d'acide ne sont pas proportionnelles à celle de la croissance des bactéries. De ce fait, nous nous sommes proposés d'étudier ces différentes vitesses séparément.

III.1.1- La croissance des micro-organismes

Nous avons considéré que l'équation générale de la cinétique de croissance est de la forme :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu X(t) \quad (27)$$

Cette considération nous a amenés à regarder de près les courbes de la fonction $f(S) = (1/X) * (dX/dt) = \mu$, qui ont les allures suivantes :

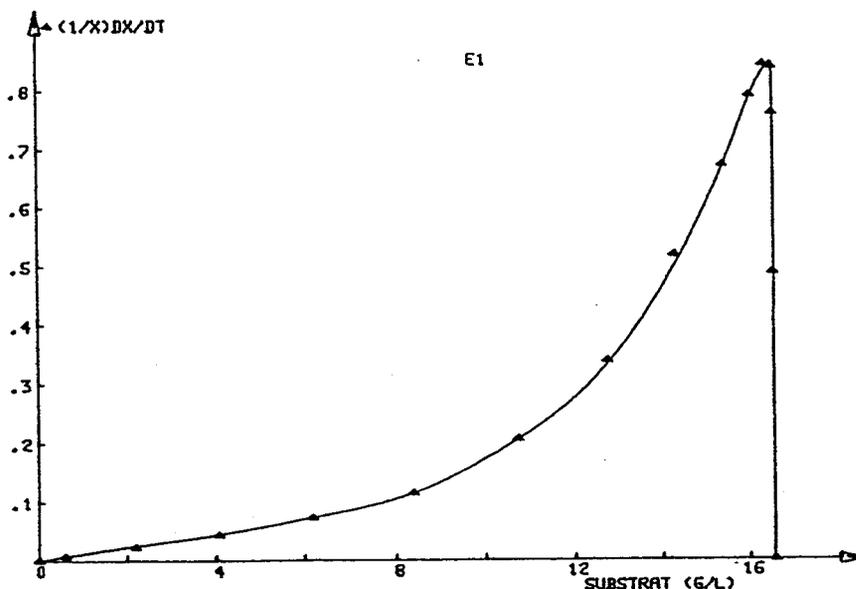


Figure B.9 (a) : Taux de croissance expérimentaux en fonction du substrat

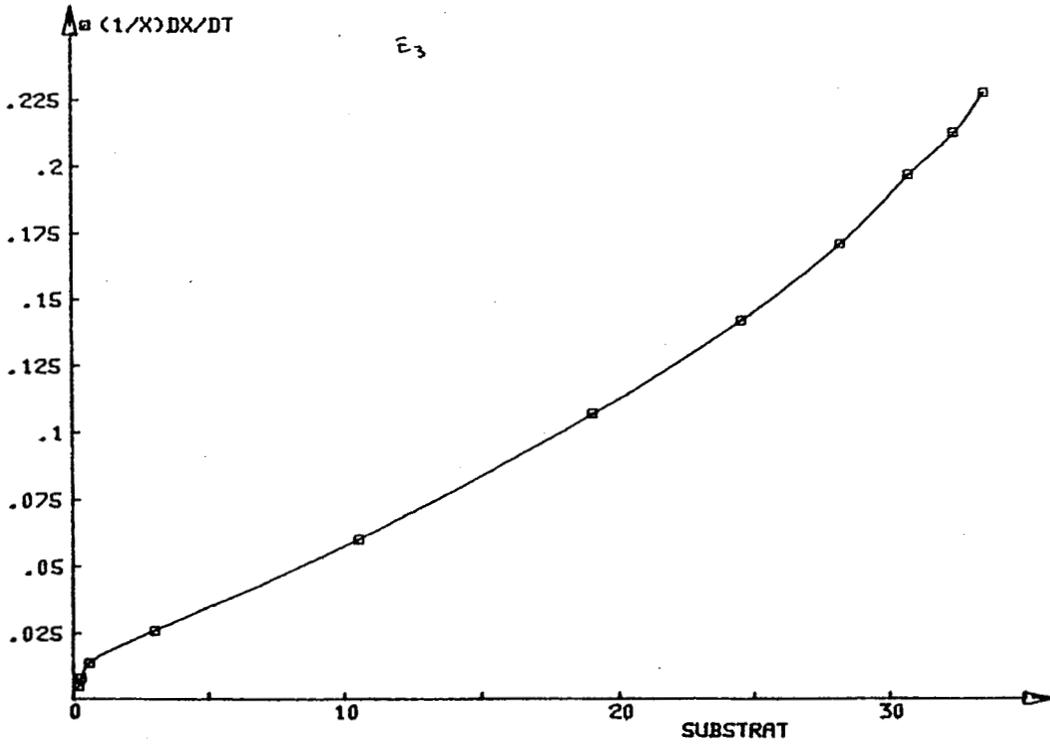
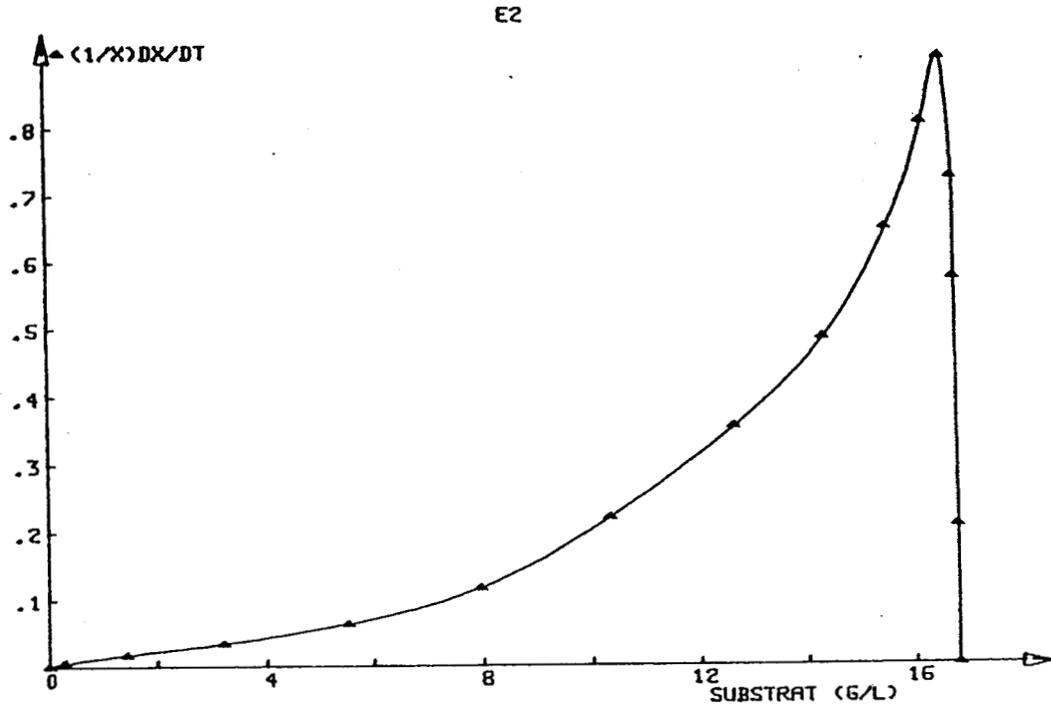


Figure B.9 (b) : Taux de croissance expérimentaux en fonction du substrat

Nous constatons que ces courbes sont nettement différentes de celles proposées par Monod et par Andrews. Cependant, elles se rapprochent de celle proposée par Contois (cas 1).

Deux cas de figure alors peuvent se présenter :

1 - Si nous ne tenons pas compte d'une inhibition éventuelle par le produit ces courbes peuvent être représentées par le modèle de Contois.

2 - Si par contre nous supposons que les déformations de ces courbes ne sont dues qu'à l'effet inhibiteur du produit, il faut pousser plus loin notre étude pour s'en assurer.

Pour ce faire, nous avons tracé ces mêmes courbes en fonction des concentrations du produit :

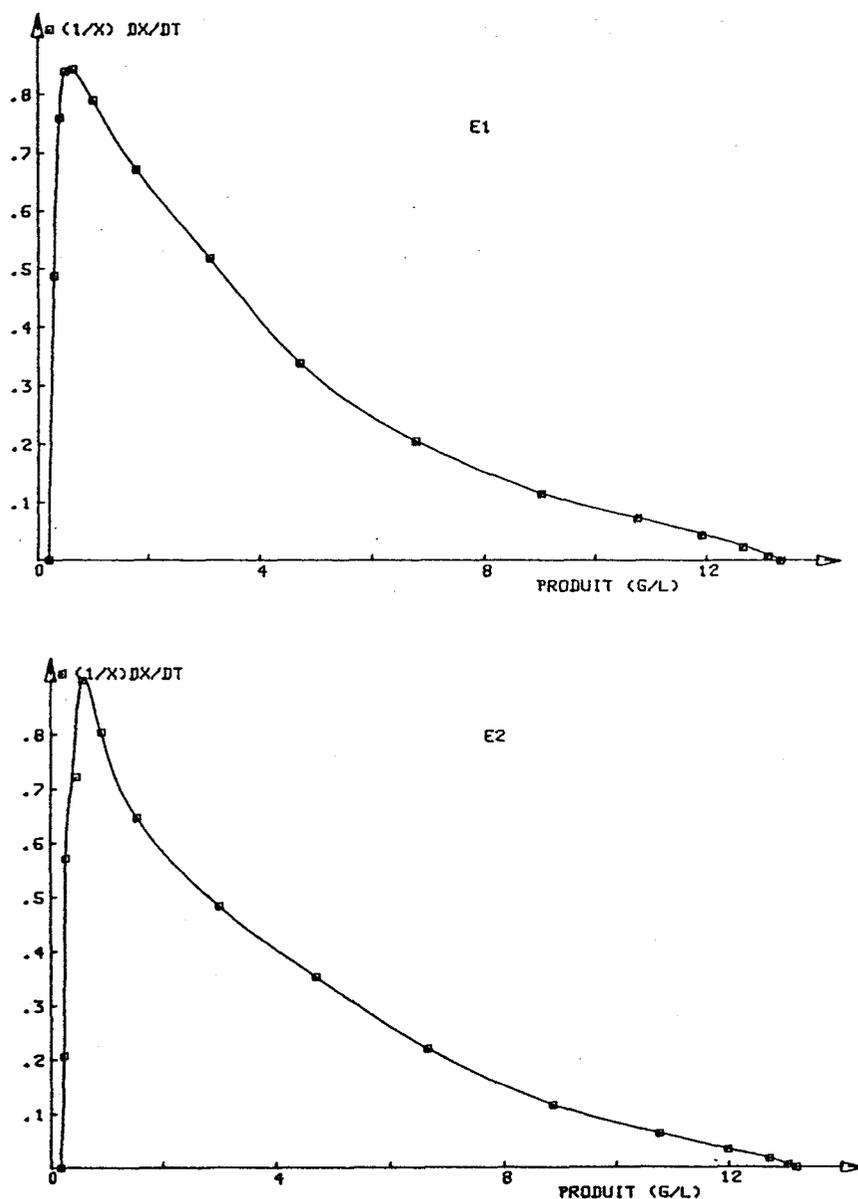


Figure B.10 (a) : Taux de croissance expérimentaux en fonction du produit

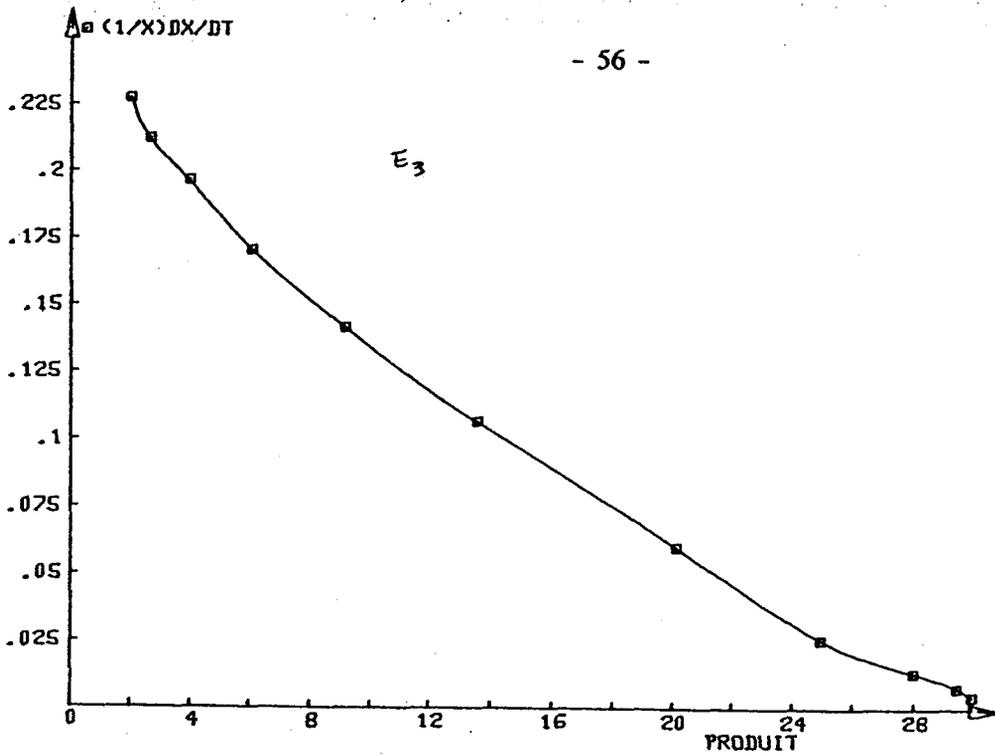
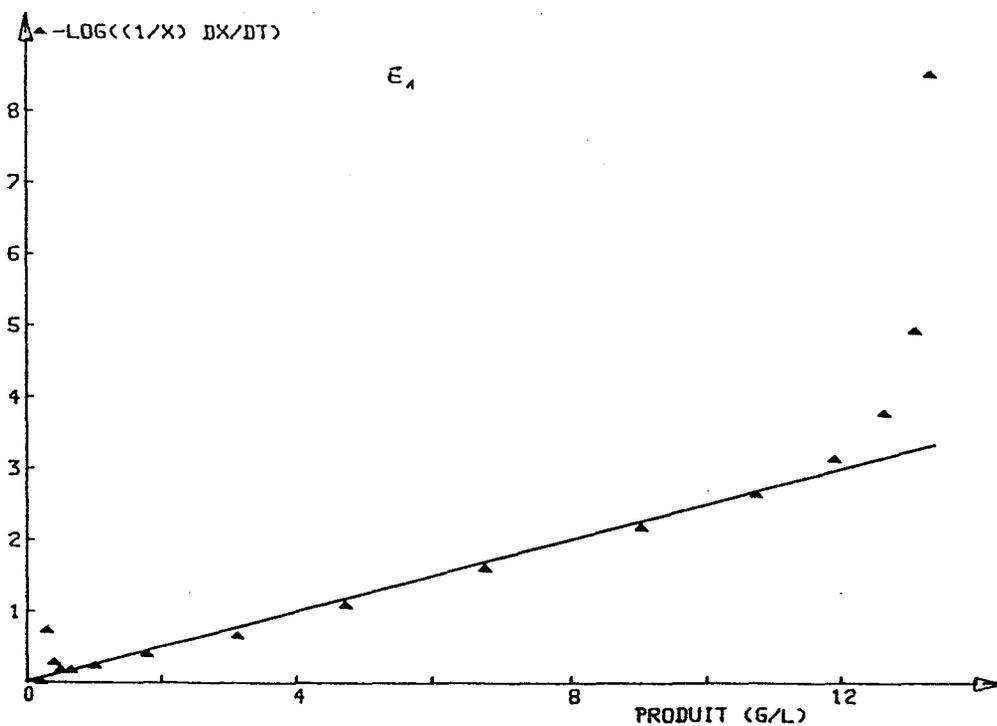


Figure B.10 (b) : Taux de croissance expérimentaux en fonction du produit

Une analyse succincte de ces courbes fait apparaître que:

- Le début des courbes correspond aux phases de latences. Juste après, la valeur du taux de croissance devient relativement importante.
- Au fur et à mesure que la concentration du métabolite augmente, le taux de croissance, quant à lui diminue.

En outre, nous pouvons constater que cette inhibition se fait d'une manière exponentielle. Pour nous en convaincre, nous avons tracé les courbes correspondantes à la fonction : $-\text{Log}((1/X) dX/dt) = f(P)$.



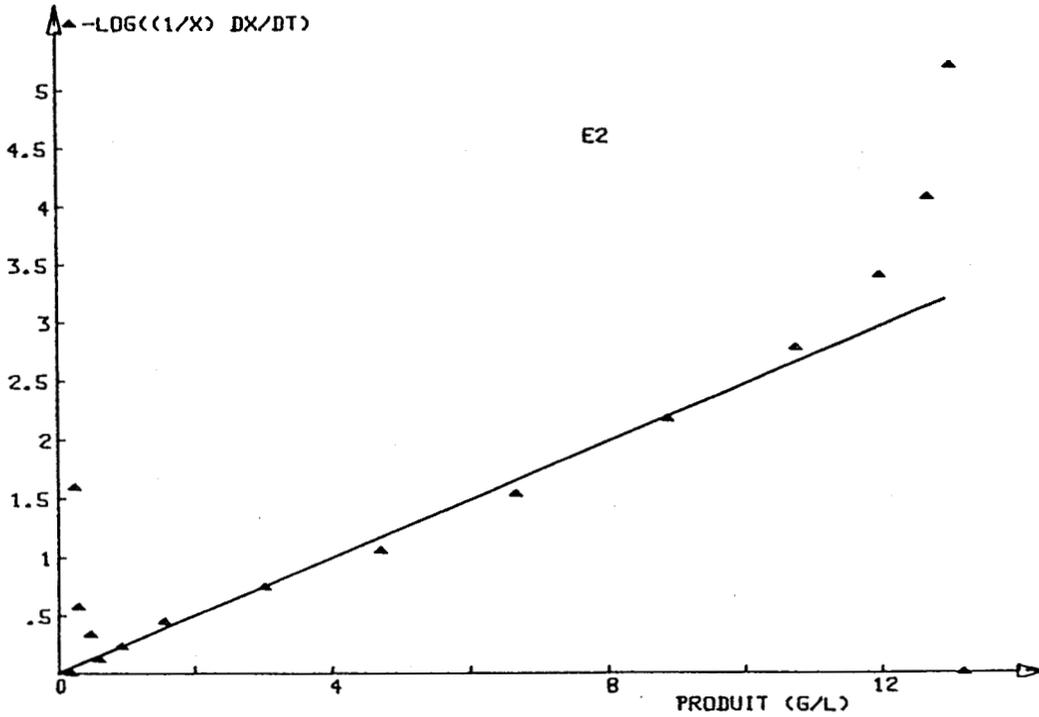
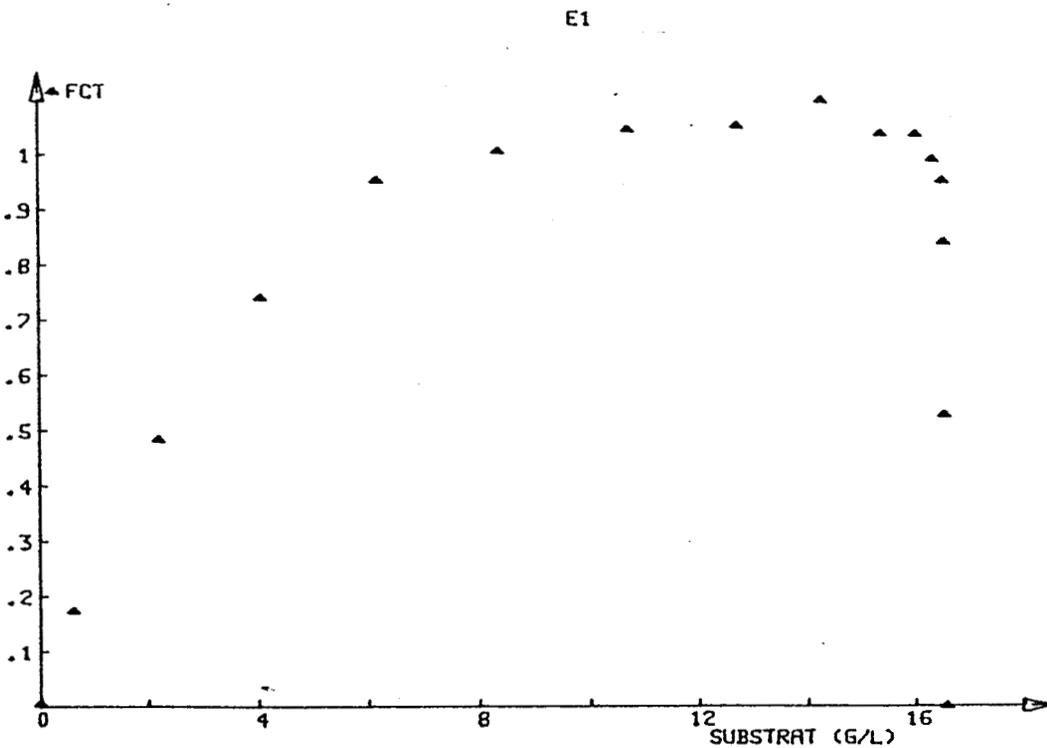


Figure B.11 : Corrélation entre le taux de croissance et la concentration du produit

Ces courbes montrent clairement la forme analytique de l'effet inhibiteur du produit sur la croissance des bactéries. Par la suite, le traçage des courbes relatives à la fonction $FCT = (1/X) * (dX/dt) e^{\alpha P}$ ci-dessous fait apparaître des courbes d'allures classiques et bien connues dans le domaine de la cinétique de croissance.



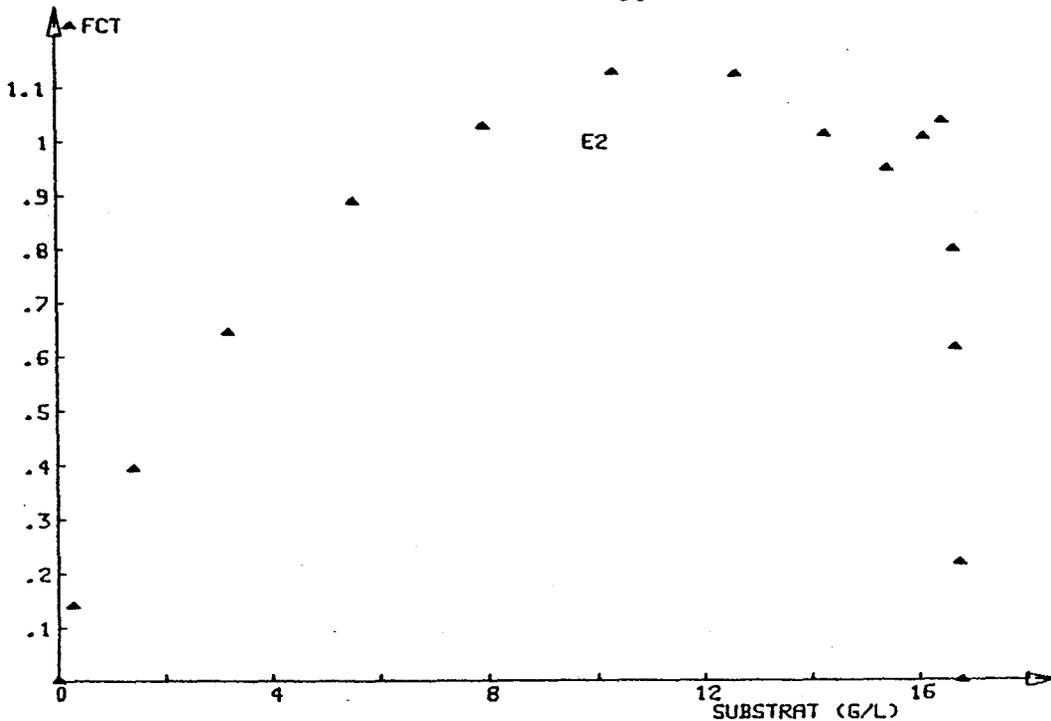


Figure B.12 : courbes relatives aux fonctions FCT

Cette fois, nous pouvons rapprocher ces courbes de celles proposées par Monod d'une part et par Teissier d'autre part. Cependant, une alternative se présente alors : laquelle de ces représentations choisir ?

A ce propos nous citons un passage de la thèse de Monod :

"... Nous avons admis que la relation, taux de croissance-concentration des aliments pouvait être représentée par une courbe hyperbolique, alors que les hypothèses de Teissier l'ont conduit à exprimer cette relation par l'arc asymptotique d'une exponentielle. En fait, il n'existe pas de raisons théoriques qui permettent avec quelque certitude de faire un choix entre ces deux représentations

...Il est vrai que le raisonnement qui conduit à accepter une relation exponentielle, est d'une portée plus générale, mais l'équation (11) à laquelle on est ainsi amené, présente l'inconvénient d'être d'un maniement peu commode, et de se prêter difficilement aux calculs numériques. Le remplacement de la relation exponentielle par une hyperbolique permet en revanche d'aboutir à une équation différentielle facilement intégrable." (Monod,1942) [24].

Or les calculateurs actuels ainsi que les méthodes numériques en vigueur aujourd'hui permettent de pallier ces difficultés. Les allégations de Monod justifient en partie notre choix pour une représentation plus générale que celle proposée par lui, et en l'occurrence nous optons pour celle de Teissier. En outre, nous avons procédé à une comparaison entre les deux modèles pour voir lequel représenterait le mieux les points issus des mesures expérimentales.

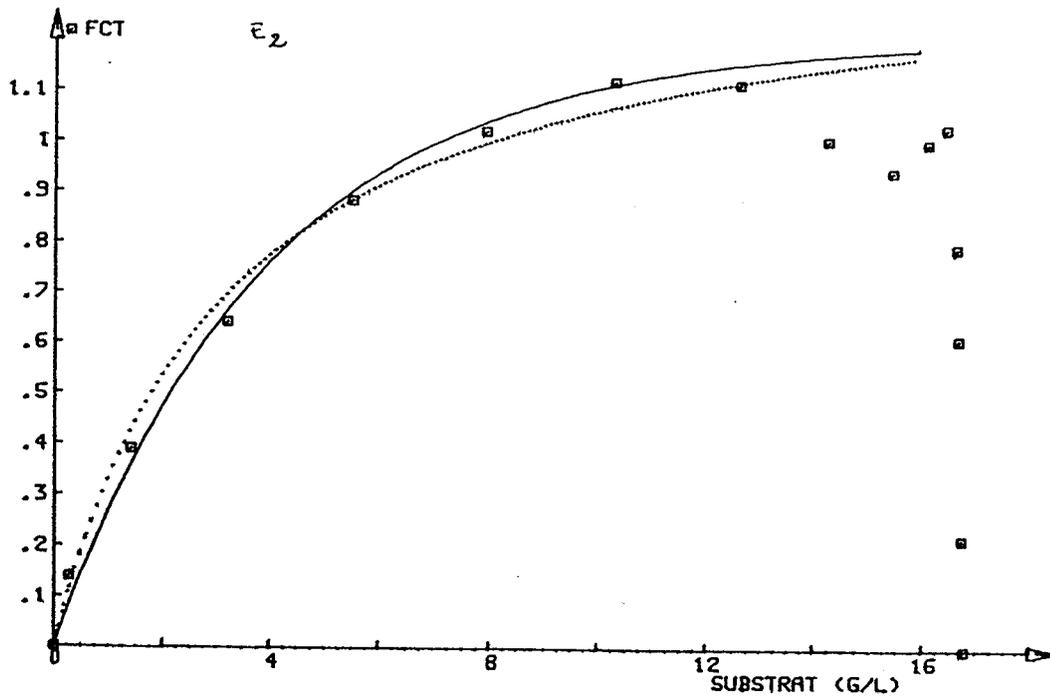
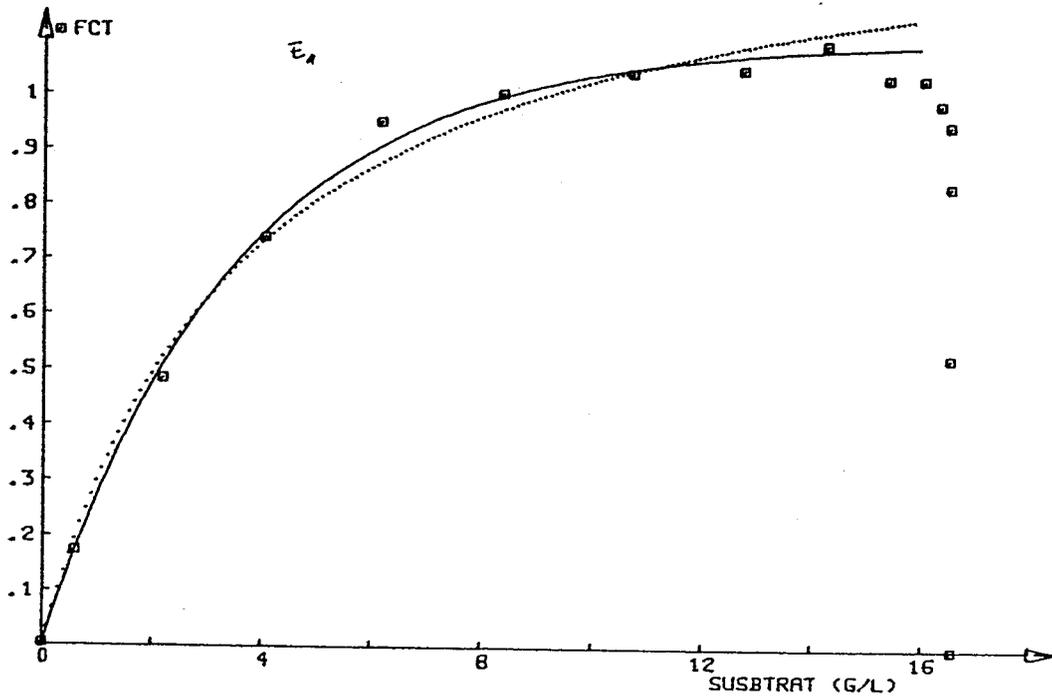


Figure B.13 : Comparaison entre le modèle de Monod et celui de Teissier

Cette étude ainsi résumée, nous a permis d'aboutir à la représentation suivante pour le taux de croissance des bactéries acidogènes :

$$\mu = \mu_{\max} e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) \quad (28)$$

L'équation différentielle de la cinétique de croissance devient alors :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu_{\max} X(t) e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) \quad (29)$$

III.1.2- La dégradation du substrat

L'expression admise pour représenter la dégradation du substrat est :

$$dS(t)/dt = -1/R * dX(t)/dt$$

Or, si nous observons, en plus des allures des différentes vitesses, celles représentant S(t) en fonction de X(t) (Fig B.14), nous constatons que ces courbes sont loins d'être des droites.

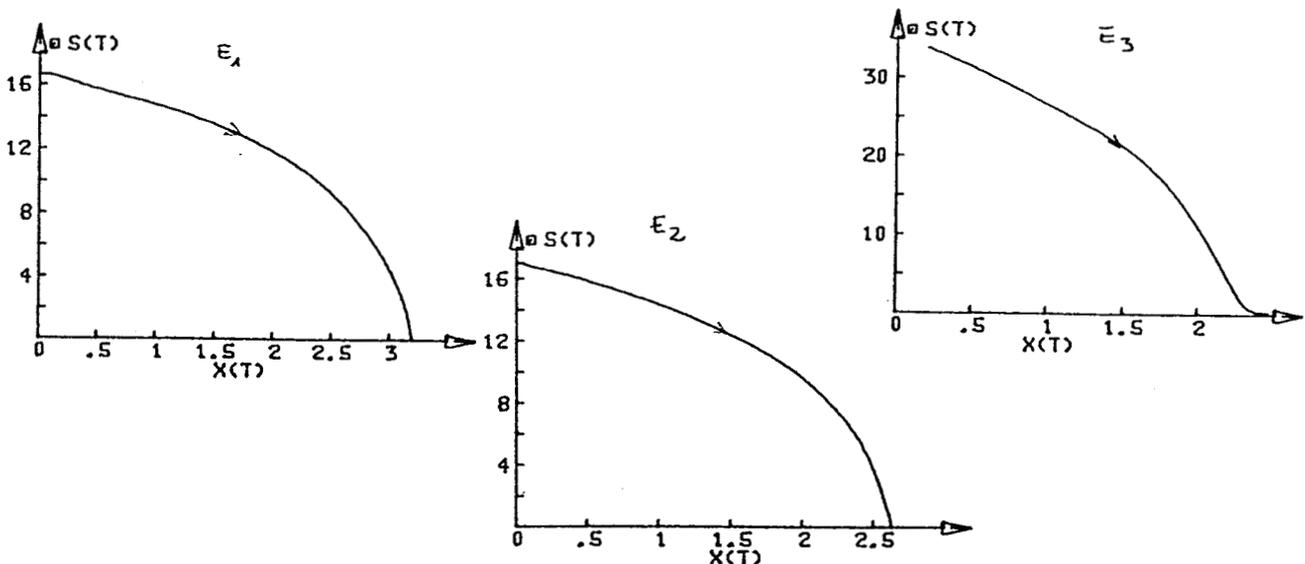


Figure B.14 Courbes de S(t) en fonction de X(t)

De ce fait, nous avons entrepris une étude similaire à celle faite pour la détermination du taux de croissance pour trouver une expression analytique représentant la vitesse de dégradation du substrat. Nous sommes partis du principe suivant :

La quantité de substrat dégradée par unité de temps est proportionnelle à la concentration en micro-organismes. Ce qui nous permet d'écrire l'équation suivante pour la vitesse de dégradation :

$$\frac{dS(t)}{dt} = - \tau(S(t), P(t)) X(t) \quad (30)$$

où le taux de dégradation $\tau(S,P)$ est supposé dépendre de la concentration en substrat et éventuellement de la concentration en produit. Pour déterminer l'expression analytique de $\tau(S,P)$, nous avons tracé les courbes, issues des valeurs expérimentales et correspondantes aux fonctions $\tau(S,P) = -(1/X) dS/dt$.

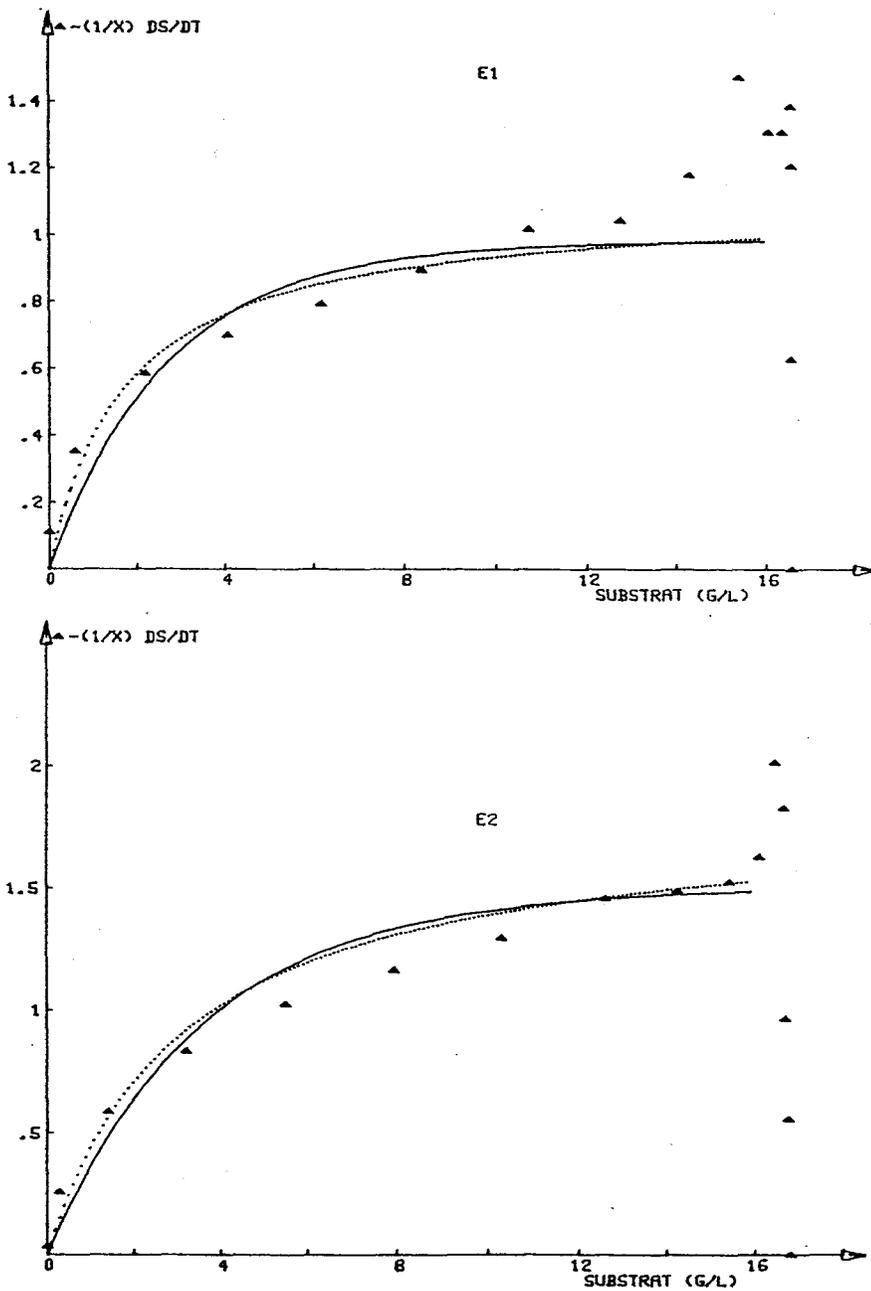


Figure B.15 : Taux de dégradation en fonction du substrat

Nous voyons effectivement apparaître les formes classiques proposées par Monod et par Teissier. Là aussi, nous avons "préféré" la représentation de Teissier (qui est plus générale) bien qu'elles soient toutes deux aussi valables. Nous pouvons alors écrire le taux de dégradation $\tau(S)$ sous la forme :

$$\tau(S) = \tau_{\max} (1 - e^{-\gamma S}) \quad (31)$$

Avec τ_{\max} , réel positif qui représente le taux de dégradation maximal.

Nous en déduisons l'expression analytique du modèle retenu pour représenter la vitesse de dégradation du substrat :

$$\frac{dS(t)}{dt} = - \tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) \quad (32)$$

Remarque : Nous constatons que l'inhibition par le produit n'apparaît pas dans cette équation (32). Ce qui est logique à notre avis, puisque l'inhibition se manifeste au travers de l'activité des micro-organismes. Donc l'inhibition de la dégradation du substrat se fait, dans notre cas, par l'intermédiaire de la variable X et c'est ça qui donne deux équations différentielles pas forcément proportionnelles

III.1.3- La biosynthèse du produit

L'observation des courbes représentant P(t) en fonction de S(t) et de X(t) (fig B.16) montre qu'à la limite nous pouvons conserver l'équation $dP(t)/dt = -k dS(t)/dt$, expression qui, à notre avis, n'est pas exhaustive.

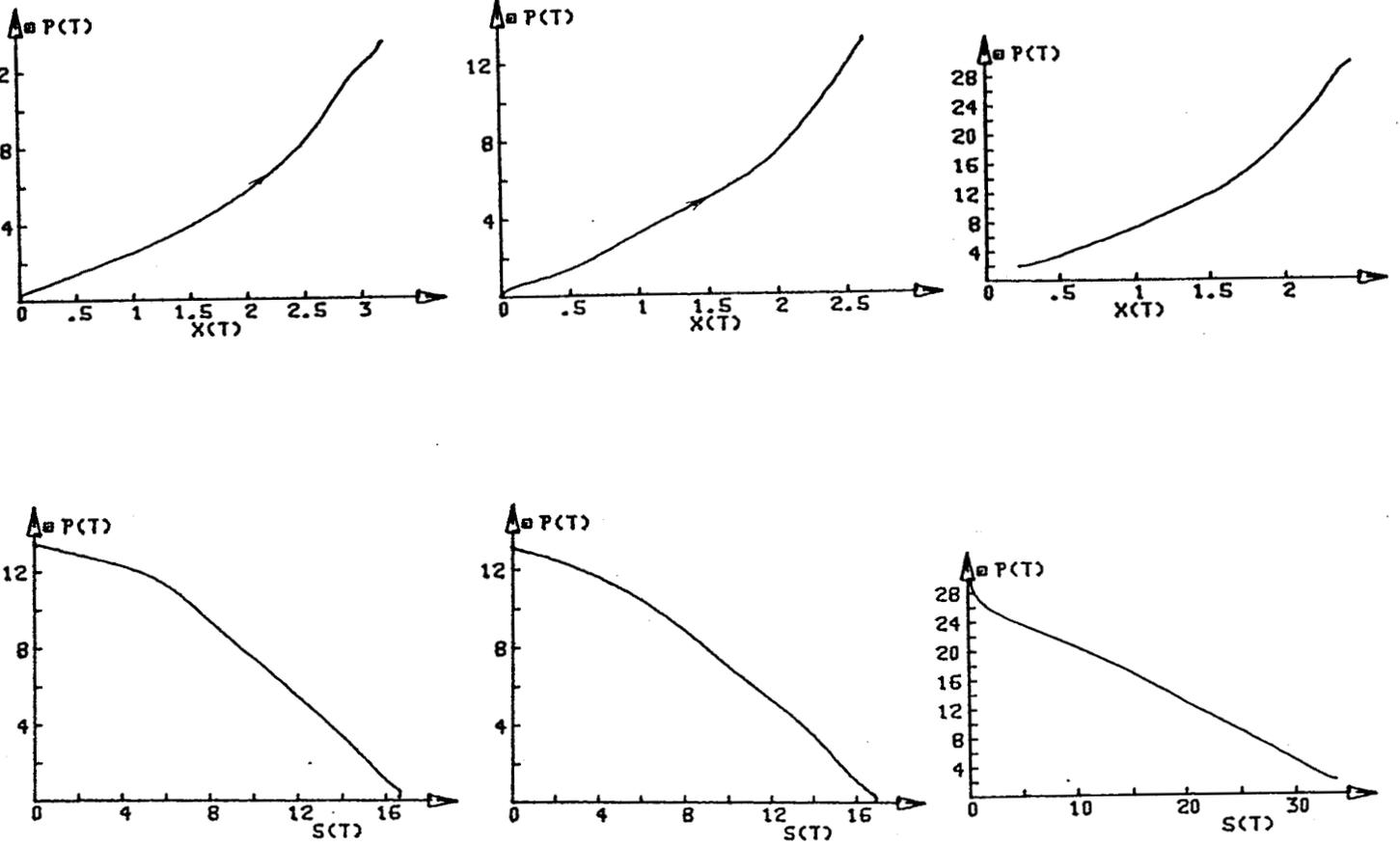
Par ailleurs, nous avons effectué quelques tentatives du même type que les précédentes, mais sans succès. La cause en est certainement l'insuffisance du nombre des expériences dont nous disposons. Cependant, nous proposons, ci-dessous, deux expressions pour représenter la biosynthèse du produit :

$$\frac{dP(t)}{dt} = -k \frac{dS(t)}{dt} \quad (33)$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = k X(t) (1 - e^{-\delta S(t)})$$

E_1

- 63 -

 E_2 E_3 Figure B.16 : Dépendance entre $P(t)$, $S(t)$ et $X(t)$

L'expression du modèle, que nous adoptons pour représenter la phase acidogène de la fermentation méthanique, prend alors la forme :

$$\begin{aligned}
 \frac{dX(t)}{dt} &= \mu X(t) & X_0 &= X(0) \\
 \frac{dS(t)}{dt} &= -\tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) & S_0 &= S(0) \\
 \frac{dP(t)}{dt} &= k h(X(t), S(t)) & P_0 &= P(0)
 \end{aligned} \tag{34}$$

où μ peut prendre une des deux expressions suivantes :

$$\mu = \mu_{\max} e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) \quad \text{ou} \quad \mu = \mu_{\max} \frac{S(t)}{k_c + S(t)}$$

$$\text{Et } h(X, S) = -dS(t)/dt \quad \text{ou encore} \quad h(S, X) = X(t) (1 - e^{-\delta S(t)})$$

Toutes les constantes sont positives

III.2- LA METHANOGENESE

Comme nous l'avions mentionné antérieurement, nous avons considéré pour cette phase de la fermentation méthanique le schéma suivant :

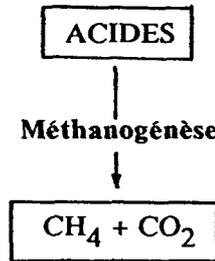


Figure B.17 : Schéma simplifiée de la phase méthanogène

Nous pouvons constater sur les expériences présentées sur la figure B.15 que, ni les concentrations en micro-organismes, ni le volume du gaz carbonique dégagé (CO_2) n'ont été mesurés. Nous avons considéré, là aussi, les trois grandeurs principales (biomasse, substrat et produit) comme variables d'état. D'autre part, cette phase du processus peut être représentée par un système d'équations différentielles (fermenteurs supposés infiniment mélangés).

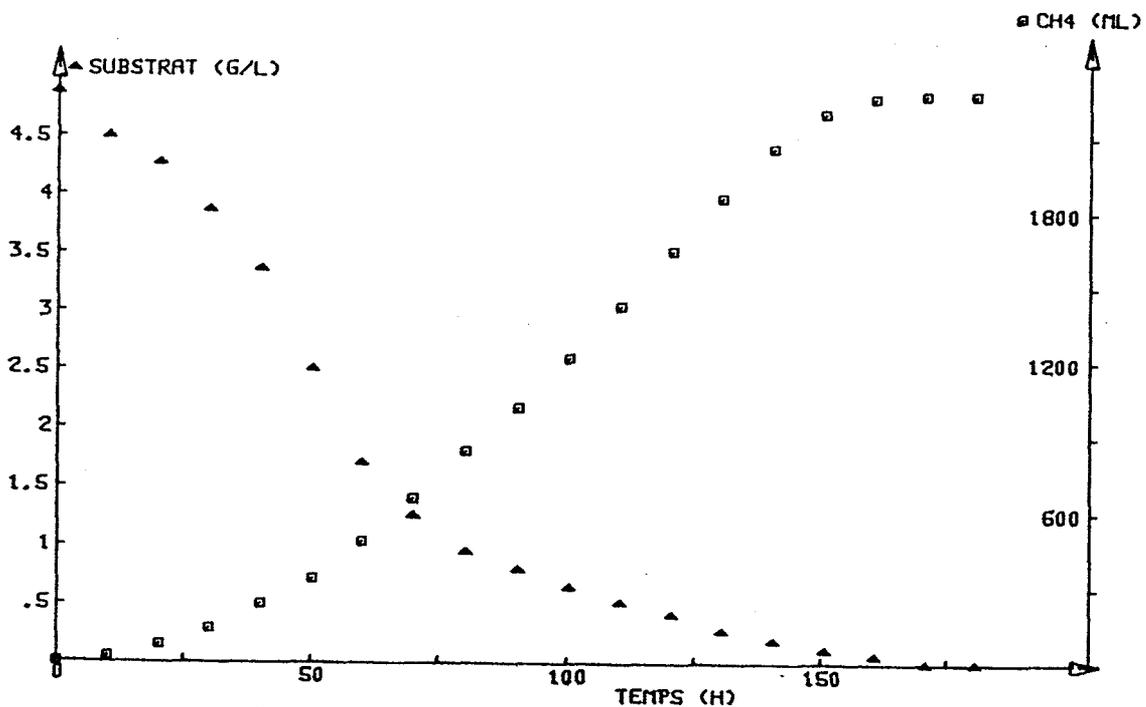


Figure B 18 (a) : Exemple de fermentation méthanogène

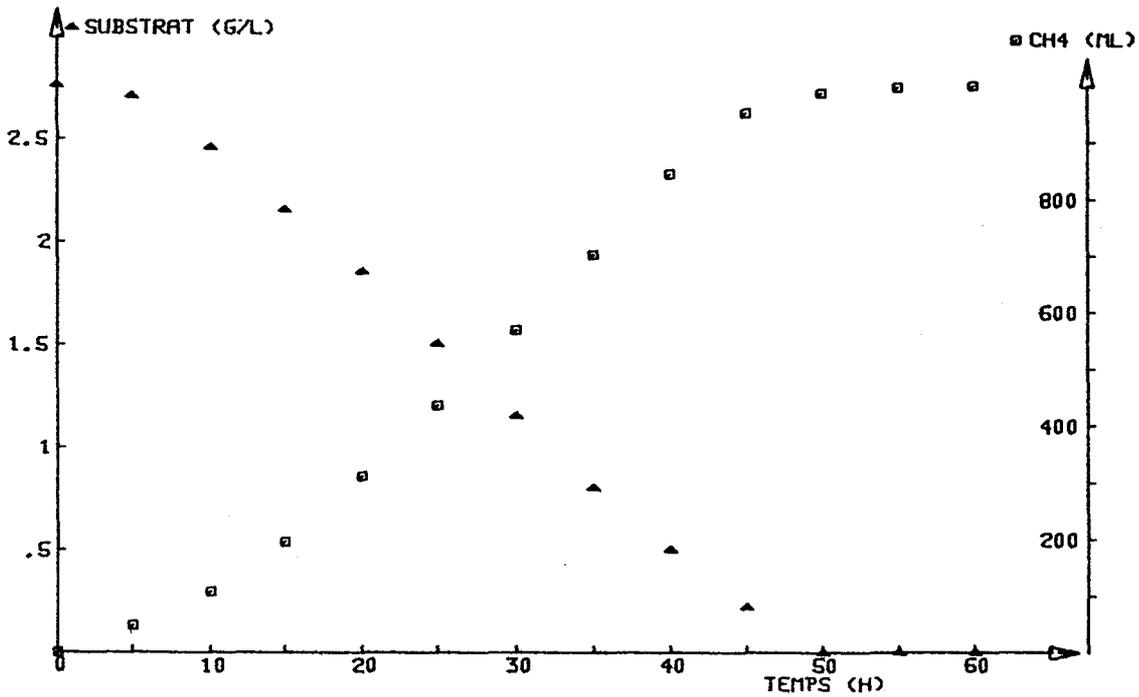


Figure B 18 (b) : Exemple de fermentation méthanogène

La aussi le processus sera considéré comme étant un système continu à observations discrètes.

$$\begin{aligned}
 dY(t)/dt &= F(Y, \Theta) & Y(0) &= Y_0 \\
 S(t_i) &= C Y(t_i) & i &= 0, 1, 2, \dots
 \end{aligned}
 \tag{35}$$

avec

$$Y(t) = \begin{pmatrix} X(t) \\ S(t) \\ P(t) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad F(Y, \Theta) = \begin{pmatrix} f_2(X, S, P, \Theta) \\ g_2(X, S, P, \Theta) \\ h_2(X, S, P, \Theta) \end{pmatrix}$$

et les conditions initiales $X_0 = X(0)$, $S_0 = S(0)$ et $P_0 = P(0)$

Les variables $X(t)$, $S(t)$ et $P(t)$ représentent respectivement: les concentrations en micro-organismes, les concentrations en substrat (Acide) et le volume du méthane dégagé comme produit. Θ est le vecteur des paramètres.

III.2.1- La croissance des micro-organismes et la biosynthèse de produit

Du fait que la concentration en micro-organismes n'est pas mesurable, une étude graphique, fût-elle partielle, ne peut pas être envisagée pour la modélisation de cette phase de la fermentation méthanique. Cependant, nous avons adopté le modèle de croissance que nous avons proposé pour la représentation de l'acidogénèse, tout en modifiant la substance inhibitrice. En effet, puisque le substrat (A.G.V.) est considéré par Andrews ([1], [2]) comme le principal inhibiteur de la méthanogénèse, nous avons alors substitué le produit dans l'expression (29) par le substrat qui devient l'inhibiteur. La vitesse de croissance des micro-organismes prend alors la forme :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu_{max} X(t) e^{-\alpha s(t)} (1 - e^{-\beta s(t)}) \quad (37)$$

Remarque : Une approximation de e^x par $(1 + x)$ permet de retrouver le modèle d'Andrews.

Par ailleurs, nous avons adopté la même expression pour la biosynthèse du méthane que celle proposée pour la production des A.G.V. dans la phase d'acidogénèse. L'équation différentielle correspondante devient alors :

$$\frac{dP(t)}{dt} = k X(t) (1 - e^{-\delta s(t)}) \quad (38)$$

III.2.2 Modèle de dégradation

Nous avons évoqué un peu plus haut le modèle de dégradation de Laurent et Povy, modèle proposé dans le cadre de l'épuration des eaux résiduaires. Il est opportun d'en parler ici, puisque nous l'avons choisi pour représenter la vitesse de disparition du substrat (A.G.V.) dans la phase méthanogène. La principale hypothèse considérée par les auteurs est que le milieu aqueux est homogène, autrement dit, infiniment mélangé. Deux conséquences découlent immédiatement de cette hypothèse :

- La répartition dans l'espace des micro-organismes et du substrat est donc supposée uniforme. Ceci implique qu'un raisonnement local est applicable à l'ensemble du système, c'est à dire que les résultats obtenues pour un micro-organisme sont identiques à la moyenne

- Les concentrations respectives de ces mêmes constituants ne dépendent que du temps. Autrement dit, le processus sera régié par un système d'équations différentielles ordinaires.

Le raisonnement local consiste alors à se placer au niveau d'un micro-organisme et d'étudier son comportement vis à vis de son environnement immédiat. En effet, les auteurs supposent qu'un micro-organisme se trouve seul dans une sphère de volume k/X et de rayon $\alpha X^{-1/3}$, X étant la concentration en micro-organismes. La masse du substrat dans ce volume est alors égale à $k S/X$ (S représente la concentration en substrat). En outre, ils considèrent une couche sphérique, centrée sur un micro-organisme, de rayon ρ et d'épaisseur $d\rho$ ($0 \leq \rho \leq \alpha X^{-1/3}$). Ils calculent ensuite la quantité de substrat dégradée dans cette couche pendant le temps dt .

$$\delta = m \tau(\rho, S(t)) dt \quad (39)$$

où m est la masse du substrat dans la couche sphérique ($m = S(t) 4 \pi \rho^2 d\rho$) et $\tau(\rho, S(t))$ est le taux de dégradation. La masse de substrat perdue dans le volume k/X pendant le temps dt est :

$$\frac{k}{X} (S(t+dt) - S(t)) = \left(\int_0^{\alpha X^{-1/3}} 4 \pi S(t) \rho^2 \tau(\rho, S(t)) d\rho \right) \quad (40)$$

d'où

$$\frac{dS(t)}{dt} = - \frac{X}{k} \int_0^{\alpha X^{-1/3}} 4 \pi S(t) \rho^2 \tau(\rho, S(t)) d\rho \quad (41)$$

Les hypothèses suivantes ont été prises en compte pour déterminer l'expression du taux de dégradation $\tau(\rho, S)$:

- Un élément de substrat sera plus vite dégradé s'il se trouve près du micro organisme.
- Un micro-organisme ne pourra pas dégrader plus d'une masse maximale donnée ($b dt$) de substrat dans l'intervalle de temps dt

Le taux de dégradation sera donc une fonction décroissante de ρ . En outre, pour une valeur fixe de ρ , (ρ, S) sera fonction décroissante de S . Les auteurs ont ainsi aboutit à l'expression suivante du taux de dégradation :

$$\tau(\rho, S(t)) = \tau_0 e^{-\rho^3} \left(1 - \frac{1}{b} \int_0^\rho 4 \pi S(t) r^2 \tau(r, S(t)) dr\right) \quad (42)$$

Où $\tau_0 = \tau(0, S)$ est le taux de dégradation maximal.

Le report de cette expression dans l'équation (41) et l'intégration du second membre qui en résulte, donnent l'expression suivante pour la vitesse de dégradation du substrat:

$$\frac{dS(t)}{dt} = -K X(t) (1 - e^{\lambda S f(X)}) \quad (43)$$

Avec $f(X) = (1 - e^{-\gamma/X})$, $K = \frac{b}{k}$, $\lambda = \frac{4\tau_0}{3b}$ et $\gamma = \alpha^3$

Notons que les auteurs ont obtenu une loi de dégradation du substrat sans devoir passer par la cinétique de croissance des micro-organismes. En outre, l'approximation de e^x par $(1 + x)$ permet de retrouver des expressions de modèles tels que celui proposée par Fujimoto [12].

III.2.3- Application à la méthanogénèse

Lorsqu'on considère la fermentation méthanique avec séparation des phases, nous pouvons constater que le milieu aqueux de la méthanogénèse n'est constitué que de substrat et de micro-organismes si nous négligeons la partie dissoute des gaz (CO_2 et CH_4). De plus, nous sommes en présence de fermenteurs infiniment mélangés, ce qui nous permet de respecter les hypothèses du modèle de dégradation et pouvoir l'appliquer à notre cas. Ainsi le modèle mathématique représentant la méthanogénèse devient :

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{max} X(t) e^{-\alpha S} (1 - e^{-\beta S}) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= -k_1 X(t) (1 - e^{-\lambda S f(X)}) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k_2 X(t) (1 - e^{-\delta S}) \end{aligned} \quad (44)$$

Avec $f(X) = (1 - e^{-\gamma/X})$

III.3- LA FERMENTATION EN CONTINU

La modélisation d'une fermentation en batch correspond à la mise en équation de la partie représentant le régime libre d'un système dynamique. Le passage au régime forcé se fait par l'adjonction d'une fonction qui dépend de la commande utilisée. Pratiquement, d'autres facteurs interviennent dans l'élaboration d'un algorithme de commande. Par ailleurs, la représentation mathématique d'une fermentation en continu se fonde sur le principe d'un réacteur chimique et utilise l'équation de bilan matière qui est :

Accumulation = ce qui rentre - ce qui sort + ce qui est produit - ce qui est consommé.

L'application de cette équation à la fermentation méthanique, avec séparation des phases et à volume constant, donne le système d'équations différentielles suivant :

Acidogénèse

$$\begin{aligned}\frac{dX_1(t)}{dt} &= (\mu_1 - D) X_1(t) \\ \frac{dS_1(t)}{dt} &= -\tau_1 X_1(t) + D(S_{1e} - S_1(t)) \\ \frac{dP_1(t)}{dt} &= \pi_1 X_1(t) + D(P_{1e} - P_1(t))\end{aligned}$$

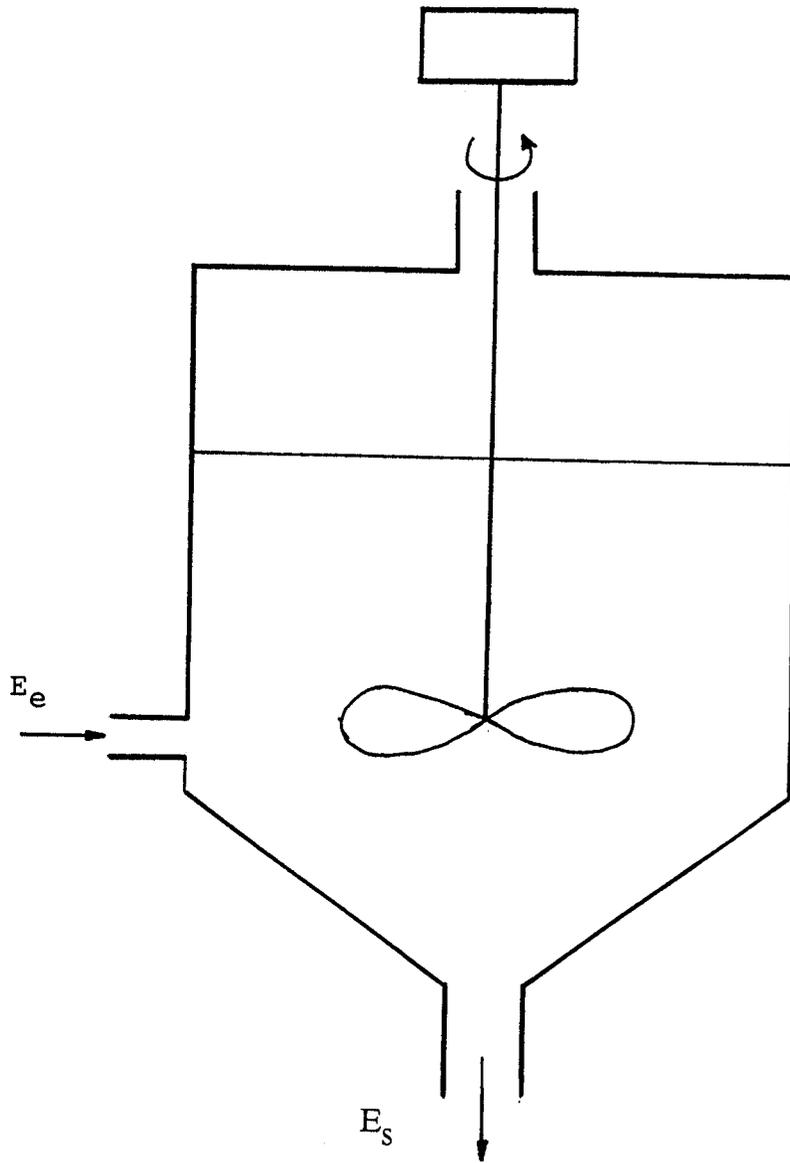
Méthanogénèse

$$\begin{aligned}\frac{dX_2(t)}{dt} &= (\mu_2 - D) X_2(t) \\ \frac{dS_2(t)}{dt} &= -\tau_2 X_2(t) + D(S_{2e} - S_2(t)) \\ \frac{dP_2(t)}{dt} &= \pi_2 X_2(t) - DP_2(t)\end{aligned}$$

D étant le taux de dilution

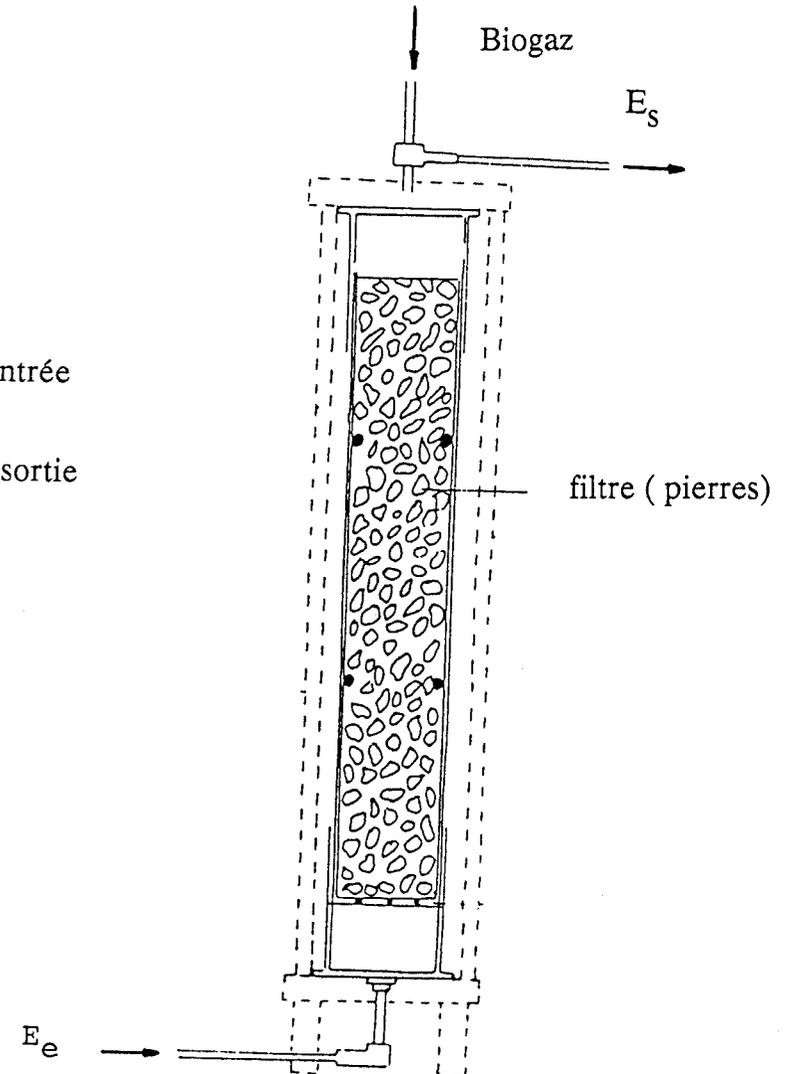
PROCEDES

1^{ère} GENERATION



INFINIMENT MELANGE

2^{ème} GENERATION



E_e : Effluent d'entrée

E_s : Effluent de sortie

filtre (pierres)

FILTRE ANAEROBIE

LE PROCESSUS

PROCEDES

Biogaz

SEPARATION DES PHASES

Biogaz

Alimentation

du 2^e fermenteur

Sortie

Décanteur

p : pompe

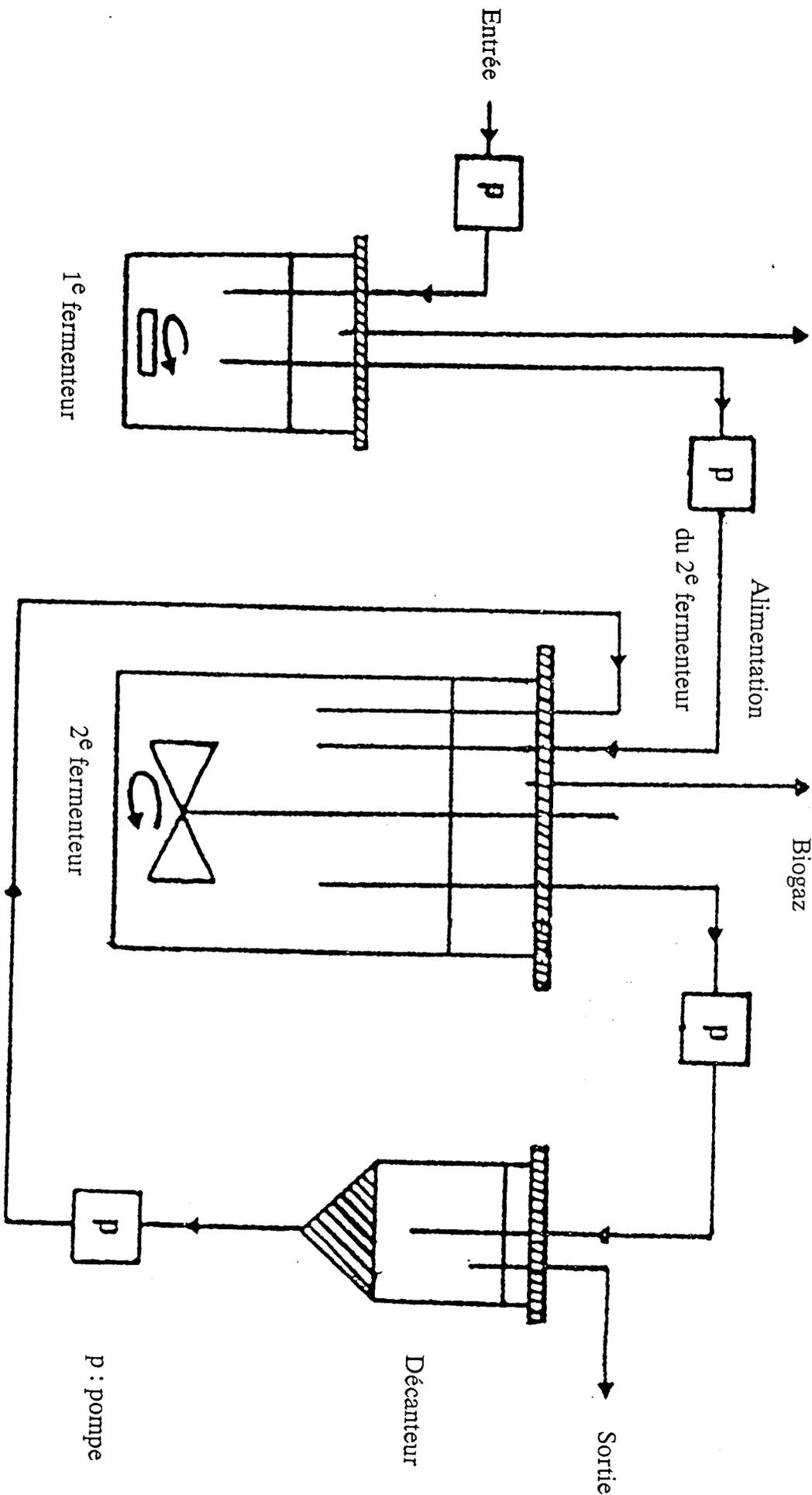
1^e fermenteur

2^e fermenteur

Recyclage de la biomasse

LIQUEFACTION ACIDOGENE

METHANOGENESE



CONCLUSION

Evidemment, ces expressions sont susceptibles d'être complétées et éventuellement modifiées par l'apport de nouvelles observations adéquates sur la fermentation méthanique. Mais avant tout, le mérite de ce modèle est de mettre en évidence le fait que les différentes cinétiques, relatives à chacune des deux phases, ne sont pas obligatoirement proportionnelles.

BIBLIOGRAPHIE DE LA DEUXIEME PARTIE

- [1] ANDREWS J.F., (1969)
Dynamic model of the anaerobic digestion process.
J. of the Sanitary Engineering Division.
Proc. of the Am. Soc. of Civil Engineers Feb.
- [2] ANDREWS J.F., GRAEF S.P., (1971)
Dynamic modeling and simulation of the anaerobic digestion process.
In *Anae. Biol. Treat. Processes Adv. in Chemistry*, Ser. 105, 126-162.
Ed. GOULD R.F.
- [3] ASTRÖM , EYKHOFF , (1971)
System identification : a Survey.
Automatica 7, 123-162.
- [4] BERTALANFFY L.V., (1973)
Théorie générale des systèmes. DUNOD
- [5] BOVEE J.P., OROBENGOA M., SEVELY Y., (1985)
Static optimization of a multistage fermentation process involving distributed
feeding.
1st I.F.A.C., Symp. on Mod. and Contr. of Biotech. Process,
Netherlands, 11-13 Dec., 251-253.
- [6] CHERRAULT Y., (1983)
Biomathématiques. P.U.F.
- [7] CUENOD M.A., FATIO J.L., (1973)
Cours d'introduction aux méthodes d'identification. Albin Michel
- [8] CONTOIS D.E., (1959)
Kinetics of bacterial growth : Relationship between population density and specific
growth rate of continuous cultures.
J. Gen. Microbiol., 21, p40 (cp [10])
- [9] DEWITT C.C., (1943)
Correlation of rate data.
Ind. Eng. Chem., 35, p695 (cp [10])
- [10] EDWARDS V.H., WILKE C.R., (1967)
Analytical methods in bacterial kinetics
Univ. of Cal., Lawrence Radiation Labo., Berkeley, California.
- [11] FOULARD C., GENTIL S., SANDRAZ J.P., (1979/87)
Commande et régulation par ordinateur numérique. De la théorie aux applications.
Deuxième Partie : Identification. Eyrolles
- [12] FUJIMOTO Y., (1963)
Kinetics of microbial growth and substrate consumption.
J. Theo. Biol., 5, p171 (cp [10])

- [13] HILL D.T., BARTH C.L., (1977)
A dynamic model for simulation of animal waste digestion.
J. of WAT. Pollut. Control Fed., 9, 2129-2143
- [14] HILL D.T., TOLLNER E.W., HOLMBERG R.D., (1983)
The kinetics of inhibition in methane fermentation of swine manure
Agr. Wastes, 5, 105-123
- [15] ISHII K., MATSUDA H., OGITA N., (1982)
A mathematical model of biological evolution.
J. math. Biol., 14, 327-353
- [16] De LARMINAT P., (1977)
Automatique des systèmes linéaires. Tome 2 : Identification
Flammarion Sciences.
- [17] LAURENT R., (1985)
Modélisation et identification des systèmes complexes :
Application à l'épuration biologique des eaux usées.
Thèse d'Etat, U.S.T.L.F.A.
- [18] LAURENT R., POVY L., (1979)
Sur la modélisation de l'épuration des eaux usées.
C.R. Acad. Sc., Paris, Tome 288, Série A, 315-318
- [19] LETTINGA M.G., (1980)
Les techniques de valorisations énergétiques de la biomasse par voie humide.
Colloque CENECA, Agriculture et Energie II, 27-29
- [20] LORENCES I., PUHAR E., GUERRA L.H., FIECHTER A., (1982)
Modeling with product and substrate inhibition, and stability analysis for growth
of *Methylomonas Clara*.
J. Ferment. Technol. Vol. 60, N°4, 327-332
- [21] LOTKA A.J., (1934)
Théorie analytique des associations biologiques.
1^{ère} Partie : Principes.
Actu Sci. et Indus. Exposés de biométrie et de stat. biologique Tome IV, Hermann
- [22] MICHAELIS et MENTEN
- [23] MOLETTA R., VERRIER D., ALBAGNAC G., (1983)
Dynamic modelisation of anaerobic digestion
3rd Int. Symp. on Anaer. Digestion, Boston 14-19 Aug.
- [24] MONOD J., (1942)
Recherches sur la croissance des cultures microbiennes
Hermann
- [25] NAKRACHI A., LAURENT R., (1986)
Modeling and parameter identification of batch fermentation process
I.F.A.C., Proc., Ser. 10, 181-183

- [26] PIRT S.J., (1982)
Maintenance energy : a general model for energy-limited and energy-sufficient growth
Arch. Microbiol., 133, 300-302
- [27] POVY L., (1975)
Identification des processus. Dunod Univ.
- [28] RATKOWSKY D.A. et Al., (1983)
Model for bacterial culture growth rate throughout the entire biokinetic temperature range
J. of Bacteriology, Vol 154, N°3, 1222-1226
- [29] RICARD J., (1973)
Cinétique et mécanismes d'action des enzymes
Tome 1 : Cinétique enzymatique phénoménologique. Doin
- [30] RICHALET J., RAULT A., POULIQUEN R., (1971)
Identification des processus par la méthode du modèle
Gordon and Breach
- [31] TEISSIER G., (1937)
Les lois quantitatives de la croissance
Actu Sci. et Indus. Exposés de biométrie et de stat. biologique Tome XI, Hermann
- [32] THOM R., (1977)
Stabilité structurelle et morphogénèse.
Essai d'une théorie générale des systèmes
Inter. Edition
- [33] VAN DEN HEUVEL J.C., (1985)
The anaerobic dissimilation of glucose :
a novel kinetic model comprising both substrate and product inhibition
1st I.F.A.C., Symp. on Mod. and Contr. of Biotech. Process, Netherlands,
11-13 Dec.
- [34] VOLTERRA V., D'ANCONA U., (1935)
Les associations biologiques au point de vue mathématique
Actualités Sci. et Indus. Exposés de biométrie et de stat. biologique Tome V,
Hermann
- [35] ZADEH L.A., (1962)
From circuit theory to system theory
Proc. I.R.E. 50, 856-865 (cp [3] et [27])
- [36] ZWINGELSTEIN G., (1984)
Panorama des méthodes d'identification de processus
1- Les méthodes non paramétriques
Nouvel Automatisme, Octobre
2- Les méthodes paramétriques
Nouvel Automatisme, Novembre

TROISIEME PARTIE

IDENTIFICATION DES PARAMETRES

INTRODUCTION

Nous avons présenté dans la partie précédente un modèle mathématique pour représenter chacune des deux principales phases de la fermentation méthanique. Dans les deux cas, le processus est considéré continu et à observations discrètes :

$$\begin{aligned} X(t) &= f(X(t), \Theta) \\ S(t_i) &= C X(t_i) \end{aligned} \tag{45}$$

où les t_i sont les instants d'observations ($i = 0, 1, 2, \dots$)

Dans cette partie, nous nous intéressons à l'identification du vecteur des paramètres, autrement dit à la détermination des valeurs numériques des composantes du vecteur Θ , à partir d'un jeu de relevés expérimentaux mesuré sur le processus. Le système (45) englobe la représentation mathématique d'un grand nombre de processus continus, qui peuvent être stochastiques ou déterministes, linéaires ou non linéaires.

IDENTIFIABILITE

Avant d'entamer l'identification des paramètres contenus dans le modèle retenu, il est parfois intéressant d'analyser les propriétés de leur identifiabilité. En effet, l'analyse théorique de l'identifiabilité permet éventuellement de montrer l'existence voir l'unicité de la solution au problème de l'identification du vecteur Θ des paramètres. Une des propositions faites à ce propos est celle de Pohjanpalo[26bis].

Il considère le modèle sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} dX(t)/dt &= f(X(t), u(t), t, \Theta) & X(t) \in \mathbb{R}^P, t \in [0, T] \\ y(t) &= g(X(t), \Theta) \end{aligned} \tag{46}$$

où Θ est le vecteur des paramètres inconnus.

Il pose ensuite $a_k(\cdot) = y^{(k)}(\cdot)$ $k = 0, 1, \dots$

avec $y^{(k)}(t)$ la $k^{\text{ième}}$ dérivée de $y(t)$ par rapport au temps.

Proposition

Il existe une condition suffisante pour que le système (46) soit identifiable est que le système d'équations :

$$g^{(k)}(X(0), \theta) = a_k(0), \quad k = 0, 1, \dots$$

ait une solution unique en θ .

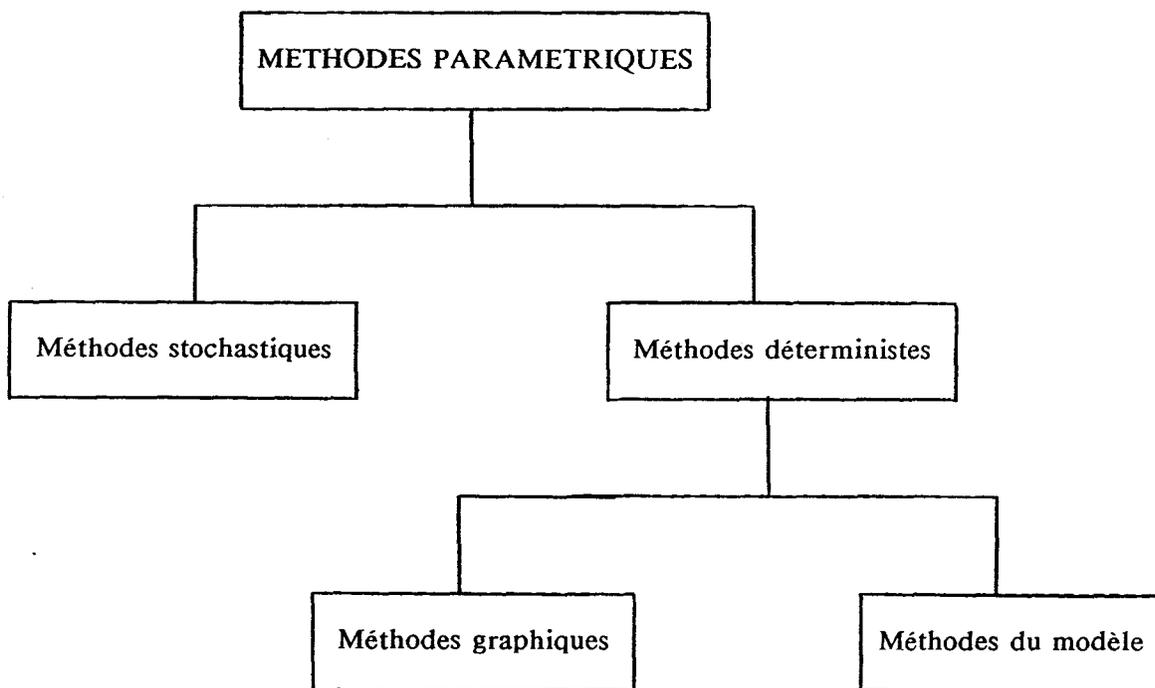
Lors de l'application de cette proposition à deux exemples simples (Annexe 2), nous avons constaté qu'il est loin d'être évident de montrer l'unicité de la solution en h . En effet, nous aboutissons à une solution unique pour le premier exemple, par contre, c'est un polynôme de second degré qui est obtenu pour le deuxième exemple. Nous nous sommes intéressés alors à l'identification des paramètres.

Notons qu'à l'opposé de la modélisation, l'identification des paramètres est un axe de l'automatique qui se prête à l'introduction de techniques d'optimisation et à l'élaboration d'algorithmes concrets. Cependant, le choix de la méthode à utiliser dépend principalement du type de modèle représentant le processus et de l'objectif à atteindre, entre autre savoir s'il s'agit d'une identification paramétrique en ligne (temps réel) ou en différé. Une représentation exhaustive de l'ensemble des méthodes relatives à ce sujet serait superflue. Mais, il nous semble opportun d'en donner néanmoins une représentation schématique, ne serait-ce que pour situer le cas qui nous intéresse.

I

METHODES PARAMETRIQUES

Les méthodes paramétriques supposent, comme nous l'avons montré plus haut, la donnée d'un modèle mathématique représentant le processus, processus qui est continu dans le cas qui nous occupe. N'oublions pas cependant que ces méthodes concernent aussi les modèles discrets. En outre, en nous rapportant à la figure ci-dessous, nous pouvons distinguer, les méthodes stochastiques des méthodes déterministes, ces dernières incluent les méthodes graphiques ainsi que les méthodes du modèle qui nous intéressent directement.



I.1- METHODES STOCHASTIQUES

Ces méthodes se fondent généralement sur les caractéristiques statistiques des signaux entachés de bruit d'entrées/sorties et font appel à des théories d'estimation et de filtrage. L'application, par exemple, du filtre de Kalman ou du filtrage non linéaire permet de résoudre un certain nombre de problèmes d'identification des paramètres en incluant ces derniers dans le vecteur d'état. L'estimation des paramètres se trouve ainsi incluse dans celle de l'état augmenté ([1],[19],[26]). Notons que cette classe de méthodes est souvent utilisée pour l'identification des paramètres en ligne.

I.2- METHODES GRAPHIQUES

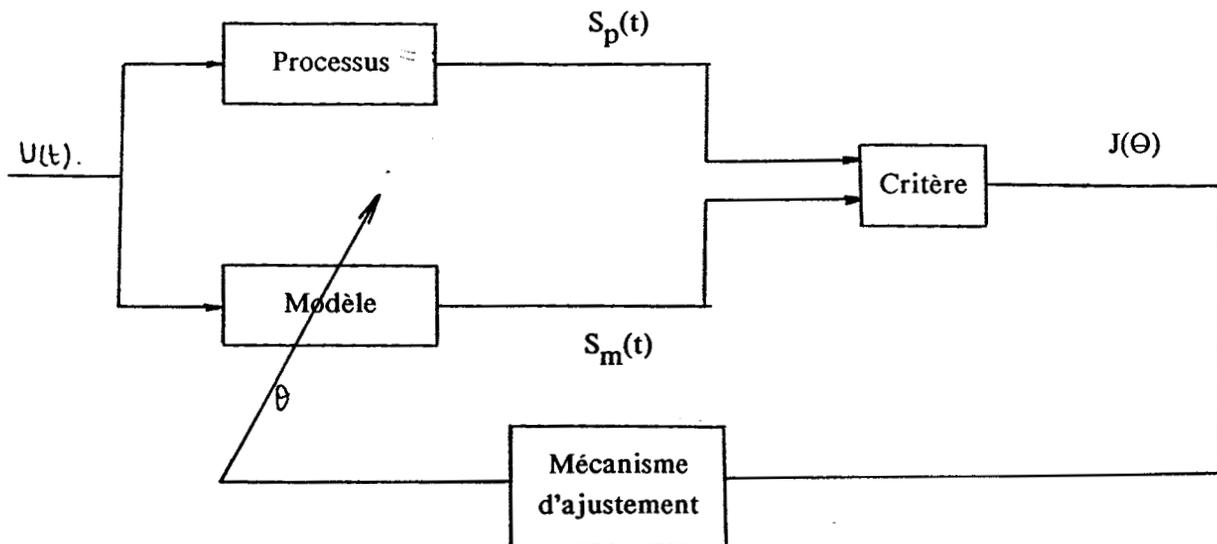
L'une de ces méthodes est due à Strejc, qui exprime toute réponse indicielle apériodique par une fonction de transfert du type :

$$L(p) = \frac{k e^{-p T}}{(1 + Tp)^n}$$

Les propriétés des réponses indicielles de ce type de modèles permettent de déterminer facilement les constantes k , T , et n ([29],[33]).

I.3- METHODE DU MODELE

Cette classe de méthodes présente plusieurs intérêts, en l'occurrence lorsqu'il s'agit d'une identification en différé. En effet, elle permet d'identifier les paramètres de modèles dont les structures sont très variées (équa diff, fcts de transferts, équa récurrentes ..). L'utilisation d'algorithmes liés à ce type de méthodes nous amène à comparer deux comportements : celui du processus étudié et celui du modèle mathématique le représentant. Bien entendu, ce dernier est supposé soumis aux mêmes entrées que le processus. A cet effet, on adopte généralement un modèle parallèle et dans ce cas, le principe de ces méthodes peut être représenté schématiquement par ([19],[29],[34]) :



Le comportement du processus est matérialisé par un relevé de mesures effectuées lors d'une expérience donnée, alors que celui du modèle est le résultat d'une simulation de ses équations.

I.3.1- Le critère

Le critère permet de déterminer l'équivalence des comportements (Modèle-Processus). Il sera calculé à partir des erreurs des différentes sorties et doit nous renseigner sur l'éventuel voisinage des deux comportements (Modèle-Processus). L'expression de ce critère a généralement la forme d'une intégrale du type :

$$J(T, \theta) = \int_0^T e(t)^T Q e(t) dt$$

Où : T est la durée de l'expérience ou l'horizon d'observation.

$e(t) = S_m(t) - S_p(t)$ est le vecteur erreur .

Q est une matrice de pondération, elle est symétrique définie positive. Dans la suite de l'exposé, nous prendrons $Q = I$ (matrice Identité).

Le critère ainsi défini, sera considéré comme fonction vectorielle des paramètres à identifier. Nous devons par la suite chercher le vecteur Θ des paramètres qui donne la plus faible valeur à cette fonction. Le problème de l'identification des paramètres se trouve ainsi réduit à un problème de minimisation de fonctions. Puisque nous sommes amenés à minimiser la valeur du critère $J(\Theta)$, l'idéal serait d'obtenir une valeur nulle de ce critère. Mais les erreurs de mesures ainsi que celles du calcul ne permettront pas d'envisager un tel objectif, sans parler du fait qu'un modèle n'est qu'une approximation de la réalité elle-même. Par ailleurs, et dans le cas où la solution du problème de minimisation existe, le minimum obtenu est-il unique?. Nous pouvons répondre à cette question par l'affirmative seulement si $J(\Theta)$ est une fonction strictement convexe sur un ensemble convexe.

I.3.2- Mécanisme d'ajustement

Cette partie de la chaîne s'occupe de la détermination du jeu de paramètres qui donne la plus faible valeur à la fonctionnelle $J(\Theta)$. Nous nous intéresserons alors à la minimisation de $J(\Theta)$ dans l'espace des paramètres. A cet effet, nous avons

recours à des méthodes dites de descente où les techniques de programmation non linéaire sont d'un très grand secours. En effet, ces techniques ont la particularité de donner naissance à des algorithmes de nature itérative aisément implantables sur calculateurs numériques.

I.3.3- Programmation non linéaire

Cette classe de techniques de calcul fait partie de la programmation mathématique qui est une branche des mathématiques appliquées en plein développement et qui s'occupe surtout de la programmation linéaire, de la programmation en nombres entiers et de la programmation dynamique. Ces techniques se fondent sur le principe dit de descente. Plus précisément, on se donne un point de départ Θ_0 et on construit une suite de points Θ_k ($k=1,2,\dots$) dont on peut dire qu'elle converge dans un sens ou dans un autre, vers la (ou une) solution du problème de minimisation. Les points successifs de cette suite sont liés par la relation :

$$\Theta_{k+1} = \Theta_k + \beta_k d_k$$

Où d_k est le vecteur direction de dimension p , qui définit la direction suivant laquelle se fait le déplacement (appelée aussi direction de descente). Le calcul de d_k est fonction de la méthode utilisée, autrement dit : les différentes méthodes de programmation non linéaires se distinguent principalement par la façon de calculer cette direction. Le calcul du scalaire β_k , quant à lui, fait appel aux techniques de minimisation unidimensionnelle.

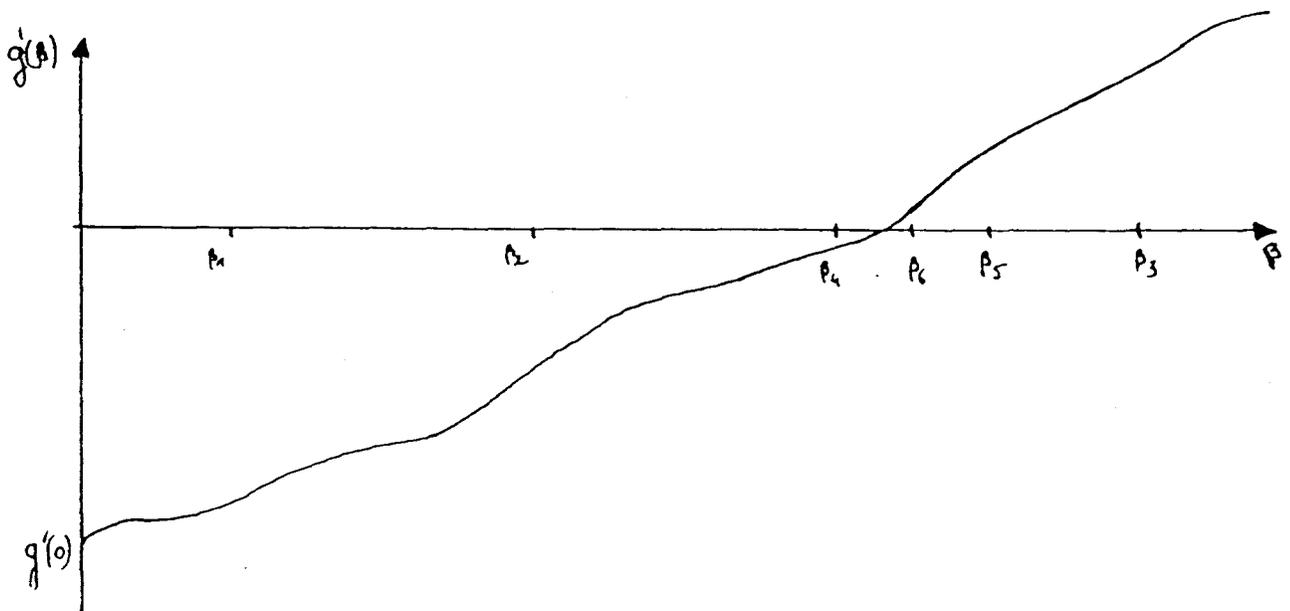
II MINIMISATIONS UNIDIMENSIONNELLES

Les algorithmes itératifs d'optimisation basés sur le principe ci-dessus font appel à des minimisations unidimensionnelles certes, mais celles-ci doivent être exactes pour la plupart des algorithmes pour préserver leurs conditions de convergence. Il s'agit alors de trouver le minimum de la fonction $J(\Theta)$ dans la direction d_k , en partant du point courant Θ_k . Autrement dit : il faut chercher la valeur de β qui minimise la fonction monovariante $g(\beta) = J(\Theta_k + \beta d_k)$.

II.1- METHODES UTILISANT LES DERIVEES

Cette catégorie de méthodes utilise le calcul de la fonction dérivée $g'(\beta)$ pour déterminer le minimum sur une direction donnée. La minimisation se limite à la recherche d'un point stationnaire β_k tel que $g'(\beta_k) \neq 0$, respectant ainsi la condition du minimum local. La recherche d'un minimum se trouve ainsi réduite à celle du zéro d'une fonction à une variable. Une des méthodes connues est celle de dichotomie avec calcul de dérivées, elle se base sur le principe suivant :

Sachant que $g'(0)$ est négatif, il faut trouver d'abord un point β tel que $g'(\beta)$ soit positif, le zéro de la fonction dérivée se trouve ainsi cerné . La suite consiste à réduire progressivement l'intervalle par dichotomie jusqu'à obtention du zéro avec une précision fixée à l'avance.



D'autres méthodes peuvent être appliquées type sécante ou encore celle de Newton-Raphson qui exige en plus du calcul de la dérivée première celui de la dérivée seconde !!

II.2- SANS CALCUL DE DERIVEES

Une première méthode consiste à évoluer dans la direction de descente tant que la valeur de $g(\beta)$ décroît, et dès que l'on trouve une valeur supérieure à la précédente (le minimum local est cerné), on procède à la réduction de l'intervalle par dichotomie. D'autres méthodes connues pour être efficaces peuvent être utilisées, mais à condition que la fonction $g(\beta)$ possède certaines propriétés telles que la continuité et la dérivabilité, voir plusieurs fois, pour l'utilisation de l'interpolation quadratique , ou encore l'unimodalité pour pouvoir appliquer des méthodes telles que la section dorée ou la méthode de Fibonacci ([17],[22],[34]).

II.3- RECHERCHES UNIDIMENSIONNELLES ECONOMIQUES

Les méthodes décrites ci-dessus exigent généralement un nombre important d'évaluation de la fonction à minimiser, et éventuellement de ses dérivées, pour atteindre le minimum sur une direction. Par ailleurs, la démonstration de la convergence de quelques algorithmes de métriques variables telle que la B.F.G.S et même la méthode de plus forte pente, n'exigent pas de minimisation unidimensionnelle exacte. Nous présentons deux règles qui ont été développées à cet effet, et qui permettent d'obtenir un point ayant les caractéristiques nécessaires à la convergence avec un nombre limité d'évaluation de la fonction et parfois celle de ses dérivées. Le principe commun à ces deux règles est :

On considère la fonction monovariante $g(\beta) = J(\Theta_k + \beta d_k)$, et on cherche une valeur de β ayant les caractéristiques nécessaires à la préservation de la convergence d'algorithme tel que la B.F.G.S.

1- le scalaire β ne doit pas être choisi trop grand, si non l'algorithme risque d'avoir un comportement oscillatoire

2- β ne doit pas être trop petit non plus.

Dans les deux règles, on s'assure de la première condition en vérifiant la relation

$$g(\beta) \leq g(0) + m_1 \beta g'(0) \quad \text{où } m_1 \in]0,1[$$

Notons que cette même relation assure que le point obtenu $\Theta_{k+1} = \Theta_k + \beta_k d_k$ vérifie la propriété de descente $J(\Theta_{k+1}) < J(\Theta_k)$ ([8],[22]).

Pour s'assurer de la deuxième condition, Goldstein [13] propose la relation

$$g(\beta) \geq g(0) + m_2 \beta g'(0) \quad \text{où } m_2 \in]m_1,1[.$$

Remarquons au passage que cette relation n'exige pas le calcul de la dérivée $g'(\beta)$ (fig C.1 a). Par contre la règle proposée par Wolf [41] et Powell [32], nécessite l'évaluation de la dérivée de $g(\beta)$ à chaque fois que la fonction est calculée (fig C.1 b). Cette relation s'écrit :

$$g'(\beta) \geq g'(0) + m_3 \beta g''(0) \quad \text{où } m_3 \in]m_1,1[$$

(a)
Points satisfaisant
la règle Goldstein
segments [a,b] et [c,d]

(b)
Points satisfaisant
la règle de Wolfe et Powell
segments [a,b] et [c,d]

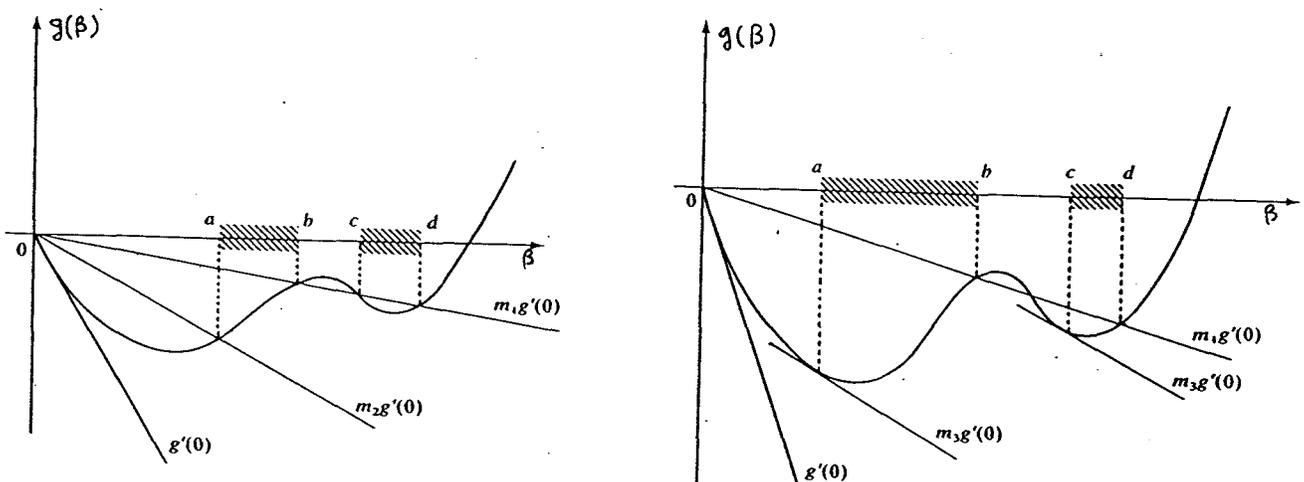


Figure C.1 : Les deux règles de la recherche unidimensionnelle économique [22]

III MINIMISATION SANS DERIVATION

Les méthodes de P.N.L. permettant le calcul des directions de descentes peuvent être séparées en trois classes : les méthodes sans calcul de dérivées, les méthodes avec calcul de dérivées pour les fonction différentiables et une troisième classe qui concerne les fonctions non partout différentiables. Dans ce qui suit, nous nous intéresseront aux deux premières classes appliquées à des problèmes sans contraintes.

Les méthodes de la première classe, qu'on appelle aussi méthodes heuristiques ou encore méthodes directes, n'exigent que l'évaluation de la fonction pour leur utilisation. Nous en présentons deux que nous avons appliquées à notre modèle.

III.1- METHODES DE SCRUTATION CYCLIQUE (Axe par Axe).

Cette méthode qui vient tout naturellement à l'esprit, consiste à faire varier les paramètres un après l'autre, le déplacement étant effectué dans le sens qui fait décroître la valeur du critère, le cycle recommence lorsque l'ensemble des paramètres a été scruté. La minimisation d'une fonction dans un espace de dimension p se trouve décomposer en p minimisations unidimensionnelles. Pour lesquelles l'équation liant deux points successifs reste applicable :

$$\theta_{k+1}^i = \theta_k^i + \beta_k^i \theta_k^i \quad (46)$$

Avec $i = 1, 2, \dots, p$ et où $d_k = \Theta_k$

On peut écrire l'équation (46) sous la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} \theta_{k+1}^1 \\ \vdots \\ \theta_{k+1}^p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_k^1 \\ \vdots \\ \theta_k^p \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \beta_k^1 & & & \\ & \cdot & & \\ & & \beta_k^i & \\ & & & \cdot \\ & & & & \beta_k^p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_k^1 \\ \vdots \\ \theta_k^p \end{bmatrix}$$

Où les β_k^i ($i = 1, 2, \dots, p$) sont des scalaires issus des p minimisations unidimensionnelles suivant les axes Θ^j ($j = 1, 2, \dots, p$).

Une telle méthode ne peut être efficace, que lorsque les différents paramètres ne sont pas liés (ou faiblement liés). Autrement dit : les courbes iso-critères doivent être régulières et tendant vers des sphères ou des ellipsoïdes dont les principaux axes sont parallèles aux axes des coordonnées. Mais dès qu'il s'agit de fonctions un peu plus complexes, une telle méthode ne peut être envisagée que pour obtenir des approximations pour l'initialisation de méthodes de P.N.L. plus puissantes. Ainsi, pour une telle utilisation de ce type de méthodes, la minimisation unidimensionnelle peut ne pas être exacte, ce qui réduit sensiblement le volume de calcul à chaque itération.

III.2- METHODES DE POWELL

Les deux méthodes de Powell s'apparentent aux méthodes de directions conjuguées. En effet, elles permettent leur construction d'une manière itérative en évitant l'évaluation du gradient de la fonction à minimiser. Un point fort de ces méthodes est qu'elles convergent en p itérations, si les minimisations unidimensionnelles sont exactes, et lorsqu'elles sont appliquées à une fonction quadratique. Là aussi le problème se décompose en $p+1$ minimisations unidimensionnelles, le principe de l'algorithme se présente comme suit :

0- Pour l'initialisation, on se donne un point initial Θ_0 et p directions d_0^i ($i = 1, 2, \dots, p$) linéairement indépendantes (pratiquement on prend les axes des coordonnées).

1- Pour l'itération courante k l'algorithme se décompose ainsi :

on pose $\theta_k^0 = \theta_k$

a) Pour $i=1$ à p

Calculer $\theta_k^i = \theta_k^{i-1} + \beta_k^i d_k^i$

où β_k^i est issu d'une minimisation unidimensionnelle, c'est à dire que β_k^i vérifie l'égalité :

$$J(\theta_k^{i-1} + \beta_k^i d_k^i) = \min_{\beta} J(\theta_k^{i-1} + \beta d_k^i)$$

2- Calcul la nouvelle direction

$$d_k^{p+1} = \frac{(\theta_k^p - \theta_k^0)}{\|\theta_k^p - \theta_k^0\|}$$

3- Calculer le nouveau point

$$\theta_{k+1} = \theta_k^p + \beta_k^{p+1} d_k^{p+1}$$

où β_k^{p+1} est issue d'une minimisation unidimensionnelle

4- Réactualisation des directions de recherches.

Dans une première version, Powell propose la substitution suivante [30] :

$$d_{k+1}^i = d_k^{i+1} \quad i = 1, 2, \dots, p$$

L'inconvénient de cette réactualisation est de ne pas garantir l'indépendance linéaire entre les différentes directions de recherches. La notion de directions conjuguées se trouve ainsi compromise. Pour y remédier, Powell [42] a proposé une deuxième version de cette méthode. Celle ci part de la remarque suivante ([22],[25]) :

Dans le cas quadratique, on démontre qu'en considérant les directions d^i normées par $(d^i)^T A (d^i) = 1$ (où A est la matrice de la forme quadratique, supposée définie positive), le déterminant de la matrice D formée par les différentes directions obtenues ($D=[d^1 d^2 \dots d^p]$), est maximal si et seulement si les directions d^i sont mutuellement conjuguées (ou A-conjuguées). Donc, pour la réactualisation des directions, il serait intéressant de ne faire la substitution ($d^i \leftrightarrow d^{p+1}$) que si celle ci augmente la valeur du déterminant de la matrice D. Cependant, le calcul d'un tel déterminant pour chacune des substitutions possibles, devient très vite onéreux, voir impossible pour les fonctions non quadratiques. Alors, pour éviter ce calcul, l'étape de substitution peut être effectuée en considérant :

$$\beta_k^{max} = \max\{\beta_k^i, i = 1, 2, \dots, p\}, D_k \text{ la valeur du déterminant courant et } EPS > 0$$

si

$$R_k = \frac{\beta_k^{max} * D_k}{k} \geq EPS$$

augmentation
du
déterminant

Alors, on effectue les substitutions suivantes :

$$\begin{aligned} \text{Pour } i = 1 \text{ à } p \text{ et } i \neq \max \text{ poser } d_{k+1}^i &= d_k^i \\ d_{k+1}^{\max} &= d_k^{p+1} \\ \text{et } D_{k+1} &= R_k \end{aligned}$$

sinon ($R_k < \text{EPS}$) on conserve les mêmes directions de recherches

5- Poser $k = k+1$ et retourner en 1

CONCLUSION

La méthode de scrutation cyclique peut toujours servir comme phase d'initialisation d'un algorithme plus puissant tel que celui de Powell. Cependant, celui-ci exige p minimisations unidimensionnelles pour obtenir une nouvelle direction de descente. Or il existe des méthodes de recherche de minimum qui ne demande qu'une seule minimisation unidimensionnelle pour générer une nouvelle direction de descente, mais ce type de méthodes exige le calcul du gradient.

IV DERIVATION ANALYTIQUE DU CRITERE

INTRODUCTION

Une première solution, pour le calcul du gradient, consisterait à remplacer ses composantes par les approximations suivantes :

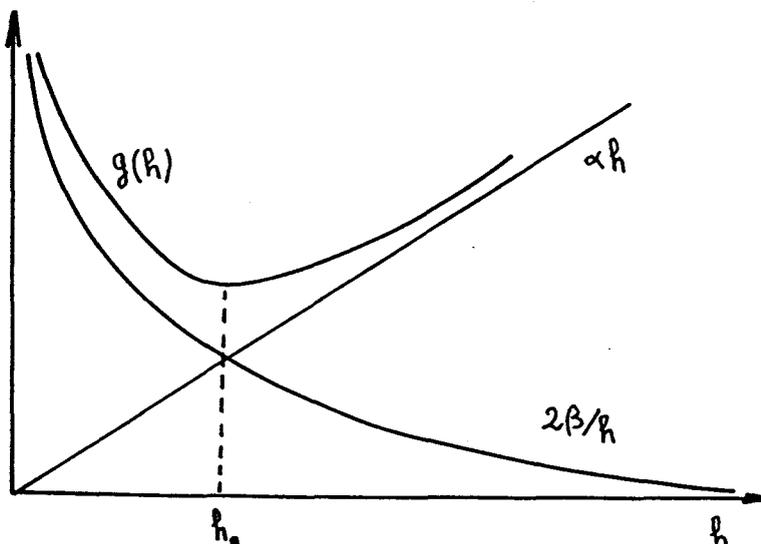
$$\frac{\partial J(\theta)}{\partial \theta_i} \# \frac{J(\theta_i + h) - J(\theta_i)}{h}$$

Evidemment, le choix de la valeur de h se pose, et on peut penser qu'en diminuant cette valeur l'approximation devrait s'améliorer. Une étude de l'erreur d'approximation montre qu'il y a une limite au deçà de laquelle la diminution de h risque d'augmenter l'erreur [2]. En effet, considérons l'approximation suivante :

$$f'(x_0) \# \frac{f(x_1) - f(x_0)}{h} \quad h = x_1 - x_0$$

son reste r_1 est borné $|r_1| < \alpha h$

En outre, si le calcul numérique de $f(x_i)$ ($i = 0, 1$) conduit à une erreur ε_i (tel que $|\varepsilon_i| < \beta$), celui de $f'(x)$ donnera un terme d'erreur supplémentaire $r_2 = (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)/h$, avec $|r_2| \leq 2\beta/h$, d'où l'évaluation de l'erreur globale $|r| \leq \alpha h + 2\beta/h = g(h)$. Si on trace $g(h)$ en fonction de h , on constate l'existence d'un minimum d'abscisse h_0 pour lequel l'erreur d'approximation est minimale.



Après cette remarque, et par souci de minimiser le plus possible l'erreur sur le calcul du gradient, nous nous sommes proposés de dériver analytiquement le critère $J(\Theta)$.

IV.1 , METHODE DE CALCUL DES DERIVEES

Etant donné que $J(0,\Theta)=0$, nous pouvons écrire $J(T,\Theta)$ sous la forme :

$$J(T,\theta) = J(0,\theta) + \int_0^T e(t)^T e(t) dt \quad (47)$$

Cette équation intégrale peut être écrite sous forme d'une équation différentielle qui lui est équivalente [28]:

$$\frac{\partial J(t,\theta)}{\partial t} = e(t)^T e(t) \quad (48)$$

Avec la condition initiale $J(0,\Theta) = 0$ et $0 < t < T$

Dérivons (48) par rapport à Θ_j où $j=1,\dots,p$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \left(\frac{\partial J(t,\theta)}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial \theta_j} (e(t)^T e(t)) = 2 \frac{\partial e(t)^T}{\partial \theta_j} e(t)$$

Sachant que $e(t) = S_m(t) - S_p(t)$, on peut écrire

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \left(\frac{\partial J(t,\theta)}{\partial t} \right) = 2 \frac{\partial X_m(t)}{\partial \theta_j} e(t)^T \quad (49)$$

Si le second membre de l'équation (49) est continu par rapport à Θ et t , alors le premier membre est défini continu et ne dépend pas de l'ordre de dérivation [28].

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} \left(\frac{\partial J(t,\theta)}{\partial t} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial J(t,\theta)}{\partial \theta_j} \right) = 2 \frac{\partial X_m(t)}{\partial \theta_j} e(t)^T \quad (50)$$

Pour assurer la continuité du second membre, il faut que $e(t)$ soit continu par rapport à Θ et t . Or les sorties observées $S_p(t)$ sont discontinues, donc représentées par une suite de points. Nous avons alors remplacé ces points par leurs courbes splines de lissage qui elles possèdent les propriétés de continuité requises. Par ailleurs, les algorithmes d'optimisation proposés dans la littérature supposent la dépendance de S_m par rapport à Θ sous forme explicite, il s'agit en l'occurrence des algorithmes de programmation non linéaire, il faut donc développer l'expression $\partial S_m / \partial \theta_j$

On se propose, pour développer cette expression, d'utiliser les propriétés de différentiabilité des solutions d'une équation différentielle par rapport aux paramètres, notamment les équations aux variations.

IV.2- CALCUL DES EQUATIONS AUX VARIATIONS

Afin de trouver l'expression permettant le calcul de $\partial S_m / \partial \theta_j$, considérons le système initial relatif au modèle :

$$\begin{aligned} X'_m(t) &= f(X_m(t), \Theta) & X_m(0) &= X_0 \\ S(t_i) &= C X_m(t_i) & i &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (51)$$

Nous prenons $C = I$ (matrice d'identité) ce qui nous permet d'avoir $S(t) = X_m(t)$

Soit $X_m(t) = \varphi(t, \theta^1)$, une solution particulière de l'équation (51) pour les valeurs X_0, θ^1 et avec $0 < t < T$. Celle-ci vérifie l'équation différentielle

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varphi(t, \theta^1)) = f(\varphi(t, \theta^1), \theta^1)$$

pour les conditions initiales $\varphi(0, \theta^1) = X_0$

Il s'avère que si les dérivées partielles du second membre du système (51) ($\partial f_i / \partial X_k$ et $\partial f_i / \partial \theta_j$) ($i=1, \dots, n$; $k=1, \dots, n$; $j=1, \dots, p$) sont définies et continues, les dérivées partielles $\partial \varphi_i(t, \theta^1) / \partial \theta_j$ de la solution particulière sont alors elles aussi définies et continues pour tout t appartenant à l'intervalle $0 < t < T$ [28]. En outre, ces dérivées partielles sont solutions du système d'équations aux variations (par rapport aux paramètres) dont la forme est:

$$Y'_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\partial f_i}{\partial X_k} Y_{kj} + \frac{\partial f_i}{\partial \theta_j} \quad \begin{matrix} i=1,\dots,n \\ j=1,\dots,p \end{matrix} \quad (52)$$

pour les conditions initiales $\frac{\partial \varphi_i(0, \theta)}{\partial \theta_j} = 0$ (53)

Autrement dit : le système de fonctions $Y_{ij} = \partial \varphi_i(t, \theta) / \partial \theta_j = \partial X_{mi}(t) / \partial \theta_j$ est solution du système (52) pour les conditions initiales (53). Ecrivons le système (50) sous forme matricielle,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial J(t, \theta)}{\partial \theta} \right) = 2 Y(t, \theta)^T e(t)$$

où $Y(t, \theta)$ est une matrice de dimension $n \times p$ et de composantes :

$$Y_{ij}(t, \theta) = \frac{\partial X_{mi}(t)}{\partial \theta_j}$$

X_{mi} étant la $i^{\text{ème}}$ composante du vecteur X_m , avec $i=1,\dots,n$ et $j=1,\dots,p$. D'autre part si on pose $Z(t, \theta) = (\partial J(t, \theta) / \partial \theta)^T$, un vecteur ligne de dimension p , il satisfait l'équation différentielle :

$$Z'(t, \theta) = 2 e(t)^T Y(t, \theta) \quad Z(0, \theta) = 0$$

Ceci étant, écrivons l'équation (52) sous forme matricielle,

$$Y'(t, \theta) = \frac{\partial f}{\partial X} Y(t, \theta) + \frac{\partial f}{\partial \theta} \quad Y(0, \theta) = 0$$

où $\partial f / \partial X$ et $\partial f / \partial \theta$ sont des matrices respectivement de dimension $n \times n$ et $n \times p$. Ainsi, pour calculer les valeurs numériques du critère $J(T, \theta)$ et de ses dérivées $\partial J(T, \theta) / \partial \theta$, on intègre numériquement de $t=0$ à T le système suivant :

$$\begin{aligned} X'_m(t) &= f(X_m(t), \theta) & X_m(0) &= X_0 \\ Y'(t, \theta) &= \frac{\partial f}{\partial X_m} Y(t, \theta) + \frac{\partial f}{\partial \theta} & Y(0, \theta) &= 0 \\ Z'(t, \theta) &= 2 e(t)^T Y(t, \theta) & Z(0, \theta) &= 0 \\ J'(t, \theta) &= e(t)^T e(t) & J(0, \theta) &= 0 \end{aligned} \quad (54)$$

On obtient alors la valeur du critère $J(T, \theta)$ à minimiser et les valeurs de ses dérivées, $\partial J(T, \theta) / \partial \theta = (Z(T, \theta))^T$, au point θ de l'espace R^p . La résolution du système (54) permet donc de calculer, à chaque itération, la direction de descente d_k nécessaire à l'utilisation d'algorithmes d'optimisation nécessitant l'évaluation du gradient.

V METHODES AVEC CALCUL DE DERIVEES

Généralement la direction d_k est une direction de descente, c'est-à-dire qu'elle vérifie l'inéquation : $(J(\Theta_k), d_k) < 0$

V.1- METHODE DE PLUS FORTE PENTE

Une des premières méthodes de descente, sinon la première, remonte au XIX^e siècle. Celle-ci a été proposée par Cauchy A. en 1847 [5]. Elle part du principe suivant :

Pour une fonction $F(x,y)$ des variables x et y , le développement en série de Taylor permet d'approximer la variation $F(x_1 + \delta_1, x_2 + \delta_2) - F(x_1, x_2)$ par $\delta_1 \partial F / \partial x_1 + \delta_2 \partial F / \partial x_2$ (en ne gardant que les premiers termes de ce développement). Cette expression peut se mettre sous la forme :

$$F(x + \delta_1, x_2 + \delta_2) - F(x, x_2) \approx \sqrt{\delta_1^2 + \delta_2^2} \sqrt{\left(\frac{\partial F}{\partial x_1}\right)^2 + \left(\frac{\partial F}{\partial x_2}\right)^2} \cos(\theta)$$

où θ est l'angle entre les directions (δ_1, δ_2) et $(\partial F / \partial x_1, \partial F / \partial x_2)$. Evidemment cette croissance est maximale lorsque $\cos(\theta) = 1$ ($\theta = 0$), autrement dit dans la direction du gradient, et pour avoir une décroissance maximale il suffit d'effectuer le déplacement dans le sens opposé. Cette méthode peut se mettre sous la forme récurrente $\Theta_{k+1} = \Theta_k + \beta_k d_k$ avec $d_k = -J(\Theta_k)$, quant à β_k il peut être constant ou encore déterminé par une minimisation unidimensionnelle. Dans ce cas la méthode converge vers un point stationnaire.

Cependant, lorsque l'influence des différents paramètres sur le critère sont disproportionnées, ce qui peut être représenté par la présence de vallées très étroites au niveau des courbes iso-critère, la méthode du gradient présente des oscillations qui ralentissent énormément la vitesse de convergence de l'algorithme. Un premier remède consisterait à accélérer cette vitesse en effectuant à partir d'un point $x_{k,0}$ i itérations ($i = 2, 3$ ou 4) par la méthode du gradient ce qui donne le point $x_{k,i}$. Le point $x_{k+1,0}$ sera déterminé dans la direction $d_k = x_{k,i} - x_{k,0}$. Une seconde façon de pallier ces inconvénients est de passer à l'application de méthodes plus puissantes. Dans ce qui suit, nous présentons quelques unes d'entre elles.

V.2- METHODES DES DIRECTIONS CONJUGUEES

Principe

Soit une fonction quadratique du type $f(x) = x^T A x + b x + c$ avec A une matrice définie positive. La minimisation de cette fonction peut se ramener à l'inversion de la matrice A , et la solution peut s'écrire :

$$x_* = x_0 - A^{-1} f'_0 = - A^{-1} b \quad (55)$$

où x_0 est un point quelconque de R^p et $f'_0 = f'(0)$.

Or A^{-1} peut être déterminée à partir de p directions A - conjuguées (d_0, d_1, \dots, d_{p-1}) qui sont bien entendu linéairement indépendantes :

$$A^{-1} = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i d_i^T}{d_i^T A d_i}$$

l'équation (55) peut s'écrire alors :

$$x_* = x_0 - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{d_i d_i^T}{d_i^T A d_i} f'_0$$

Par ailleurs, comme les p directions sont linéairement indépendantes, elles peuvent constituer une base qui permet d'écrire :

$$x_* = x_0 + \sum_{i=0}^{n-1} \beta_i d_i$$

l'unicité du développement d'un vecteur suivant une base permet d'écrire :

$$\beta_i = - \frac{d_i^T f'_0}{d_i^T A d_i} \quad (56)$$

Donc la donnée de p vecteurs conjugués (d_0, d_1, \dots, d_{p-1}) permet de déterminer le minimum d'une fonction quadratique en p itérations au plus par la formule :

$$x_{k+1} = x_k + \beta_k d_k \quad \text{avec } k = 0, 1, \dots, p-1.$$

Le coefficient β_k étant déterminé soit par la formule (56) soit par une minimisation unidimensionnelle. Cependant, le problème de la détermination des directions d_i subsiste. Néanmoins, la puissance de ce type de méthodes (algorithme fini pour la minimisation d'une fonction quadratique), a incité un certain nombre d'auteurs à proposer des méthodes itératives pour la construction de ces directions conjuguées. Bien entendu chaque type de construction constitue une méthode des directions conjuguées, la différence entre les divers algorithmes proposés réside au niveau des conditions plus ou moins restrictives que doivent respecter les fonctions à minimiser. Ces conditions vont des fonctions quadratiques [15] aux fonctions de classe c^1 [8] en passant par la convexité.

Algorithme

On pose $Z_k = (Z(T, \Theta))^T = \partial J / \partial \theta \quad k = 0, 1, \dots, p$

On se donne Θ_0 et on calcule $J(T, \Theta)$ et $d_0 = Z_0$

Boucle 1

Tant que $J(T, \theta_0) \geq \epsilon_1$ et $\|Z_0\|^2 \geq \epsilon_2$ faire;

ϵ_1 et ϵ_2 sont deux réels positifs fixés à l'avance

Boucle 2

Pour $k = 1$ à p faire;

a - Minimisation dans la direction d_k

On calcule $\Theta_{k+1} = \Theta_k + \beta_k d_k$ avec un β_k tel que :

$$J(T, \Theta_k + \beta_k d_k) = \min_{\beta} (J(T, \Theta_k + \beta d_k))$$

b - Calcul de la nouvelle direction de descente

$$d_{k+1} = -Z_k + \alpha_k d_k$$

Fin de la boucle 2

On pose $\Theta_0 = \Theta_p$ et $d_0 = Z_p$

Fin de la boucle 1

Les algorithmes diffèrent par les formules proposées pour le calcul de α_k

Formule de Hestens et Steifel [15]

$$\alpha_k = \frac{\langle Z_{k+1}, (Z_{k+1} - Z_k) \rangle}{\langle d_k, (Z_{k+1} - Z_k) \rangle}$$

Formule de Polak et Ribière [27]

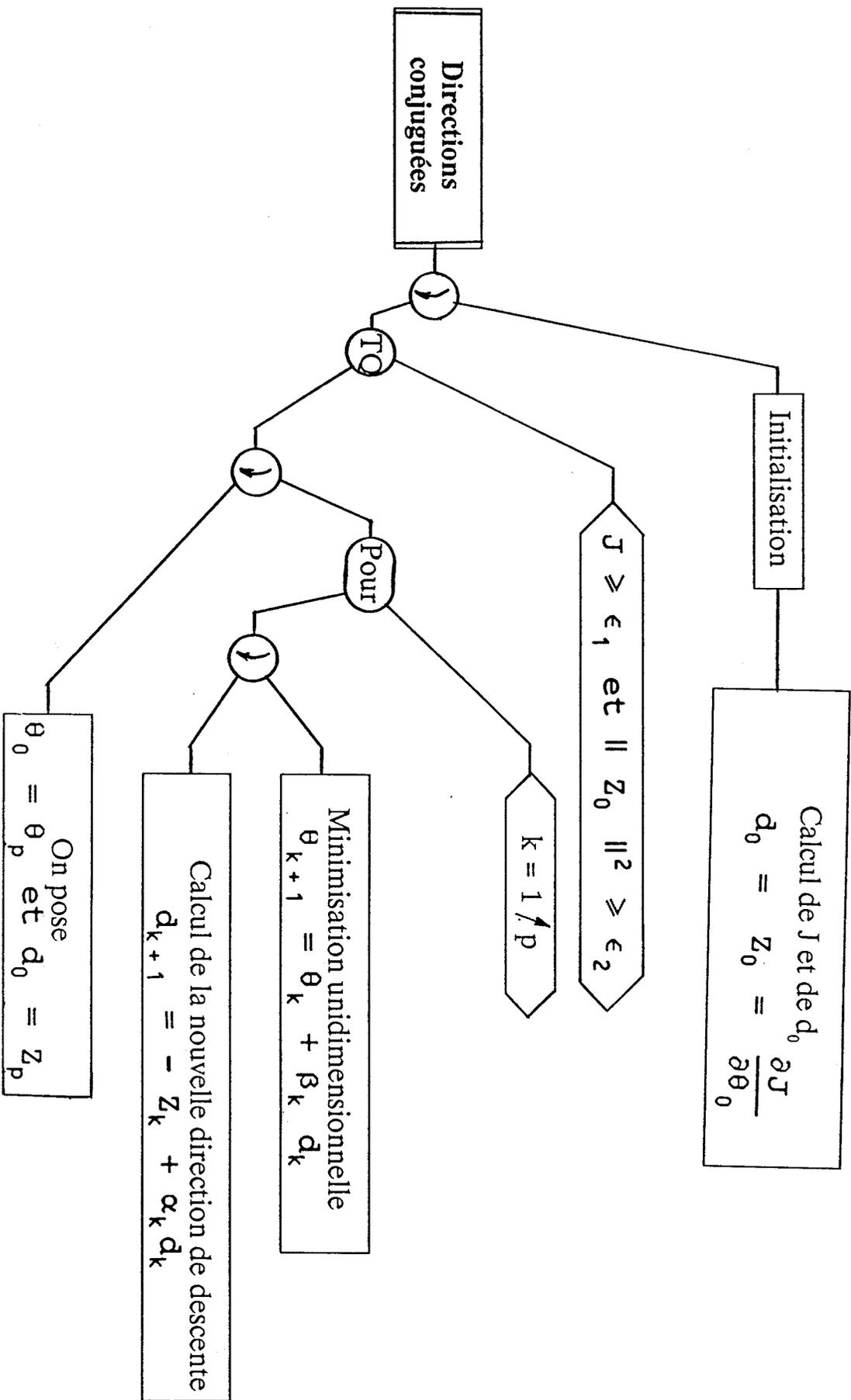
$$\alpha_k = \frac{\langle Z_k, (Z_{k+1} - Z_k) \rangle}{\|Z_k\|^2}$$

Formule de Fletcher et Reeves [11]

$$\alpha_k = \frac{\|Z_{k+1}\|^2}{\|Z_k\|^2}$$

METHODES AVEC CALCUL DES DERIVEES

Méthodes des directions conjuguées



V.3- METHODES DE METRIQUES VARIABLES

Avant de parler des méthodes de métrique variables, rappelons le principe de la méthode de Newton-Ralphson.

Soit $F(X)$ une fonction vectorielle deux fois dérivables, on considère les trois premiers termes du développement en série de Taylor au point courant X_k , autrement dit, écrivons l'approximation suivante :

$$F(X_k + \delta) \approx F(X_k) + \delta \nabla F(X_k) + \frac{1}{2} \delta^T H_k \delta$$

où H_k (le Hessien) est la matrice des dérivées secondes de F au point X_k .

La recherche d'un point stationnaire de F , considérée comme fonction de X , se ramène à la résolution du système d'équations $\nabla F(X_k) + H_k \delta = 0$ (57).

Dans le cas où le hessien est une matrice symétrique définie positive, le point stationnaire est un minimum.

Le point suivant de la suite est pris tel que $\delta = X_{k+1} - X_k$ soit solution de l'équation (57), c'est à dire $\delta = X_{k+1} - X_k = -(H_k)^{-1} \nabla F(X_k)$, autrement dit, les points successifs de la suite sont liés par :

$$X_{k+1} = X_k + \beta_k d_k \text{ avec } \beta_k=1 \text{ et } d_k = - (H_k)^{-1} \nabla F(X_k)$$

Le fait de devoir évaluer l'inverse du hessien à chaque itération complique, sinon rend impossible, la mise en oeuvre d'une telle méthode. Pour contourner cette difficulté, un certain nombre d'auteurs ont proposé des algorithmes permettant le calcul du hessien ou de son inverse d'une manière itérative tout en préservant la puissance de la méthode de Newton-Ralphson. Pour la correction de la matrice H à chaque itération nous proposons deux méthodes bien connues de réactualisation :

L'algorithme de D.F.P. (Davidon, Fletcher et Powell) propose la correction suivante :

$$H_{k+1} = H_k + \frac{\delta_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{H_k \gamma_k \gamma_k^T H_k}{\gamma_k^T H_k \gamma_k}$$

où $\delta_k = \theta_{k+1} - \theta_k$ et $\gamma_k = \nabla F_{k+1} - \nabla F_k$

L'algorithme de B.F.G.S. (Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno) a été développé indépendamment par les quatres auteurs. Il possède l'avantage de conserver les mêmes propriétés de convergence que l'algorithme de D.F.P. tout en utilisant des minimisations unidimensionnelles économiques.

$$H_{k+1} = H_k + \left[1 + \frac{\gamma_k^T H_k \gamma_k}{\delta_k^T \gamma_k} \right] \frac{\delta_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k} - \frac{\delta_k \gamma_k^T H_k + H_k \gamma_k \delta_k^T}{\delta_k^T \gamma_k}$$

V.4- APPLICATIONS

Nous avons pris comme fonction test, le modèle de la phase acidogène :

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} X(t) e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= -\tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k X(t) (1 - e^{-\delta S(t)}) \end{aligned}$$

Les valeurs des paramètres à atteindre sont :

$$\mu_{\max} = 0.75; \quad \alpha = 0.1; \quad \beta = 0.2; \quad \tau_{\max} = 2.0; \quad \gamma = 0.25; \quad k = 1.5 \quad \text{et} \quad \delta = 0.5$$

Le premier exemple est fait avec la formule de Hestens et Steifel[15].

Tous les paramètres sont égaux à 0.5 au départ. Nous arrivons aux valeurs suivantes : 0.918 ; 0.256 ; 0.498; 1.128; 0.529; 0.993 et 0.682 , après avoir calculé le critère 1640 fois et le gradient 65 fois.

Le deuxième exemple est fait avec la formule de Polak et Ribière [27]

Tous les paramètres sont égaux à 0.1 au départ. Nous arrivons aux valeurs suivantes : 0.856; 0.217 ; 0.998; 1.317; 0.877; 1.167 et 1.13, après avoir calculé le critère 1830 fois et le gradient 76 fois.

Nous avons tracé ci-dessous les courbes correspondantes aux résultats ainsi obtenus.

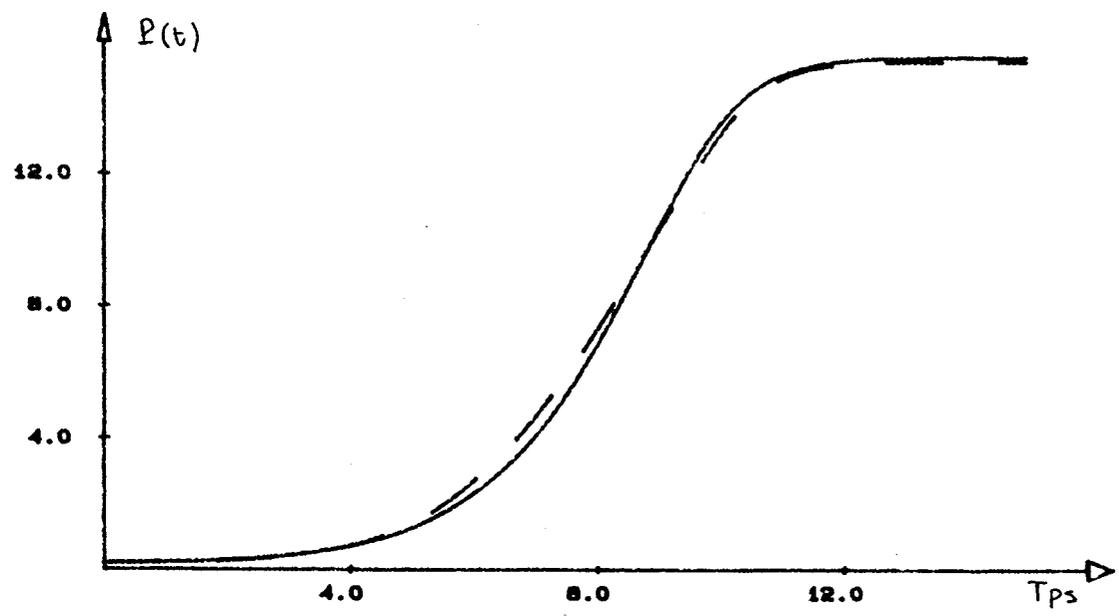
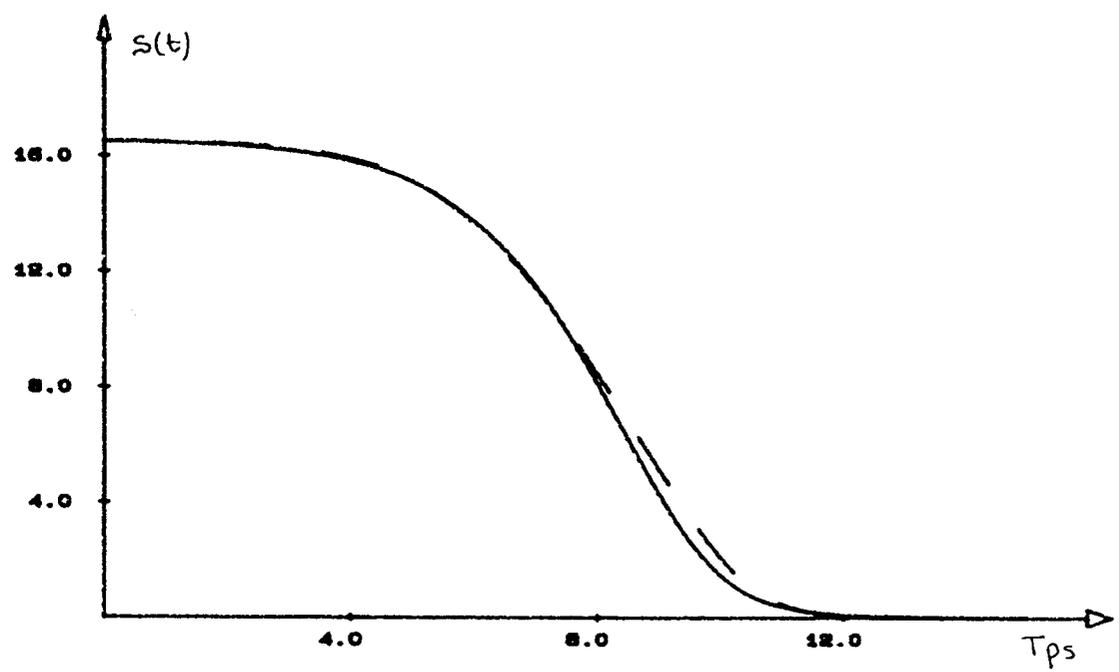
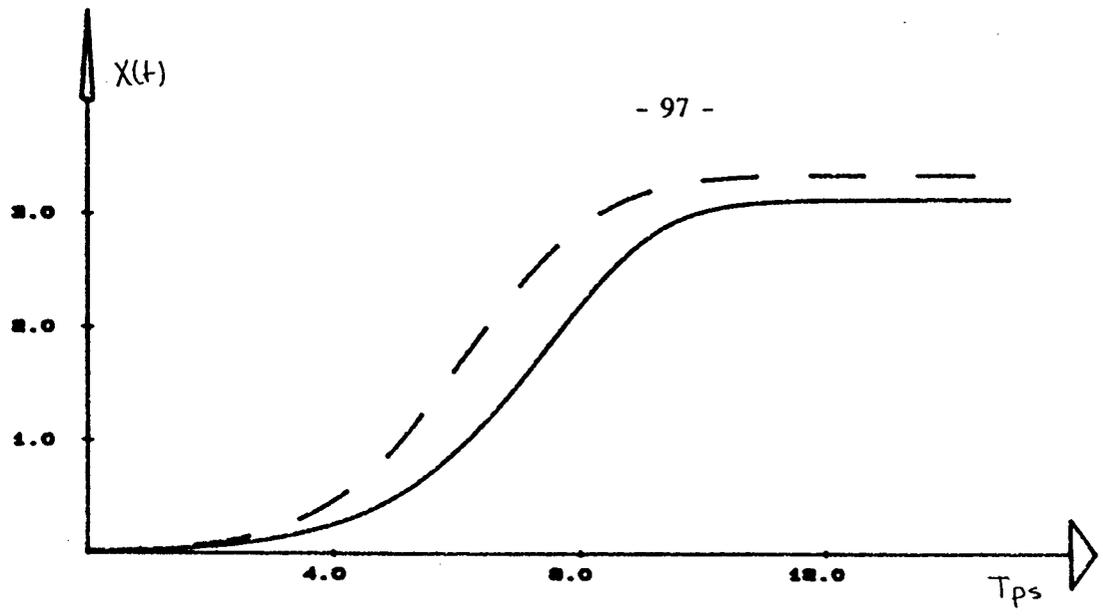


Figure C.2 : Formule de Hestens et Steifel

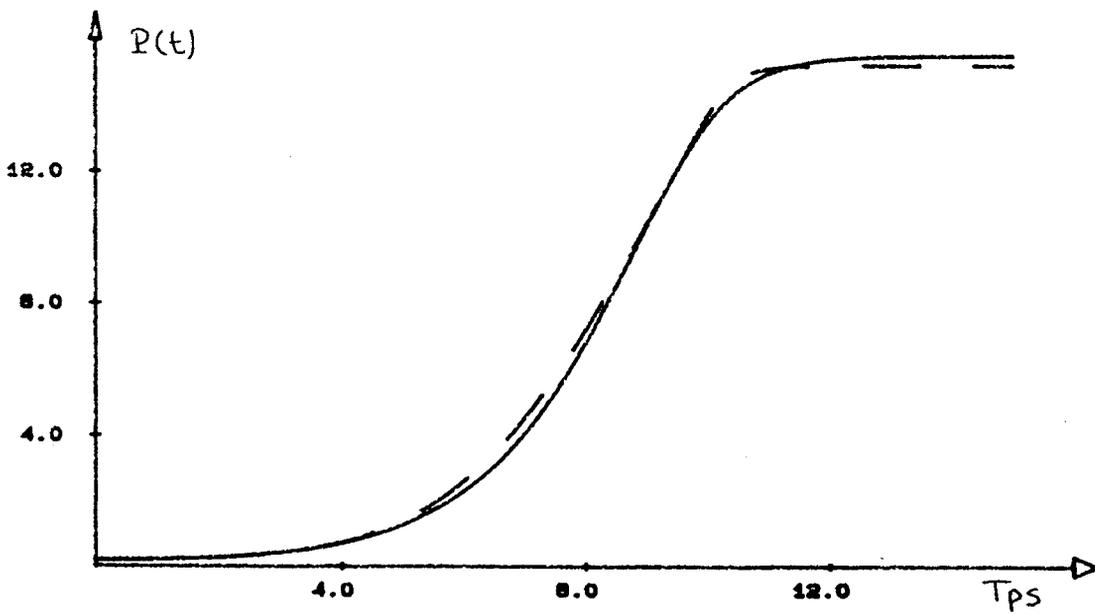
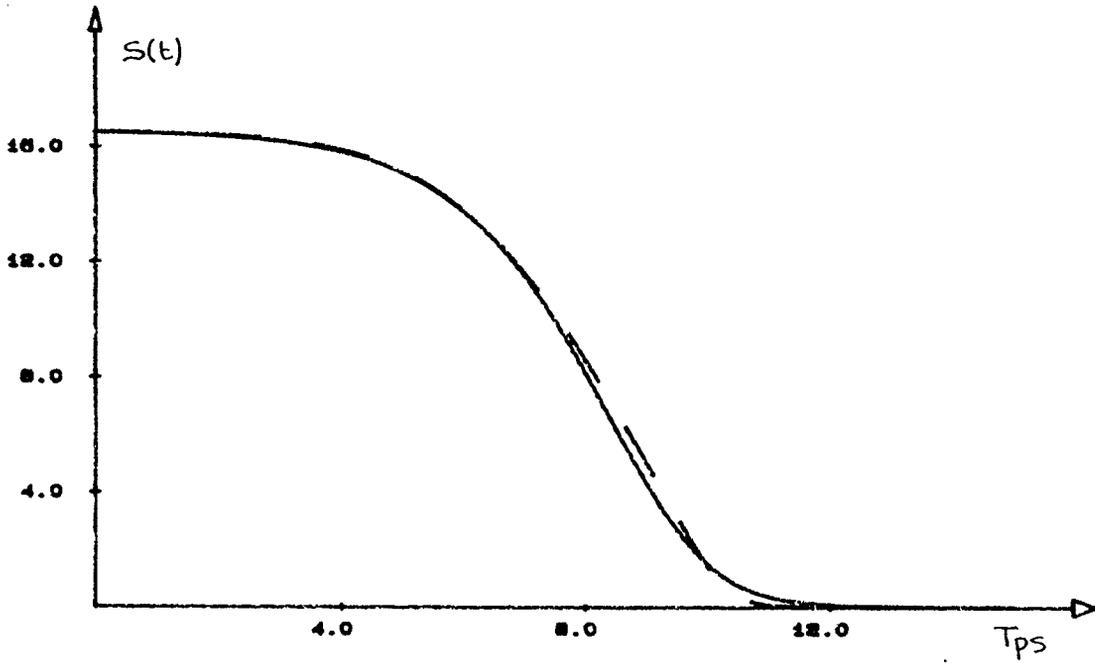
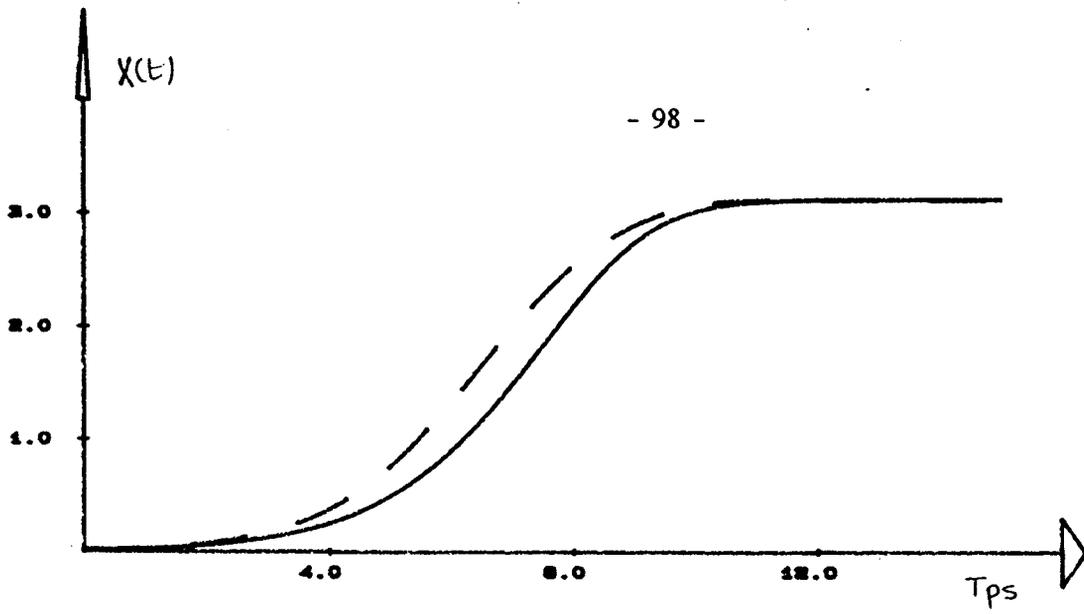


Figure C.3 : Formule de Polak et Ribière

CONCLUSION

L'utilisation de méthodes connues pour être puissantes telles que les directions conjuguées ou les méthodes de métriques variables a amélioré d'une façon évidente l'identification d'une bonne partie des paramètres contenus dans les expressions du modèle que nous avons présenté. Nous constatons cependant qu'une insuffisance dans l'identification de quelques uns d'entre eux subsiste. La principale cause est sans doute les disproportions d'influences des différents paramètres sur le gradient du critère et par là même sur la construction des directions conjuguées ou celle de l'inverse du hessien. Pour essayer de remédier à ces inconvénients, nous avons repris le principe de la décomposition de l'espace paramétrique proposée par Laurent [20].



VI

DECOMPOSITION DYNAMIQUE DE L'ESPACE PARAMETRIQUE

Lors de l'utilisation des méthodes de directions conjuguées et de métriques variables, nous avons constaté que certains paramètres ne variaient presque pas alors que d'autres avaient pratiquement atteint leurs valeurs optimales. Cependant, se ne sont pas les méthodes de minimisation ni l'expression analytique du critère qu'il faut mettre en cause, mais plutôt le "lien" entre les paramètres et le gradient en passant par les fonctions de sensibilité. Autrement dit : l'influence des paramètres sur les sorties est disproportionnée et cette influence se manifeste à travers les sensibilités. Dans ce cas, l'identification de l'ensemble des paramètres par une méthode, aussi puissante soit elle, posera toujours des problèmes de convergence. Et ces problèmes s'aggravent au fur et à mesure que le nombre de paramètres à identifier augmente. On peut résoudre le problème en décomposant l'espace paramétrique en sous-espaces. Chaque sous espace regroupe alors une classe de paramètres compatibles.

Notons que la notion de décomposition n'est ni nouvelle ni spécifique au domaine de l'identification. En effet, dans le domaine de la commande des processus, la décomposition des grands systèmes ou des systèmes complexes est couramment usitée; celle-ci fait appel à des théories telles que la théorie de l'information. Le système complexe se trouve ainsi décomposé en sous-systèmes faiblement liés. Cette décomposition utilise la notion de transinformation et des indices informationnels ([34], [36], [38]). Il faut noter qu'en général cette décomposition est statique, du fait qu'elle a lieu au départ, une fois pour toute et avant d'élaborer une technique de commande adéquate.

VI.1- LES FONCTIONS DE SENSIBILITES

Nous avons reporté sur les figures (C.4) et(C.5) l'évolution des fonctions de sensibilités des différents paramètres des deux modèles retenus pour représenter l'acidogénèse, à savoir :

$$\frac{dX(t)}{dt} = \mu X(t)$$

$$\frac{dS(t)}{dt} = -\tau_{max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)})$$

$$\frac{dP(t)}{dt} = k X(t) (1 - e^{-\delta S(t)})$$

$$\text{avec } \mu = \mu_{max} \frac{S(t)}{k_c X(t) + S(t)} \text{ (Fig C.4) ou } \mu = \mu_{max} e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) \text{ (Fig C.5)}$$

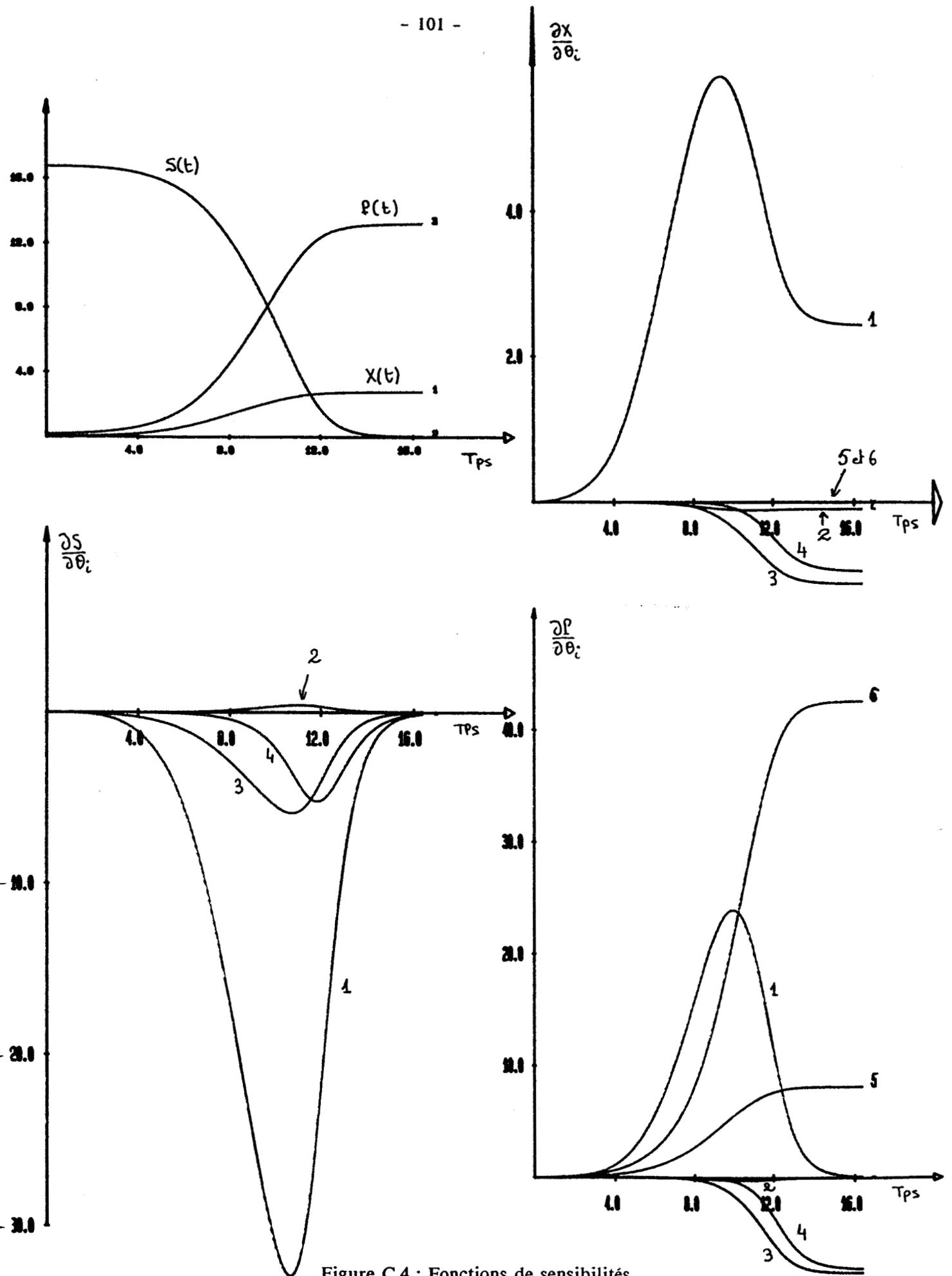


Figure C.4 : Fonctions de sensibilités

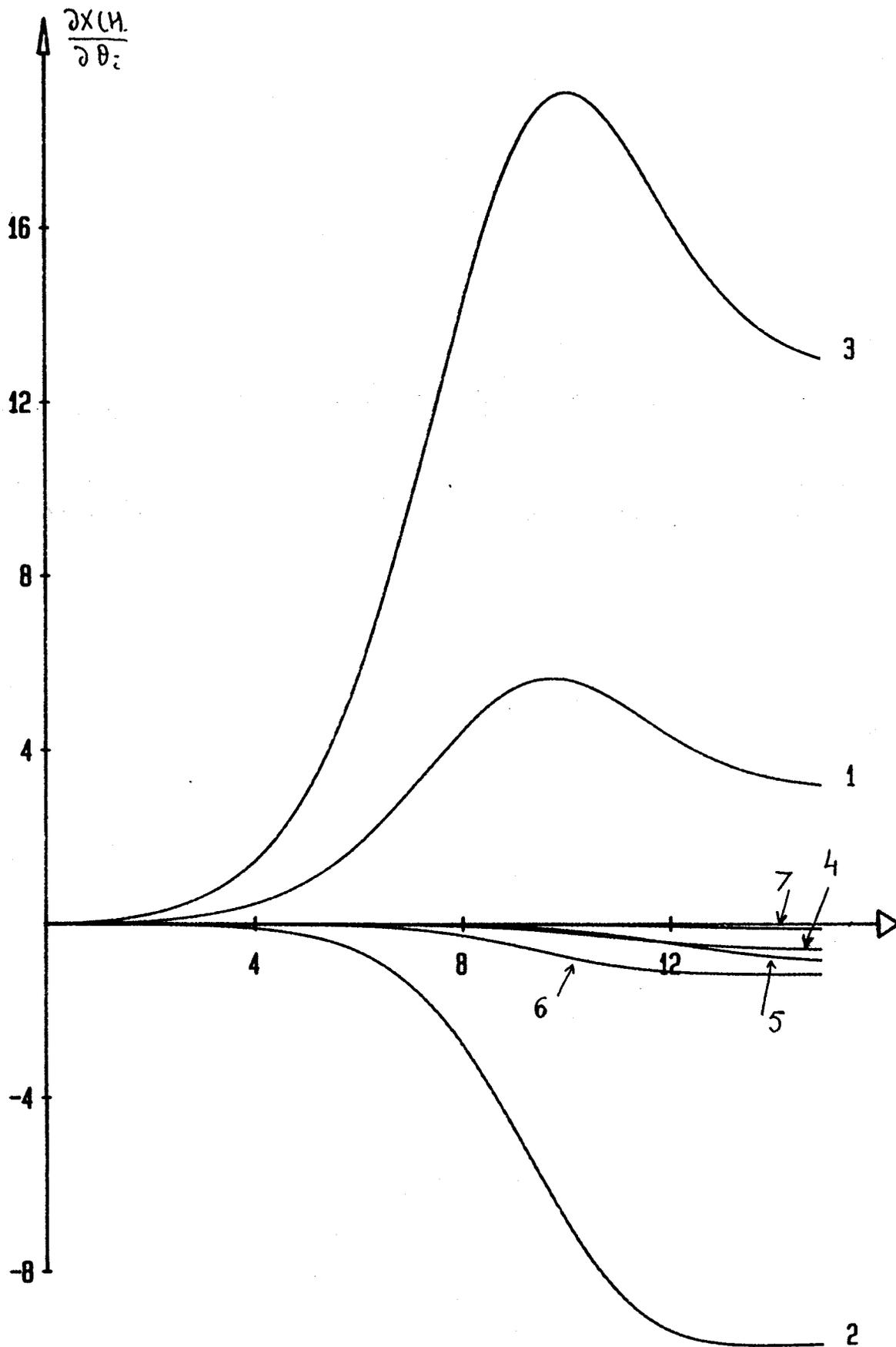


Figure C.5 (a) : Fonctions de sensibilités

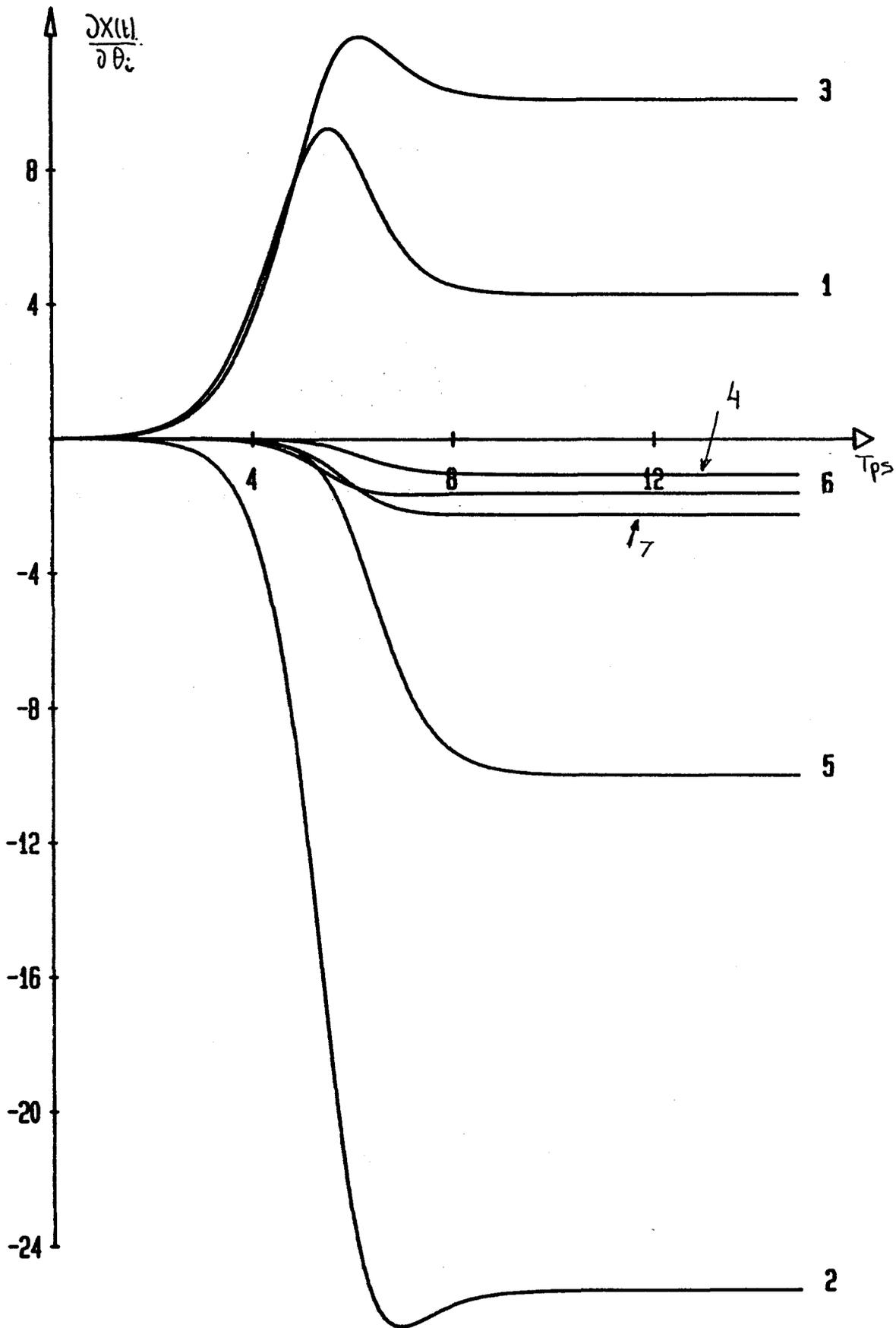


Figure C.6 (a) : Fonctions de sensibilités

Décomposition de l'espace paramétrique

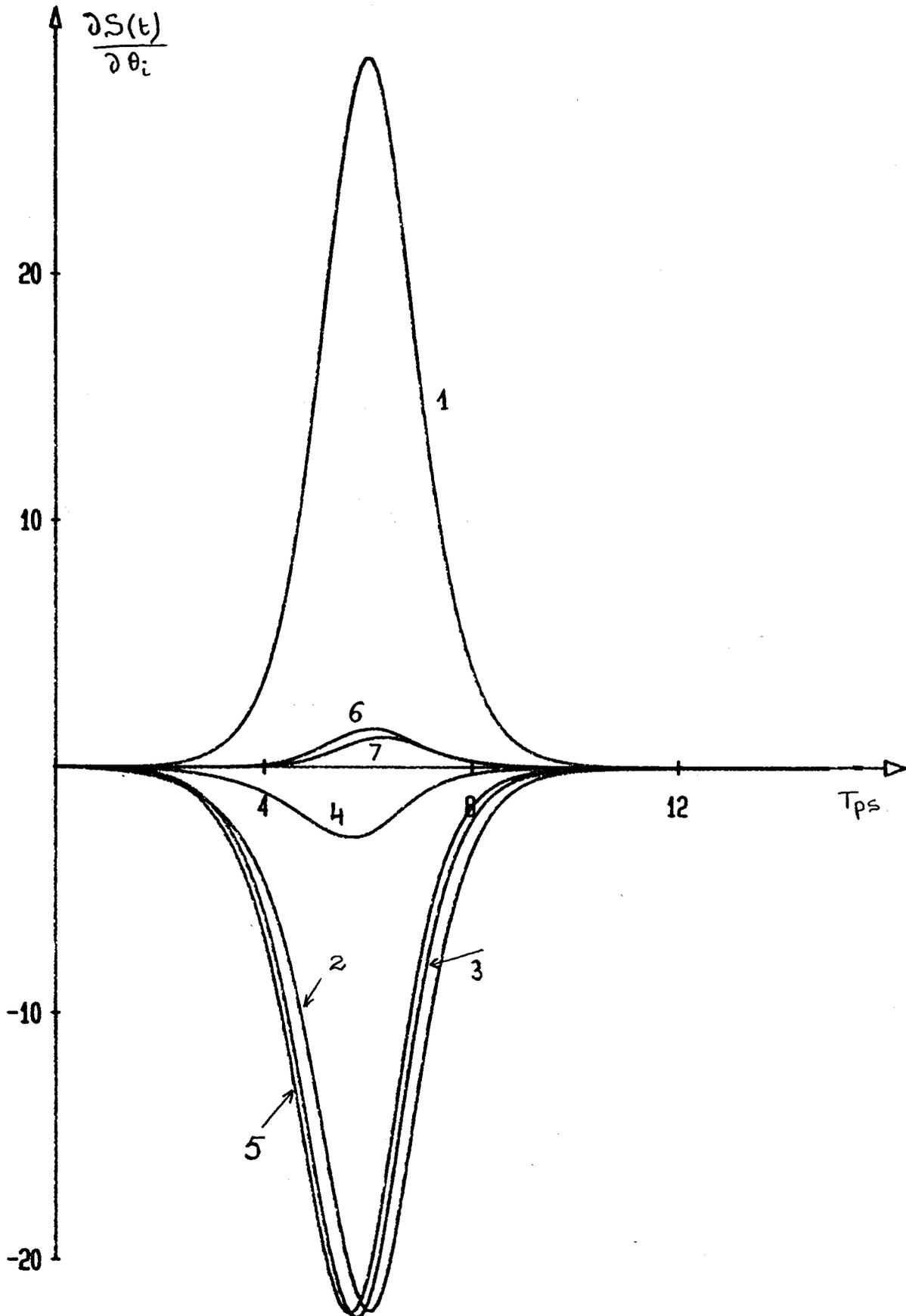


Figure C.6 (b) : Fonctions de sensibilités

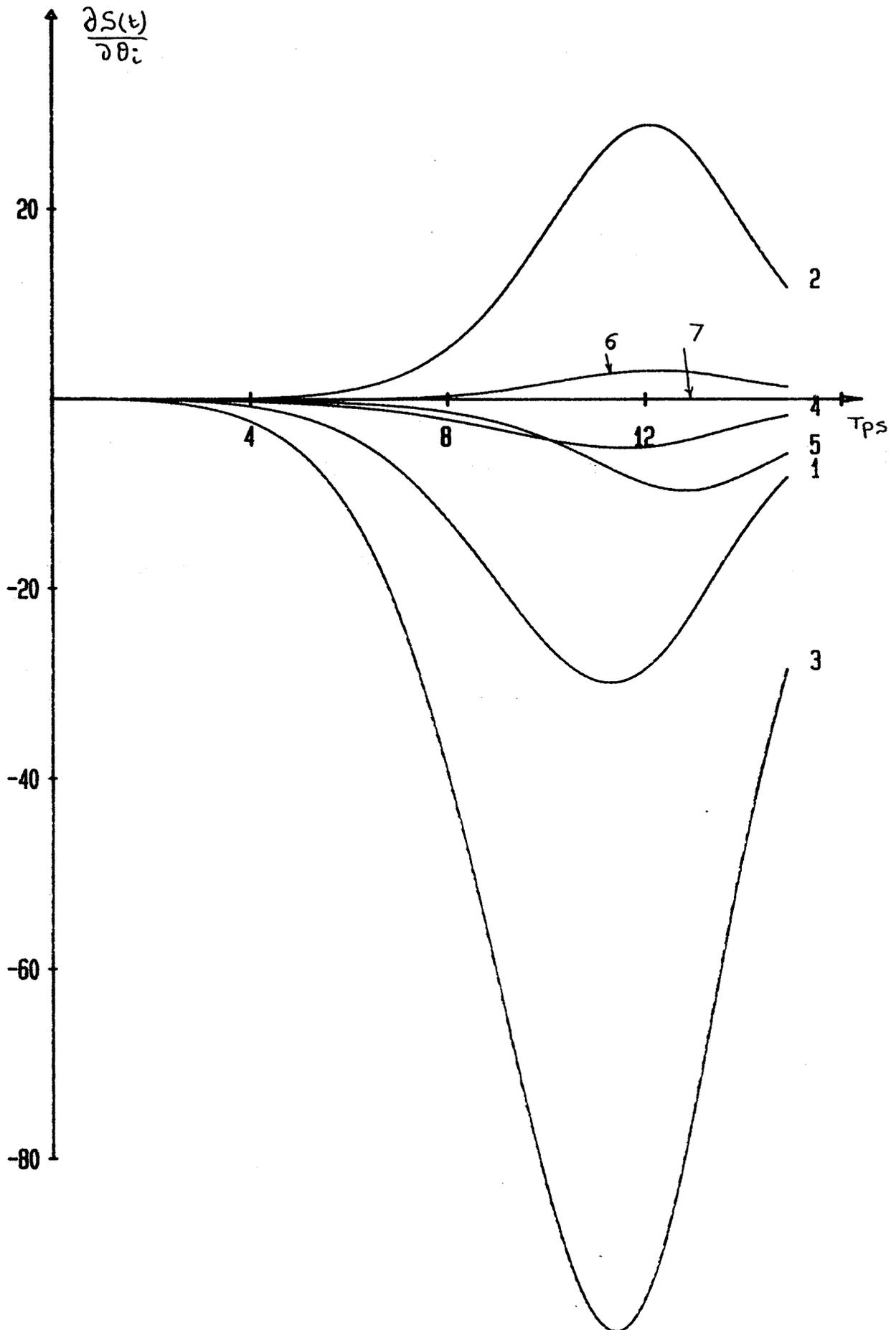


Figure C.5 (b) : Fonctions de sensibilités

Décomposition de l'espace paramétrique

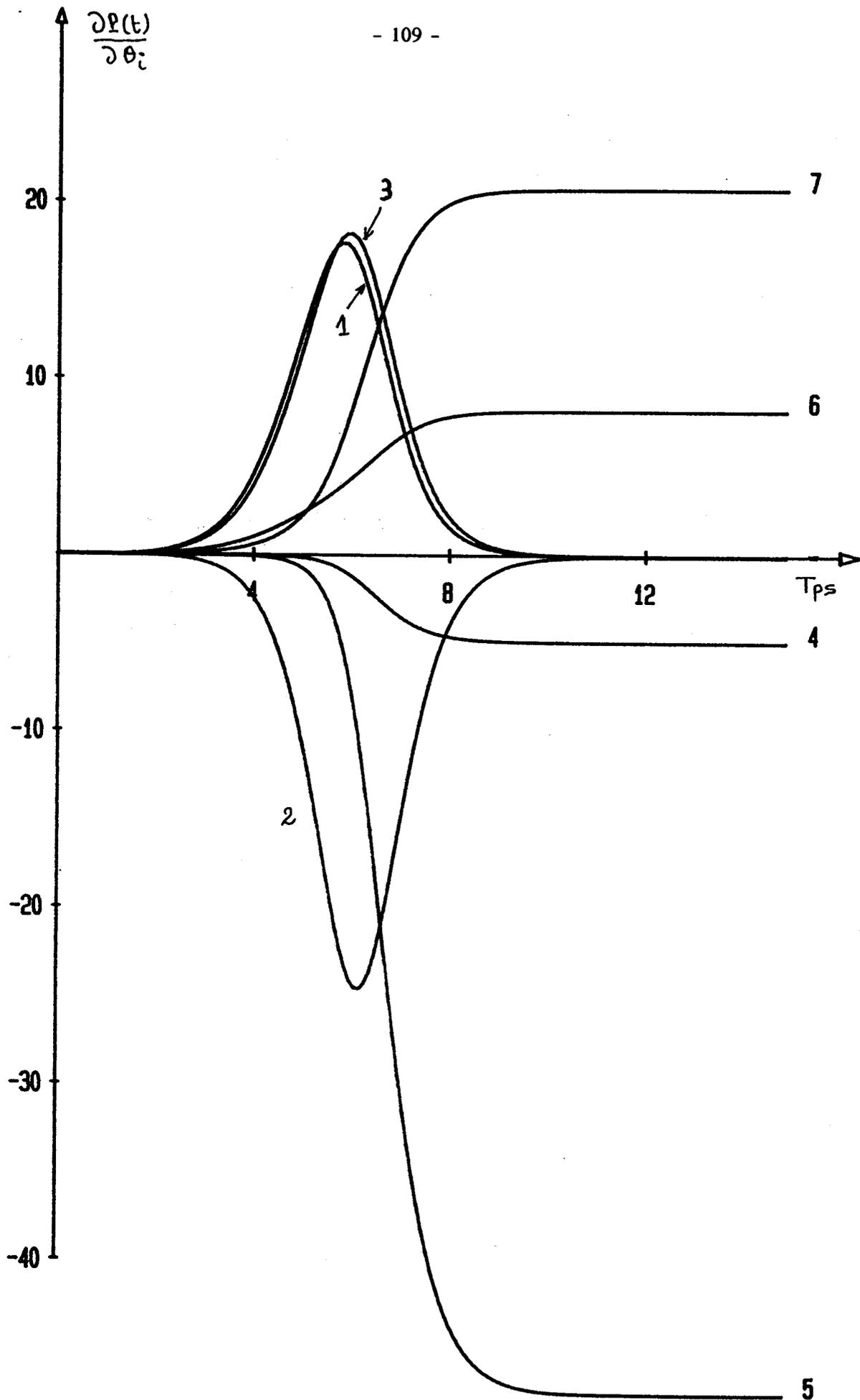


Figure C.6 (c) : Fonctions de sensibilités

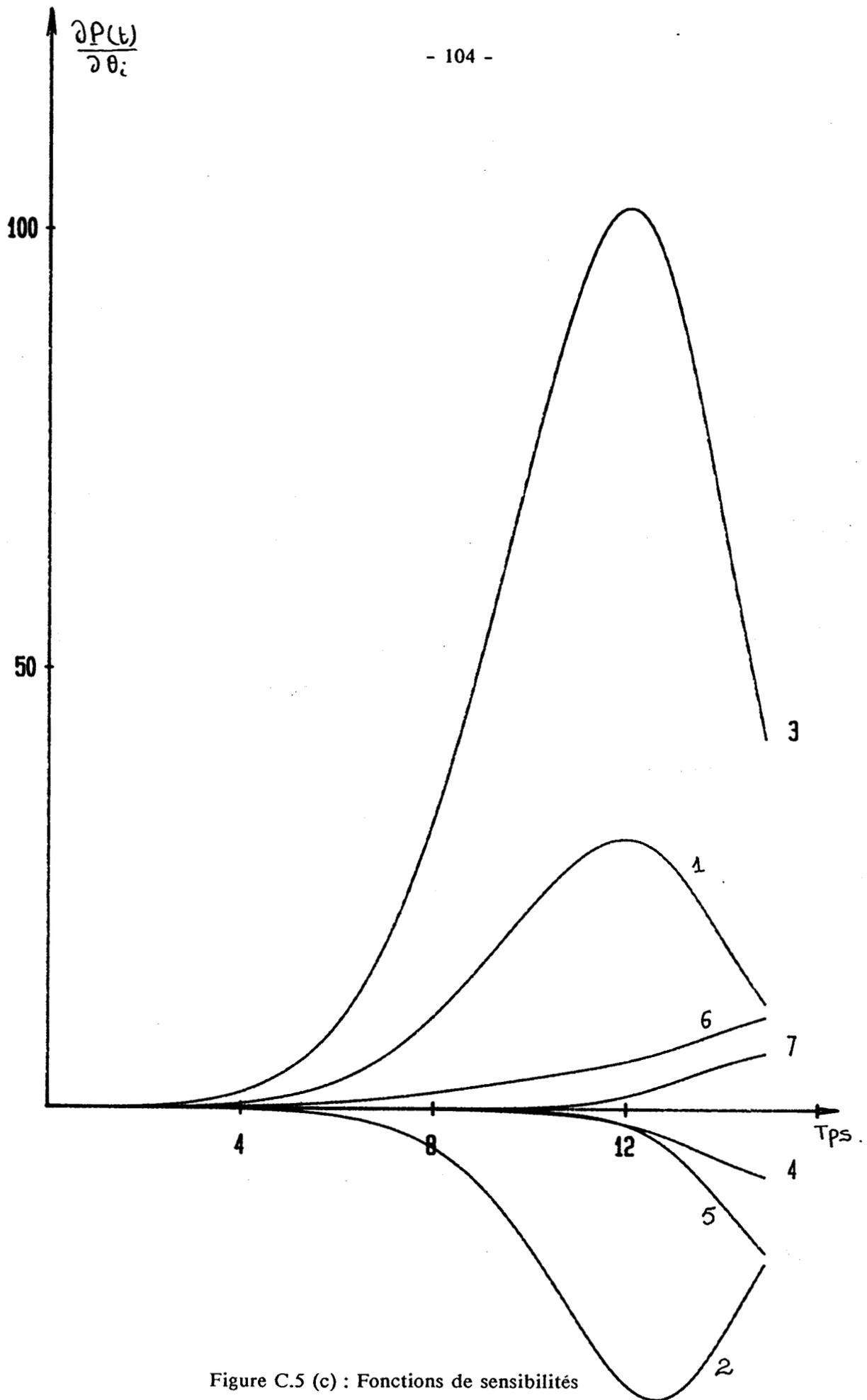


Figure C.5 (c) : Fonctions de sensibilités

Nous constatons effectivement que les courbes relatives aux fonctions de sensibilités des différents paramètres sont parfois nettement disproportionnés. Ce déséquilibre ne permet pas l'identification des paramètres dont les fonctions de sensibilités sont faibles par rapport aux autres. L'idée est de grouper les paramètres en classes. Dans chacune de ces classes, les paramètres doivent être compatibles moyennant un critère et c'est là qu'intervient le coefficient de ressemblance.

VI.2- COEFFICIENT DE RESSEMBLANCE

La décomposition de l'espace paramétrique en sous-espaces peut être intéressante dans le domaine de l'identification des paramètres. En effet, si nous arrivons à avoir des classes de paramètres dans lesquelles les influences des uns par rapport aux autres sur les sorties restent voisines, nous pouvons alors appliquer des algorithmes d'identification à chacune des classes séparément. Mais avant toute chose, il nous faut un critère de décomposition. A cet effet, Laurent [20] a proposé, pour l'identification des paramètres d'un système à une seule sortie, un coefficient de ressemblance r_{ij} permettant de quantifier la ressemblance entre deux paramètres Θ_i et Θ_j dont l'expression analytique est :

$$r_{ij} = \frac{\int_0^{\infty} \min(|f_i|, |f_j|) dt}{\sqrt{\int_0^{\infty} |f_i| dt * \int_0^{\infty} |f_j| dt}}$$

où β_i est le coefficient de sensibilité de la sortie par rapport au paramètre Θ_i .

Une des propriétés de ce coefficient r_{ij} est qu'il est borné $0 < r_{ij} < 1$. En outre, au fur et à mesure que la valeur de r_{ij} tend vers un, les coefficients de sensibilités $\beta_i(t)$ et $\beta_j(t)$ se ressemblent de plus en plus. Cependant, pour pouvoir utiliser ce même coefficient pour notre cas, il faut l'étendre aux systèmes à plusieurs sorties. Afin d'y arriver, nous avons généralisé en quelque sorte le coefficient de ressemblance r_{ij} qui devient :

$$r_{ij} = \frac{\int_0^T \min \left(\sum_{k=1}^n |\sigma_{ki}|, \sum_{k=1}^n |\sigma_{kj}| \right) dt}{\sqrt{\int_0^T \sum_{k=1}^n |\sigma_{ki}| dt * \int_0^T \sum_{k=1}^n |\sigma_{kj}| dt}}$$

Partant de la matrice R_{IJ} calculée pour un couple (s, Θ) , nous procédons alors à la formation de classes de un ou plusieurs éléments et nous éliminons de la matrice ceux qui n'appartiennent qu'à ces classes. Le procédé se fait itérativement jusqu'à l'obtention d'une matrice réduite qui ne contient que des uns. Elle est ainsi constituée des éléments appartenant à la dernière classe.

Une itération de cet algorithme se fait comme suit :

- Chercher la ligne qui contient le minimum de un 1

- Si le nombre de 1 de cette ligne est égal à l'unité, alors, former une classe à un seul élément et éliminer celui-ci de la matrice.

- Si le nombre de 1 de la ligne est égal à deux, alors, former une classe à deux éléments. Pour l'élimination :

Si le nombre de 1 de la ligne du deuxième élément est égal à deux, alors, éliminer les deux éléments de la matrice .

Sinon éliminer le premier élément seulement.

- Si le nombre de 1 de la ligne est égal à trois, alors,

a- Si les deux autres éléments sont compatibles, alors, former une classe à trois éléments. Eliminer en plus du premier élément celui dont la ligne contient trois 1.

b- Si les deux autres éléments ne sont pas compatibles, alors, former deux blocs à deux éléments et éliminer le premier seulement.

On procède de la même manière si le nombre de 1 de la ligne sélectionnée est égale à quatre. On recommence une nouvelle itération avec la matrice réduite ainsi obtenue jusqu'à ce que la dimension de la matrice soit égale au nombre de uns contenus dans chacune des lignes.

Exemple :

Soit la matrice R_{IJ} suivante calculée en un point Θ de l'espace paramétrique de dimension sept.

	Θ_1	Θ_2	Θ_3	Θ_4	Θ_5	Θ_6	Θ_7
Θ_1	1	.51	.78	.14	.29	.63	.75
Θ_2		1	.73	.38	.77	.01	.31
Θ_3			1	.03	.81	.71	.78
Θ_4				1	.59	.88	.26
Θ_5					1	.75	.45
Θ_6						1	.38
Θ_7							1

Soit $s = 0.7$, nous pouvons écrire cette matrice sous la forme suivante

	1	2	3	4	5	6	7
1	1	0	1	0	0	0	1
2	0	1	1	0	1	0	0
3	1	1	1	0	1	1	1
4	0	0	1	1	0	1	0
5	0	1	1	0	1	1	0
6	0	0	1	1	1	1	0
7	1	0	1	0	0	0	1

1^{ère} itération

La première ligne possède le nombre minimum de 1 qui vaut 3, donc nous avons la possibilité de former soit une classe de trois éléments ou deux classes à deux éléments. Comme les éléments 3 et 7 sont compatibles, nous pouvons former un bloc à trois éléments (1, 3, 7). Pour l'élimination, seuls les éléments 1 et 7 sont à éliminer, puisqu'ils n'appartiennent qu'à cette classe.

2^{ème} itération

La matrice issue de la première itération est la suivante :

	2	3	4	5	6
2	1	1	0	1	0
3	1	1	0	1	1
4	0	0	1	0	1
5	1	1	0	1	1
6	0	1	1	1	1

Dans cette itération, nous avons la formation d'une classe à deux éléments (4, 6), mais élimination de l'élément n°4 seulement.

3^{ème} itération

Ecrivons la matrice réduite par la deuxième itération

	2	3	5	6
2	1	1	1	0
3	1	1	1	1
5	1	1	1	1
6	0	1	1	1

Le résultat de cette itération est la formation de la classe (2, 3, 5) et l'élimination de l'élément n°2.

4^{ème} itération

	3	5	6
3	1	1	1
5	1	1	1
6	1	1	1

Après cette dernière itération, nous la formation de la classe (3, 5, 6) et l'arrêt de l'algorithme. Le résultat final donne les classes suivantes :

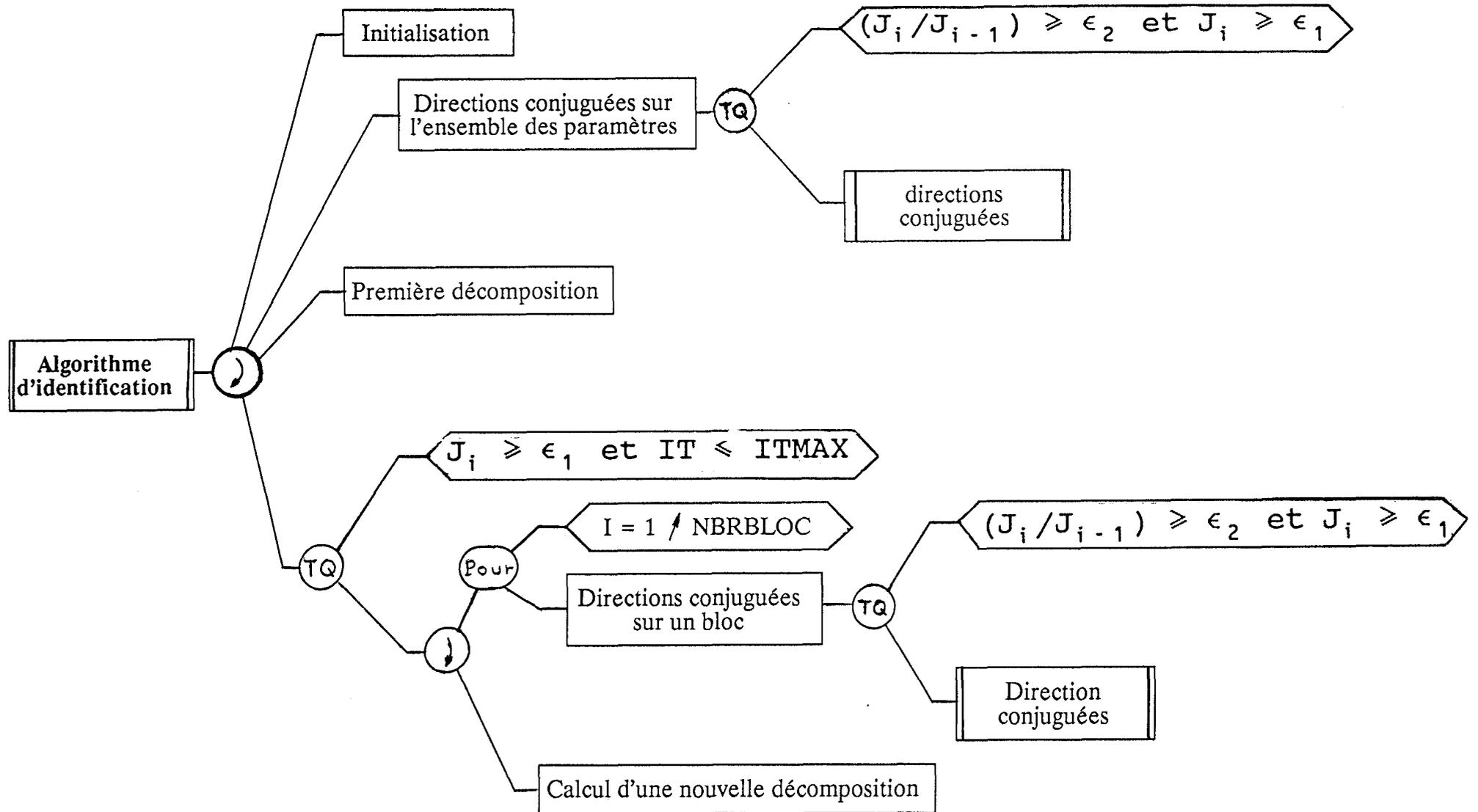
(1, 3, 7); (2, 3, 5); (4, 6) et (3, 5, 6).

VI.3- ALGORITHME D'IDENTIFICATION

Pour éviter d'effectuer un nombre excessif de fois la décomposition en sous-espaces, nous commençons d'abord par une phase de minimisation sur l'ensemble des paramètres par une méthode de directions conjuguées ou de métrique variable. Dès que la valeur du critère ne décroît plus d'une manière appréciable, l'algorithme effectue une première décomposition. La minimisation se fait alors à l'intérieur de chacune des classes obtenues. Le procédé est réitéré tant que la diminution du critère reste valable. Dans le cas contraire, l'algorithme procède à une nouvelle décomposition.

Le procédé est répété jusqu'à l'obtention d'une valeur satisfaisante du critère ou dès que le nombre de calcul du critère dépasse une valeur maximale fixée à l'avance.

ALGORITHME D'IDENTIFICATION



VI.4- APPLICATIONS

Pour illustrer cet algorithme d'identification, nous avons considéré deux applications.

VI.4.1- Simulation

Nous avons considéré l'exemple précédemment utilisé pour l'illustration des méthodes de directions conjuguées.

Les valeurs des paramètres à atteindre sont :

$$\max = 0.75; \quad = 0.1; \quad \beta = 0.2; \quad \max = 2.0; \quad = 0.25; \quad k = 1.5 \quad \text{et} \quad = 0.5$$

Formule de Hestens et Sreifel (Fig C.7)

Tous les paramètres sont égaux à 0.5 au départ.

1^{ère} Décomposition à nfct = 1340 et ndf = 65. Les classes obtenues sont {3}; {1,2}; {4,6} et {5,7}

2^{ème} Décomposition à nfct = 1614 et ndf = 78. Les classes obtenues sont {3}; {5}; {7}; {1,2} et {4,6}

3^{ème} Décomposition à nfct = 2063 et ndf = 115. Les classes obtenues sont {3}; {1,2}; {4,5} et {4,6}

4^{ème} Décomposition à nfct = 2910 et ndf = 154. Les classes obtenues sont {3}; {7}; {1,2}; {4,5,6}

Nous arrivons aux valeurs suivantes : 0.802; 0.179; 0.405; 1.84; 0.30; 1.35 et 0.59, après avoir calculé le critère 3110 fois et le gradient 170 fois.

Formule de Polak et Ribière (Fig C.8)

Tous les paramètres sont égaux à 1.0 au départ.

1^{ère} Décomposition à nfct = 1830 et ndf = 76. Les classes obtenues sont {3}; {1,2}; {4,6} et {4,5,6}

2^{ème} Décomposition à nfct = 2390 et ndf = 94. Les classes obtenues sont {3}; {7}; {1,2} et {4,5,6}

3^{ème} Décomposition à nfct = 3220 et ndf = 134. Les classes obtenues sont {3}; {7}; {1,2}; {4,6} et {5,6}.

Nous arrivons aux valeurs suivantes : 0.755; 0.129; 0.477; 1.86; 0.31; 1.45 et 0.64, après avoir calculé le critère 4134 fois et le gradient 209 fois.

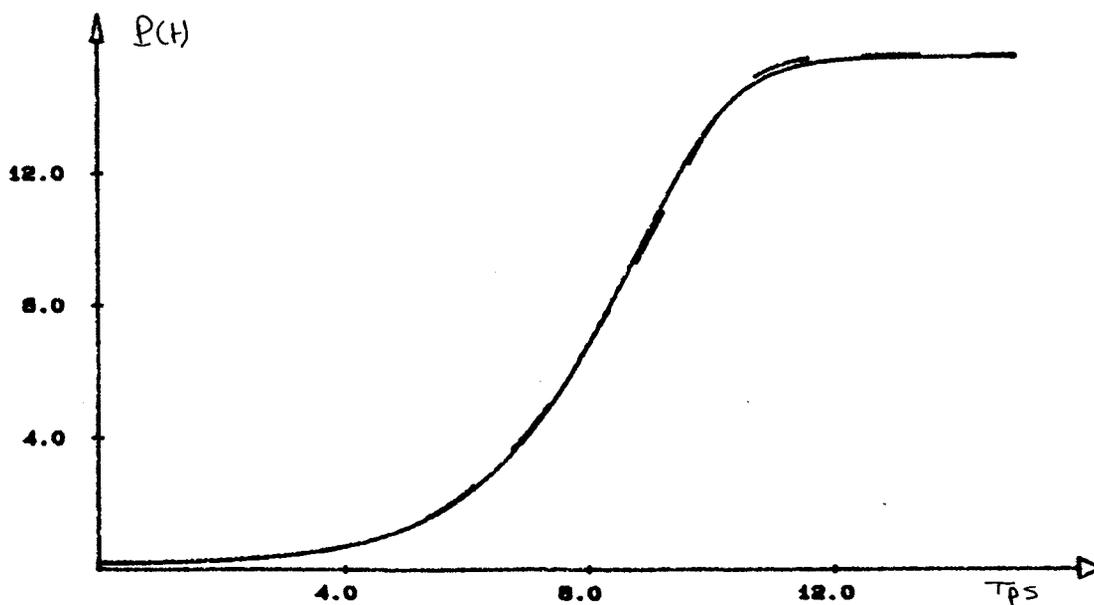
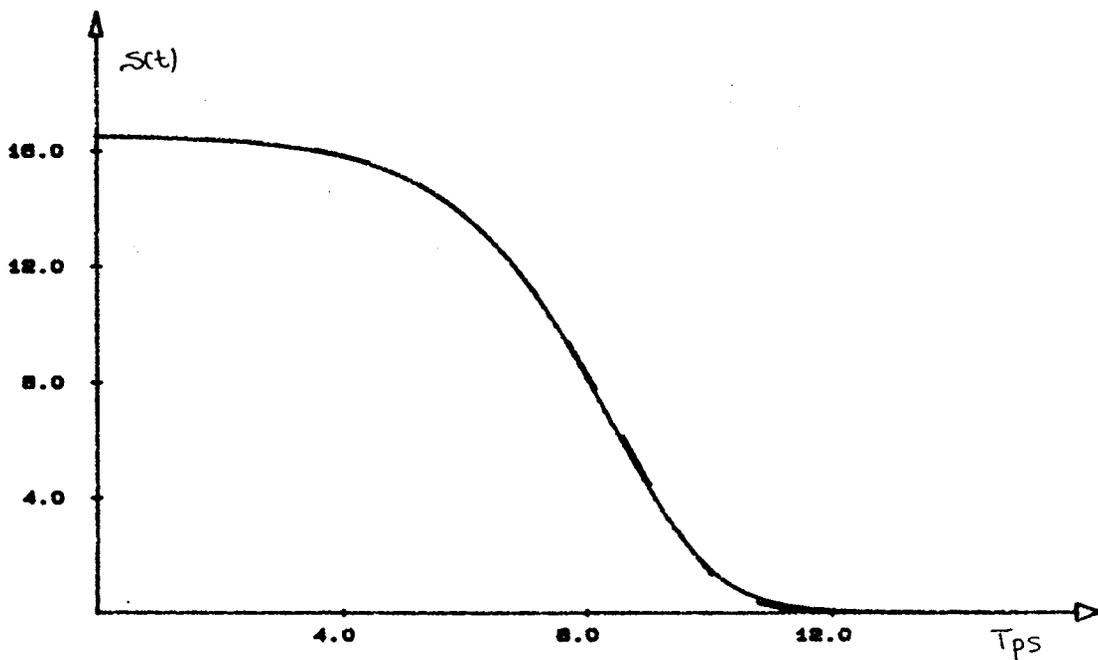
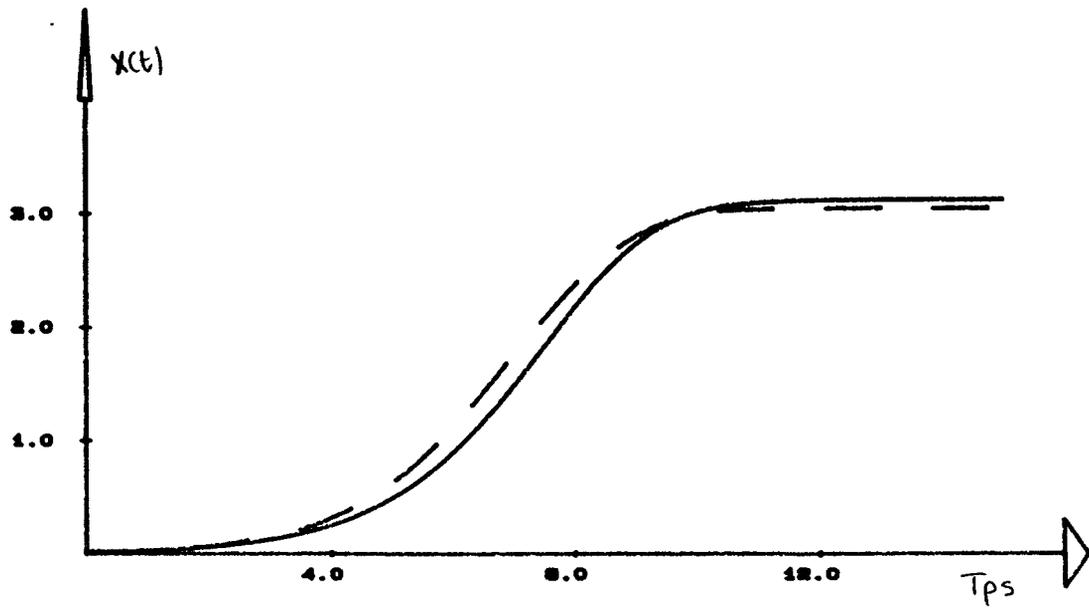


Figure C.7 : Formule de Hestens et Steifel

VI.4.2- Application à l'acidogénèse

Nous avons considéré quatre exemples représentant les différentes possibilités de modéliser l'acidogénèse. Ces exemples nous permettront aussi de justifier les expressions proposées dans la partie précédente.

Modèle 1

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} \frac{X(t) S(t)}{k_c X(t) + S(t)} & X_0 &= X(0) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= - \tau_{\max} \frac{dX(t)}{dt} & S_0 &= S(0) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k \frac{dX(t)}{dt} & P_0 &= P(0) \end{aligned}$$

Modèle 2

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} \frac{X(t) S(t)}{k_c X(t) + S(t)} & X_0 &= X(0) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= - \tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) & S_0 &= S(0) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k \frac{dX(t)}{dt} & P_0 &= P(0) \end{aligned}$$

Modèle 3

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} \frac{X(t) S(t)}{k_c X(t) + S(t)} & X_0 &= X(0) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= -\tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) & S_0 &= S(0) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k X(t) (1 - e^{-\delta S(t)}) & P_0 &= P(0) \end{aligned}$$

Modèle 4

$$\begin{aligned} \frac{dX(t)}{dt} &= \mu_{\max} X(t) e^{-\alpha P(t)} (1 - e^{-\beta S(t)}) & X_0 &= X(0) \\ \frac{dS(t)}{dt} &= - \tau_{\max} X(t) (1 - e^{-\gamma S(t)}) & S_0 &= S(0) \\ \frac{dP(t)}{dt} &= k X(t) (1 - e^{-\delta S(t)}) & P_0 &= P(0) \end{aligned}$$

Les données expérimentales utilisées sont celles des trois expériences analysées dans la partie modélisation.

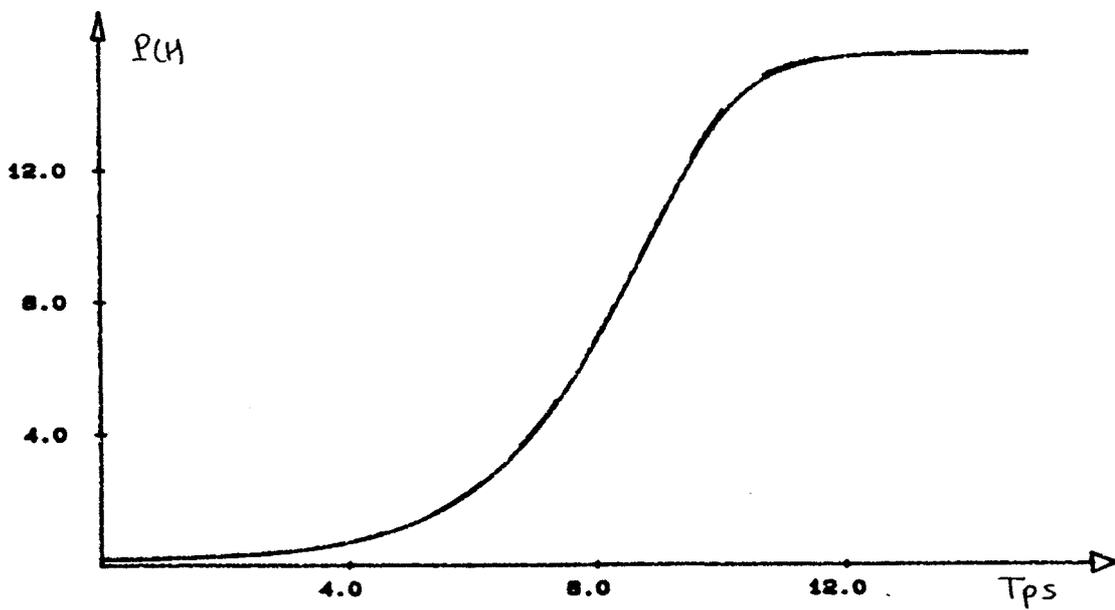
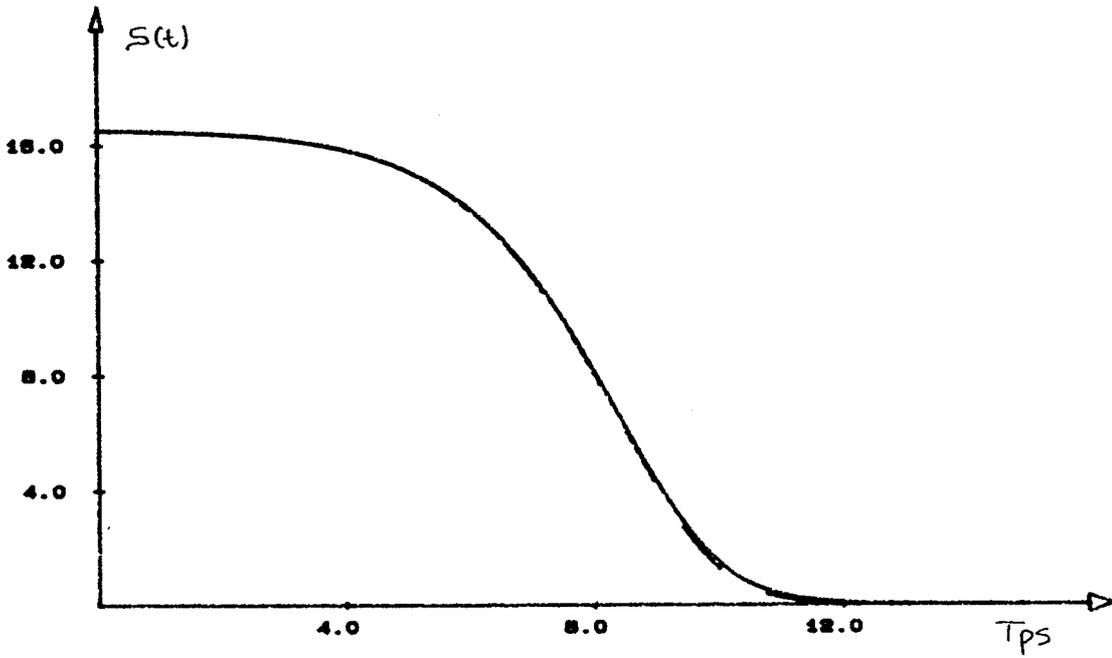
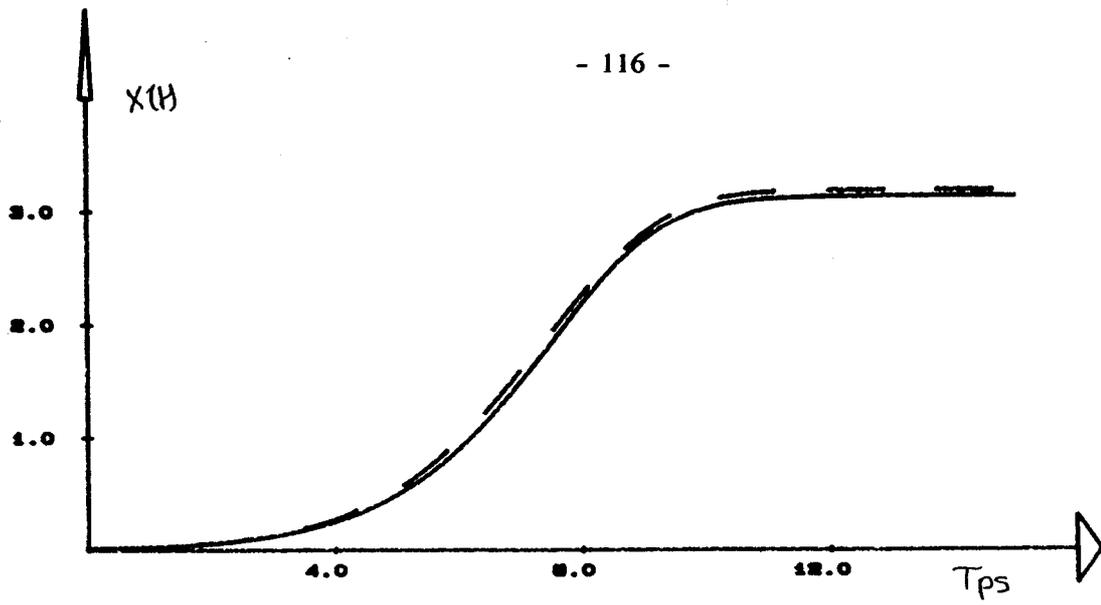


Figure C.8 : Formule de Polak et Ribière

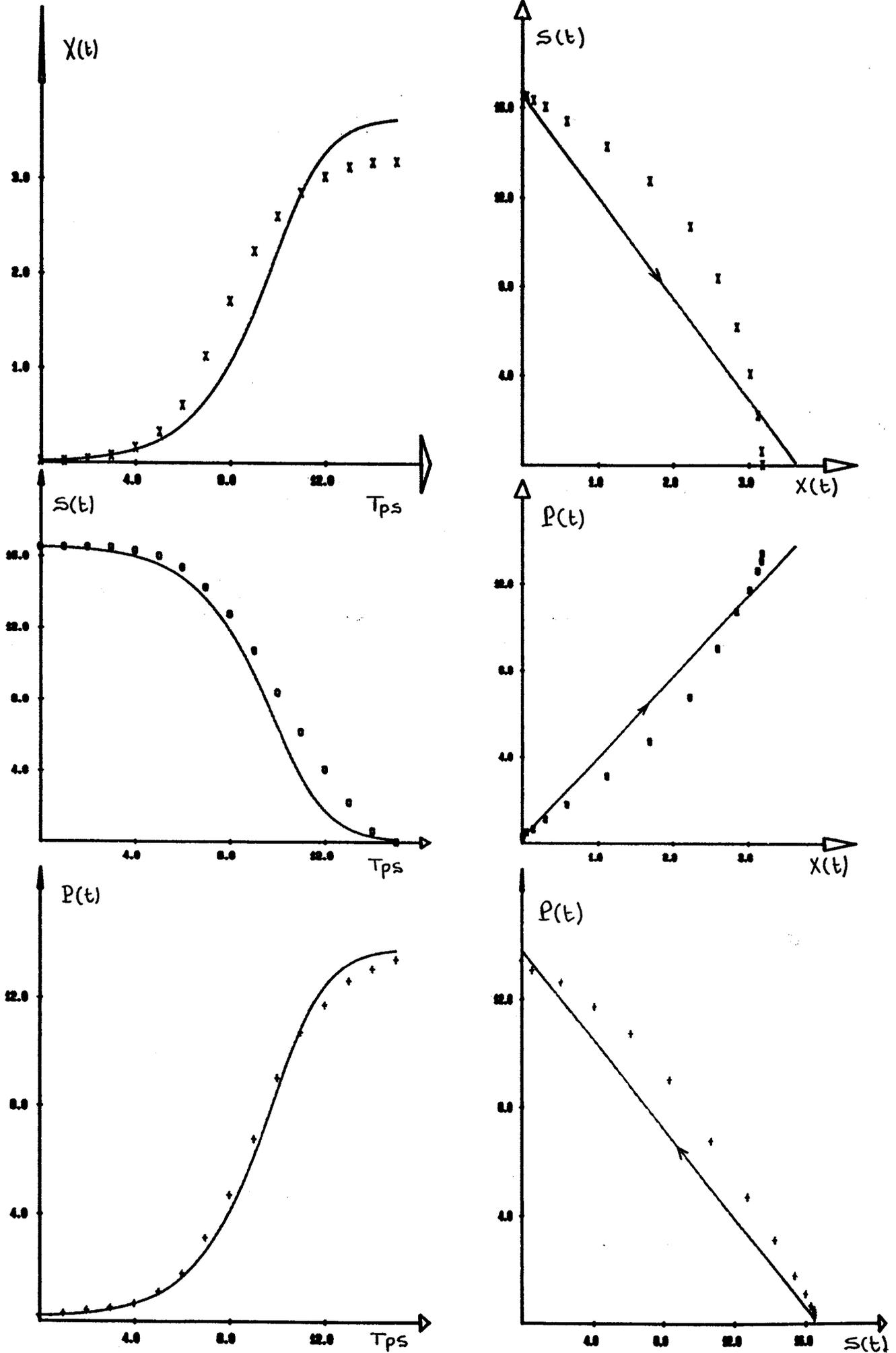


Figure C.9 : Modèle 1 Expérience E₁

valeurs des paramètres : 0.543; 2.450; 4.552; 3.756

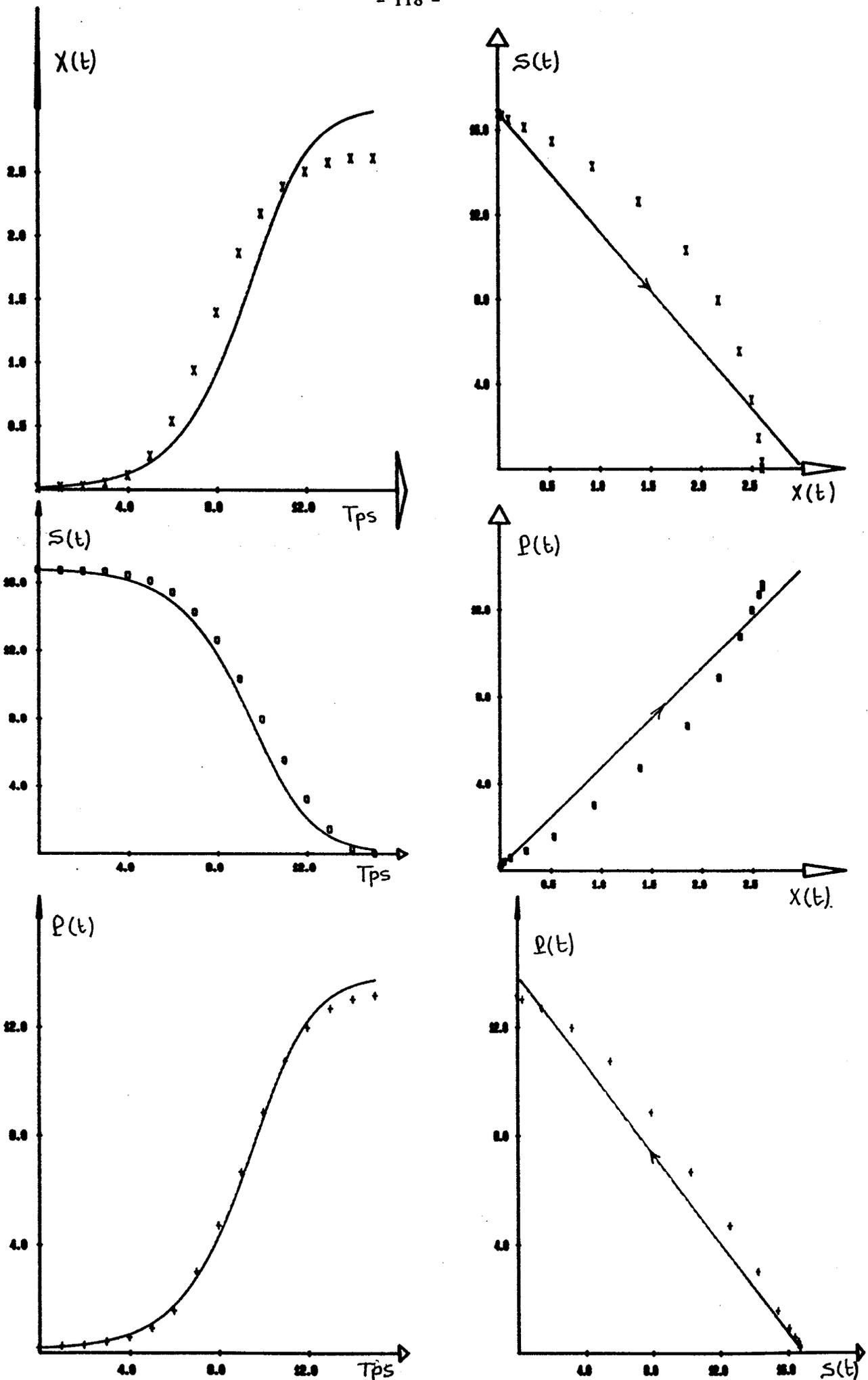


Figure C.10 : Modèle 1 Expérience E₂

valeurs des paramètres : 0.550; 3.692; 5.587; 4.575

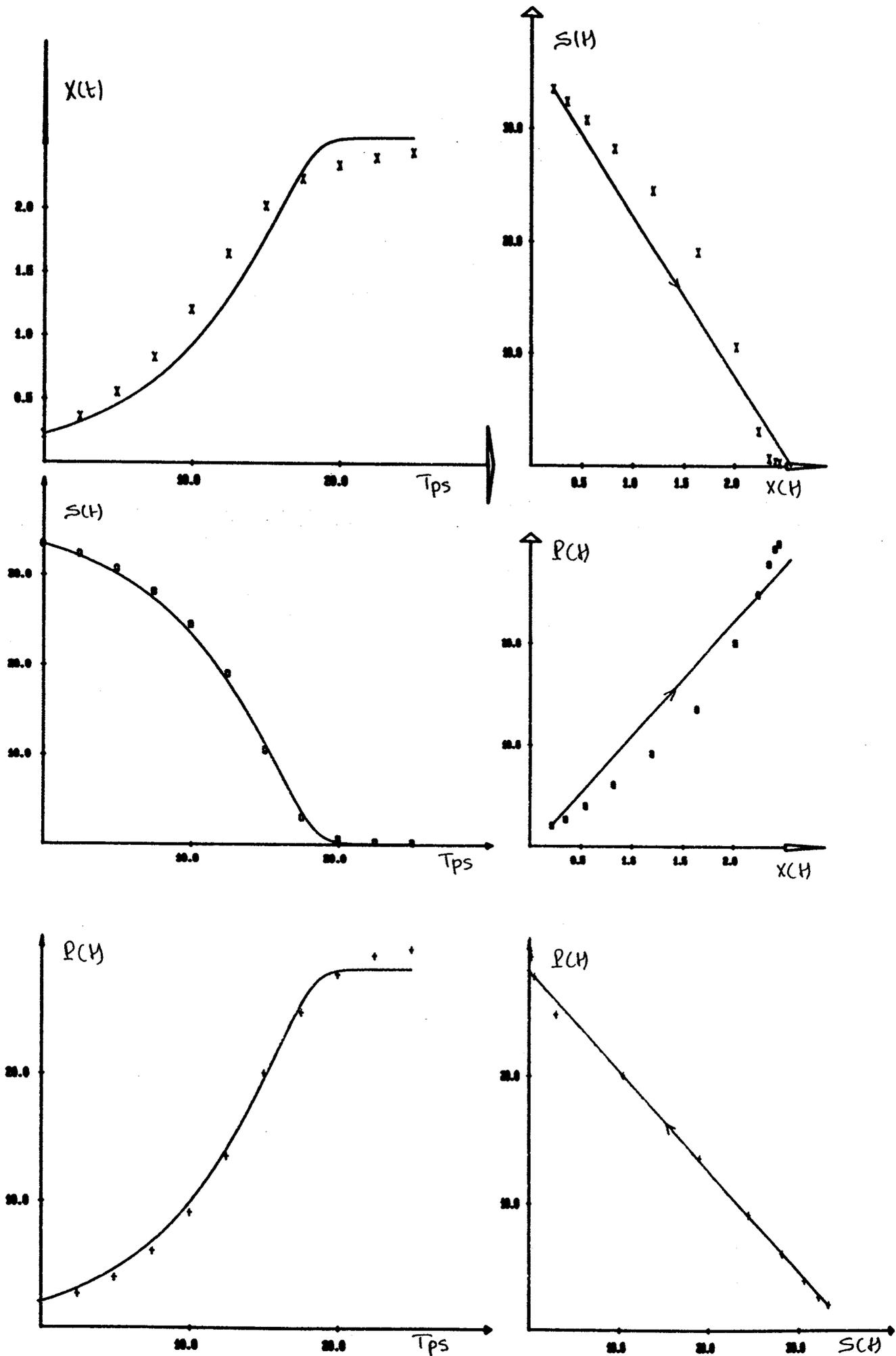


Figure C.11 : Modèle 1 Expérience E_3

valeurs des paramètres : 0.145; 1.304; 14.298; 11.238

Décomposition de l'espace paramétrique

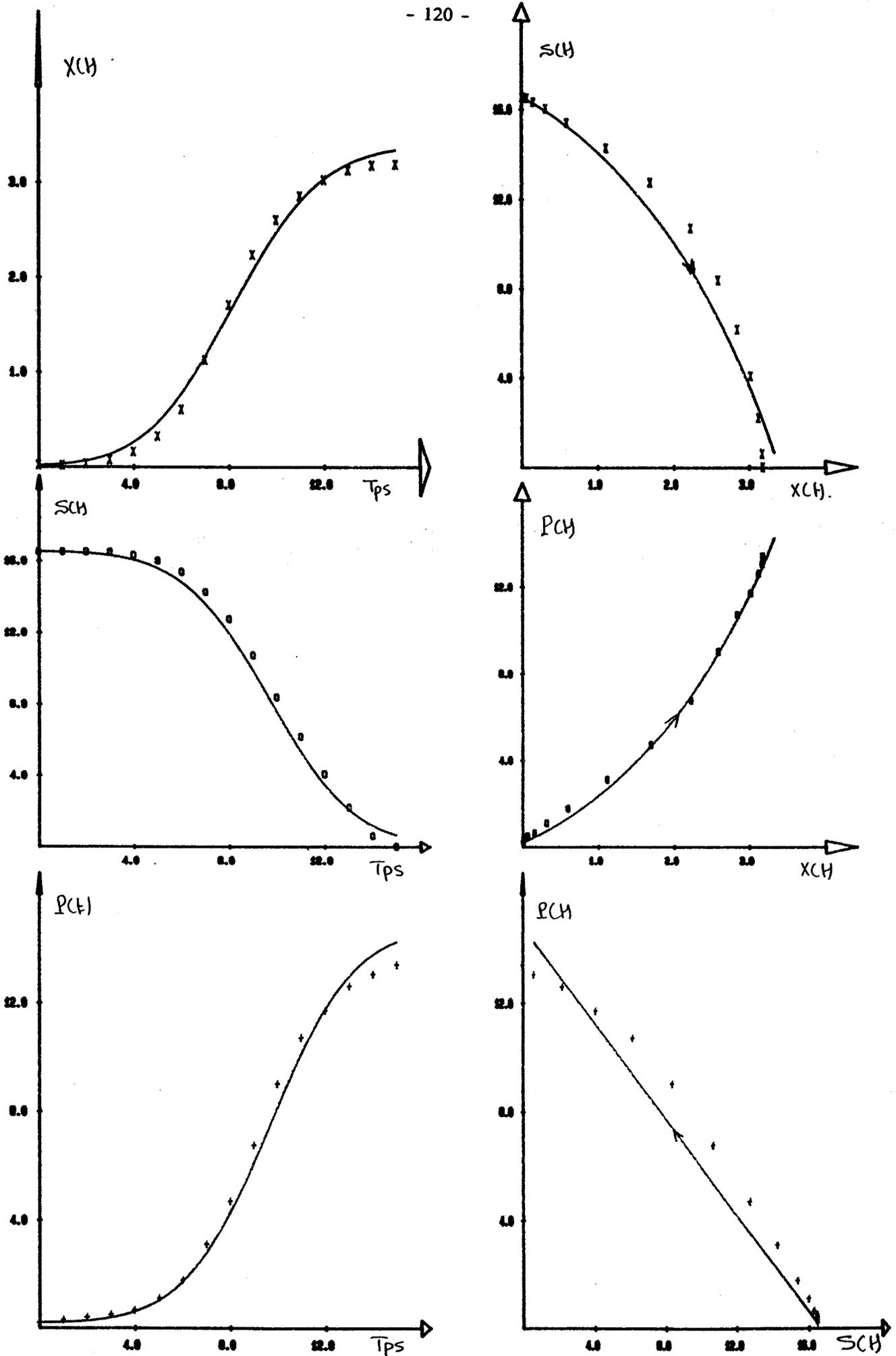


Figure C.12 : Modèle 2 Expérience E₁

valeurs des paramètres : 0.738; 11.872; 1.496; 0.130; 0.884

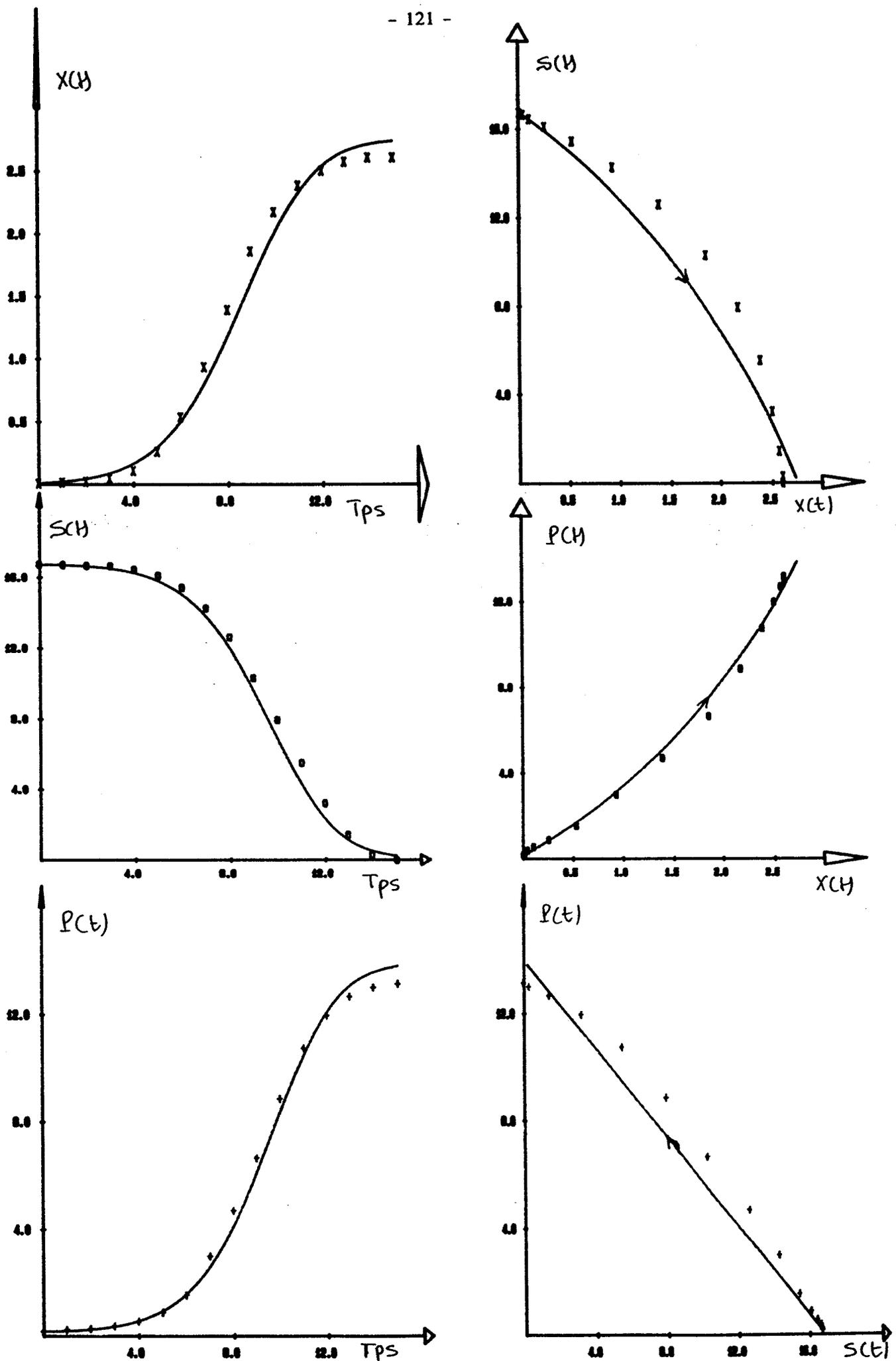


Figure C.13 : Modèle 2 Expérience E_2

valeurs des paramètres : 0.637; 8.376; 2.227; 0.138; 0.826

Décomposition de l'espace paramétrique

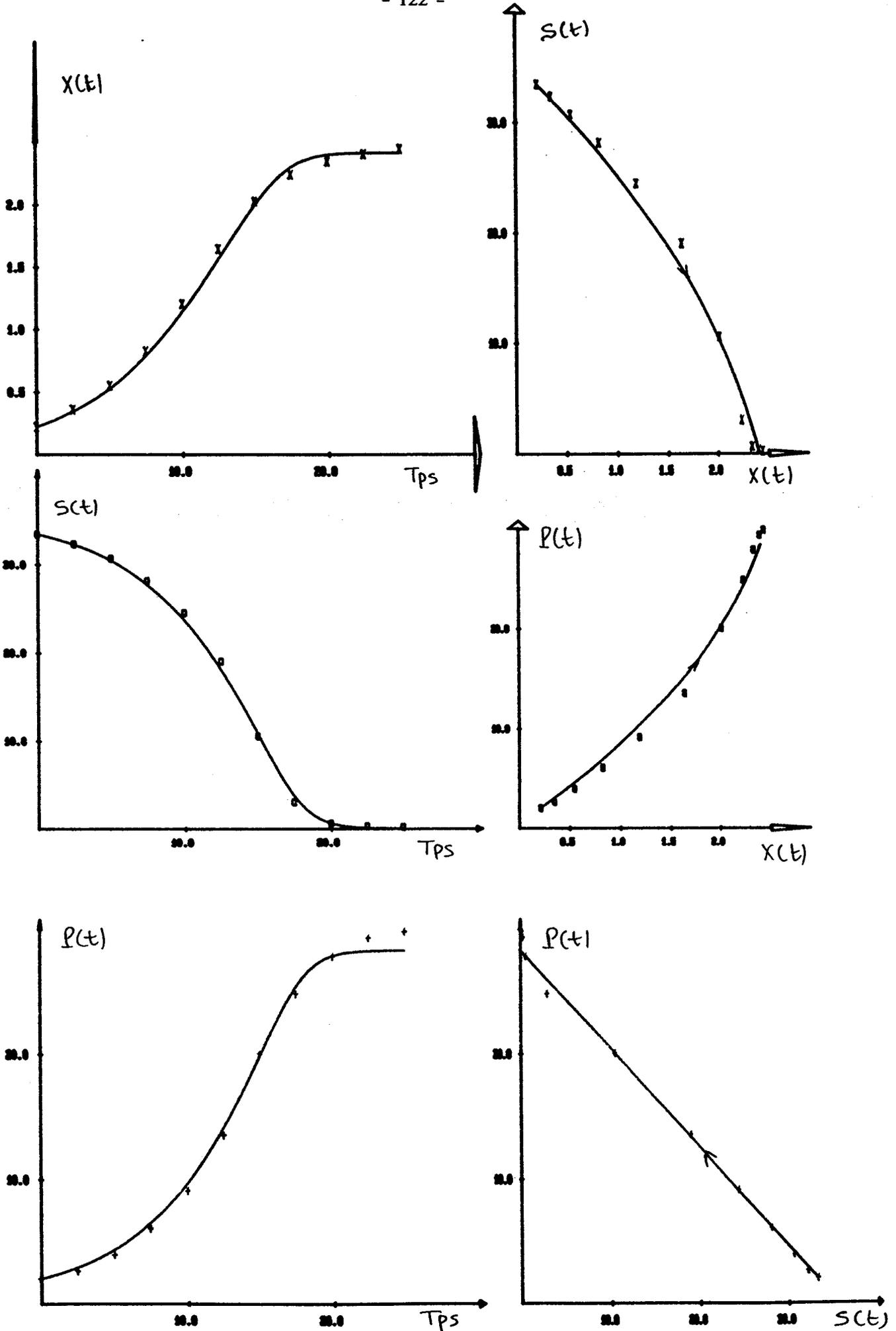


Figure C.14 : Modèle 2 Expérience E_3

valeurs des paramètres : 0.187; 7.422; 1.694; 0.224; 0.787

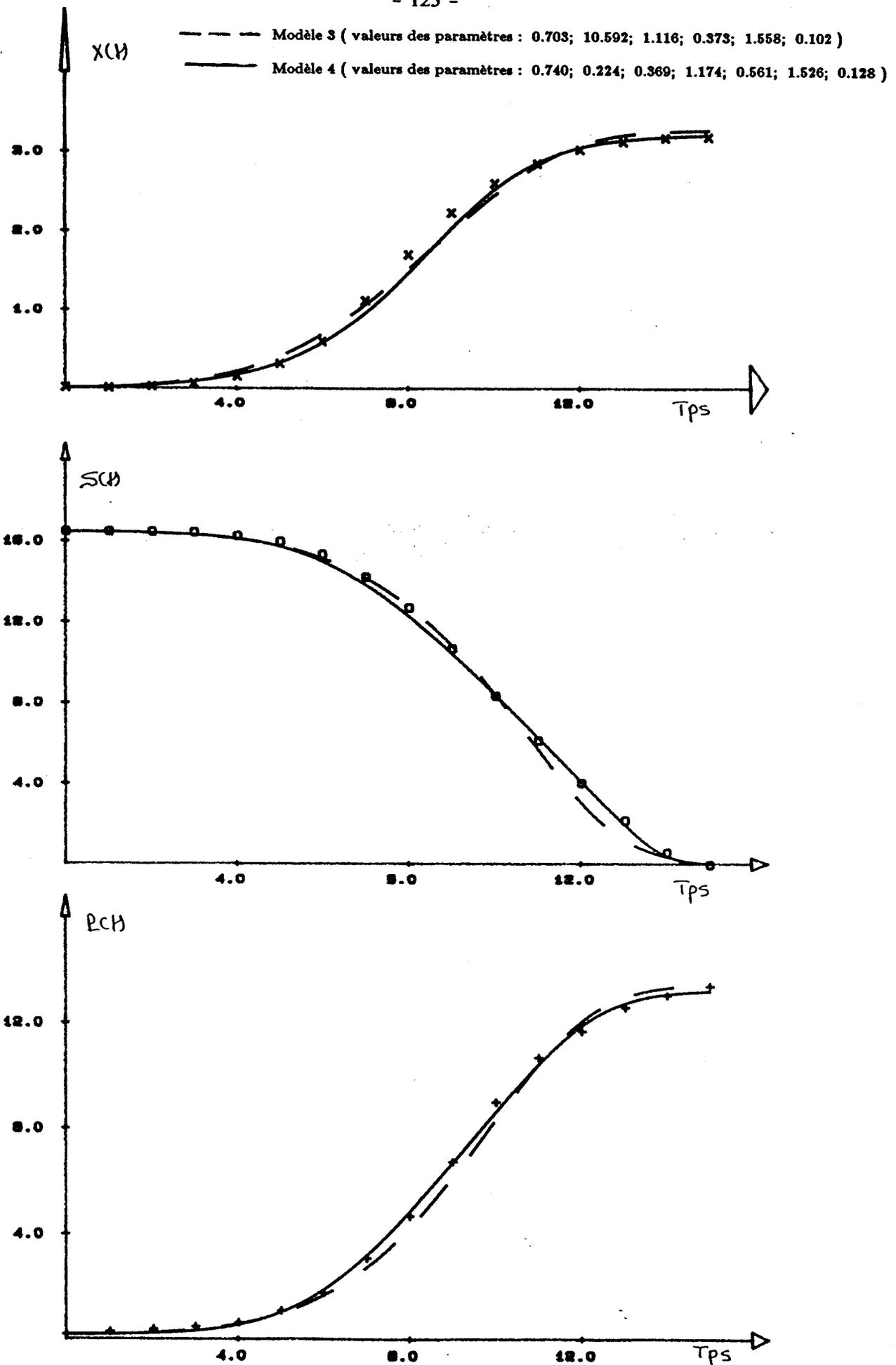


Figure C.17 : Comparaison entre le modèle 3 et le modèle 4 appliqués à l'expérience E₁

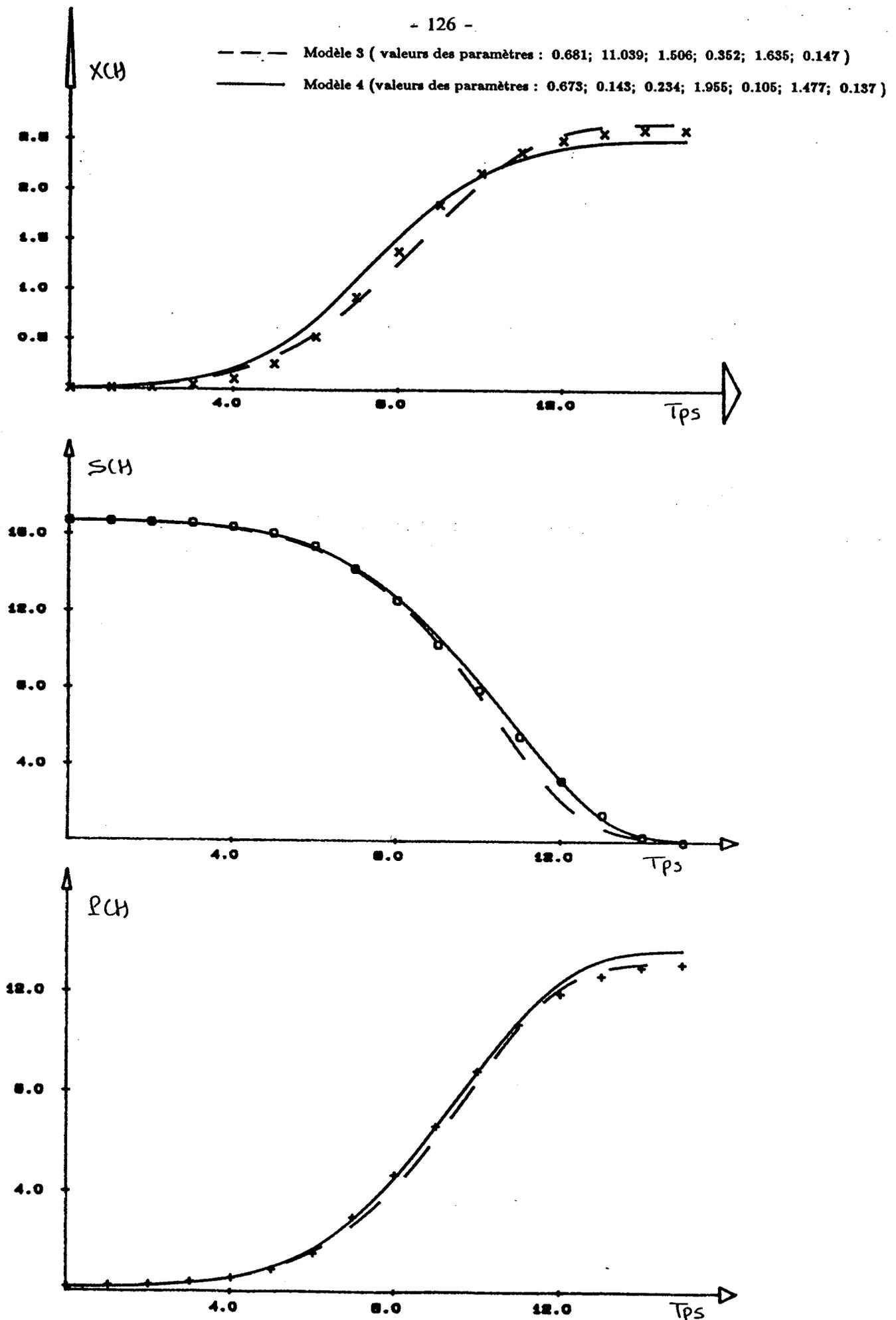


Figure C.18 : Comparaison entre le modèle 3 et le modèle 4 appliqués à l'expérience E₂

CONCLUSION

Les résultats présentés au niveau de la simulation montrent bien l'efficacité de l'algorithme que nous avons développé. Il subsiste des cas où celui-ci échoue partiellement. Ceci peut être dû à un mauvais choix de la méthode de descente. Ainsi, nous avons constaté que l'emploi des méthodes de métriques variables (D.F.P. et B.F.G.S.) n'a pas donné les résultats escomptés. De plus, il faut noter que le choix de la valeur à affecter au seuil est important. En effet, nous devons faire plusieurs essais avant d'obtenir une valeur correcte. Enfin, nous pouvons éventuellement affiner le coefficient de ressemblance pour aboutir à une décomposition optimale en fonction de la position du point Θ dans l'espace des paramètres.

Par ailleurs, cette méthode de décomposition dynamique nous a permis de mettre en évidence la non proportionnalité entre les différentes cinétiques et l'efficacité du modèle de Contois. En effet, la comparaison entre ce modèle et celui que nous avons proposé montre qu'ils sont les mieux adaptés pour représenter de telles expériences. Mais, l'expression proposée par Contois est avantageuse par sa simplicité et par le fait qu'elle permet de réduire le nombre de paramètres de un.

BIBLIOGRAPHIE DE LA TROISIEME PARTIE

- [1] ASTRÖM K.J., EYKHOFF P., (1971)
System identification - A survey, Automatica, Vol. 7, pp 123-162.
- [2] BAKHVALOV N., (1976)
Méthodes numériques. MIR
- [3] BEKEY G.A., BENEKEN J.E.W., (1978)
Identification of biological systems - A survey, Automatica, Vol.14, pp 41-47
- [4] BROYDEN C.G., (1970)
The convergence of a class of double-rank minimization algorithms 2 :
The new algorithm J. Inst. of Math. and Its Appl., 6, PP 222-231 (cp [8] et [22])
- [5] CAUCHY A., (1847)
Méthode générale pour la résolution des systèmes d'équations simultanées.
C.R. Acad. Sci. Paris, 25, p536 (cp [28])
- [6] CROUZEIX M., MIGNOT (1984)
Analyse numérique des équations différentielles, Masson
- [7] DAVIDON W.C., (1959)
Variable metric method for minimization.
A.E.C. Recherch and Development Rep. ANL-5990 (rev.) (cp [31])
- [8] EL HALLABI M., (1981)
Sur la convergence de formules de métrique variable paramétrées.
Thèse 3^{ème} Cycle Lille.
- [9] FLETCHER R., (1970)
Anew approach to variable métric algorithms
Comp. J., Vol. 13, N°3, pp317-322 (cp [8] et [22])
- [10] FLETCHER R., POWELL M.J.D., (1963)
A rapidly convergent descent method for minimization, Comp. J., 6, pp163-168
- [11] FLETCHER R., REEVES C.M., (1964)
Function minimization by conjugate gradients, Comp. J., 7, pp149-154
- [12] GOLDFARB D.,(1970)
A family of variable metric methods derived by variational means
Math. of Compu.,24, pp23-26 (cp [8] et [22])
- [13] GOLDSTEIN A.A., (1967)
Constructive real analysis, Harper, Newyork (cp [22])
- [14] HENRICI P., (1962)
Discrete variable methods in ordinary differential equations, J. Willey & Sons
- [15] HESTENES M.R., STIEFEL E., (1952)
Methods of conjugate gradients for solving linear systems
J. Res., Nat. Bur. Standard, 49, pp409-436

- [16] HOLMBERG A., RANTA J., (1982)
Procedures for parameter and state estimation of microbial growth process models.
Automatica, Vol.18, N°2, pp181-193
- [17] KARMANOV V., (1977)
Programmation mathématique, MIR
- [18] LARMINAT P. de, (1971)
Sur l'identification par filtrage non linéaire, Thèse d'état Nante
- [19] LARMINAT P. de, (1977)
Automatique des systèmes linéaires, Tome 2 : Identification, Flammarion
- [20] LAURENT R., (1985)
Modélisation et identification des systèmes complexes
Application à l'épuration biologique des eaux. Thèse d'état Lille
- [21] LAURENT R., LAAFIA O., (1982)
Problèmes relatives to identification of nonlinear systems with cascade structure.
VIth I.F.A.C. Symp. on Ident. and Syst. Param. Estimation, Washington
- [22] MINOUX M., (1983)
Programmation mathématique : Théorie et algorithmes, Tome 1, Dunod
- [23] NAAT A., (1983)
Caractérisation et identification de certaines classes de systèmes linéaires au moyen
de
méthodes numériques utilisant l'analyse spectrale et la transformation
Thèse 3^{ème} Cycle Lyon
- [24] NAKRACHI A., LAURENT R., POVY L., (1985)
Identification des paramètres dans les équations différentielles.
A.M.S.E. Proce., Int. Conf. on Modelling and simulation Monastir (Tunisie).
1. Methodologie, Vol. 1.A, PP 10-19
- [25] PCHENITCHNY B., DANILINE A., (1977)
Méthodes numériques dans les problèmes d'extrémums, MIR
- [26] PIASCO J.M., (1976)
Contribution à l'étude et la mise en oeuvre d'algorithmes d'identification
par filtrage non linéaire, Thèse Doct. Ing., Nante
- [26bis] POHJANPALO H., (1978)
System identifiability based on the power series expansion of the solution.
Mathematical Biosciences 41, pp 21-33
- [27] POLAK E., RIBIERE G., (1969)
Sur la convergence des méthodes de directions conjuguées, R.A.I.R.O., 16, PP 35-43
- [28] PONTRIAGUINE L., (1975)
Equations différentielles ordinaires, MIR
- [29] POVY L., (1974)
Identification des processus, Dunod

- [30] POWELL M.J.D., (1964)
A efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculating derivatives, *Comp. J.* 7, pp 155-162
- [31] POWELL M.J.D., (1972)
A survey of numerical methods for unconstrained optimization, in *Perspectives on optimization* (Ch.1), pp3-21, Addison-Wesley
- [32] POWELL M.J.D., (1976)
Some global convergence properties of a variable metric algorithm for minimization without exact line searches, in *Nonlinear programming*
S.I.A.M.-A.M.S. Proc. 9. (cp [8] et [22])
- [33] RICHALET J., RAULT A., POULIQUEN , (1971)
Identification des processus par la méthode du modèle, Gordon & Breach
- [34] RICHETIN M., (1975)
Analyse structurale des systèmes complexes en vue d'une commande hiérarchisée
Thèse d'état Toulouse
- [35] ROTH R.S., (1981)
Techniques in identification of deterministic systems.
I.E.E.E. Tran. on Auto. Contr., Vol. AC-26, n°5, pp 1169-1176
- [36] SINGH M.G., TITLI A., (1978)
System decomposition, optimization and control, Pergamon Press
- [37] SHANNO D.F., (1970)
Conditioning of quasi-Newton methods of function minimization
Math. of Computation, 24, pp 641-656 (cp [21])
- [38] TORO V., (1982)
Contribution à l'analyse structurale des systèmes complexes à l'aide de l'entropie et ses généralisations, Thèse 3^{ème} Cycle Lille.
- [39] VIALAS C., CHERUY A., GENTIL S., (1985)
An experimental approach to improve the Monod model identification.
1st Symposium
- [40] WOLFE P., (1969)
Convergence conditions for ascent methods
S.I.A.M. Review 11, pp226-235 (cp [8] et [22])
- [41] ZANGWILL W.I., (1967)
Minimizing a function without calculating derivatives, *Comp. J.*, Vol. 10,N°3
- [42] 1st I.F.A.C. Symp. on Modelling and Control of Biotech. Processes, (1985)
Session 1a et 2a , Noordwijkerhout, Pays-Bas.

CONCLUSION

A travers l'étude de la fermentation méthanique, nous avons pu voir l'insuffisance des modèles existants pour la représentation mathématique de la croissance microbienne. Dès lors, nous avons essayé d'aller plus loin et montré par une étude graphique que les différentes vitesses (dégradation et biosynthèse) ne sont pas obligatoirement proportionnelles à celle de la croissance des micro-organismes. Nous avons alors proposé un modèle plus général, différent de ce qui est proposé jusqu'ici pour l'acidogénèse et nous avons adopté un modèle de dégradation en lui ajoutant deux équations différentielles pour la représentation de la méthanogénèse. Certes, nous ne prétendons pas avoir abouti aux versions finales, néanmoins, les modèles présentés peuvent être appliqués à d'autres types de fermentations.

Par ailleurs, il nous semble possible et important d'aller encore plus loin au niveau de la modélisation. Ceci peut se faire soit par l'adjonction d'autres variables significatives, telles que le pH ou la température, en tant que variables d'état lorsqu'il s'agit d'un fermenteur infiniment mélangé. En ce qui concerne les fermenteurs de la seconde génération avec rétention de la biomasse, il serait intéressant, à notre avis, de chercher des modèles à paramètres distribués, ce qui risque de compliquer l'identification des paramètres.

En effet, les convergences et surtout les vitesses de convergence des méthodes de minimisation que nous avons appliquées sont assurées pour des fonctions quadratiques ou, à la limite, pour des fonctions convexes. Mais, lorsqu'il s'agit d'équations différentielles, nul n'évoque ce type particulier de problèmes. Néanmoins, nous avons pu établir une méthode de dérivation analytique du critère de minimisation dépendant d'un système d'équations différentielles ordinaires. Celle-ci nous a donné la possibilité de dépasser l'utilisation des méthodes sans calcul des dérivées et d'appliquer des méthodes plus puissantes.

Malheureusement, l'influence des paramètres sur la construction des directions conjuguées ou celle de l'inverse du Hessien d'une part et le nombre élevé des paramètres à identifier d'autre part, ralentissent, sinon rendent impossible la convergence de tels algorithmes. Nous nous sommes proposés alors, de décomposer l'espace paramétrique d'une manière dynamique. Cette décomposition nous a permis d'améliorer la convergence des

procédés itératifs et a donné des résultats satisfaisants. Mais, il faut dire qu'elle n'est pas optimale parce que la détermination de la valeur seuil de décomposition reste empirique.

L'idéal est d'obtenir une décomposition où le critère à minimiser est une fonction convexe, voir strictement convexe, à l'intérieur de chacun des sous-espaces. Une telle procédure doit être réitérée jusqu'à l'obtention d'un seul sous-espace dont la dimension serait égale à celle de l'espace tout entier.

Enfin, notons que d'autres améliorations seront nécessaires pour arriver à l'automatisation d'un tel processus, tant au niveau de la modélisation qu'au niveau de l'identification des paramètres. Dans le domaine de la modélisation, un travail pluridisciplinaire (biotechnologues, microbiologistes, automaticiens, etc....) peut être conséquent. En outre, une ouverture est faite vers des recherches pour la mise au point d'algorithmes de minimisation spécifiques à ce type de problèmes.

Annexe 1

FONCTIONS SPLINE D'AJUSTEMENT

L'identification en différé se fait sur la base des enregistrements, entachées d'erreurs, des entrées et des sorties. Ces derniers se font à des instants discrets, ce qui aboutit à des fonctions $x_{pi}(t)$ définies par des réseaux de couples de données $(t_r, x_{pi}(t_r))$ avec :
 $r = 0, 1, \dots, N$ ($N+1$ mesures) ; $i=1, \dots, n$ et $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$.

Afin d'assurer la continuité de $e(t) = x_m(t) - x_p(t)$ que nous avons supposé dans les équations (47) et (49) et afin d'avoir la meilleure approximation possible de $J(\Theta)$ et $\partial J(\Theta) / \partial \Theta$ il est nécessaire de procéder à un lissage des réseaux de couples $(t_r, x_{pi}(t_r))$, puisque le pas d'intégration numérique est généralement inférieur, en tout cas différent, à la période d'observation $\Delta t_r = t_{r+1} - t_r$ ($r = 0, \dots, N-1$). Ceci revient à chercher des fonctions continues $x_{pi}(t)$ ne prenant pas exactement les valeurs $x_{pi}(t_r)$ aux instants t_r , mais passant le plus près possible de ces points. Le lissage par des fonctions-spline d'ordre deux se prête bien à la résolution de ce type d'approximation, c'est à dire partant d'un réseau de couples (t_r, x_r) avec $r = 0, 1, \dots, N$ ($N > 3$) et $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$.

On cherche une fonction $g(t) \in H^2[0, T]$, où $H^2[0, T]$ désigne l'espace des fonctions réelles définies sur l'intervalle $[0, T]$, fonctions qui ont une dérivée première absolument

continue et une dérivée seconde de carré sommable (ie $\int_0^T (g''(t))^2 dt < \infty$),

L'ensemble de ces fonctions forme un espace de Hilbert. La fonction $g(t)$ doit réaliser le minimum suivant :

$$g(t) = \text{Min}_{h \in H^2[0, T]} \left(\int_0^T (h''(t))^2 dt + \rho \sum_{r=1}^{N-1} (h(t_r) - x_r)^2 \right)$$

Autrement dit,

$$\int_0^T (g''(t))^2 dt + \rho \sum_{r=0}^{N-1} (g(t_r) - x_r)^2 \leq \int_0^T (h''(t))^2 dt + \rho \sum_{r=1}^{N-1} (h(t_r) - x_r)^2$$

pour tout $h \in H^2[0,T]$. La fonction $g(t)$ est unique et est appelée fonction spline d'ajustement d'ordre deux sur $[0,T]$ [2].

Le terme $\int_0^T (g''(t))^2 dt$ sert à mesurer le caractère lisse de la fonction $g(t)$

et le terme $\sum_{r=1}^{N-1} (g(t_r) - x_r)^2$ caractérise l'approximation du réseau (t_r, x_r) par $g(t)$.

Le coefficient réel $\rho > 0$ détermine l'importance relative que l'on accorde au lissage et à l'approximation. $g(t)$ est caractérisée par les propriétés suivantes [2] :

1- g est un polynôme de degré trois sur chacun des intervalles $]t_r, t_{r+1}[$ où $r = 1, \dots, (N-2)$

2- g est un polynôme de degré un sur chacun des intervalles $[0, t_1[$ et $]t_{N-1}, T]$

3- en chaque point t_r , $r = 1, \dots, (N-1)$, on a la relation $g(t_r) + \frac{1}{\rho}(g''(t_r^+) - g''(t_r^-)) = x_r$

4- g et ses dérivées g' et g'' sont continues, autrement dit $g^{(i)}(t_r^-) = g^{(i)}(t_r^+)$ avec $r = 1, \dots, (N-1)$ et $i = 0, 1, 2$

Enfin, différents types d'algorithmes sont proposés pour le calcul numérique de cette fonction-spline ([1], [3]) pour la méthode dite d'intégration, [4] pour la méthode de transport des relations .

Bibliographie

[1] DE BOOR C., (1978)

A practical guide to splines. Spring-Verlag

[2] LAURENT P. J., (1972)

Approximation et optimisation. Hermann

[3] MARCHOUK G., (1980)

Méthodes de calcul numérique. MIR

[4] PETIT M., (1971)

Quelques programmes graphiques d'analyse numérique. Thèse 3^{ème} cycle Grenoble.

Annexe 2

Considérons d'abord l'exemple proposé par Pohjanpalo [2]

soit le système :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda_{10} - \lambda_{12} & 1 - s_2 x_2(t) & 0 \\ \lambda_{12} & 1 - s_2 x_2(t) & -\lambda_{20} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1(0) \\ x_2(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$y(t) = (1 \ 0) \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}$$

La proposition de Pohjanpalo permet d'écrire le système algébrique suivant :

$$1 = a_0 \quad \text{avec } \lambda_{1\Sigma} = \lambda_{10} + \lambda_{12} \quad (1)$$

$$\lambda_{12}^2 s_2 + \lambda_{1\Sigma}^2 = a_2 \quad (2)$$

$$-\lambda_{12}^3 s_2^2 - 4\lambda_{12}^2 s_2 \lambda_{1\Sigma} - \lambda_{12}^2 s_2 \lambda_{20} - \lambda_{1\Sigma}^3 = a_3 \quad (3)$$

$$\lambda_{12}^4 s_2^3 + 7\lambda_{12}^3 s_2^2 \lambda_{1\Sigma} + 2\lambda_{12}^3 s_2^2 \lambda_{20} + 4\lambda_{12}^4 s_2^2 + 11\lambda_{12}^2 s_2 \lambda_{1\Sigma}^2 + 5\lambda_{12}^2 s_2 \lambda_{1\Sigma} +$$

$$\lambda_{12}^2 s_2 \lambda_{20}^2 + \lambda_{1\Sigma}^4 = a_4 \quad (4)$$

Les équation (1) et (2) nous permettent d'écrire :

$$\lambda_{12}^2 s_2 = a_2 - a_1^2 \quad s_2 = \frac{a_2 - a_1^2}{\lambda_{12}^2}$$

$$-\frac{(a_2 - a_1^2)^2}{\lambda_{12}} + 4a_1(a_2 - a_1^2) - (a_2 - a_1^2)\lambda_{20} + a_1^3 = a_3 \quad (5)$$

$$\frac{(a_2 - a_1^2)^3}{\lambda_{12}^2} - 7a_1 \frac{(a_2 - a_1^2)^2}{\lambda_{12}} + 2\lambda_{20} \frac{(a_2 - a_1^2)^2}{\lambda_{12}} + 4(a_2 - a_1^2)^2 + 11a_1^2(a_2 - a_1^2) - 5\lambda_{20} a_1(a_2 - a_1^2) + (a_2 - a_1^2)\lambda_{20} + a_1^4 = a_4 \quad (6)$$

De l'équation (5) nous pouvons tirer λ_{12} en fonction de λ_{20}

$$\frac{(a_2 - a_1^2)^2}{\lambda_{12}} = 4a_1(a_2 - a_1^2) - (a_2 - a_1^2)\lambda_{20} + a_1^3 - a_3$$

Le report de cette expression dans l'équation (6) nous permet d'obtenir une équation du premier ordre en λ_{20} permettant d'affirmer l'unicité de la solution du système algébrique.

Le deuxième exemple que nous avons traité est le suivant :

Soit le système :

$$\begin{pmatrix} \dot{x}_1(t) \\ \dot{x}_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mu \frac{x_2(t)}{k x_1(t) + x_2(t)} & 0 \\ -\frac{\mu x_2(t)}{R(k x_1(t) + x_2(t))} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}$$

avec les conditions initiales :

$$\begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

$$\text{et } y(t) = (1 \ 0) \begin{pmatrix} x_1(t) \\ x_2(t) \end{pmatrix}$$

L'application de la même proposition donne le système algébrique suivant :

$$a = a_0$$

$$\mu \frac{ab}{ka + b} = a_1 \tag{1}$$

$$-\frac{k a_1^2}{b(ka + b)} \left(\frac{a}{R} + b\right) + \frac{a_1^2}{a} = a_2 \tag{2}$$

$$2 \frac{ka_1^2 \left(\frac{a}{R} + b\right) a_1 \left(k - \frac{1}{R}\right)}{b(ka + b)} - \frac{a_1 a_2 k \left(\frac{a}{R} + b\right)}{b(ka + b)} - 2 \frac{ka_1^3 \left(\frac{a}{R} + b\right)}{b(ka + b)} + \frac{a_1 a_2}{a} = a_3 \tag{3}$$

De l'équation (2) nous pouvons tirer R en fonction de k

$$\frac{a}{R} + b = - \frac{b(ka + b) \left(a_2 - \frac{a_1^2}{a}\right)}{ka_1^2}$$

Nous remplaçons cette expression dans l'équation (3) pour avoir

$$k^2 \left[aa_3 - a_1 a_2 + \left(a_2 - \frac{a_1^2}{a}\right) \left(1 - \frac{aa_2}{a_1} - 2aa_1\right) \right] + kb \left[a_3 - \frac{a_1 a_2}{a} + \left(a_2 - \frac{a_1^2}{a}\right) \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{a_1^2} \left(a_1 - \frac{a_1^2}{a}\right) - \frac{a_2}{a_1} - 2a_1\right) \right] + \frac{b^2}{a_1^2} \left(\frac{a_1^2}{a} - a_2\right) = 0$$

Là nous aboutissons à un polynôme de deuxième degré dont le nombre de solutions dépend des valeurs des coefficients a_i ($i = 1, 2, 3$)

Bibliographie

- [1] ATROUNE D., CHERUY A., FLANDROIS J.P., CARRET G., (1988)
Choice of the specific growth rate formulation in biotechnologic processes. IMACS Proc., Paris (Juillet)
- [2] POHJANPALO H., (1978)
System identifiability based on the power series expansion of the solution
Mathematical Biosciences 41, pp 21 - 33