



UNIVERSITÉ DE TLEMCEEN, ALGÉRIE

Spécialité: Automatique

Option: Commande



UNIVERSITÉ DE MONTPELLIER, FRANCE

Ecole doctorale: Information Structure Systèmes I2S

Spécialité: Mathématiques et modélisation

THÈSE DE DOCTORAT

Présentée par :

Amel GHOUALI épouse BEDJAOUI CHAOUICHE

Analyse et contrôle optimal d'un bioréacteur de digestion anaérobie

Soutenue le 14 Décembre 2015 devant le jury composé de :

Frédéric JEAN	Professeur, ENSTA ParisTech	Rapporteur
Mustapha LAKRIB	Professeur, Université de Sidi Bel-Abbes	Rapporteur
Jérôme HARMAND	Directeur de Recherche INRA	Directeur
Ali MOUSSAOUI	Professeur, Université de Tlemcen	Directeur
Claude LOBRY	Professeur Emérite, Université de Nice	Examineur
Brahim CHERKI	Professeur, Université de Tlemcen	Examineur
Terence BAYEN	Maitre de conférence Université de Montpellier	Examineur
Nahla ABDELLATIF	Maitre ASSISTANTE , Université de MANOUBA	Examineur
Alain RAPAPORT	Directeur de Recherche INRA	Invité

Remerciements

L'ensemble de ces travaux de recherche a été réalisé au sein de l'équipe du Laboratoire d'Automatique de l'Université de Tlemcen, LAT et l'équipe UMR MISTEA Supagro-INRA de Montpellier. Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Messieurs Brahim CHERKI et Alain RAPAPORT, pour m'avoir accueilli parmi leur équipe et pour la confiance qu'ils m'ont témoigné.

Je remercie plus spécialement les équipes encadrantes, à commencer par Monsieur Jérôme HARMAND, Directeur de recherche INRA de Narbonne, sans qui cette thèse n'aurait pas vu le jour. Je le remercie vivement pour toutes ses qualités humaines et scientifiques dont il a fait preuve : ses précieux conseils issus d'un savoir semble-t-il inépuisable, sa constante disponibilité et ses encouragements permanents m'ont été d'un grand secours et m'ont permis, je l'espère, de rendre fructueuses les années passées sous sa tutelle.

Je remercie Monsieur Ali MOUSSAOUI, Professeur en mathématiques à l'Université de Tlemcen, qui a su m'orienter et me remotiver lors de mes nombreuses périodes de doute.

Une attention plus particulière est à mettre en exergue pour le professeur Tewfik SARI, Directeur UMR Itap, Montpellier pour sa science et sa patience. En effet, il est ce professeur qui vous touche tant par son savoir que par la manière de le transmettre, et fait naître, tout au moins inconsciemment, le désir d'arriver à un niveau de connaissance. Je lui exprime ainsi ma gratitude pour l'attention, le soutien et la disponibilité dont il a fait preuve depuis le commencement de ce travail jusqu'à la relecture finale du mémoire. Durant l'évolution de cette étude, ses compétences scientifiques, son souci de clarté, de rigueur et de précision m'ont été très profitables.

Je suis sensible à l'honneur que me font Monsieur Frédéric JEAN, Professeur ENSTA Pristech et Monsieur Mustapha LAKRIB, Professeur en Mathématiques à l'Université de Bel-Abbès, en acceptant de juger ce travail de thèse et d'en être les rapporteurs.

Je tiens à exprimer tous mes sentiments, mon profond respect et mes sincères gratitude à Monsieur Brahim CHERKI, Professeur en Automatique à l'Université de Tlemcen et Directeur du LAT. Je remercie aussi Madame Nahla ABDELLATIF, Maître Assistante à l'École nationale des sciences de l'informatique de Manouba, Tunisie. Je les remercie d'avoir accepté

de faire partie du jury de thèse.

Je tiens particulièrement à remercier Monsieur Claude LOBRY, Professeur émérite à l'Université de Nice, pour l'intérêt qu'il a porté à mes travaux. Je lui suis reconnaissante d'avoir accepté de juger ce travail et de présider mon jury de thèse. Merci également à TERENCE Bayen Maître de Conférences à l'Université de Montpellier pour sa participation à mes divers comités de thèse.

Je me dois ici d'accorder une pensée à Monsieur Alain Rapaport, Directeur de recherche INRA à Montpellier. Ses conseils et ses discussions fructueuses, l'accueil chaleureux au sein de l'équipe UMR MISTEA Supagro-INRA et son soutien m'ont été d'un grand apport tout au long de ma thèse .

De la même manière, l'organisation de la soutenance a représenté un véritable casse tête de calendriers, et c'est avec gratitude que je salue Madame Bernadette LACAN, Assistante Administrative et Financière au sein de la Faculté des Sciences, Université de Montpellier. Je la remercie pour son aide et sa disponibilité.

Je remercie également le programme AVERROES, le projet Euro-Mediterranean research network TREASURE (INRA-INRIA Euromed 3+3 project), le PHC TASSILI project no 33254QH et l'Université de Tlemcen, en particulier, à Monsieur le Recteur Mustapha JAA-FOUR et Mr. Abdesselam Taleb, Vice Récuteur chargé de la Post-Graduation et de la Recherche, de l'Université de Tlemcen pour l'aide financière allouée durant ces années de recherche.

Je ne saurais oublier mes amis avec qui j'ai passé d'agréables moments à Montpellier plus particulièrement Fadia, Tarik et Meriem pour leur soutien. Mes remerciements vont également à Monsieur Paul SIBLOT et Madame Nadjat HOMMAN. Merci d'avoir été toujours présents.

J'éprouve une reconnaissance sans fin pour ma famille qui a toujours cru en moi et m'a toujours soutenu. Je dois remercier plus spécifiquement mon père qui m'a toujours épaulé dans ce projet. Sans rechigner, après des journées fatigantes de travail, s'est laissé porter volontaire pour la relécture de mon manuscrit. A ma mère, ma première fan. Sa présence et ses encouragements sont pour moi les piliers fondateurs de ce que je suis et de ce que je fais qui n'a pas cessé de m'encourager! Un merci particulier à ma petite soeur Kamila, pour sa patience et pour l'aide morale qu'elle a su m'apporter durant les périodes difficiles. Je remercie mes frères pour leur encouragements.

Mes remerciements vont aussi à ma belle famille, pour tout leur soutien et leurs encouragements tout au long de ma thèse. Avec cette question récurrente, « quand est-ce que tu la soutiens ta thèse? », bien qu'angoissante en période fréquente de doute, m'ont permis de ne jamais dévier de mon objectif final.

Enfin, je tiens à exprimer ma profonde reconnaissance et tout mon amour à Housseyn, devenu mon époux durant cette thèse, pour son soutien quotidien indéfectible et son enthousiasme contagieux à l'égard de mes travaux comme de la vie en général, pour sa patience pour la compréhension dont il a fait preuve à mon égard.

À tous ces intervenants, je présente mes remerciements, mon respect et ma gratitude.



A la mémoire de mon grand père
A ma famille, ma belle famille
A mon cher et adorable mari



Résumé

Cette thèse porte sur l'analyse et le contrôle optimal d'un digesteur anaérobie. L'objectif est de proposer une stratégie de commande optimale pour maximiser la quantité de biogaz produit dans un bioréacteur anaérobie sur une période de temps donnée. Plus particulièrement, à partir d'un modèle simple de bioprocédé et en considérant une classe importante de cinétiques de croissance, nous résolvons un problème de maximisation de biogaz produit par le système pendant un temps fixé, en utilisant le taux de dilution $D(\cdot)$ comme variable de contrôle. Dépendant des conditions initiales du système, l'analyse du problème de contrôle optimal fait apparaître des degrés de difficulté très divers. Dans une première partie, nous résolvons le problème dans le cas où le taux de dilution permettant de maximiser le débit de gaz à l'équilibre est à l'intérieur des bornes minimales et maximales du débit d'alimentation pouvant être appliqué au système : il s'agit du cas WDAC (Well Dimensioned Actuator Case). La synthèse du contrôle optimal est obtenue par une approche de comparaison de trajectoires d'un système dynamique. Une étude comparative des solutions exactes et celle obtenues avec une approche numérique directe en utilisant le logiciel "BOCOP" est faite. Une comparaison des performances du contrôleur optimal avec celles obtenues en appliquant une loi heuristique est discutée. Nous montrons en particulier que les deux lois de commande amènent le système vers le même point optimal.

Dans une deuxième partie, dans le cas où l'actionneur est sous- (ou sur-) dimensionné, c'est-à-dire si la valeur du taux de dilution à appliquer pour obtenir le maximum de biogaz à l'équilibre est en dehors de la valeur minimale ou maximale de l'actionneur, alors nous définissons les cas UDAC (Under dimensioned Actuator Case) et ODAC (Over Dimensioned Actuator Case) que nous résolvons en appliquant le principe du maximum de Pontryagin.

Mots clés : Contrôle optimal, bioréacteur, maximisation, biogaz, digestion anaérobie.



Table des matières

Introduction générale	17
1 Etat de l'art	23
1.1 Introduction	23
1.2 Généralités sur La digestion anaérobie	23
1.2.1 Description de la digestion anaérobie	23
1.2.2 Étapes de la digestion anaérobie et mode de fonctionnement	24
1.2.3 Mode de fonctionnement des bioréacteurs	26
1.3 Modélisation de la digestion anaérobie	27
1.3.1 Aperçu historique : du modèle du chemostat à l'ADM1	27
1.3.2 Choix du modèle	29
1.4 Sur le contrôle de la digestion anaérobie	30
1.4.1 Synthèse bibliographique	30
1.4.2 Présentation de la problématique	33
1.5 Conclusion	34
2 Maximisation de la production de biogaz d'un bioréacteur de digestion anaérobie	37
2.1 Résumé de la problématique et de l'approche mise en œuvre	37
2.2 Introduction	39
2.3 Model description and control problem	42
2.4 Maximizing the output gas flow rate	43
2.4.1 Main results	43
2.4.2 Implementation problems and robustness properties	44
2.5 Comparison with the heuristic control law	48
2.6 A direct approach	49
2.7 Conclusions and perspectives	53
Appendices	55
.1 Proof of Proposition 1	57
.1.1 The case of a Monod type function	57
.1.2 The case of a Haldane type function	59
.2 BOCOP optimization parameters for results reported in section 2.6	60

3	Contrôle optimal d'un bioréacteur de digestion anaérobie	63
3.1	Résumé de la problématique et de l'approche mise en œuvre	63
3.2	Introduction	64
3.3	Model description and control problem	66
3.3.1	Hypotheses	66
3.3.2	The Well-Dimensioned-Actuator-Case (WDAC)	69
3.4	Admissibility of the singular arc (WDAC)	70
3.5	The Under Dimensioned Actuator Case (UDAC)	74
3.6	The Over Dimensioned Actuator Case (ODAC)	75
3.7	Conclusions and perspectives	76
	Appendices	77
.1	Pontryagin Maximum Principe	79
.2	Proof of Proposition 3	83
.3	Proof of Proposition 4	86
.4	Proof of Proposition 5	87
	Conclusions générales et perspectives	91

Table des figures

1.1	Comparatif des procédés anaérobie et aérobie	24
1.2	Diagramme réactionnel de la Digestion Anaérobie	25
2.1	Regularization of a discontinuous control signal depending on the measurement : x is measured (left), s is measured (right).	44
2.2	Robustness of the optimal control when x is measured and $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold, $D_{min} = 0$ and $D_{max} = 1.2D_*$; on the left, x is plotted in thick dotted lines and s in fine solid lines.	46
2.3	Robustness of the optimal control when s is measured and $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold, $D_{min} = 0$ and $D_{max} = 1.2D_*$; on the left, x is plotted in thick dotted lines and s in fine solid lines.	48
2.4	The function γ and the heuristic control law.	50
2.5	Exact optimal control and optimal control computed with BOCOP : Monod kinetic, $s_0 + x_0 = s_{in}$	51
2.6	Comparison of optimal controls when $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold ; Monod kinetic and $D_* \leq D_{max}$: on the top, the plots are the same as those in Figure (2.3) ; on the medium, optimal trajectories and controls computed with BOCOP and on the bottom, the same trajectories and control when the criterion is modified in penalizing the control to avoid control chattering ($\epsilon = 5$).	52
3.1	Plots of the functions $y = \mu(S)$, $y = D_{min}$ and $y = D_{max}$, corresponding to the various cases depicted in Table 3.1. The green lines correspond to $s_* = s_{in} - x_*$, $D_* = \mu(s_*)$	68
3.2	Plots of the functions $y = \gamma(x)$, $y = D_{min}x$ and $y = D_{max}x$, corresponding to the various cases depicted in Fig. 3.1. The green lines correspond to x_* , $\gamma(x_*)$	68
3.3	For the parameters values $m = 1$, $K = 0.1$, $n = 6$ and $s_{in} = 2$ the function $\gamma(x) = x\mu(s_{in} - x)$, see panel b, corresponding to the increasing growth function (3.7), see panel a, exhibits two maximal values on the interval $[0, s_{in}]$	69
3.4	The optimal synthesis in the WDAC.	70
3.5	Admissibility regions of the singular arcs $x = x_*$ and $s = s_*$	71
3.6	Top left, $s(t)$ and $x(t)$ for $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$, top right, the corresponding control. Bottom left and right, the same plot but for $x_0 = 80$ and $s_0 = 80$ respectively.	72

TABLE DES FIGURES

3.7	On the right, the dynamics of the closed-loop system : Trajectories with $D = D_{max}$ are plotted in red, those with $D = D_{min}$ in blue, the admissible part of the singular arc in green and its non admissible part in black. On the left the trajectories corresponding to the initial conditions $(s_0, x_0) = (10, 10)$ and $(s_0, x_0) = (80, 80)$	73
3.8	The graphical definitions of $x_{\sharp} = x_{\sharp}(x)$ and $\tau_c = \tau_c(x)$	74
3.9	The optimal synthesis in the UDAC (on the left) and ODAC (on the right). . .	75
10	Orbits of the hamiltonian system (26). Panel a : $D > D^*$ and (27) has no positive solution. Panel b : $D > D^*$ and (27) has one positive solution. Panel c : $D > D^*$ and (27) has two positive solutions. Panel d : $D < D^*$ and (27) has two positive solutions. Panel e : $D < D^*$ and (27) has one positive solutions. Panel f : $D = 0$	83

Liste des tableaux

2.1	Gas flow rate wrt initial conditions, D_{min} and the measurement used. The third [resp. fourth] column gives the value of the functional (2.2), where $x(\cdot)$, $s(\cdot)$ is the solution of (2.1) with initial condition (s_0, x_0) and $D(\cdot)$ is given by (2.8) [resp. (2.9)].	47
2.2	Gas flow rate when computing the optimal solution with BOCOP in the case where no penalty on the control in the criterion.	53
2.3	Functional (2.10) when computing the optimal solution with BOCOP in the case where a penalty on the control is added in the criterion (here for $\epsilon = 5$) and the corresponding biogas produced (functional (2.2)) over the period $T = 2$	53
3.1	Parameter values for Figs. 3.1 and Fig. 3.2 : $m = 5$, $K = 10$, $K_i = 50$	67

LISTE DES TABLEAUX

Introduction générale

L'eau est une ressource essentielle pour l'être humain. Longtemps considérée comme abondante, elle est aujourd'hui perçue comme un bien limité et sa qualité est menacée.

L'activité humaine entraîne le rejet dans les milieux récepteurs des quantités très importantes d'éléments chimiques, comme les phosphates et les nitrates... En outre, les ressources hydriques diminuent de plus en plus face à une augmentation de la population mondiale (9,1 milliards en 2050, dont 2,4 milliards en Afrique subsaharienne [55]). Ce qui amène la plupart des pays du monde à réaliser des stations d'épuration dans le cadre de la politique publique de préservation des milieux récepteurs, ainsi que la réutilisation des eaux traitées dans l'industrie et dans l'agriculture tout en préservant la santé humaine et l'environnement.

A titre indicatif, nous pouvons présenter quelques agrégats relatifs à la situation des ressources en eau dans le monde. Dans son rapport publié à la faveur de la journée mondiale de l'eau (le 22 mars 2015), l'ONU souligne que la planète devrait faire face à un déficit global en eau de 40% d'ici 2030[25].

Pour toutes ces raisons, la préservation des ressources en eau doit impérativement être un objectif à part entière dans les futurs objectifs de développement durable à l'horizon de 2030.

En revanche, l'assainissement reste un gigantesque chantier à peine entamé. Il est à noter que 748 millions de personnes dans le monde n'ont accès à aucune source d'eau potable et plus de 2 milliards n'ont droit qu'à un service individuel ou collectif de piètre qualité ou limité. Selon le dernier rapport de l'ONU-EAU, 2,5 milliards d'humains vivent sans raccordement à un système de collecte. Dans les pays en voie de développement, au moins 90% des eaux usées sont rejetées dans l'environnement, générant des maladies hydriques et pollutions.

En ce qui concerne l'Algérie qui dispose actuellement de 96 barrages (données 2014 – 2015), la capacité théorique de la mobilisation des eaux superficielles avoisine 9 milliard de m^3 . Les actions de développement mises en oeuvre ont porté en priorité sur l'épuration des eaux usées ce qui a permis de disposer d'un parc en exploitation de 110 stations d'épuration (STEP) dont 56 lagunes.

Avec les Step et les lagunes en réalisation, le parc atteindra dans le futur 239 stations d'épuration des eaux usées correspondant à une capacité de 1,2 milliards de m^3 par an d'eau épurée.

Toutes les eaux usées épurées seront systématiquement utilisées dans le domaine de l'agriculture avec un objectif de plus de 100000 ha. Ceci montre l'importance de ce secteur par rapport à l'évolution des eaux traitées dédiées à l'agriculture.

Les enjeux du traitement de l'eau sont majeurs pour notre pays. Pour répondre à ces spécificités, des recherches permettent d'opter pour les meilleures technologies disponibles devant être développées et amplifiées. Or, dans beaucoup de cas, il ne s'agit pas d'adapter des stations d'épurations aux nouvelles exigences environnementales comme cela est souvent la problématique en Europe, mais plutôt de concevoir une station présentant les meilleures caractéristiques au regard des contraintes environnementales et locales.

Depuis peu, un nouveau paradigme est né. Il ne s'agit plus de concevoir ou d'améliorer des installations de traitement de l'eau existante mais de concevoir, voire de transformer des installations existantes en véritable bioraffinerie environnementale.

En effet, la dépollution par voie biologique des résidus (liquides ou solides) consiste à transformer, à l'aide de micro-organismes (ou biomasse), de la matière présente dans les déchets sous forme organique et constituée pour l'essentiel de carbone, d'azote et de phosphore.

Il existe deux types de traitement des eaux usées : aérobie (présence d'oxygène), majoritairement mise en oeuvre dans les stations d'épuration et anaérobie (absence d'oxygène) qui est un procédé conduisant à traiter les effluents chargés en matière organique. La technique utilisée dans les systèmes anaérobies s'appelle la digestion anaérobie ou méthanisation. C'est un processus complexe impliquant plusieurs réactions biologiques. Il décrit généralement quatre étapes principales, impliquant quatre consortiums microbiens spécifiques interagissant les uns avec les autres (pour plus de détails, voir [31]) :

1. hydrolyse
2. acidogénèse
3. acétogénèse
4. méthanogénèse

Ces quatre étapes principales seront présentées en détail dans le chapitre 1.

Le but de ces types de traitement est de diminuer suffisamment la quantité de substances polluantes contenues dans les eaux usées pour que l'eau finalement rejetée dans le milieu naturel ne dégrade pas ce dernier. L'épuration des eaux usées obéit donc à une logique de préservation des ressources en eau et de protection de l'environnement.

L'avantage principal de la digestion anaérobie est la possibilité de produire de l'énergie sous forme de biogaz. Ce dernier est un mélange gazeux qui contient de 50% à 70% de méthane

(CH_4). Il permet de produire de la chaleur, valorisée en tant que telle ou transformée en électricité. Par ailleurs, le résidu de méthanisation (le digestat), peut servir à fertiliser les terres agricoles. Le biogaz est un contenu énergétique élevé et peut donc être utilisé comme source d'énergie renouvelable.

Le biogaz est encore très marginal dans l'ensemble des énergies renouvelables, à peine 2% dans de nombreux pays européens. Le biogaz provient en grande partie, des décharges publiques (60%), agricoles et industrielles agro-alimentaires (20%), et de la méthanisation des boues des stations d'épuration (plus de 18%) [20].

Il y a lieu de noter que de nombreux pays européens ont entrepris des actions visant à produire davantage de biogaz en s'attaquant à des contraintes liées principalement à l'injection du biogaz dans les réseaux de distribution classique (éparpillement des sources, coté législatif,...).

En effet, ce n'est qu'en 2014 que quelques sites d'épuration sont connectés au réseau gazier ! La ville de Lille est la première à avoir injecté du biogaz [21]. Des solutions prometteuses sont envisagées pour le développement de cette énergie "verte".

En 2030, l'objectif de production de biogaz à un niveau de 10% est atteignable selon des prévisions européennes. D'où le lancement de grands programmes pour une meilleure productivité de biogaz (nouvelles technologies, meilleure utilisation des digestats, ...).

Comme cela a été déjà signalé, en Algérie, la réutilisation des eaux usées épurées dans le domaine agricole à longterm a été entravée en raison de la vétusté des stations d'épuration du pays. Dans la nouvelle politique de l'eau, elle est devenue un axe prioritaire et des investissements ont été consentis dans la réhabilitation des anciennes stations et la construction de nouvelles en essayant de manière progressive d'introduire les nouvelles STEP.

Pour faire de la méthanisation un procédé industriel efficace il faut savoir modéliser le processus, identifier ses paramètres et enfin appliquer des règles de contrôle issues de l'automatique. Cependant, la digestion anaérobie est un processus très complexe où interagissent un grand nombre de micro-organismes, de composés organiques et de conditions physico-chimiques. Ce type de procédé est facilement destabilisable : certaines étapes sont plus lentes que d'autres, certains composés inhibiteurs peuvent s'accumuler et peuvent mettre en péril le système. Par la suite, sa remise en route demande de longs délais pouvant aller jusqu'à plusieurs mois ce qui n'est pas convenable ni du point de vue pratique ni du point de vue économique. La question qui se pose est comment pouvons nous assurer la stabilité des méthaniseurs dans le temps, améliorer leur rendement de traitement et optimiser la production de biogaz et ceci, en dépit de perturbations environnementales et de variations des paramètres clés du processus ?

Pour cette raison, la communauté scientifique de l'automatique s'intéressant aux bioprocédés, étudie la digestion anaérobie en terme de modélisation, d'observation et de contrôle afin de prendre en charge les différentes préoccupations citées plus haut.

Le travail présenté dans cette thèse s'articule autour de l'analyse et le contrôle optimal d'un procédé de digestion anaérobie. L'objectif est de proposer une stratégie de commande optimale pour maximiser la quantité de biogaz produit lors de la fermentation. Plus particulièrement, à partir d'un modèle simple de bioprocédés et en considérant une classe importante de cinétiques de croissance, nous résolvons un problème de maximisation de biogaz produit par le système pendant un temps T en utilisant le taux de dilution $D(\cdot)$ comme variable de contrôle.

Dépendant des conditions initiales du système, la résolution du problème de contrôle optimal fait apparaître des degrés de difficulté très divers. Nous avons complètement résolu le problème pour des conditions initiales telles que $s_{in} = x_0 + s_0$ et des contraintes sur l'actionneur. Plus particulièrement, si nous notons D_{min} et D_{max} les valeurs minimales et maximales du débit d'alimentation pouvant être appliqué au système, nous définissons deux type de problèmes bien particuliers. Si le taux de dilution permettant de maximiser le débit de gaz à l'équilibre est à l'intérieur de ces deux bornes, alors nous considérons un cas nommé WDAC (pour Well Dimensioned Actuator Case) et l'on a $D_{min} \leq D \leq D_{max}$. Nous le résolvons par une méthode de comparaison de trajectoires d'un système dynamique.

En revanche, si l'actionneur est sous- (ou sur-) dimensionné, c'est-à-dire si la valeur du taux de dilution à appliquer pour obtenir le maximum de biogaz à l'équilibre est en dehors de la valeur minimale ou maximale de l'actionneur, alors nous définissons les cas UDAC (Under dimensioned Actuator Case) et ODAC (Over Dimensioned Actuator Case) que nous résolvons en appliquant le principe du maximum de Pontryagin.

Ce manuscrit est structuré comme suit :

Dans le premier chapitre, un état de l'art sur les systèmes liés à la digestion anaérobie est présenté et est commenté. Une revue des différents travaux de modélisation de ce type de processus et de contrôle optimal est explicitée. Nous présentons par la suite la problématique abordée pour la maximisation de biogaz et les différentes techniques mathématiques conduisant à la résolution. Nous discuterons leurs limites et leurs inconvénients. Nous présentons par la suite notre contribution consistant à résoudre les différents cas cités précédemment.

Une fois le modèle choisi suite à la synthèse bibliographique présentée dans le chapitre 1, nous avons consacré le deuxième chapitre à la description du modèle du chémostat, à la formalisation du problème de contrôle optimal auquel nous nous sommes intéressé et à l'élaboration de la stratégie de contrôle dans le cas WDAC. Cette dernière est obtenue par une méthode de comparaison de trajectoires du système dynamique. Dans ce cas, nous montrons que le contrôle optimal est un contrôle de type "bang-bang" qui consiste à joindre le plus rapidement possible le point optimal (point d'équilibre maximisant le débit de biogaz) et d'y rester grâce à un contrôle singulier. Des résultats théoriques sont présentés et les preuves sont explicitées qui montrent que sous certaines conditions réalisables à savoir : conditions initiales particulières et classe de contraintes sur l'actionneur, l'optimum est atteint.

Les différents résultats de simulation numérique sont présentés et discutés en mettant l'ac-

cent sur : les difficultés de l'implémentation du contrôle optimal et tests de robustesse par rapport aux conditions initiales. Une étude comparative des solutions exactes avec celle obtenues avec une approche directe "BOCOP" est faite. Un regard particulier est mis sur une loi de commande heuristique. Il s'agit de présenter la loi proposée par Steyer et coll. [53]. Une comparaison des résultats obtenus avec la stratégie proposée par les experts du bioprocédé est longuement discutée.

Dans le chapitre 3, une étude des trois cas (WDAC, UDAC et ODAC) à l'aide du principe du maximum de Pontryagin est faite. La solution analytique pour les deux derniers cas ainsi qu'une analyse d'atteignabilité pour l'arc singulier du cas WDAC sont présentées. Plus précisément, l'approche hamiltonienne consiste à représenter les orbites du système hamiltonien dans le plan de phase et de déduire par la suite, la solution optimale parmi toutes celles qui vérifient les conditions nécessaires d'optimalité données par le PMP (Principe du Maximum de Pontryagin). Contrairement au cas précédent, dans les deux cas considérés, l'optimum n'est pas atteint et le mieux que nous puissions faire est de s'en rapprocher. Tous ces éléments sont développés dans ce chapitre.

En dernier lieu, nous présentons une conclusion générale sur les résultats obtenus ainsi que les perspectives et les extensions possibles du travail réalisé.

Chapitre 1

Etat de l'art

1.1 Introduction

Le traitement de l'eau est nécessaire avant son rejet dans l'environnement. C'est pourquoi les eaux usées sont de plus en plus souvent prises en charge au niveau de stations de traitement qui effectuent des opérations de filtrage et de séparation et surtout, qui exploitent et intensifient ces mêmes réactions biologiques. Depuis les simples lagunes, recréant dans un espace clos les conditions naturelles aptes au retraitement, les procédés biologiques ont évolué au point de devenir des procédés industriels complexes. A ce titre, ils représentent un champ d'applications de l'automatique.

L'objectif du premier chapitre du manuscrit est de se familiariser avec un moyen de dépollution des eaux usées sous la forme d'un réacteur biologique à fonctionnement anaérobie. Après une revue des différents travaux relatifs à la modélisation et au contrôle des procédés de digestion anaérobie, nous présentons le problème de contrôle optimal que nous avons traité.

1.2 Généralités sur La digestion anaérobie

1.2.1 Description de la digestion anaérobie

La digestion anaérobie, ou méthanisation est un processus biologique naturel de décomposition de la matière organique par des microorganismes (bactéries) qui s'activent dans des conditions anaérobies, c'est-à-dire sans oxygène. La digestion de la matière organique génère du biogaz, riche en méthane (CH_4) à plus de 50%, de dioxyde de carbone (CO_2) et d'un degré moindre d'hydrogène (H_2). Le méthane présente l'avantage de pouvoir être valorisé sous forme d'énergie. Avec ce type de traitement, nous avons une économie d'énergie grâce à la production du méthane, la non utilisation d'oxygène et d'une faible production de boues excédentaires.

Par rapport aux techniques classiques de dépollution (dégradation biologique aérobie qui se fait en présence d'oxygène), la digestion anaérobie présente plusieurs avantages [23] :

- la dégradation d'effluents à forte concentration en matière organique,
- une faible production de boues de 5 à 10 fois moins qu'un réacteur aérobie (voir figure 1.1),
- la valorisation énergétique du biogaz,
- un faible coût énergétique car contrairement aux procédés aérobies, il ne faut pas transférer de l'oxygène au milieu, action qui consomme beaucoup d'énergie,

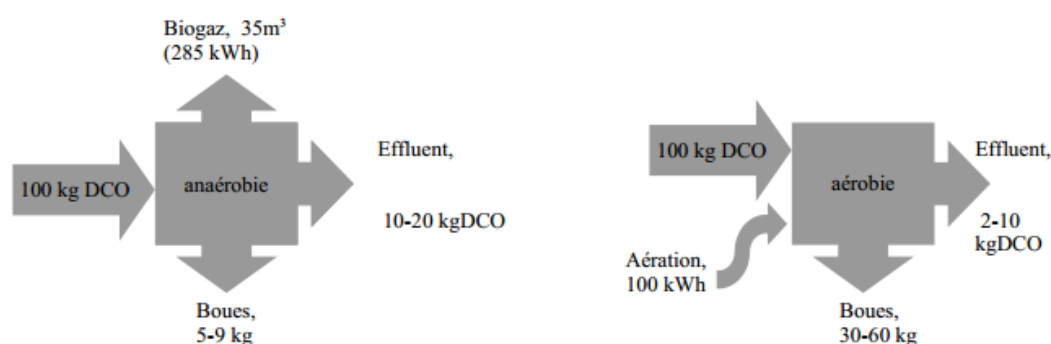


FIGURE 1.1 – Comparatif des procédés anaérobie et aérobie

Remarque 1.2.1. *L'effluent traité est caractérisé par sa DCO (Demande Chimique en Oxygène). Cette dernière représente la quantité massique d'oxygène nécessaire pour oxyder totalement le carbone organique. C'est une mesure de la pollution.*

1.2.2 Étapes de la digestion anaérobie et mode de fonctionnement

L'instabilité du processus de digestion anaérobie s'explique par le fait que i) certaines étapes sont plus rapides que d'autres et que ii) dans ces étapes plus lentes, des substances toxiques et/ou inhibitrices peuvent s'accumuler. Les étapes auxquelles nous faisons allusion sont :

1. L'Hydrolyse

L'étape d'hydrolyse est assurée par des enzymes extracellulaires qui assurent la transformation du substrat en monomères (acides gras, glycérol, acides aminés, sucres simples).

2. l'Acidogénèse

L'acidogénèse métabolise les monomères en acides organiques qui sont à leur tour métabolisés sous forme d'Acides Gras Volatils (AGV) par les bactéries acétogènes.

3. L'acétogénèse

A ce moment, les AGV et les substances de petites tailles moléculaires (quelques alcools)

sont transformés en acétate par des bactéries acétogènes, en produisant de l'hydrogène H_2 et du CO_2 .

4. La méthanogénèse

Au cours de cette étape, les populations méthanogènes vont consommer les acides gras et l'hydrogène et libérer les produits ultimes sous forme de CO_2 et de CH_4 . Les microorganismes méthanogènes sont des bactéries, dont la vitesse de croissance est beaucoup plus faible que celle des acétogènes. De plus, elles sont inhibées par leur propre substrat, bien avant que les acides inhibent la première étape. C'est donc l'accumulation des AGV qui provoque la déstabilisation des réacteurs anaérobies [5].

Le diagramme réactionnel de la digestion anaérobie est résumé dans la figure 1.2.

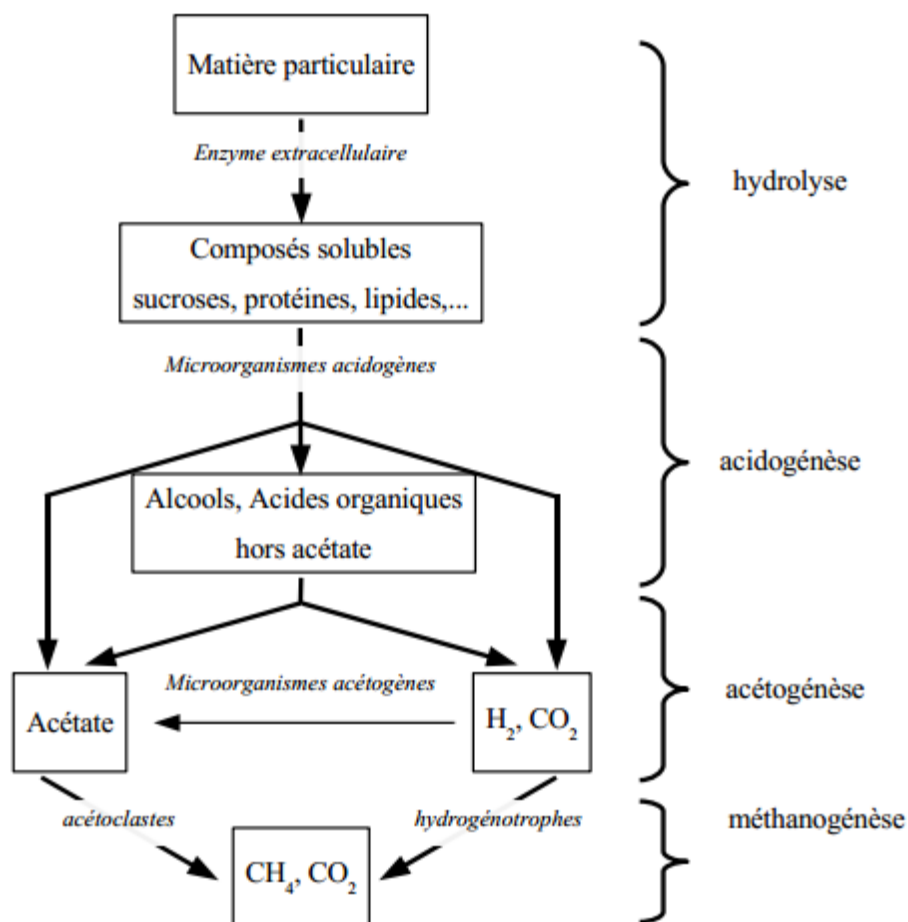


FIGURE 1.2 – Diagramme réactionnel de la Digestion Anaérobie

Cette description, est une description simpliste des réactions complexes mises en oeuvre par la digestion anaérobie mais elle suffit à faire apparaître un point fondamental : le réacteur ne dépolluera efficacement que si les conditions permettent aux deux catégories de micro-organismes de travailler en accord.

En dépit des avantages qu'offre la digestion anaérobie, elle possède aussi des inconvénients à savoir :

- une faible vitesse de croissance des bactéries anaérobies impose une cinétique d'épuration lente,
- sensibilité des populations bactériennes mises en jeu face aux surcharges organiques et toxiques,
- une réputation d'instabilité liée à la sensibilité de la dynamique de croissance des bactéries,
- un post-traitement aérobie peut être nécessaire avant de rejeter l'effluent dans le milieu naturel.

1.2.3 Mode de fonctionnement des bioréacteurs

Trois modes de fonctionnement sont possibles dans un bioréacteur :

1. En discontinu ou "batch" en anglais : le mode de fonctionnement batch est très simple puisque le digesteur est rempli avec la matière organique à traiter qui est laissée dans le réacteur jusqu'à l'épuisement du substrat à dégrader. Le temps de digestion est fonction de divers paramètres à savoir la température ou le type de substrat. Une fois la digestion effectuée, le digesteur est vidé et un nouveau cycle peut commencer. Cependant, cette technique présente l'avantage d'être simple et robuste lorsque l'objectif est la production de biomasse, la biomasse initiale est choisie faible. Le temps-mort nécessaire à l'initiation de la réaction après la vidange et le remplissage de la cuve, est un inconvénient de ce type de procédé.
2. En semi-continu ou "fed batch" ou "sequencing-batch reactor (SBR)" en anglais : Ce procédé fonctionne par cycles, la cuve est remplie progressivement en fonction de l'avancement de la réaction pour éviter une surcharge organique et garantir des conditions de croissance optimales. A la fin de la digestion une phase de décantation permet de séparer la phase liquide de la biomasse en suspension. Les procédés SBR s'attachent à maintenir une concentration assez élevée en biomasse dans le digesteur. Cette méthode est intéressante lorsque l'effluent à traiter présente un caractère inhibiteur. Elle est aussi bien adaptée à la digestion des déchets solides, il est en effet plus difficile d'assurer un mélange homogène dans un digesteur continu, alors que ce point est essentiel pour assurer un contact optimal entre la biomasse et le substrat.
3. En continu : Dans un réacteur fonctionnant en continu la cuve est alimentée avec un débit constant (le débit de la sortie est égal au débit d'entrée), et le digestat est évacué par une

action mécanique. Cette technologie est idéale pour les installations de grandes tailles. Les réacteurs utilisés peuvent être disposés aussi bien verticalement qu'horizontalement, et il existe également des procédés multi-cuves. Ce mode de fonctionnement est le plus utilisé dans le domaine du traitement des eaux usées.

Pour faire de la méthanisation un procédé industriel efficace il faut savoir le modéliser, identifier ses paramètres et enfin appliquer des règles de contrôle issues de l'automatique.

1.3 Modélisation de la digestion anaérobie

Avant de recenser les différents modèles existants de la digestion anaérobie, rappelons d'abord la notion de "Modèle".

Un modèle peut être développé pour des fins très diverses. Il peut servir pour reproduire ou expliquer un phénomène observé, pour prédire un comportement, contrôler un système,... Un modèle n'est cependant utile que s'il permet de répondre aux questions que nous nous posons à propos du processus étudié : que modélise-t-on ? Comment ? et pourquoi ce modèle est satisfaisant ? Ceci explique pourquoi, parmi un ensemble donné de modèles, tel modèle est préféré aux autres, car il apportera des réponses aux questions posées.

La modélisation des bioprocédés en général et de la digestion anaérobie en particulier est un exercice assez délicat. Contrairement à la physique où les modèles sont connus et validés et peuvent servir de base pour la construction de modèles, il n'existe pas en biologie des lois ou des modèles universels. Les modèles de croissance bactérienne sont très empiriques [30].

La modélisation de la digestion anaérobie représente un champ de recherche très actif depuis ces dernières années. Dans le but de mieux comprendre son fonctionnement et de proposer des stratégies de commande adaptées, de nombreux modèles ont été proposés. Nous présentons dans ce qui suit une revue des différents travaux de modélisation de la digestion anaérobie.

1.3.1 Aperçu historique : du modèle du chemostat à l'ADM1

Monod introduit en 1942 le premier modèle reliant le taux croissance microbienne à un substrat limitant. Il prouva par la suite que le ralentissement et l'arrêt de la croissance des bactéries est lié à l'appauvrissement en substrat du milieu de culture [42]. En se basant sur les bilans de masse qu'il avait obtenus, il proposa une fonction de croissance représentée par deux paramètres clés (un, représentant l'affinité des microorganismes pour le substrat et la vitesse maximale de croissance). Monod formula également en 1950, le principe selon lequel la vitesse de croissance d'une population bactérienne pourrait être représentée comme étant le produit de la biomasse et le taux de croissance [30].

Par la suite il développa le premier modèle de chimostat représenté par deux variables, à savoir, la concentration de la biomasse et le substrat limitant, dans un bioréacteur fonctionnant en continu. Les équations du modèle du chimostat seront reprises en détail dans le chapitre 2.

En ce qui concerne la modélisation des processus de fermentation, un grand nombre de modèles reposent sur l'utilisation de bilans de matières qui constituent des outils puissants pour déduire les équations du modèle [4],[5] et [17].

Les premiers modèles se sont focalisés sur la méthanogénèse sous l'hypothèse qu'elle serait l'étape limitante dans les procédés de digestion anaérobie. Une fonction de Haldane (explicitée dans le chapitre 2) a été utilisée par Andrew [3] pour représenter l'inhibition des bactéries méthanogènes en présence de fortes concentrations de substrat. L'auteur a relié le caractère instable de la digestion anaérobie à l'existence de deux points d'équilibres localement stables pour ce système. Il mis en exergue l'idée de lessivage et le taux de dilution maximal, en d'autres termes, le taux de dilution au delà duquel le temps de séjour dans le bioréacteur est plus faible que le taux de croissance, et ne permet pas l'accumulation de biomasse [3].

D'autres auteurs se sont intéressés à l'inhibition par des substrats outre que les AGV, comme l'azote ou l'hydrogène en incluant des termes supplémentaires dans l'équation de Haldane (voir par exemple [43]). Par la suite, la représentation du processus a été améliorée en introduisant d'autres populations bactériennes (acidogènes, acétogènes, ... etc), de nouveaux substrats (comme l'acetate) et d'autres réactions.

De fil en aiguille, un modèle plus générique a vu le jour, il s'agit du modèle ADM1 qui est actuellement le modèle phénoménologique de digestion anaérobie le plus complet permettant de simuler les réacteurs anaérobies. ADM1 pour Anaerobic Model N° 1 a été proposé par un groupe d'experts internationaux de la digestion anaérobie sous l'égide de l'International Water Association (IWA)[32]. Une première version de ce modèle a vu le jour dans un rapport scientifique et technique en 2001 [31]. ADM1 décrit 19 processus biochimiques, 7 populations bactériennes, 26 variables d'état, dont une grande partie n'est pas accessible à la mesure et 86 paramètres. Ce modèle répond au besoin de disposer d'une plate-forme commune de travail, il peut aussi bien servir de base à un procédé virtuel pour la mise en place d'unités de dépollution, que pour tester dans un cadre plus réaliste avant de valider expérimentalement des stratégies de contrôle basées sur d'autres modèles plus simples.

Du fait de sa grande dimension, son utilisation pour l'estimation, la commande et la supervision des digesteurs anaérobies n'est pas appropriée (fortement non-linéaire, difficile à appréhender).

De ce fait, des modèles plus synthétiques et plus appropriés pour faire du contrôle ont été proposés. Il s'agit du modèle AM2 (Acidogénèse- Méthanogénèse- 2 étapes). Ce dernier a été développé lors du projet AMOCO (Advanced Monitoring and Control System of Anaerobic Process, European FAIR project No. ERB-FAIR CT96-1198) sur la modélisation et le contrôle de procédés de digestion anaérobie [5]. C'est un modèle en deux étapes en cascade considérant

que deux populations bactériennes : les acidogènes et les méthanogènes. Sa structure simple (en comparaison avec le modèle ADM1) se prête plus aisément à des procédures de calibration et permet le développement de capteurs logiciels et de stratégies de contrôle [37].

Ce modèle néglige l'étape d'hydrolyse, il n'est donc pas adapté au traitement d'effluent fortement chargé en matière en suspension ou aux déchets solides. *AM2* comprend six équations différentielles. Une analyse mathématique très rigoureuse et complète des équilibres du modèle et de leur stabilité a été faite par Benyahia et al. ([9], [8] et [10]). Des travaux plus récents des auteurs ont porté sur le développement d'un nouveau modèle dynamique pour un BRM (Bioréacteur membranaire) anaérobie, basé sur la modification du modèle *AM2* et l'intégration d'une nouvelle variable *SMP* (Produits Microbiens Solubles) [11].

Un autre modèle mécaniste baptisé *AM2G* qui représente les mêmes caractéristiques que le modèle *AM2* mais prend en compte les échanges gazeux entre les phases liquide-solide et gazeuse dans le digesteur, a été développé par [30] dans le but de contrôler la qualité du biogaz.

Le modèle *AMH1* est issu des travaux de Bernard et al. [6] dont l'objectif était de déterminer le nombre d'équations nécessaire à l'expression de la variance du modèle *AM2* par analyse des composantes principales. Ayant déduit des données expérimentales que 86% de la variance était contenue dans un système à deux équations contre 91% pour quatre équations, les auteurs ont considéré un système en une seule étape où le substrat d'entrée est dégradé par une population bactérienne méthanogène. *AMH1* consiste donc à ne considérer que l'étape limitante de la digestion anaérobie, soit à supposer implicitement que le taux de croissance des acétogènes est infiniment plus grand que celui des méthanogènes. Dans *AMH1*, la transformation de la totalité du substrat en AGV est instantanée.

Ces modèles présentent l'intérêt d'avoir pu être validés et calibrés avec des données acquises sur un digesteur pilote du LBE [5].

1.3.2 Choix du modèle

Nous venons de citer quelques modèles mathématiques concernant le bioréacteur anaérobie. Comme nous l'avons souligné plus haut, la réussite du contrôle automatique s'appuie sur un bon modèle mathématique du procédé de digestion anaérobie. L'expression "bon modèle" sous entend, un modèle qui contient la plus grande quantité d'informations sur les variables clés du procédé et qui permette de prévoir au mieux son comportement dynamique [9]. Dans cette thèse, nous nous limiterons à considérer le cas moins complexe avec une seule population bactérienne, où la dynamique du système peut être résumée par une seule étape d'acidogénèse. Durant cette étape, les bactéries acidogènes dégradent le substrat et produisent par la suite du biogaz.

Il s'agit du modèle du chemostat. Ce modèle bien que peu détaillé par rapport à des modèles beaucoup plus complexes comme l'ADM1, approxime assez bien des systèmes complexes dont la digestion anaérobie. Sa relative simplicité et sa bonne représentation de la dynamique du

système réel font du modèle un très bon candidat pour la synthèse du contrôle ou des travaux d'optimisation.

Dans le cas de cette thèse, nous nous plaçons dans le cas étudié par Olivier Bernard [5], c'est-à-dire, dans le cas où un modèle à une seule étape dit "modèle du chémostat" décrit suffisamment bien le processus de digestion anaérobie.

1.4 Sur le contrôle de la digestion anaérobie

Plusieurs auteurs se sont investis pour mieux comprendre ce processus complexe afin de mieux le contrôler. Parmi les objectifs de commande ciblés nous pouvons citer : la régulation de la pollution en sortie, la stabilisation du procédé et l'optimisation de ses performances à savoir la maximisation de la production de biogaz.

Dans ce qui suit, nous présentons un état de l'art sur les différentes méthodes de contrôle de la digestion anaérobie existantes dans la littérature.

1.4.1 Synthèse bibliographique

Au cours de nos recherches, nous avons trouvé différentes approches pour le contrôle des digesteurs anaérobies. Elle peuvent être basées sur des approximations locales (contrôleur PI ou PID appliqué au système linéarisé), des lois de commande linéarisantes nécessitant la connaissance parfaite du modèle, des cinétiques ainsi que les états, des commandes dites avancées, des commandes heuristiques,... ect.

Les premiers contrôleurs reposaient sur des commandes simples de type "tout-ou-rien" (TOR), proportionnelle (P) ou encore proportionnelle intégrale (PI). En 1973, Graef et Andrews [28] ont testé en simulation le contrôle du pH, pour éviter l'acidification d'un réacteur suite à une surcharge organique, pour cela ils ont proposé de contrôler l'ajout de soude dans le digesteur par une commande TOR. L'intérêt d'agir sur le pH pour minimiser l'effet d'une surcharge organique se comprend aisément, en effet, une des conséquences directes d'une surcharge est l'accumulation d'AGV qui entraîne la chute du pH dans le milieu et perturbe la croissance des microorganismes. En régulant le pH, il est possible de maintenir des conditions environnementales favorables à la croissance bactérienne.

Ces types de contrôleurs donnent des résultats satisfaisants mais se limitent aux problèmes proches de la linéarité, ils ne sont pas adaptés pour des problèmes fortement non linéaires ce qui est généralement le cas des bioprocédés.

Des lois de commandes non linéaires basées sur des modèles ont pu apporter une amélioration à ces stratégies de contrôle. Nous pouvons citer les commandes linéarisantes. Le principe de ces dernières est d'imposer une évolution linéaire au système en boucle fermée.

L'inconvénient de ces lois de commande découle des erreurs éventuelles de modélisation. Les

différents paramètres sont difficiles à estimer de façon certaine, et une valeur erronée pourrait mettre en péril le système contrôlé.

En revanche, les commandes adaptatives permettent de limiter la dérive de ces contrôleurs en incluant une étape clé qui est l'estimation en-ligne des paramètres de la loi de commande [4]. En utilisant cette loi de commande, Renard et al. ainsi que Dochain et al. [45] ont pu réguler, respectivement, le propionate (acide propionique) et la pression partielle en H_2 en dessous des concentrations inhibant le procédé.

les commandes dites avancées sont utilisées lorsque nous disposons d'un "bon modèle". La commande adaptative, prédictive, stabilisante ainsi que la commande optimale sont des exemples de cette catégorie de commandes basées sur des modèles.

Il existe d'autres approches qui peuvent être indiquées si nous cherchons à atteindre un objectif particulier. Par exemple, si la variation ou l'incertitude paramétrique est un réel problème, peut-être faut-il regarder plus du côté de la commande adaptative ou de la commande robuste. Cependant il est connu que l'utilisation d'une commande robuste peut limiter les performances réelles du système. De plus, dans les approches robustes, la difficulté majeure provient de la manière dont l'utilisateur va prendre en compte les perturbations lors de la synthèse. Il est donc nécessaire de bien définir le type de perturbations qui risquent d'altérer les performances du régulateur. Dans ce cas, les utilisateurs optent pour maximiser la quantité et les amplitudes des perturbations possibles afin de couvrir la plus large gamme de perturbations. Dans un tel cas, la loi de commande, conçue précisément pour contrer les effets des perturbations les plus néfastes, va être très conservatrice. Ceci met en évidence l'un des grands problèmes fondamentaux de l'automatique moderne, à savoir la nécessité de trouver un compromis entre robustesse et performance lors de la synthèse d'un contrôle [1].

Les commandes heuristiques peuvent donner de bons résultats, elles sont capables de traiter les non-linéarités d'un système en évitant une trop grande complexité mathématique. Ce type de commande est basé sur l'expertise de l'opérateur humain. La commande floue fait partie des commandes heuristiques. Pũnal et al. [40] ont régulé les AGV dans un digesteur en utilisant une loi de commande basée sur de la logique floue.

Autre exemple de loi heuristique, il s'agit d'une loi développée par des experts du génie des procédés et de l'automatique, connaissant parfaitement la digestion anaérobie mais ne pouvant garantir théoriquement ni performance ni propriété de stabilité au sens où aucun modèle n'avait été utilisé pour la développer. Plus précisément, il s'agit de la commande proposée par Steyer et col. en 1999 [53]. Cette loi de commande est particulièrement intéressante car elle a été évaluée sur un pilote de la digestion anaérobie. Elle a permis d'atteindre des performances importantes et a montré une grande robustesse vis-à-vis de perturbations affectant le système. Cette loi teste l'état de l'écosystème en perturbant volontairement et régulièrement le bioprocédé en lui appliquant une petite surcharge organique sous la forme d'une "impulsion". L'analyse de la réponse du système, en terme de biogaz, permet de décider si oui ou non il peut supporter une

augmentation de la charge polluante à traiter. Si c'est le cas, un échelon est appliqué sur le débit d'alimentation avant d'appliquer une nouvelle impulsion et ainsi de suite.

La mise en œuvre de ces règles permet effectivement d'amener un procédé à des performances maximales (production maximale de biogaz), mais sur de longues périodes de temps. Elle a également démontré sa capacité à s'adapter à des perturbations telles qu'une chute de la concentration de l'effluent d'entrée. Par ailleurs, elle ne nécessite pas de connaissances de cette concentration pour sa mise en œuvre.

Intuitivement, les experts du bioprocédé ont suggéré que cette loi de commande pouvait être optimale sans toutefois être en mesure de l'affirmer puisqu'il s'agit d'une approche essentiellement "heuristique". Une question que nous pouvons nous poser est donc de savoir vis-à-vis de quel critère formel, la loi proposée est optimale ? Nous discuterons tous ces points en détail dans le chapitre 2 de ce manuscrit.

Jusqu'à présent, nous avons recensé quelques stratégies de commande pouvant améliorer le procédé lorsque ce dernier n'est pas imposé par des contraintes épuratoires. Les différentes techniques évoquées précédemment peuvent être transposées à des objectifs d'optimisation afin d'améliorer les performances du digesteur à savoir, la maximisation du biogaz produit qui est une énergie renouvelable. Cet objectif de commande est au cœur de nos préoccupations dans le cadre de ce travail.

De nombreuses stratégies de contrôle optimal visant à maximiser la quantité de biogaz issue de la fermentation ont été proposées. Les travaux de D'Ans et coll. [13] ont mis en exergue le caractère "bag-bang" d'un problème de contrôle optimal dans le temps dans le chémostat et le contrôle optimal des bioprocédés en général et de la digestion anaérobie en particulier.

Dimitrova et Krastanov ont mis en œuvre un contrôle permettant la stabilité en temps réel la dynamique du système tout en maximisant la quantité de biogaz [14]. Toutefois, leur approche n'est pas basée sur un modèle : un algorithme est présenté sous forme d'un bloc pour ajuster de manière itérative le taux de dilution qui va à son tour, permettre au système d'aller vers un état d'équilibre où la valeur optimale de biogaz est atteinte. Une telle approche présente quelques limites à savoir, les dynamiques du système ne sont pas stables en boucle ouverte. Un autre contrôleur du type stabilisant local a été nécessaire [15]. D'autres extensions ont été proposées dans [15], [16].

Dans leur travaux, Sbarciog et coll. [47, 48] ont proposé une loi de contrôle visant la production maximale de biogaz d'un bioréacteur de digestion anaérobie modélisé par un système d'ordre 2. La stratégie de contrôle adoptée est le résultat de deux problèmes d'optimisation : i) la première est relative à la détermination d'un point d'équilibre optimal, il s'agit d'une optimisation statique. ii) Le second concerne une optimisation dynamique s'articulant autour du Principe du Maximum de Pontryaguin pour trouver le contrôle permettant au système d'aller

d'un état initial vers un état final tout en maximisant la production de biogaz. Recemment, en considérant d'autres mesures, Sbarciog et coll. [50] ont proposé une simple stratégie de commutation (switching strategy) pour optimiser le processus de digestion anaérobie.

Toutes ces stratégies ont pour but d'amener le système le plus rapidement possible au voisinage du point optimal, c'est-à-dire où la production de biogaz est maximale. Cette façon de contrôler le système peut présenter un risque en cas de perturbations extérieures (surcharge organique) selon la zone du plan de phase dans laquelle le système se trouve. Dans ce cas, une étude qualitative des trajectoires est nécessaire pour informer l'opérateur des risques encourus.

D'autres situations ont été examinées. Stamartelatou et coll. [52] ont aussi traité des problèmes de maximisation de biogaz sur un intervalle de temps donné, en présence de perturbations (présence d'inhibiteurs par exemple). Les auteurs ont calculé les arcs singuliers en utilisant le Principe du Maximum de Pontryagin. Cependant, la synthèse du contrôle optimal n'a pas été explicitée et l'analyse de contrôlabilité est absente. Ce problème de contrôle optimal en toute généralité, n'est pas résolu et demeure ouvert.

1.4.2 Présentation de la problématique

Le problème de commande auquel nous nous sommes intéressés dans cette thèse est synthétisé comme suit :

En considérant

- i) un modèle simple de digestion anaérobie, il s'agit du modèle du chémostat,
- ii) des hypothèses sur l'ensemble des conditions initiales (hypothèses 1 à 3 du chapitre 2),
- iii) une production de méthane proportionnelle à l'activité microbienne définie par $k\mu(s)x$ comme proposée dans [4], où k est un coefficient de rendement, $\mu(s)$ est une cinétique de croissance bactérienne et x est la biomasse.

Nous résolvons le problème de maximisation de biogaz $\max_{D(t)} \int_{t=0}^{t=T} \mu(s)x dt$ sur un intervalle de temps donné T , en utilisant comme actionneur le taux de dilution $D(\cdot)$ car ce dernier, constitue un moyen d'action pratique pour des réacteurs fonctionnant en mode continu. La synthèse du contrôle optimal est obtenue dans différentes situations qui sont explicitées dans les chapitres 2 et 3 et ceci, pour une large classe de cinétique de croissance.

1.5 Conclusion

Après avoir passé en revue les explications relatives à la digestion anaérobie, présenté les principaux modèles de ce processus et défini la problématique générale du contrôle, nous allons présenter dans le chapitre 2 le modèle du chémostat et résoudre le problème de contrôle optimal pour des contraintes particulières sur l'actionneur. Il s'agira de résoudre le problème dans le cas WDAC.

Chapitre 2

Maximisation de la production de biogaz d'un bioréacteur de digestion anaérobie

2.1 Résumé de la problématique et de l'approche mise en œuvre

Après avoir rappelé les équations du modèle du chimostat et défini les hypothèses sur l'ensemble des conditions initiales (hypothèses 1 à 3), nous résolvons dans ce présent chapitre, le problème de contrôle optimal pour maximiser la quantité de biogaz produit sur un intervalle de temps donné. Dépendant des conditions initiales et de contraintes sur l'actionneur (le débit d'alimentation), la résolution du problème fait apparaître des degrés de difficultés très diverses. Dans ce chapitre, il s'agit de résoudre le problème dans le cas WDA (Well Dimensioned Actuator Case) où $D_{min} \leq D \leq D_{max}$, D_{min} et D_{max} représentent respectivement, les valeurs minimales et maximales du débit d'alimentation pouvant être appliqué au système.

la synthèse du contrôle est obtenue par une méthode de comparaison de trajectoires du système dynamique. Dans ce cas, nous montrons que le contrôle optimal est un contrôle de type "bang-bang" consistant à joindre le plus rapidement possible le point optimal (point d'équilibre maximisant le débit de biogaz) et d'y rester grâce à un contrôle singulier. Des résultats théoriques sont présentés et les preuves sont explicitées qui montrent que sous certaines conditions à savoir : conditions initiales particulières et classe de contraintes sur l'actionneur, l'optimum est atteint.

Les différents résultats de simulation numérique sont présentés et discutés en mettant l'accent sur : les difficultés de l'implémentation du contrôle optimal et tests de robustesse par rapport aux conditions initiales. Une comparaison des performances du contrôleur optimal avec celles obtenues en appliquant une loi heuristique est discutée. On montre en particulier que les deux lois de commande amènent le système vers le même point optimal.

Enfin, une étude comparative des solutions exactes avec celle obtenues avec une approche

CHAPITRE 2. Maximisation de la production de biogaz d'un bioréacteur de digestion anaérobie

numérique directe en utilisant le logiciel "BOCOP" est faite.

L'élaboration de la loi de commande dans le cas WDAC est présentée dans l'article ci-après, intitulé : Maximizing of biogas production from anaerobic digestion, paru récemment dans Journal of Process Control. Dans cet article, nous détaillons les bases initiales de développement de la stratégie de commande adoptée.

Maximizing biogas production from the anaerobic digestion

A. Ghouali^{a,d}, T. Sari^{b,e}, J. Harmand,^{c,d,*}

^a Université de Tlemcen, Laboratoire d'Automatique, B.P 119 Tlemcen, Algérie

^b Irstea, UMR Itap, 361 rue Jean-François Breton, 34196 Montpellier France

^c INRA, UR0050 LBE, Avenue des Étangs, 11100 Narbonne, France

^d INRA-INRIA, EPI MODEMIC, UMR MISTEA,

2 P. Viala, 34060 Montpellier, France

^e Université de Haute Alsace, 4 rue des Frères Lumière, 68093 Mulhouse, France

* Corresponding author.

Abstract

This paper presents an optimal control law policy for maximizing biogas production of anaerobic digesters. In particular, using a simple model of the anaerobic digestion process, we derive a control law to maximize the biogas production over a period T using the dilution rate as the control variable. Depending on initial conditions and constraints on the actuator (the dilution rate $D(\cdot)$), the search for a solution to the optimal control problem reveals very different levels of difficulty. In the present paper, we consider that there are no severe constraints on the actuator. In particular, the interval in which the input flow rate lives includes the value which allows the biogas to be maximized at equilibrium. For this case, we solve the optimal control problem using classical tools of differential equations analysis. Numerical simulations illustrate the robustness of the control law with respect to several parameters, notably with respect to initial conditions. We use these results to show that the heuristic control law proposed by Steyer *et al.*, 1999 [53] is optimal in a certain sense. The optimal trajectories are then compared with those given by a purely numerical optimal control solver (i.e. the "BOCOP" toolkit) which is an open-source toolbox for solving optimal control problems. When the exact analytical solution to the optimal control problem cannot be found, we suggest that such numerical tool can be used to intuit optimal solutions.

Keywords : optimal control, bioreactor, maximization, biogas, anaerobic digestion.

2.2 Introduction

Anaerobic digestion or methanization is a biological process in which organic compounds are transformed into carbon dioxide and methane (biogas) by micro organisms. These processes represent a promising technology for treating liquid and solid waste while producing valuable energy and limiting the greenhouse [44]. The operation of such process poses however a number of practical problems since anaerobic digestion is a complex nonlinear system which is known to be unstable : an organic overload can destabilize the biological process and its restart needs long delays (over months). It is thus necessary to develop automatic systems to optimally manage such a process when dealing with disturbances or to optimize important steps as its

operation during the starting period.

Schematically, there are two families of automatic controllers developed for such purpose : model- and knowledge-based approaches. The first refer to the synthesis and the application of automatic control laws when a model of the system is available. Most of such controllers have been proposed by people from the automatic control community. They include approaches based on both linear or nonlinear techniques. Their main advantage lie in their theoretical properties they are suppose to guarantee such as performance or stability robustness with respect to uncertainty or disturbances. For instance, the controllers proposed by [2] are part of this family. The second class of approaches - called here knowledge-based - include approaches - not only but rather - developed by experts of the anaerobic digestion (biotechnologists, chemical engineers) who proposed control methods based on the detailed practical knowledge they have about bioprocess dynamics. They are most often validated on real processes than model-based controllers and are usually based on easily accessible measurements usually available in an industrial context such as pH, gas flow rates, H₂ concentration, partial or total alkalinity... Approaches by [33], [46] or [53] can be classified in this family. The counterpart of the fact they are easily applicable on real processes is that no theoretical guarantee with respect to performance can be given since no model is necessary to synthesize the controller.

Steyer et al., 1999 [53] proposed the 'Disturbances Monitoring' principle as a way to control highly loaded anaerobic processes. This strategy is based on the following idea : a known overload is first applied voluntary to the process. The analysis of the systems response allows one to decide whether the system is able to deal with an increase in the pollutant load or not. If it is the case, the feeding flow undergoes a step while it remains at its actual value or is decreased otherwise. Once the new equilibrium has been reached, a new load test is applied and so on. In their paper, the authors claim that 'the control law allows to reach automatically the maximum treatment ability of the anaerobic process whatever the input concentration in organic matter is' without being able to prove it because their control law is completely heuristic. If we define the maximum treatment ability of an anaerobic system as the maximum biogas flow rate it can deliver over a given period of time, and if we consider a model of the process, we face an optimal control problem that can be posed from a mathematical viewpoint. To do so, we need a model of the anaerobic digestion process. The anaerobic process involves thousands of microorganisms interacting together through a complex metabolic network which is, actually, only partially known. On the one hand, even if several synthetic functional models have recently been proposed, including high dimensional ones like the ADM1 (cf. [32]), but also more simplified ones like the AM2 (cf. [5]), it is to be noticed that the nonlinear character of biological models and their relatively high dimension (the AM2 is of dimension 4 in its simplest form) render their use inappropriate for the application of optimal control theory. On the other hand, it has been shown that under some circumstances, very simple models were able to adequately capture the main dynamical behavior of the anaerobic model [26].

The use of such a simplified model is not new and several authors have already proposed to

use it for optimal control design of anaerobic digesters (cf. for instance [52]). From the seminal work by D’Ans and al. ([13]) who established the bang-bang character of a simple optimal-time control problem of the chemostat, the optimal control of bioprocesses in general, and of the anaerobic digestion in particular, has been studied over a quite long time. More particularly, an optimal control policy to avoid the failure in the digester operation and restore its normal operation or lead it to a new optimal steady state was proposed by Stamatelatou and al. [52]. It has been designed using a simplified model of anaerobic digestion to determine the optimal dilution rate as a function of time, in response to entry of inhibitors or sudden changes in the feed substrate concentration. The authors shown that there is a proportional relationship between the dilution rate and the methane production. A simpler and implementable suboptimal control law was derived by Dimitrova and Krastanov to stabilize in real time a dynamic model towards the maximum methane flow rate [16]. Their approach is however not model-based : the algorithm is presented in the form of a block-scheme to iteratively adjust the dilution rate to drive the process dynamics towards a set point, where an optimal value of the output is achieved. The main limitation in applying this approach is that the dynamics should be open-loop stable. Otherwise, a locally stabilizing controller is necessary to stabilize the equilibrium points around the optimal operating point [16]. Other extensions were derived by the same authors [14, 15]. Sbarciog et al. [49, 47] have proposed a control strategy for maximizing biogas production of an anaerobic digestion system modeled by a 2-order system. The control law was synthesized by solving two optimization problems : firstly, a static optimization problem to determine the optimal operating point and, secondly, a transient optimization problem using the maximum principle of Pontryagin to find the control which will drive the system from an initial condition towards the optimal operating point while maximizing the gas flowrate. Recently, considering other sets of measurements, Sbarciog et al. [50] proposed a simple switching strategy for optimizing anaerobic digestion process. In [52], the problem of maximizing the biogas production over a given period of time has been investigated considering different possible disturbances (presence of an inhibitor or over/under-loads). The singular arcs were calculated using the Maximum Principle of Pontryagin. However, the optimal control synthesis was not given explicitly and no controllability analysis was performed.

In the present work, considering i) a simple model of a chemostat (see equations (2.1) below), ii) a restricted set of initial conditions (see Hypothesis 2 below) iii) assuming the biogas produced is a linear function of the activity defined as $k\mu(s)x$ as proposed in [4] (see section (2.3)), we solve the problem of maximizing the biogas production over a given period of time $\max_{D(t)} \int_{t=0}^{t=T} \mu(s)x dt$ for a large class of kinetics functions (including both Monod and Haldane growth rates). These results are then used to better understand the knowledge-based controller proposed by Steyer and al.(1999).

This paper is organized as follows. In section (2.3) we present the class of problems we are interested in. In the next section, we establish the main results of the paper about the maximization of the output gas flow rate for the chemostat model. In section 4, we compare the control law we establish in section 3 with that one proposed by Steyer *et al.*, 1999 [53].

In section 5, we propose to use a direct approach to intuit the optimal trajectories for a more general class of initial conditions than those considered in previous sections before some conclusions and perspectives are drawn.

2.3 Model description and control problem

In the present work, we consider a single-step model for the anaerobic digestion process based on one biological reaction, where the organic substrate denoted by s is degraded into methane biogas (CH_4) by a bacterial population x . We assume that the methane flow rate, Q_{CH_4} , is proportional to the microbial activity as proposed in [4]. The mass balance model of the classical chemostat model is given by the following nonlinear system of ordinary differential equations :

$$\begin{cases} \dot{x} &= (\mu(s) - D)x \\ \dot{s} &= D(s_{in} - s) - \mu(s)x \end{cases} \quad (2.1)$$

where x and s denote biomass and substrate concentrations, respectively, s_{in} is the concentration of the influent substrate s , while $\mu(s)$ is the specific growth rate of biomass. $D \in [D_{min}, D_{max}]$ is the dilution rate which is considered hereafter as the control variable, μ is the specific growth rate of microorganisms. Notice that the yield coefficient Y which usually appears in the chemostat model, does not appear in the equations since it is straightforward to show that the change of variable $x = X/Y$ allows us to reduce the system to (2.1). In the sequel, we will consider that the kinetic μ , satisfies the very general property :

Hypothesis 1. $\mu(0) = 0$ and $\mu(s) > 0$ for all $s > 0$. The function $\mu(\cdot)$ is either increasing, or there exists \bar{s} such that $\mu(s)$ is increasing for $0 < s < \bar{s}$ and decreasing for $s > \bar{s}$.

In this paper, we seek to maximize the biogas production over a given time interval. The total methane production over the interval $[0, T]$ can be expressed as :

$$J(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T k\mu(s(t))x(t)dt \quad (2.2)$$

where $(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot))$ satisfy (2.1). Since k is constant, without loss of generality, we will consider $k = 1$ in the following.

The problem of maximizing biogas production consist in maximazing the integral (2.2) under the constraint $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$. As surprising as it may be, as posed hereabove in very general terms, the optimal control problem is very difficult to solve. It is why we restrict here our attention to a specific case in introducing the following additional hypothesis.

Hypothesis 2. The initial conditions of system (2.1) lie on the line $x_0 + s_0 = s_{in}$.

Notice that under Hypothesis 2, $x(t) + s(t) = x_0 + s_0 = s_{in}$ holds for all positive t . Thus, the two dimensional dynamical system (2.1) is reduced to the following one dimensional system :

$$\dot{x} = \gamma(x) - Dx; \quad x(0) = x_0 \quad (2.3)$$

with $\gamma(x) = \mu(s_{in} - x)x$. Notice that $\gamma(0) = 0$ and $\gamma(s_{in}) = 0$. We can then rewrite the functional (2.2), with $k = 1$, as :

$$J(x(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \gamma(x(t))dt \quad (2.4)$$

where $(x(\cdot), D(\cdot))$ satisfy (2.3), subject to constraint $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$. Finally, to completely define our problem, we introduce the following hypotheses

Hypothesis 3. *There exists $x_* \in]0, s_{in}[$ such that*

$$\gamma(x) \leq \gamma(x_*) \text{ for all } x \in [0, s_{in}] \quad (2.5)$$

$$\gamma(x) \text{ is increasing on } [0, x_*] \quad (2.6)$$

$$\gamma(x) \text{ is decreasing on } [x_*, s_{in}] \quad (2.7)$$

Hypothesis 4. *Let $D_* = \mu(s_{in} - x_*)$ be the control for which $x = x_*$ is a steady state of equation (2.3). We assume that $0 \leq D_{min} \leq D_* \leq D_{max}$.*

Remark 1 *Note that both Monod and Haldane functions (that are $\mu(s) = \mu_{max} \frac{s}{s+k_s}$ and $\mu(s) = \mu_{max} \frac{s}{s+k_s+\frac{s^2}{k_i}}$, respectively) verify Hypotheses 1 and 3.*

2.4 Maximizing the output gas flow rate

2.4.1 Main results

We first establish the following result (the proof is given in Appendix (.1)) :

Proposition 1. *Assume that Hypotheses 1-4 hold. Then the optimal control maximizing the functional (2.4) is given by :*

$$D(\cdot) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } x(t) < x_* \\ D_{max} & \text{if } x(t) > x_* \\ D_* & \text{if } x(t) = x_* \end{cases} \quad (2.8)$$

where $D_* = \mu(s_{in} - x_*)$ is the singular control which keeps $x(t) = x_*$ at the optimal steady state.

In such a case, according to the position of $x(t)$ with respect to x_* , the digester operates either at its minimum ($D = D_{min}$) or at its maximum capacity ($D = D_{max}$), until it reaches the singular arc D_* and stay at the optimal steady state x_* .

Remark 2 *The bang-bang control law proposed within proposition 1 is equivalent to the fastest possible way to go towards the optimal point x_* and stay there if x_* is attained.*

2.4.2 Implementation problems and robustness properties

Implementation of the control law

In this section, we discuss a number of questions related to the practical implementation of the optimal control law given in the previous section. The first question that may arise is related to the bang-bang character of the control. Indeed, when implementing the optimal strategy, we face the problem of simulating a dynamical system with a discontinuous second member ([34]). This problem can be solved using specific mathematical analysis tools and numerical algorithms. In practice, to apply this strategy on a real system, this problem is usually circumvented using regularization techniques. This approach consists in joining the two discontinuous arcs of the control by a continuous signal where the switch between two discontinuous values of the control is replaced by a continuous change between $x_* - \epsilon_2$ and $x_* + \epsilon_1$ (resp. $s_* - \epsilon_2$ and $s_* + \epsilon_1$ if s is measured instead of x , cf. Figure 2.1 where ϵ_1 and/or ϵ_2 are tuning parameters as shown in Figure 2.1. Once regularized, one may check by simulation that the closed loop system behaves satisfactorily.



FIGURE 2.1 – Regularization of a discontinuous control signal depending on the measurement : x is measured (left), s is measured (right).

The presence of noise and the fact that sensors and/or actuators can be affected by delays may also disturb the functioning of the controller. In such cases, the use of different filters and other numerical techniques may limit the level of their influence on the closed-loop system. One must also keep in mind that measuring biological states can take some time and that actuators, like pumps in the present case, cannot deliver signals with too high derivatives. Thus, the discrete character of actuators and sensors must be dealt with. In more specific terms, engineers evaluate the robustness of the controller in the presence of such disturbances and if the simulation results are appropriate, do not implement sophisticated techniques. Apart from very specific application domains like in aeronautic or astronautic, such questions for biological processes are usually only studied in simulation or explored for very particular cases without considering any optimization criterion (cf. for instance [39]). However, it may happen that apparent small changes lead to important consequences for the closed-loop system. In our

case, as already stated hereabove, notice that it may happen that the variable s is measured instead of x . In such a case, a corollary of Proposition 1 can directly be written and yields the same optimal control law unlike the decision is inverted with respect to the position of s with respect to s_* since $x(t) = s_{in} - s(t)$. It seems that nothing is fundamentally changed in the control unless it is now the corollary to Proposition 1 which must be used to compute the actual control. However, if we investigate now the robustness properties of the control system, we will establish that under some circumstances, fundamental and actually dramatic changes may arise.

Robustness with respect to initial conditions

In practice, the condition $x_0 + s_0 = s_{in}$, defined as the hypothesis 2, may not be satisfied. Studying the robustness of the control with respect to the initial conditions refers to studying what happens to the system when the closed loop system is simulated with the control law synthesized in proposition 1 - that has been designed for $x_0 + s_0 = s_{in}$ - while it is actually not the case.

Remark 3 *When Hypothesis 2 is not satisfied, the control law is not optimal. More precisely, notice that the strategy proposed in Proposition 1 consists in applying either D_{min} or D_{max} and then to switch to the singular control D_* which shall maintain the state on the singular arc $x = x_*$ or $s = s_*$ once it is attained. However, it has been established by Stamatelalou et al. (cf. [52]) that $s = s_*$ (or $x = x_*$) **are not** singular arcs in the general case (however, as recalled in the introduction, in their paper Stamatelalou et al. did not give the optimal synthesis. The problem is difficult and actually remains open). Thus, the control proposed in Proposition 1 is not optimal when Hypothesis 2 is not satisfied.*

First, assume x is measured. Let us apply the control law (2.8) given in Proposition 1 for different values of s_0 , x_0 and s_{in} such that $x_0 + s_0 = s_{in}$ is no longer satisfied. To illustrate our discussion, let consider a model with Monod kinetic where $\mu_{max} = 4.5$, $K_S = 10$, $S_{in} = 100$, $D_{max} = 1.2D_*$ (all in arbitrary appropriate units¹). In such a case x_* which only depends on μ_{max} , K_S and s_{in} equals 76.8. Let us simulate the control over a period of time $T = 2$ for several sets of initial conditions and two different values of D_{min} , that are $D_{min} = 0$ and $D_{min} = 1$. To avoid numerical problems due to the presence of a discontinuous second member, we regularize the control law with $\epsilon_1 = 1$ yielding $\epsilon_2 = 5$ where ϵ_1 and ϵ_2 are defined in Figure 2.1 and thus computed as :

$$\epsilon_2 = \epsilon_1 \frac{D_* - D_{min}}{D_{max} - D_*}$$

if x is measured and as :

$$\epsilon_2 = \epsilon_1 \frac{D_* - D_{max}}{D_{min} - D_*}$$

1. The values for μ_{max} and K_S will be the same in all simulations of the paper

if s is measured. With the regulation of the control law, the system to be simulated is a simple system of ordinary differential equations which were solved using standard matlab solvers. The total biogas produced for each case is reported in the third column of Table (2.1) while the dynamic behavior of some interesting cases (solutions with initial conditions $\{s_0, x_0\}$ corresponding to $\{10, 10\}$, $\{10, 40\}$ and $\{10, 70\}$, $D_{min} = 0$) are plotted in Figure 2.2.

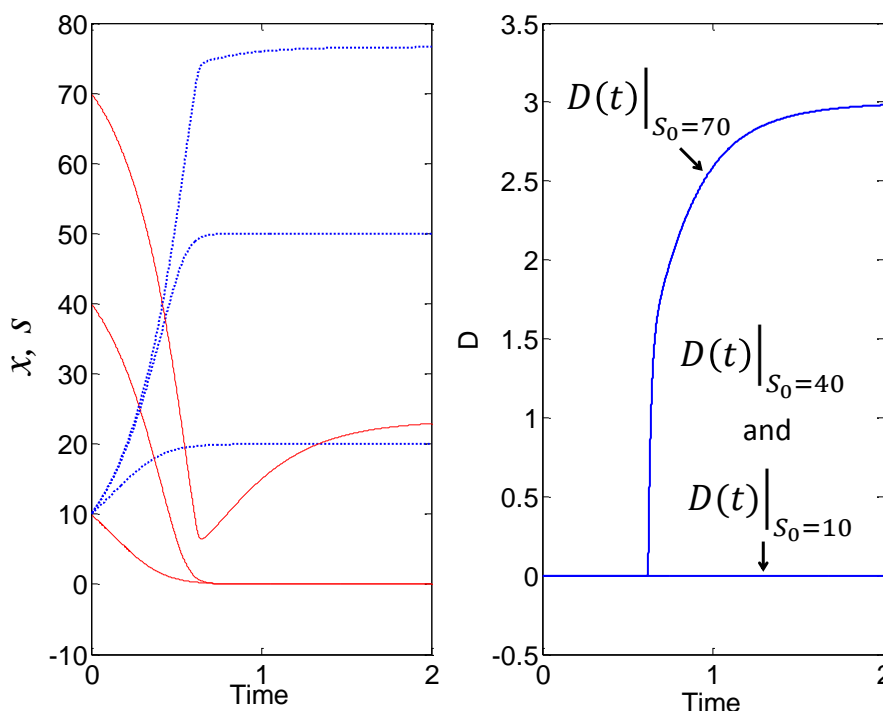


FIGURE 2.2 – Robustness of the optimal control when x is measured and $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold, $D_{min} = 0$ and $D_{max} = 1.2D_*$; on the left, x is plotted in thick dotted lines and s in fine solid lines.

For several initial conditions ($\{10, 10\}$, $\{10, 40\}$ and $\{50, 10\}$ in Table (2.1)), when x is measured, the system behaves as a batch and the optimal steady state is never reached even for large T : since the yield of biogas production equals 1, the total biogas produced is simply equal to s_0 . The reason explaining this batch behavior is the following: as stated in Proposition 1, as long as $x_0 < x_*$, the control applied is $D = D_{min} = 0$ until $x(t)$ reaches x_* . If T is large enough, the condition $x_0 + s_0 = s_{in}$ guarantees that there is enough substrate for the biomass to reach x_* . However, when $x_0 + s_0 = s_{in}$ no longer holds, like in the cases where initial conditions are $\{10, 10\}$, $\{10, 40\}$ and $\{50, 10\}$, it may happen that there is not enough substrate for the biomass to grow sufficiently to attain x_* . In other terms, if $x_0 + s_0 = s_{in}$ is not verified, if $x_0 < x_*$ and if s_0 is too small, then the control never switches to D_{max} and remains to $D = D_{min} = 0$ leading to the production of a very small amount of biogas. The control law is thus poorly robust with respect to initial conditions when x is measured.

D_{min}	$\{s_0, x_0\}$	functional (2.2) when measuring x	functional (2.2) when measuring s
0	10, 10	10	315
1	10, 10	239	320
0	10, 40	40	350
1	10, 40	307	354
0	10, 70	345	394
1	10, 70	341	384
0	10, 100	388	435
1	10, 100	350	410
0	50, 10	10	436
1	50, 10	344	437
0	80, 10	449	472
1	80, 10	449	473
0	100, 10	465	489
1	100, 10	465	490

TABLE 2.1 – Gas flow rate wrt initial conditions, D_{min} and the measurement used. The third [resp. fourth] column gives the value of the functional (2.2), where $x(\cdot)$, $s(\cdot)$ is the solution of (2.1) with initial condition (s_0, x_0) and $D(\cdot)$ is given by (2.8) [resp. (2.9)].

Now, assume that s is measured instead of x . The control law (2.8) given in Proposition 1 is written now

$$D(\cdot) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } s(t) > s_* \\ D_{max} & \text{if } s(t) < s_* \\ D_* & \text{if } s(t) = s_* \end{cases} \quad (2.9)$$

where $s_* = s_{in} - x_*$.

Let us study by simulation the robustness of the control law with respect to the initial conditions. We choose $\epsilon_1 = 1$ yielding now $\epsilon_2 = 0.2$. Again, we simulate the system for the set of initial conditions reported in Table (2.1) and for two values of D_{min} . The total biogas produced for each case is reported in the fourth column of Table (2.1). As in the previous case, a number of simulation results are reported in Figure 2.3 (solutions with initial conditions $\{s_0, x_0\}$ corresponding to $\{10, 10\}$, $\{10, 40\}$ and $\{10, 70\}$, $D_{min} = 0$) and the total biogas produced in each case is reported in Table (2.1). In this case, although $s_0 + x_0 = s_{in}$ is not satisfied, the system behaves well and as long as T is large enough and $x_0 > 0$, the optimal point is always attained. Of course, the control law cannot be said to be ‘optimal’ with respect to the biogas production since some hypotheses are not verified, but at least, the system converges - asymptotically - towards the optimal point computed with $x_0 + s_0 = s_{in}$. In this sense, we can then say that the control is robust with respect to initial conditions if s is measured instead of x .

Furthermore, as long as x_* is attained (*i.e.* $D_{min} > 0$ and T large enough) we noticed that the total biogas produced is always greater when s is measured instead of x (compare third and fourth columns of Table 2.1). However, we could not prove this point and there is thus no reason to affirm that it is a general result as long as Hypothesis 2 is not satisfied.

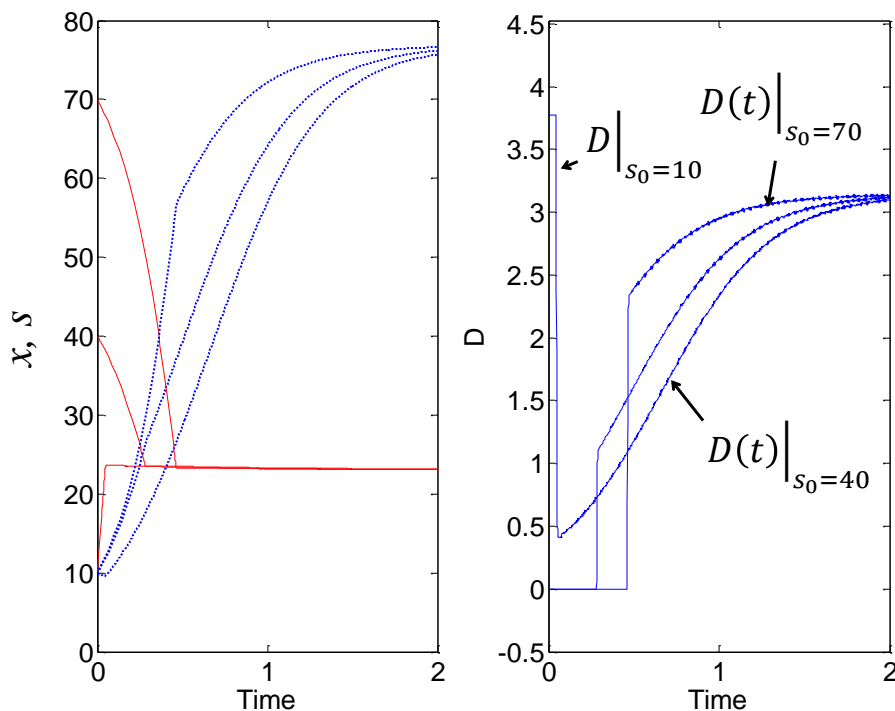


FIGURE 2.3 – Robustness of the optimal control when s is measured and $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold, $D_{min} = 0$ and $D_{max} = 1.2D_*$; on the left, x is plotted in thick dotted lines and s in fine solid lines.

2.5 Comparison with the heuristic control law

In this section, we use the results established in Proposition 1 to show that the control law proposed in [53] and ours drive the system towards the same functioning point.

Basically, the control by [53] is based upon a test about the actual ‘biological state’ of the digester. The authors even presented their control law as a ‘real dialog’ between the operator and the microbial ecosystem of the process. The idea relies on the application of a controlled disturbance in the input flow rate during a given period of time. Assuming the input substrate concentration is known and constant, one may compute the theoretical increase in the gas flow this disturbance should cause. Monitoring the gas flow over the time allows then the user to estimate whether the applied overload has been supported by the process - through a corres-

ponding increase in the biogas - or not. If yes, the process is considered to be in ‘good health’ and the input load can be increased through an increase of the input flow rate. If not, it means that the additional substrate that has been introduced through the disturbance has accumulated in the process (under the form of intermediate byproducts of the anaerobic digestion like VFA) possibly leading to a destabilization of the process. In such a case, the input flow rate is decreased.

Let us compare this strategy with ours. Consider the output gas flow rate represented by the γ function in Figure 2.5 for the same model than in section (2.4.2) and $S_{in} = 100$. Under the hypothesis that $x_0 + s_0 = s_{in}$, the dynamic of the system is given by $\dot{x} = \gamma(x) - Dx$. First, consider an equilibrium point \bar{x} such that $\bar{x} < x_*$ (left side of Figure 2.5). Notice that the corresponding input flow rate verifies $D_{max} > \bar{D} = \mu(s_{in} - \bar{x}) > D_*$. In this case, we know that the optimal control consists in applying $D = 0$ and that this control will drive the system towards $x_* = 76.8$ (once attained, the control is then switched to D_*). Now, from the same initial equilibrium point $\bar{x} < x_*$, let us apply the control by Steyer *et al.*, 1999. In particular, let us apply a disturbance $D_d > \bar{D}$ during a given period of time (step 1 on the left in Figure 2.5) and let us monitor the output of the system, that is the output gas flow rate. Since the dynamic of the system is given by $\dot{x} = \gamma(x) - D_d x$, x will decrease (step 2 on the left in Figure 2.5) and since γ is increasing for all $x < x_*$, we will observe a decrease in the biogas. Following the algorithm of Steyer *et al.*, 1999 [53], we should conclude that the system does not behave very well and decrease the value of \bar{D} accordingly (step 3 on the left in Figure 2.5). Reproducing again the same strategy, it is quite clear, at least intuitively, that the applied control should converge towards D_* , which is actually the optimal strategy since it will finally drive the state x towards x_* . Conversely, if we start from an initial condition with a $\bar{D} < D_*$ such that $\bar{x} > x_*$, we can show using the same reasoning than previously (and taking into account that γ is decreasing for $x > x_*$), that the heuristic control will drive the state towards x_* as the optimal control (steps 1 to 3 on the right in Figure 2.5). Obviously, the heuristic strategy is not optimal with respect to the functional (2.4) since it will take more time to reach the optimal state x_* than using the bang-bang optimal strategy, but we can still conclude that the control is similar to ours in the sense it will drive the system towards the optimal point x_* which maximizes the output gas flow rate.

2.6 A direct approach

In previous sections, we have designed an optimal control law for the system (2.1) with respect to the functional (2.4) under Hypotheses 1 to 3. Using tools of the optimal control theory, under Hypothesis 2, we were able to find the optimal feedback law to be applied in measuring one state of the system. When Hypothesis 2 does not hold anymore or when the model of the system is more complicated than ours so as it is not possible anymore to derive analytically the solution, a direct approach can be used. Here a ‘direct approach’ is referred to as a completely numerical optimization. The last decade, a number of softwares have been designed for that purpose. Here, we use a software called BOCOP ([36]). The principle of this

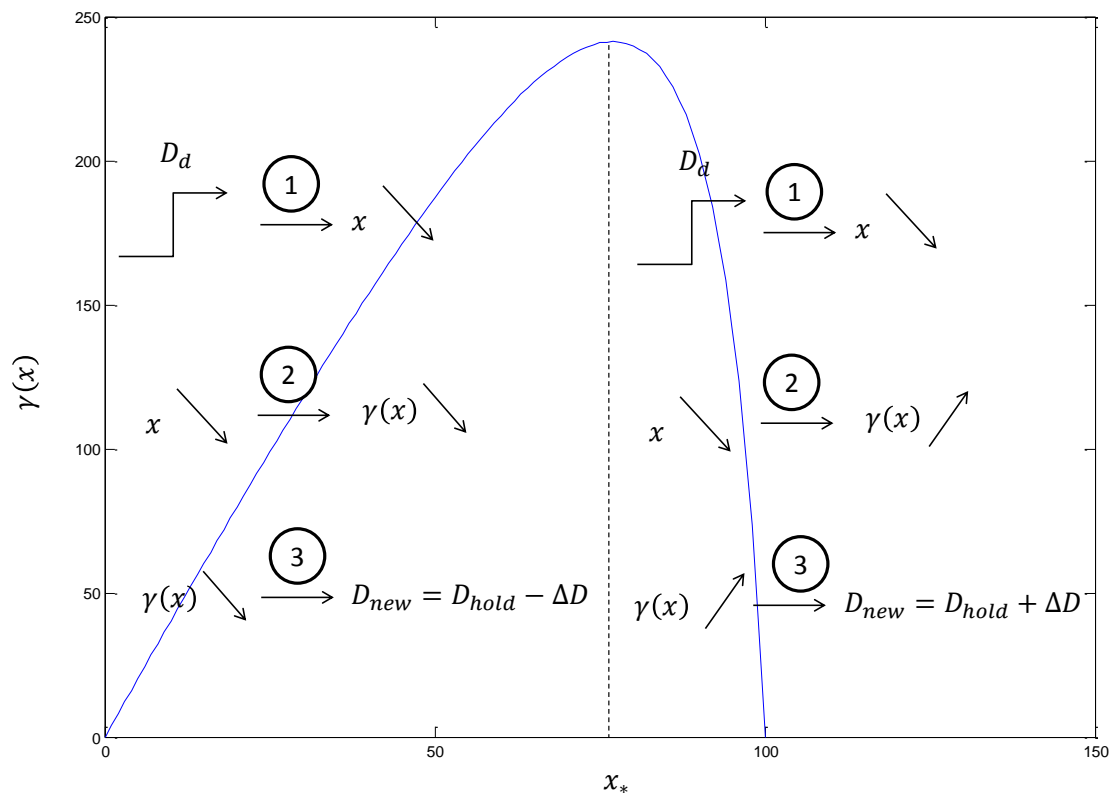


FIGURE 2.4 – The function γ and the heuristic control law.

tool is to discretize the problem and to find optimal trajectories among all candidates using numerical optimization toolkits. We have used this software in a ‘blind way’, *i.e.* without introducing any other knowledge than the criterion to be optimized, the model of the system and the known constraints on the actuator.

First, let us compare what BOCOP delivers when Hypothesis 2 holds with the application of the exact optimal solution. Again, we use the same parameters as those used in the section (2.4.2). In this case, recall that $x_* = 76.87$ and $D_* = 3.14$. The exact optimal control is given by Proposition 1 as long as Hypotheses 1 to 3 hold. Let $x_0 = 10$ and $s_0 = 90$. Again, to avoid numerical problems, the control is regularized with $\epsilon_1 = 1$. Let us compare the trajectories obtained when applying Proposition 1 and those computed by BOCOP for this first example. Both state trajectories and corresponding control signals are plotted in Figure 2.5 while BOCOP optimization parameters and results are reported in Appendix (.2).

The flowrates in both cases are equivalent (equal to about 422). Obviously, BOCOP delivers a control signal which is comparable to the theoretical optimal solution.

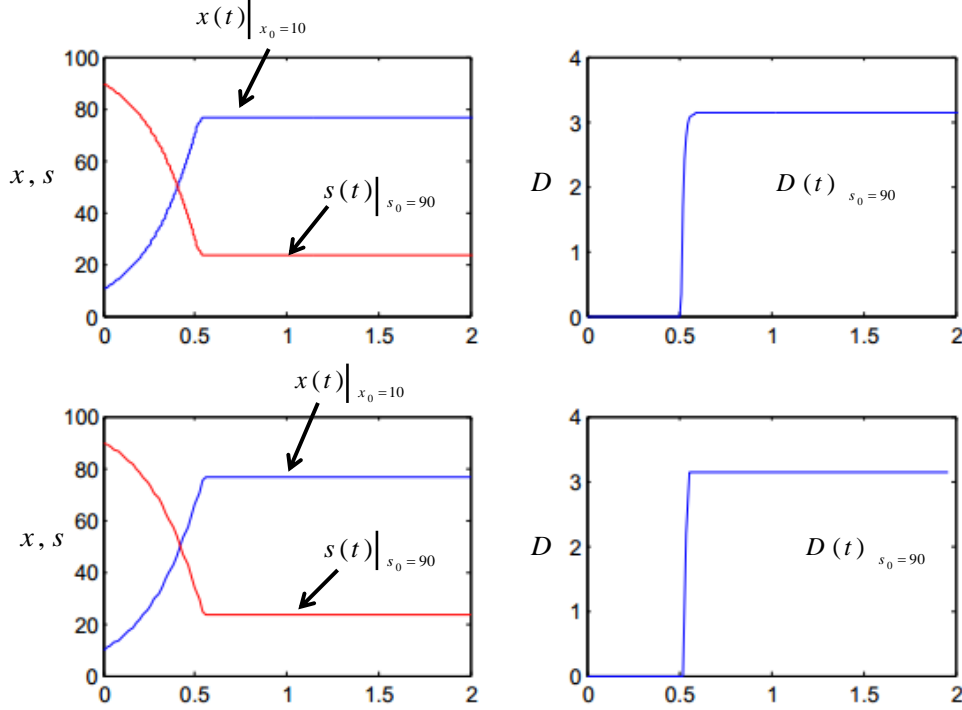


FIGURE 2.5 – Exact optimal control and optimal control computed with BOCOP : Monod kinetic, $s_0 + x_0 = s_{in}$.

These results suggest that BOCOP may be a good candidate to investigate extensions of the optimal control solutions when hypotheses used in the design of the optimal control do not hold anymore. In particular, we can investigate what could be the optimal controls computed with BOCOP when $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold. Thus, one may compare the results obtained in the section (2.4.2) within the framework of the study of the robustness of the control law with respect to the initial conditions and those obtained with BOCOP. For that purpose, we solve the problem with BOCOP using $x_0 = 10$ and $s_0 = 10, 40$ and 70 , respectively. Simulation results are presented in Figure 2.6 while the total biogas produced in each case is reported in Table (2.2) and BOCOP optimization parameters and results are reported in Appendix (.2).

More precisely, three cases are represented in Figure 2.6. For easily comparing the trajectories obtained within the robustness study (applying Proposition 1 while $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold) and those obtained with BOCOP, we plotted again the trajectories and controls of Figure 2.3 on the top of Figure 2.6. Just below, medium place of Figure 2.6, we plotted the

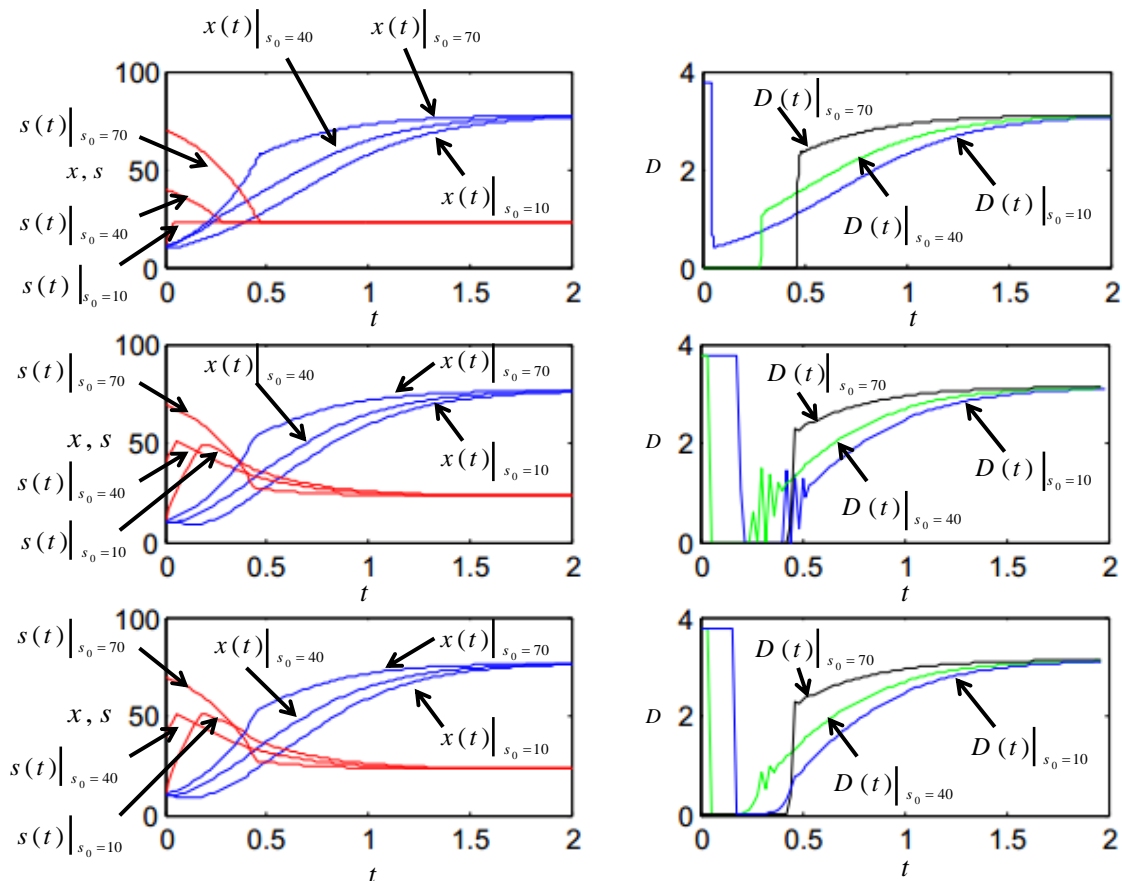


FIGURE 2.6 – Comparison of optimal controls when $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold; Monod kinetic and $D_* \leq D_{max}$: on the top, the plots are the same as those in Figure (2.3); on the medium, optimal trajectories and controls computed with BOCOP and on the bottom, the same trajectories and control when the criterion is modified in penalizing the control to avoid control chattering ($\epsilon = 5$).

optimal trajectories and corresponding controls obtained with BOCOP for the three initial conditions. The control signals are very noisy, simply because BOCOP has difficulties when the trajectory follows a singular arc. To avoid such chattering phenomena when using a numerical optimization software, one way to proceed is to modify the criterion to be optimized in penalizing the control signal. The criterion then becomes :

$$J(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T [\mu(s(t))x(t) + \epsilon D(t)^2] dt \quad (2.10)$$

Of course, when proceeding this way, a fine compromise must be found when choosing ϵ which must be kept small enough : it is expected that smaller ϵ closer the computed trajectories from

s_0	functional (2.2)
10	324
40	357
70	395

TABLE 2.2 – Gas flow rate when computing the optimal solution with BOCOP in the case where no penalty on the control in the criterion.

s_0	functional (2.10)	functional (2.2)
10	388	324
40	416	354
70	461	394

TABLE 2.3 – Functional (2.10) when computing the optimal solution with BOCOP in the case where a penalty on the control is added in the criterion (here for $\epsilon = 5$) and the corresponding biogas produced (functional (2.2)) over the period $T = 2$.

the optimal ones since functional (2.10) tends towards functional (2.2) when ϵ tends towards zero. The trajectories and controls corresponding to optimizations obtained with $\epsilon = 5$ are plotted in the last line of Figure 2.6 (again, BOCOP optimization parameters and results are reported in Appendix (.2)). To evaluate the different results, we can first compare the biogas production values reported in Table (2.1) of section (2.4.2) and those obtained with BOCOP (without penalty on the control) reported in Table (2.2) : for each pair of initial conditions considered, we notice that the total biogas produced is comparable. then, we can compare the optimal control performance with and without penalty on the control in the criterion in comparing results reported in Tables (2.2) and (2.3). Again, the results are comparable : whatever the control is left free or constrained by an additional penalty in the criterion, the optimal strategies are comparable for identical initial conditions. Thus, on the first hand, we suggest BOCOP to be a good candidate to rapidly intuiter optimal solutions when the analytical solution of a problem is not known. On the other hand, these results suggest that applying the control law proposed within the framework of Proposition 1 while Hypothesis 2 does not hold should produce reasonably good results in terms of biogas production and that the optimal solution is thus quite robust to uncertainty on the initial solutions as long as s is measured.

2.7 Conclusions and perspectives

In this work, we have discussed classical implementation problems and robustness issues with respect to recent results from optimal control theory for the chemostat with the class of kinetics satisfying Hypotheses (1) and (3). Using these results, the optimality of the heuristic control law initially proposed by Steyer *et al.*, 1999 was investigated. It was shown that this

heuristic control law is suboptimal with respect to the maximization of the biogas over a given period of time and that it drives the system towards the same optimal point than the actual optimal control law. Perspectives of this work include the extension of our results to more complex models than the simple chemostat model and, eventually based on numerical results obtained with a numerical optimization toolkit, *e.g.* the BOCOP software, the generalization of the results in the case where the condition $x_0 + s_0 = s_{in}$ does not hold, which, actually, remains an open problem.

Acknowledgment : The authors would like to thank the Euro-Mediterranean research network TREASURE (INRA-INRIA Euromed 3+3 project), the PHC TASSILI project no 33254QH and the Averroes program for their support. They also thank Terence Bayen, Claude Lobry, Ali Moussaoui and Alain Rapaport for fruitful discussions about this work.

Appendices

.1 Proof of Proposition 1

Let $D(\cdot)$ be an admissible control. Let $x(t, x_0, D(\cdot))$ be the solution of the system :

$$\dot{x} = \gamma(x) - D(t)x, \quad x(0) = x_0 \quad (11)$$

We need the following lemma :

Lemma 2. *Let $D = D(\cdot)$ a control satisfying $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$ for all $t \in [0, T]$. We have :*

$$x(t, x_0, D_{max}) \leq x(t, x_0, D(\cdot)) \leq x(t, x_0, D_{min}), \text{ for all } t \in [0, T]$$

Proof. It comes from a direct application of the theorem of comparison of solutions of dynamical systems since for any control $D(\cdot)$ satisfying $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$ one has :

$$\gamma(x) - D_{max}x \leq \gamma(x) - D(t)x \leq \gamma(x) - D_{min}x$$

□

In Section (.1.1), we give the proof of Proposition 1 for an increasing function $\mu(\cdot)$. When $\mu(\cdot)$ is increasing and then decreasing (like a Haldane growth function) the proof is similar with some technicalities, see Section (.1.2).

.1.1 The case of a Monod type function

Proof. In this section, we assume that $\mu(\cdot)$ is increasing. According to Hypothesis 4, $D_{min} \leq D_*$, $\mu(s_*) = D_*$ and $s_* < s_{in}$. Thus there exists s_{min} such that $\mu(s_{min}) = D_{min}$ and $s_{min} \leq s_* < s_{in}$. Recall that $x(t, x_0, D_{min})$ is the solution of :

$$\dot{x} = \gamma(x) - D_{min}x, \quad x(0) = x_0 \quad (12)$$

The solution of (12) converges towards $x_{min} = s_{in} - s_{min} \geq x_*$. Hence for all $x_0 \leq x_*$ there exists $t_{min}(x_0)$ such that $x(t_{min}(x_0), x_0, D_{min}) = x_*$.

Similarly, $x(t, x_0, D_{max})$ is the solution of :

$$\dot{x} = \gamma(x) - D_{max}x, \quad x(0) = x_0 \quad (13)$$

If $D_{max} \geq \sup \mu(\cdot)$, the solution of (13) converges towards 0. If $D_{max} < \sup \mu(\cdot)$, let s_{max} be defined by $\mu(s_{max}) = D_{max}$. According to Hypothesis 4, we have $s_* \leq s_{max}$. Two cases must be distinguished : If $s_{max} < s_{in}$ then the solution of (13) converges towards $x_{max} = s_{in} - s_{max} \leq x_*$. If $s_{max} \geq s_{in}$ it converges towards 0. Hence for all $x_0 \geq x_*$ there exists $t_{max}(x_0)$ such that $x(t_{max}(x_0), x_0, D_{max}) = x_*$.

Let us define

$$t_*(x_0) = \begin{cases} \min(T, t_{min}(x_0)) & \text{if } x_0 \leq x_* \\ \min(T, t_{max}(x_0)) & \text{if } x_0 \geq x_* \end{cases} \quad (14)$$

In other words, $t_*(x_0)$ is the instant at which the solution $x(t, x_0, D_{min})$ reaches x_* , when $x_0 \leq x_*$, or $x(t, x_0, D_{max})$ reaches x_* , when $x_0 \geq x_*$, if its reaches it on $[0, T]$. If these solutions never reach x_* on $[0, T]$, $t_*(x_0)$ is put equal to T .

Now, to prove Proposition 1, we consider an admissible control $D(\cdot)$ and an initial condition $x_0 \in [0, s_{in}]$. To simplify notations we note $x(t) = x(t, x_0, D(\cdot))$. We distinguish two cases depending on x_0 .

If $0 \leq x_0 \leq x_*$ then let us consider the following control :

$$D^*(t) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } 0 \leq t \leq t_*(x_0) \\ D_* & \text{if } t_*(x_0) < t \leq T \end{cases} \quad (15)$$

where $t_*(x_0)$ is defined by (14). The corresponding solution is given by

$$x^*(t) = \begin{cases} x(t, x_0, D_{min}) & \text{if } 0 \leq t \leq t_*(x_0) \\ x_* & \text{if } t_*(x_0) < t \leq T \end{cases}$$

Using Lemma 2, for all admissible control $D(\cdot)$ one has

$$x(t) \leq x(t, x_0, D_{min}) = x^*(t) \text{ for all } t \in [0, t_*(x_0)]$$

Since $x^*(t) \leq x_*$ for all $t \in [0, t_*(x_0)]$, from (2.6) we deduce that

$$\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t)) \text{ for all } t \in [0, t_*(x_0)] \quad (16)$$

Since $x^*(t) = x_*$ for all $t \in [t_*(x_0), T]$, from (2.5) we deduce that

$$\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t)) \text{ for all } t \in [t_*(x_0), T] \quad (17)$$

Using (16) and (17), for all $t \in [0, T]$, $\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t))$. Therefore, for all $x_0 \leq x_*$

$$J(x(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \gamma(x(t)) dt \leq \int_0^T \gamma(x^*(t)) dt = J(x^*(\cdot), D^*(\cdot)) \quad (18)$$

If $x_* \leq x_0 \leq s_{in}$ then let us introduce the following control :

$$D^*(t) = \begin{cases} D_{max} & \text{if } 0 \leq t \leq t_*(x_0) \\ D_* & \text{if } t_*(x_0) < t \leq T \end{cases} \quad (19)$$

where $t_*(x_0)$ is defined by (14). The corresponding solution is given by

$$x^*(t) = \begin{cases} x(t, x_0, D_{max}) & \text{if } 0 \leq t \leq t_*(x_0) \\ x_* & \text{if } t_*(x_0) < t \leq T \end{cases}$$

Using Lemma 2, for all admissible control $D(\cdot)$ one has

$$x(t) \geq x(t, x_0, D_{max}) = x^*(t) \text{ for all } t \in [0, t_*(x_0)]$$

Since $x^*(t) \geq x_*$ for all $t \in [0, t_*(x_0)]$, from (2.7) we deduce that

$$\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t)) \text{ for all } t \in [0, t_*(x_0)] \quad (20)$$

Since $x^*(t) = x_*$ for all $t \in [t_*(x_0), T]$, from (2.5) we deduce that

$$\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t)) \text{ for all } t \in [t_*(x_0), T] \quad (21)$$

Using (20) and (21), for all $t \in [0, T]$, $\gamma(x(t)) \leq \gamma(x^*(t))$. Therefore, for all $x_0 \geq x_*$

$$J(x(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \gamma(x(t)) dt \leq \int_0^T \gamma(x^*(t)) dt = J(x^*(\cdot), D^*(\cdot)) \quad (22)$$

From (18) and (22) we deduce that for all initial conditions $x_0 \in [0, s_{in}]$ and the admissible control $D(\cdot)$ one has

$$J(x^*(\cdot), D^*(\cdot)) = \max_{D_{min} \leq D(\cdot) \leq D_{max}} J(x(\cdot), D(\cdot)).$$

Thus, depending on the initial conditions, the control defined by (15) and by (19) is optimal, which is exactly what Proposition 1 states. \square

.1.2 The case of a Haldane type function

Proof. We assume that there exists \bar{s} such that $\mu(s)$ is increasing for $0 < s < \bar{s}$ and decreasing for $s > \bar{s}$. The numbers s_{min} or s_{max} were defined in the previous sections as solutions of equations

$$\mu(s) = D_{min} \text{ or } \mu(s) = D_{max}$$

respectively. Now these equations can have at most two solutions and we must explain how to choose their appropriate solution s_{min} or s_{max} .

Let $x_* \in]0, s_{in}[$ given by Hypothesis 3. Then $\gamma'(x_*) = 0$. Since

$$\gamma'(x) = \mu(s_{in} - x) - \mu'(s_{in} - x)x$$

we have $\mu'(s_*) = \mu'(s_{in} - x_*) > 0$, that is to say $0 < s_* < \bar{s}$.

According to Hypothesis 4, $D_{min} \leq D_*$, $\mu(s_*) = D_*$ and $s_* < s_{in}$. Thus, there exists s_{min} and $s_{min}^\#$ such that $\mu(s_{min}) = \mu(s_{min}^\#) = D_{min}$ and

$$s_{min} \leq s_* < s_{in} \text{ and } s_{min} < \bar{s} < s_{min}^\#$$

Two cases must be distinguished : If $\mu(s_{in}) \geq D_{min}$, that is to say $s_{in} \leq s_{min}^\#$ then for all $x_0 \leq x_*$, the solution of (12) converges towards $x_{min} = s_{in} - s_{min} \geq x_*$. Therefore, there exists $t_{min}(x_0)$ such that $x(t_{min}(x_0), x_0, D_{min}) = x_*$. If $\mu(s_{in}) < D_{min}$, that is to say $s_{in} > s_{min}^\#$ then, for all $x_0 \leq x_*$, the solution of (12) converges either towards $x_{min} \geq x_*$, either towards 0. More precisely,

-
1. if $x_{min}^\# < x_0 \leq x_*$, where $x_{min}^\# = s_{in} - s_{min}^\# > 0$, the solution of (12) converges towards $x_{min} \geq x_*$, and we define $t_{min}(x_0)$ by $x(t_{min}(x_0), x_0, D_{min}) = x_*$
 2. if $0 < x_0 < x_{min}^\#$, the solution of (12) converges towards 0, so that it never attains x_* , and we let $t_{min}(x_0) = +\infty$.

If $D_{max} \geq \sup \mu(\cdot)$, the solution of (13) converges towards 0. If $D_{max} < \sup \mu(\cdot)$, let s_{max} and $s_{max}^\#$ such that $\mu(s_{max}) = \mu(s_{max}^\#) = D_{max}$ and

$$s_* \leq s_{max} < \bar{s} < s_{max}^\#$$

Many cases must be distinguished : If $s_{max} \geq s_{in}$ then the solution of (13) converges towards 0. If $s_{max} < s_{in} < s_{max}^\#$, then it converges towards $x_{max} = s_{in} - s_{max} \leq x_*$. If $s_{max}^\# < s_{in}$, then it converges either towards $x_{max} \leq x_*$, either towards 0. Therefore for all $x_0 \geq x_*$, the solution attains x_* and therefore, there exists $t_{max}(x_0)$ such that $x(t_{max}(x_0), x_0, D_{max}) = x_*$.

We define now $t_*(x_0)$ by (14). The rest of the proof is the same as in Section (.1.1). \square

Remark 4 If $\mu(s_{in}) < D_{min}$, the washout is locally stable and there exist initial conditions (defined as $0 < x_0 < x_{min}^\#$) for which x converges towards 0. Notice however that it never happens if $D_{min} = 0$.

.2 BOCOP optimization parameters for results reported in section 2.6

Hereafter, we report BOCOP parameters for the 7 optimizations realized with BOCOP reported in Figures 2.5 and 2.6

1. Simulations of Figure 2.5, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 90$:
 - Discretization method : 4th order Runge-Kutta
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.85s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 010$
 - Total CPU in IPOPT : 0.323s
 - Total CPU in NLP : 0.477s
 - Nb of iterations : 31
2. Simulations of Figure 2.6, medium figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$:
 - Discretization method : 1st order Explicit Euler
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.57s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 012$
 - Total CPU in IPOPT : 0.29s
 - Total CPU in NLP : 0.223s
 - Nb of iterations : 40
3. Simulations of Figure 2.6, medium figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 40$:

- Discretization method : 1st order Explicit Euler
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.64s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 012$
 - Total CPU in IPOPT : 0.34s
 - Total CPU in NLP : 0.251s
 - Nb of iterations : 48
4. Simulations of Figure 2.6, medium figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 70$:
- Discretization method : 1st order Explicit Euler
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.37s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 012$
 - Total CPU in IPOPT : 0.207s
 - Total CPU in NLP : 0.138s
 - Nb of iterations : 37
5. Simulations of Figure 2.6, bottom figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$:
- Discretization method : 4th order Implicit Gauss
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.58s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 005$
 - Total CPU in IPOPT : 0.21s
 - Total CPU in NLP : 0.315s
 - Nb of iterations : 20
6. Simulations of Figure 2.6, bottom figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 40$:
- Discretization method : 1st order Explicit Euler
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.32s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 005$
 - Total CPU in IPOPT : 0.16s
 - Total CPU in NLP : 0.11s
 - Nb of iterations : 21
7. Simulations of Figure 2.6, bottom figures, Initial conditions $x_0 = 10$ and $s_0 = 70$:
- Discretization method : 1st order Explicit Euler
 - Discretization step : fix
 - Total simulation time : 0.37s
 - Desired convergence tolerance : $1.0000000000e - 005$
 - Total CPU in IPOPT : 0.18s
 - Total CPU in NLP : 0.12s
 - Nb of iterations : 23



Chapitre 3

Contrôle optimal d'un bioréacteur de digestion anaérobie

3.1 Résumé de la problématique et de l'approche mise en œuvre

Nous proposons dans le chapitre 3, la résolution du problème de contrôle défini précédemment dans les cas UDAC (Under Dimensioned Actuator Case) et ODAC (Over Dimensioned Actuator Case) en utilisant une approche hamiltonienne. Cette dernière consiste à représenter les trajectoires du système hamiltonien dans le plan, et de déduire par la suite, la solution optimale parmi toutes celles qui vérifient les conditions nécessaires d'optimalité données par le PMP (Principe du Maximum de Pontryagin) avec la condition de transversalité $p(T) = 0$. Autrement dit, il faut chercher les solutions qui vont de la droite verticale $x = x_0$ vers la droite horizontale $p = 0$ dans le temps $T - t_0$.

Contrairement au cas précédent, dans les cas UDAC et ODAC, l'optimum n'est pas atteint et le mieux que nous puissions faire est de s'en rapprocher.

L'élaboration de la loi de commande dans les cas UDAC et ODAC, est présentée dans l'article ci-après, intitulé : Optimal control of anaerobic digestion process soumis récemment dans le journal Automatica. Dans cet article, nous complétons d'abord l'étude menée dans le chapitre 2 (cas WDAC) par une analyse d'atteignabilité de l'arc singulier. Par la suite, nous reprenons la partie synthèse du contrôle dans les cas WDAC, UDAC et ODAC en utilisant le principe du maximum de Pontryagin.

Optimal control of the anaerobic digestion process

A. Ghouali^{a,d}, T. Sari^{b,e}, J. Harmand, ^{c,f,*}

^a Laboratoire d'Automatique, Université de Tlemcen, B.P 119 Tlemcen, Algérie

^b Irstea, UMR Itap, 361 rue Jean-François Breton, 34196 Montpellier France

^c INRA LBE , Avenue des Etangs, 11100 Narbonne, France

^d UMR INRA-SupAgro MISTEA, 2 P. Viala, 34060 Montpellier, France

^e LMIA, Université de Haute Alsace, Mulhouse, France

^f EPI INRA-INRIA MODEMIC, route des Lucioles, 06902 Sophia-Antipolis, France

* Corresponding author.

Abstract

This paper extends the results presented in [27] on the optimal control of anaerobic digesters in the case where the dilution rate (the control variable) allowing the maximization of the biogas at equilibrium is out of the actuator constraints. In a first part, we establish new results about the controllability of the singular arc of the optimal control when specific conditions on the initial conditions do not hold. Then, when the actuator is under (or over)-dimensioned (the maximum (resp. the minimum) value of the dilution rate is smaller (resp. larger) than that maximizing the biogas production at equilibrium), we show that the solution may be not trivial and we solve the problem for a specific class of initial conditions.

Keywords : optimal control, chemostat, bioreactor, biogas maximization, anaerobic digestion.

3.2 Introduction

Anaerobic digestion or methanization is a biological process in which organic compounds are transformed into carbon dioxide and methane (biogas) by micro organisms. The operation of such process poses however a number of practical problems since anaerobic digestion is a complex nonlinear system which is known to be unstable : an organic overload can destabilize the biological process and its restart needs long delays (over months). It is thus necessary to develop automatic systems to optimally manage such a process when dealing with disturbances or to optimize important steps as its operation during the starting period.

In the present work, we consider a single-step model for the anaerobic digestion process based on one biological reaction, where the organic substrate denoted by s is degraded into methane biogas (CH_4) by a bacterial population x . We assume that the methane flow rate, Q_{CH_4} , is proportional to the microbial activity as proposed in [4]. The mass balance model in the classical chemostat model which the dynamical equations are given by the following nonlinear system of ordinary differential equations :

$$\begin{cases} \dot{x} &= (\mu(s) - D)x \\ \dot{s} &= D(s_{in} - s) - \mu(s)x \end{cases} \quad (3.1)$$

while the methane production rate is modeled as :

$$Q_{CH_4} = \mu(s)x$$

x and s denote biomass and substrate concentrations, respectively, s_{in} is the concentration of the influent substrate s . $D \in [D_{min}, D_{max}]$ is the dilution rate which is considered hereafter as the control variable, μ is the specific growth rate of microorganisms.

In the present work, we consider the same single-step model for the anaerobic digestion process presented in chapter 2, based on one biological reaction, where the organic substrate denoted by s is degraded into methane biogas (CH_4) by a bacterial population x . We assume that the methane flow rate, Q_{CH_4} , is proportional to the microbial activity as proposed in [4]. We are interested in maximizing Q_{CH_4} over a given time period T under the constraints $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$ for a general class of kinetics. In other terms, we investigate the maximization of the functional $J(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot)) = \int_{t=0}^{t=T} \mu(s)x dt$. Actually, this general problem remains open. In [52], the problem of maximizing the biogas production over a given period of time has been investigated considering different possible disturbances (presence of an inhibitor or over/under-loads). The singular arcs were calculated using the Maximum Principle of Pontryagin. It was proved that $x = x_*$, where x_* is the maximum of the function $x \mapsto x\mu(s_{in} - x)$, is not a singular arc in the general case. However, the optimal control synthesis was not given explicitly and no controllability analysis was performed. Considering a limited class of initial conditions, *i.e.* $s_0 + x_0 = s_{in}$, we established in [27] that when the dilution rate allowing to attain the maximum gas flow rate at equilibrium $D_* = \mu(s_{in} - x_*)$ is between the minimum value D_{min} and maximum value D_{max} , the optimal control consists in going towards the corresponding equilibrium point x_* , as fast as possible, using either D_{min} or D_{max} (depending on the position of x_0 with respect to x_*) and, if the equilibrium x_* is attained, then to switch to D_* , which maintains the solution at x_* . Because of the hypothesis $D_{min} \leq D_* \leq D_{max}$, this case was named ‘well-dimensioned-actuator-case’ or WDAC.

In the present paper, we extend the results proposed in [27] with two considerations. First, a controllability study of the singular arc is proposed : we study the possibility to stay on it when the hypothesis $x_0 + s_0 = s_{in}$ does not hold. Second, assuming this hypothesis holds, we solve the optimization problem in two particular cases called the ‘under- (resp. over)-dimensioned-actuator-case’, or UDAC (resp. ODAC), in which D_* verifies $D_{max} \leq D_*$ (resp. $D_* \leq D_{min}$).

In the next section, the main results established in [27] are recalled. Then, the controllability of the singular arc is studied and results are illustrated with simulations. Then, the ‘under-’ and ‘over-dimensioned-actuator-case’ are presented before conclusions and perspectives are drawn.

3.3 Model description and control problem

3.3.1 Hypotheses

In the sequel, we will consider the following kinetic μ , satisfying the very general property :

Hypothesis 5. *The function $\mu(s)$ has a continuous derivative and is such that $\mu(0) = 0$ and $\mu(s) > 0$ for all $s > 0$. Moreover, it is either increasing or there exists \bar{s} such that $\mu(s)$ is increasing for $0 < s < \bar{s}$ and decreasing for $s > \bar{s}$.*

The Monod growth function and Haldane Growth function

$$\mu(S) = \frac{mS}{K + S}, \quad \mu(S) = \frac{mS}{K + S + S^2/K_i}$$

satisfy this hypothesis since the first is increasing and the second is increasing for $0 < s < \bar{s} = \sqrt{KK_i}$ and decreasing for $s > \bar{s}$, that's why from now and in the rest of the manuscript, we will use “Monod type” to denote a growth function which is increasing and of “Haldane type” to denote a growth function which is increasing and then decreasing.

As explained in [27], we seek to maximize the biogas production over a given time interval. The total methane production over the interval $[0, T]$ can be expressed as :

$$J(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \mu(s(t))x(t)dt \quad (3.2)$$

where $(x(\cdot), s(\cdot), D(\cdot))$ satisfy (3.1) under the constraint $D(\cdot) \in [D_{min}, D_{max}]$.

Recall the main results obtained by [27] were obtained if the following hypothesis holds.

Hypothesis 6. *The initial conditions of system (3.1) lie on the line $x_0 + s_0 = s_{in}$.*

Notice that under Hypothesis 6, $x(t) + s(t) = x_0 + s_0 = s_{in}$ holds for all positive t . Thus, the two dimensional optimization problem (3.1-3.2), is reduced to the following one dimensional optimization problem :

$$\dot{x} = \gamma(x) - Dx, \quad x(0) = x_0 \quad (3.3)$$

$$J(x(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \gamma(x(t))dt \quad (3.4)$$

with $\gamma(x) = x\mu(s_{in} - x)$.

This optimization problem is equivalent to the following one dimensional optimization problem :

$$\dot{s} = D(s_{in} - s) - \gamma(s_{in} - s), \quad s(0) = s_0 \quad (3.5)$$

$$J(s(\cdot), D(\cdot)) = \int_0^T \gamma(s_{in} - s(t)) dt \quad (3.6)$$

In the following section we will recall how to solve one of the equivalent optimization problems (3.3-3.4) or (3.5-3.6).

The function $\gamma(x)$ satisfies obviously the properties $\gamma(0) = \gamma(s_{in}) = 0$ and $\gamma(x) > 0$ for $0 < x < s_{in}$. Therefore it must reach a maximal value on the interval $[0, s_{in}]$. We assume that it has a unique maximum on this interval.

Hypothesis 7. *There exists $x_* \in]0, s_{in}[$ such that $\gamma'(x_*) = 0$, $\gamma'(x) > 0$ for all $x \in [0, x_*)$ and $\gamma'(x) < 0$ for all $x \in (x_*, s_{in}]$.*

Remark 1 Both Monod and Haldane functions verify Hypothesis 7. For instance, for the Haldane function, straightforward computations show that

$$\gamma'(x) = m \frac{(1 + s_{in}/K_i) x^2 + (K + s_{in} + s_{in}^2/K_i) (s_{in} - 2x)}{(K + s_{in} - x + (s_{in} - x)^2/K_i)^2}$$

Therefore $\gamma'(0) = \frac{ms_{in}}{K+s_{in}+s_{in}^2/K_i} > 0$, $\gamma'(s_{in}) = -\frac{ms_{in}}{K} < 0$ and $\gamma'(x) = 0$ has a unique solution x_* on the interval $(0, s_{in})$. We have

$$x_* = K \frac{K_i}{K_i + S_{in}} + S_{in} - \sqrt{K^2 \frac{K_i^2}{(K_i + S_{in})^2} + K S_{in} \frac{K_i}{K_i + S_{in}}}$$

Similarly, for the Monod function, straightforward computations show that

$$\gamma'(x) = m \frac{x^2 + (K + s_{in}) (s_{in} - 2x)}{(K + s_{in} - x)^2}$$

Therefore $\gamma'(0) = \frac{ms_{in}}{K+s_{in}} > 0$, $\gamma'(s_{in}) = -\frac{ms_{in}}{K} < 0$ and $\gamma'(x) = 0$ has a unique solution x_* on the interval $(0, s_{in})$. We have

$$x_* = K + S_{in} - \sqrt{K^2 + K S_{in}}$$

It should be noticed that the formulas for the Monod function can be derived from the formulas for the Haldane function by letting $K_i = \infty$.

	s_{in}	D_{min}	D_{max}	x_*	s_*	D_*
Fig. 3.1a (WDAC)	80	1	2.6	65.89	14.11	2.51
Fig. 3.1b (WDAC)	80	1	3	65.89	14.11	2.51
Fig. 3.1c (UDAC)	80	1	2.3	65.89	14.11	2.51
Fig. 3.1c (ODAC)	35	2.4	3	9.63	25.37	2.24

TABLE 3.1 – Parameter values for Figs. 3.1 and Fig. 3.2 : $m = 5$, $K = 10$, $K_i = 50$.

Finally, to completely define our problem, we introduce the following hypotheses on the control parameter D_{min} :

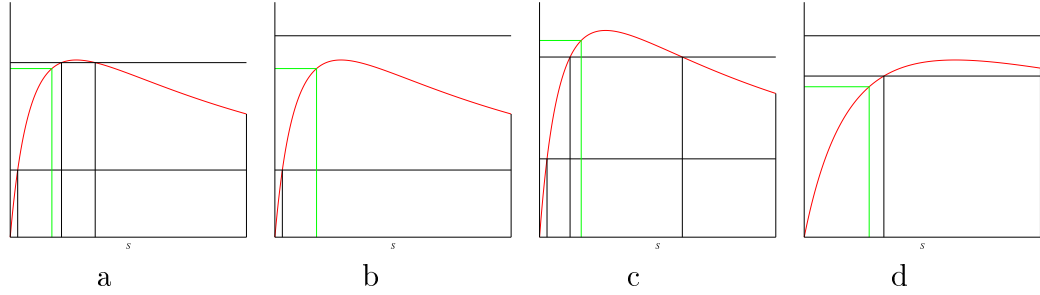


FIGURE 3.1 – Plots of the functions $y = \mu(S)$, $y = D_{min}$ and $y = D_{max}$, corresponding to the various cases depicted in Table 3.1. The green lines correspond to $s_* = s_{in} - x_*$, $D_* = \mu(s_*)$.

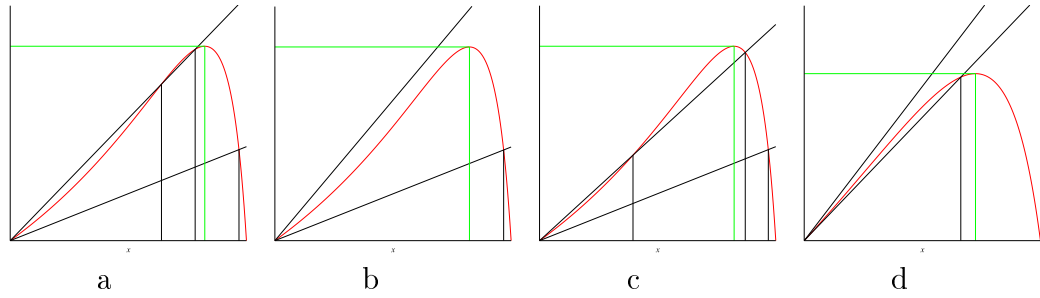


FIGURE 3.2 – Plots of the functions $y = \gamma(x)$, $y = D_{min}x$ and $y = D_{max}x$, corresponding to the various cases depicted in Fig. 3.1. The green lines correspond to x_* , $\gamma(x_*)$.

Hypothesis 8. We assume that $\mu(s_{in}) > D_{min}$.

This last hypothesis is used to avoid the situation where the only attractive equilibrium would be the washout. Notice that this case has no interest in practice.

Various situations can be distinguished : among them, those depicted in Fig. 3.1 correspond to the WDAC (panel a), the UDAC (panel b) and the ODAC (panel c), respectively. The corresponding functions $\gamma(x)$ are shown in Fig. 3.2.

Remark 3 Notice that Hypothesis 5 does not imply Hypothesis 7. For instance, for the increasing growth function

$$\mu(s) = \frac{ms}{K+s} \frac{1+2s^n}{1+s^n} \quad (3.7)$$

the function $\gamma(x) = x\mu(s_{in} - x)$ can exhibit two maximal values on the interval $[0, s_{in}]$, as shown on Figure 3.3.

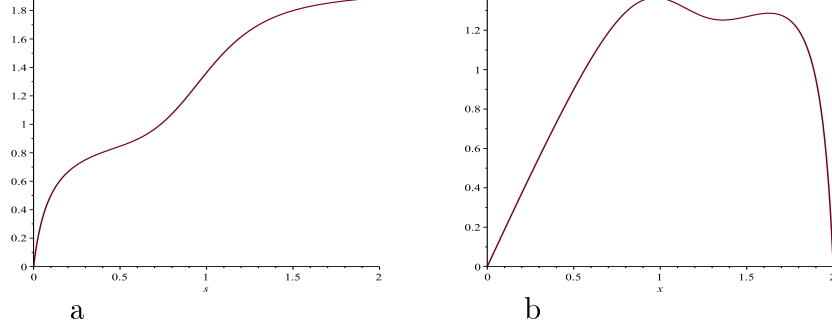


FIGURE 3.3 – For the parameters values $m = 1$, $K = 0.1$, $n = 6$ and $s_{in} = 2$ the function $\gamma(x) = x\mu(s_{in} - x)$, see panel b, corresponding to the increasing growth function (3.7), see panel a, exhibits two maximal values on the interval $[0, s_{in}]$.

3.3.2 The Well-Dimensioned-Actuator-Case (WDAC)

We first recall the following main results established in [27] where it was assumed that $0 \leq D_{min} \leq D_* \leq D_{max}$ where $D_* = \mu(s_{in} - x_*)$.

Proposition 3. *Assuming x is measured, the optimal control of (3.3-3.4) is given by :*

$$D(t, x(t)) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } x(t) < x_* \\ D_{max} & \text{if } x(t) > x_* \\ D_* & \text{if } x(t) = x_* \end{cases} \quad (3.8)$$

where $D_* = \mu(s_{in} - x_*)$ is the singular control which keeps $x(t)$ at x_* . Assuming s is measured, the optimal control of (3.5-3.6) is given by :

$$D(t, s(t)) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } s(t) > s_* \\ D_{max} & \text{if } s(t) < s_* \\ D_* & \text{if } s(t) = s_* \end{cases} \quad (3.9)$$

where $s_* = s_{in} - x_*$ and $D_* = \mu(s_*)$ is the singular control which keeps $s(t)$ at s_* .

The result was given and proved in [27] (see Proposition 1 and equation (9) in this paper).

Remark 4 In the Appendix of the present paper, we give a new proof of this result by using the Pontryagin Maximum Principle (PMP). We give this new proof since the application of the PMP to the WDAC, for which the optimal strategy design is quite intuitive and was first established in [27] using classical inequalities arguments, will help us to understand the more intricate UDAC and ODAC, whose optimal strategies can be obtained only by a careful application of the PMP.

The optimal strategy of Proposition 3 consists in going towards x_* (resp. s_*). According to the position of $x(t)$ with respect to x_* (resp. $s(t)$ with respect to s_*), the digester operates either at its minimum ($D = D_{min}$) or at its maximum capacity ($D = D_{max}$) until x (resp.

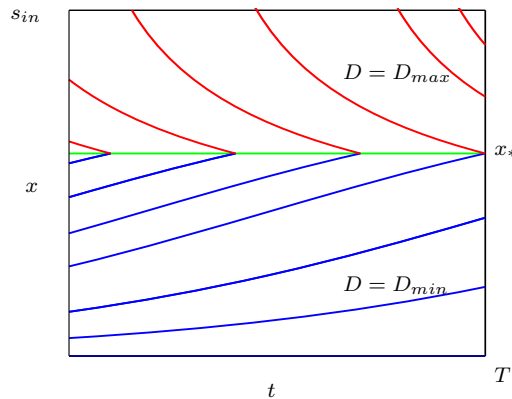


FIGURE 3.4 – The optimal synthesis in the WDAC.

s) eventually reaches the singular arc x_* (resp. s_*) and then staying on it, using the singular control D_* , see Fig 3.4. This is possible if and only if $D_{min} \leq D_* \leq D_{max}$.

In the case where Hypothesis 6 does not hold, a numerical investigation was realized using the software BOCOP. In the next section we will consider the following problem : what happens if the optimal strategy (3.8) or (3.9) is used for the original optimization problem (3.1-3.2) ?

3.4 Admissibility of the singular arc (WDAC)

In this section Hypothesis 6 is not verified, that is $s_0 + x_0 = s_{in}$ does not hold. We use the optimal strategy of Proposition 3. Assuming first that $x(t)$ is measured, we use the control (3.8). Therefore $D = D_{min}$ or $D = D_{max}$ leads the state $(s(t), x(t))$ towards the singular arc $x = x_*$. We must study the admissibility of this singular arc $x = x_*$, and determine whether it is possible to stay on it. We must determine which control allows us to stay on the lines $x = x_*$. More precisely,

$$x = x_* \Rightarrow 0 = \dot{x}_* = (\mu(s) - D)x \Rightarrow D = \mu(s)$$

must hold.

Therefore, when $x(t)$ is measured, the control (3.8) applied to (3.1-3.2) becomes :

$$D(t) = \begin{cases} D_{max} & \text{if } x(t) > x_* \\ \mu(s(t)) & \text{if } x(t) = x_* \\ D_{min} & \text{if } x(t) < x_* \end{cases} \quad (3.10)$$

This control allows one to attain $x = x_*$ and to stay on it as long as the initial conditions are in the admissible region of the singular arc $x = x_*$. Indeed, to know if $x = x_*$ can be attained from an initial condition which does not satisfy $s_0 + x_0 = s_{in}$, one must determine the admissible region of $x = x_*$, that is the set of initial conditions from which we can attain the singular arc while $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$. One has :

$$D_{min} \leq \mu(s) \leq D_{max} \quad (3.11)$$

3.4. Admissibility of the singular arc (WDAC)

For the Monod function $\mu(s) = \frac{ms}{K+s}$, and $D_{min} = 0$ this condition is equivalent to $0 \leq s \leq \lambda_{max}$, where $\mu(\lambda_{max}) = D_{max}$, see Figure 3.5. In this figure the blue curves are orbits corresponding to $D_{min} = 0$ and the red curve is the orbit through (λ_{max}, x_*) corresponding to D_{max} .

Assume that $x_0 < x_*$. If the initial condition is not between the blue orbits then, with $D = D_{min}$, the trajectory does not attain $x = x_*$ or it attains $x = x_*$ with $s > \lambda_{max}$.

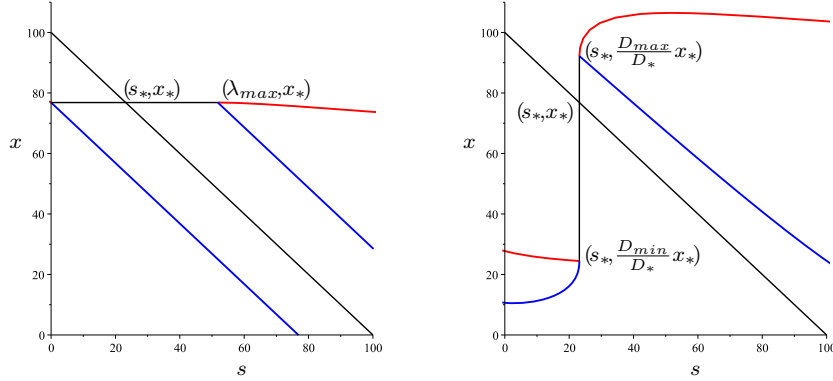


FIGURE 3.5 – Admissibility regions of the singular arcs $x = x_*$ and $s = s_*$.

Similarly, assuming that $s(t)$ is measured, we use the control (3.9). Therefore $D = D_{min}$ or $D = D_{max}$ leads the state $(s(t), x(t))$ towards the singular arc $s = s_*$. We must study the admissibility of this singular arc $s = s_*$, and determine whether it is possible to stay on it. We must determine which control allows us to stay on the lines $s = s_*$. We have :

$$s = s_* \Rightarrow 0 = \dot{s}_* = D(s_{in} - s_*) - \mu(s_*)x \Rightarrow D = \frac{\mu(s_*)}{s_{in} - s_*}x = \frac{D_*}{x_*}x$$

must hold to stay on the singular arc $s = s_*$. Therefore, when $s(t)$ is measured, the control (3.9) applied to (3.1-3.2) becomes :

$$D(t) = \begin{cases} D_{max} & \text{if } s(t) < s_* \\ \frac{D_*}{x_*}x(t) & \text{if } s(t) = s_* \\ D_{min} & \text{if } s(t) > s_* \end{cases} \quad (3.12)$$

To know if $s = s_*$ can be attained from an initial condition which does not satisfy $s_0 + x_0 = s_{in}$, one must determine the admissible region of $s = s_*$, that is the set of initial conditions from which we can attain the singular arc while $D_{min} \leq D(t) \leq D_{max}$. One has :

$$D_{min} \leq \frac{D_*}{x_*}x(t) \leq D_{max} \iff \frac{D_{min}}{D_*}x_* \leq x(t) \leq \frac{D_{max}}{D_*}x_* \quad (3.13)$$

This control allows one to attain $s = s_*$ and to stay on it as long as the initial conditions are in the admissible region (3.13), cf. Figure 3.5. In this figure the blue curves are orbits corresponding to D_{min} and the red curves are orbits corresponding to D_{max} .

To illustrate these results, let us consider that we measure $s(t)$. The simulation of the control (3.12) leads to two important problems. The first one is that $x(t)$ is not measured, so that, the singular control $\frac{D_*}{x_*}x(t)$ which maintains $s(t) = s_*$ cannot be implemented. The second problem arises from the bang-bang character of the control which produces chattering. In practice, both problems can be circumvented using regularization techniques. The regularization consists in replacing the control (3.12) by the following regularized control :

$$D_{reg}(t) = \begin{cases} D_* + \frac{D_{max}}{\epsilon_1} (s(t) - s_*) & \text{if } s(t) \leq s_* - \epsilon_2 \\ D_* + \frac{D_{min} - D_*}{\epsilon_1} (s(t) - s_*) & \text{if } s_* - \epsilon_2 < s(t) < s_* + \epsilon_1 \\ D_{min} & \text{if } s(t) \geq s_* + \epsilon_1 \end{cases} \quad (3.14)$$

where $\epsilon_1 > 0$ and $\epsilon_2 = \frac{D_{max} - D_*}{D_* - D_{min}} \epsilon_1$. The regularization (3.14) of the control is used as proposed in [27] to avoid chattering.

Consider two sets of initial conditions out of the admissibility region : $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$ on the first hand and $x_0 = 80$ and $s_0 = 80$ on the other hand. The model parameters are given by $m = 4.5$, $K = 10$ and $s_{in} = 100$. Constraints on the actuator are given by $D_{max} = 1.2D_*$ and $D_{min} = 1$. We simulate the control (3.14) with $\epsilon_1 = 1$, which yields $\epsilon_2 = 0.2934$, until $t = T = 2$. The simulation results are reported in figures 3.6.

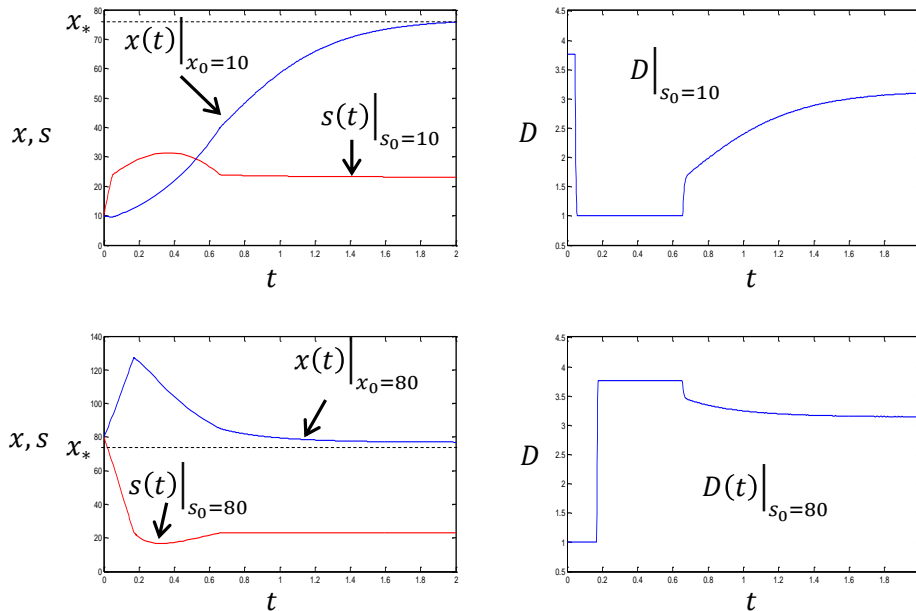


FIGURE 3.6 – Top left, $s(t)$ and $x(t)$ for $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$, top right, the corresponding control. Bottom left and right, the same plot but for $x_0 = 80$ and $s_0 = 80$ respectively.

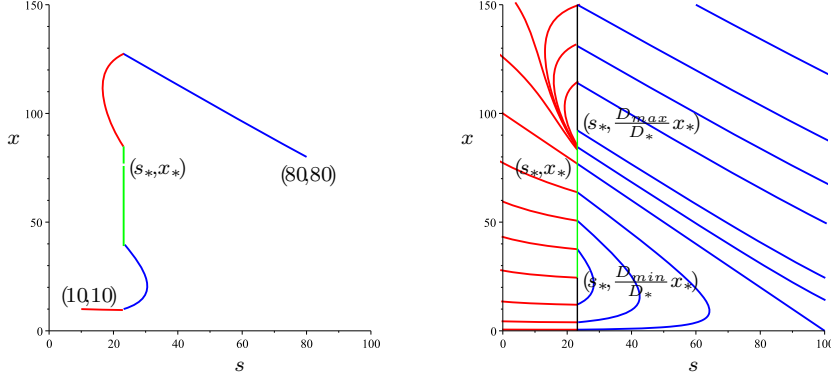


FIGURE 3.7 – On the right, the dynamics of the closed-loop system : Trajectories with $D = D_{max}$ are plotted in red, those with $D = D_{min}$ in blue, the admissible part of the singular arc in green and its non admissible part in black. On the left the trajectories corresponding to the initial conditions $(s_0, x_0) = (10, 10)$ and $(s_0, x_0) = (80, 80)$.

On both figures, we notice that the optimal signals are not D_{max} and then D_{sing} (or D_{min} and then D_{sing}), where

$$D_{sing}(t) = \frac{D_*}{x_*} x(t)$$

is the singular control (3.12) that maintains the solution on the singular arc $s = s_{in}$, as planned by the proposition 3, but rather D_{max} then D_{min} then D_{sing} in the case $x_0 = 10$ and $s_0 = 10$ (or D_{max} then D_{min} then D_{sing} in the case $x_0 = 80$ and $s_0 = 80$). More precisely on both figures for $t > 0.7$, what is shown is the regularized control (3.14)

$$D_{reg}(t) = D_* + \frac{D_{min} - D_*}{\epsilon_1} (s(t) - s_*)$$

that maintains the solution on the vicinity of singular arc $s_{in} - \epsilon_2 < s < s_{in} + \epsilon_1$. This is exactly what is planned by the above admissibility analysis : in both cases, since hypothesis 6 is far from being satisfied, the optimal solution thus begins by D_{max} (resp. D_{min}) until s_* is reached. However, $s(t)$ attains s_* at a point of the state space which does not belong to the admissible part of the singular arc. It is thus necessary to switch to the other extreme control D_{min} (resp. D_{max}) before coming back to s_* and finally switch to D_{sing} which tends towards D_* . To better understand this admissibility problem for other initial conditions, we have represented in Figure 3.7 what happens to the closed-loop system when the optimal strategy of proposition 3 is applied while hypothesis 6 is not satisfied. In particular, we find in this figure the strategies simulated in the plots of Figure 3.6 for $\{x_0, s_0\} = \{10, 10\}$ and $\{x_0, s_0\} = \{80, 80\}$. More precisely, on Figure 3.7, for $(s_0, x_0) = (10, 10)$ [resp. for $(s_0, x_0) = (80, 80)$], we see the transition D_{max} then D_{min} [resp. D_{min} then D_{max}], then D_{sing} , which corresponds to the transition D_{max} then D_{min} [resp. D_{min} then D_{max}], then D_{reg} shown on Figure 3.6.

3.5 The Under Dimensioned Actuator Case (UDAC)

In the UDAC, the solution to the optimal time control problem is given by the following proposition :

Proposition 4. Assume $D_{max} \leq D_*$. Then the optimal control of (3.3-3.4) is given by :

$$D(t, x) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } t > \tau_c(x) \\ D_{max} & \text{if } t < \tau_c(x) \end{cases}$$

where the commutation curve $\tau_c(x)$ is defined by

$$\tau_c(x) = T - \int_x^{x_{\#}} \frac{d\xi}{\gamma(\xi) - D_{max}\xi}. \quad (3.15)$$

In this integral, $x_{\#}$ is uniquely defined by equations

$$x < x_* < x_{\#}, \quad \gamma(x_{\#}) = \gamma(x) \quad (3.16)$$

The proof, which uses the Pontryagin Maximum Principle, is given in the Appendix.

It should be noticed that $\tau_c(x_*) = T$ and that $T - \tau_c(x)$ defines the area under the graph of the function $\frac{1}{\gamma(x) - D_{max}x}$, delimited by the vertical lines x and $x_{\#}$, see Figure 3.8.

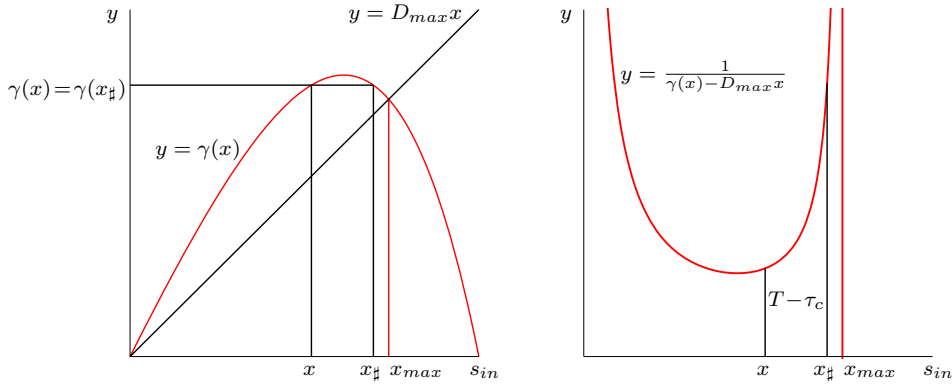


FIGURE 3.8 – The graphical definitions of $x_{\#} = x_{\#}(x)$ and $\tau_c = \tau_c(x)$.

In such a case, according to the position of the state point $(t, x(t))$ with respect to the commutation curve $t = \tau_c(x)$, the digester operates either at its minimum ($D = D_{min}$) or at its maximum capacity ($D = D_{max}$). Notice that the solutions corresponding to $D = D_{max}$ converge towards x_{max} which is defined by $\mu(s_{in} - x_{max}) = D_{max}$. Since $D_{max} \leq D_*$, one has $x_* \leq x_{max} \leq s_{in}$. Notice that the optimal point x_* is not reached as in the WDAC. Furthermore, in this case, the optimal strategy consists in keeping $x(t)$ as close as possible to x_* (see Figure 3.9).

For the Monod function one has the following expressions for $x_{\#}$ and $\gamma(x)$

$$x_{\#} = \frac{(K + s_{in})(s_{in} - x)}{K + s_{in} - x}$$

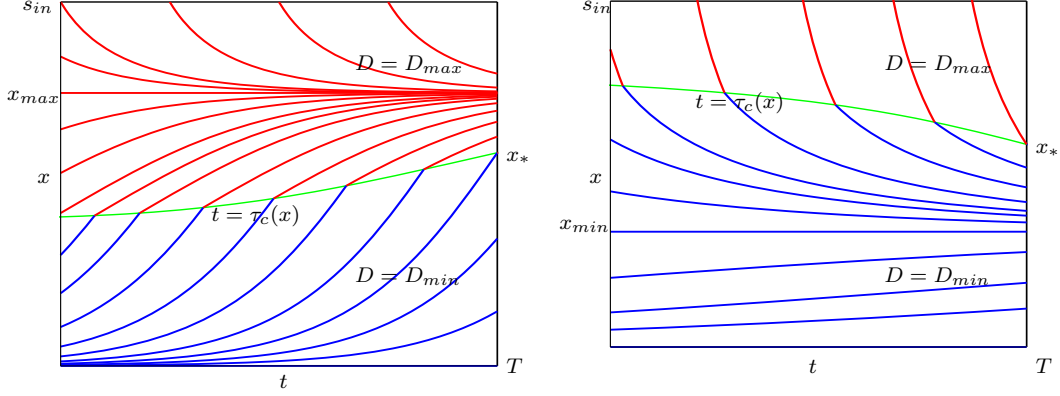


FIGURE 3.9 – The optimal synthesis in the UDAC (on the left) and ODAC (on the right).

$$\gamma(x) = \frac{mx(s_{in} - x)}{K + s_{in} - x}$$

For the Haldane function one has the following expressions for x_{\sharp} and $\gamma(x)$

$$x_{\sharp} = \frac{(K + s_{in} + s_{in}^2/K_i)(s_{in} - x)}{K + s_{in} - x + s_{in}(s_{in} - x)/K_i}$$

$$\gamma(x) = \frac{mx(s_{in} - x)}{K + s_{in} - x + (s_{in} - x)^2/K_i}$$

In both cases, $\frac{1}{\gamma(x) - D_{max}x}$ is a rational function whose integral can be computed explicitly. Hence the commuting function $t = \tau_c(x)$ is explicitly known.

3.6 The Over Dimensioned Actuator Case (ODAC)

Similarly, in the ODAC, the solution to the optimal time control problem is given by the following proposition :

Proposition 5. Assume $D_{min} \geq D_*$. Then the optimal control of (3.3-3.4) is given by :

$$D(t, x) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } t < \tau_c(x) \\ D_{max} & \text{if } t > \tau_c(x) \end{cases}$$

where the commutation curve $\tau_c(x)$ is defined by

$$\tau_c(x) = T - \int_{x_b}^x \frac{d\xi}{\gamma(\xi) - D_{min}\xi}. \quad (3.17)$$

In this integral, x_b is uniquely defined by equations

$$x_b < x_* < x, \quad \gamma(x_b) = \gamma(x) \quad (3.18)$$

In such a case, according to the position of the state point $(t, x(t))$ with respect to the commutation curve $t = \tau_c(x)$, the digester operates either at its minimum ($D = D_{min}$) or at its maximum capacity ($D = D_{max}$). Notice that the solutions corresponding to $D = D_{min}$ converge towards x_{min} which is defined by $\mu(s_{in} - x_{min}) = D_{min}$. Since $D_{min} \geq D_*$, one has $x_* \geq x_{min} > 0$. Notice that the optimal point x_* is not reached as in WDAC. Furthermore, in this case, the optimal strategy consists in keeping $x(t)$ as close as possible to x_* (see Figure 3.9).

3.7 Conclusions and perspectives

In this work, we have extended the results initially proposed in [27] about the maximization of the output gas flow rate over a given period of time from an initial condition verifying $x_0 + s_0 = s_{in}$ for the classical chemostat model. The class of kinetics considered was quite general and included both Monod and Haldane. Depending on the constraints on the actuator, different levels of difficulties were pointed out and extensions, denoted by the UDAC and the ODAC, respectively, with respect to the results presented in [27], were solved. Perspectives of this work include the generalization of the results in the case where the condition $x_0 + s_0 = s_{in}$ does not hold, which, actually, remains an open problem.

Appendices

.1 Pontryagin Maximum Principle

In this section we apply the Pontryagin Maximum Principle (PMP) to the optimization problem (3.3-3.4) and we give the proofs of Propositions 3, 4 and 5. We use the change of control variable

$$u = \frac{D - D_{min}}{D_{max} - D_{min}}$$

The optimization problem (3.3-3.4) becomes

$$\dot{x} = g(x) - u\alpha x, \quad x(0) = x_0, \quad 0 \leq x_0 \leq s_{in} \quad (19)$$

$$J(x(\cdot), u(\cdot)) = \int_0^T \gamma(x(t, u(\cdot))) dt \quad (20)$$

where $\alpha = D_{max} - D_{min} > 0$, $g(x) = \gamma(x) - D_{min}x$, the control $u(\cdot)$ satisfies $0 \leq u(\cdot) \leq 1$, and $x(t, u(\cdot))$ is the corresponding solution.

We introduce the Hamiltonian associated to (19) and cost functional (20) :

$$\mathcal{H}(x, p, u) = p[g(x) - u\alpha x] + \gamma(x) = (pg(x) + \gamma(x)) - p\alpha x u. \quad (21)$$

where p is called the adjoin variable.

By Pontryagin's maximum principle [54], any maximum of the cost functional attained at some $(x^*(t), p^*(t), u^*(t))$ must maximize the hamiltonian $\mathcal{H}(x, p, u)$ with respect to u ,

$$\mathcal{H}(x^*(t), p^*(t), u^*(t)) \geq \mathcal{H}(x^*(t), p^*(t), u)$$

for all $u \in [0, 1]$, and must solve the Hamiltonian system

$$\begin{cases} \dot{x} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(x, p) \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x}(x, p) \end{cases} \quad (22)$$

with boundary and transversality conditions

$$x(0) = x_0, \quad p(T) = 0 \quad (23)$$

where the Hamiltonian $H(p, x)$ is given by

$$H(p, x) = \max_{0 \leq u \leq 1} \mathcal{H}(x, p, u)$$

Since \mathcal{H} is linear in the control variable u , it follows from (21) that

$$H(p, x) = \begin{cases} \mathcal{H}(x, p, 0) = (p+1)\gamma(x) - D_{min}px & \text{if } p > 0 \\ \mathcal{H}(x, p, 1) = (p+1)\gamma(x) - D_{max}px & \text{if } p < 0 \end{cases} \quad (24)$$

Therefore

$$D^*(t) = \begin{cases} D_{min} & \text{if } p > 0 \\ D_{max} & \text{if } p < 0 \end{cases} \quad (25)$$

Hence, if $(x^*(t), u^*(t))$ is an optimal solution of (19,20), there exists $p^*(t)$ such that $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24). Therefore, we must find the solutions of the Hamiltonian system (22,24) that are starting at time 0 on the vertical line $x = x_0$ and are reaching the horizontal strait line $p = 0$ at time T .

The set of points

$$\mathcal{S} = \{(x, p) : p = 0\}$$

is called the switching curve of the Hamiltonian system. The transversality condition $p^*(T) = 0$ shows that the optimal solution attains the switching curve \mathcal{S} at $t = T$. The question remains what values $p^*(t)$ takes for other t -values in the control interval $[0, T]$. In other words will the state $(x^*(t), p^*(t))$ of the Hamiltonian system ever cross, or remain on the switching curve \mathcal{S} . If the state remains on \mathcal{S} then the value of $u^*(t)$ (or, equivalently, $D^*(t)$ is not determined by (25). The control is said to be *singular* if this happens and a more detailed analysis is required to determine $u^*(t)$. This phenomenon is studied in the following lemma.

Lemma 6. *If $(x^*(t), p^*(t), u^*(t))$ is an optimal solution of (22,23,24) then $p^*(t)$ belongs to the switching curve $p = 0$ in some subinterval of $[0, T]$, that is to say the control is singular, if and only if $x^*(t) = x_*$, and hence $D^*(t) = D_*$, on this subinterval.*

Proof. It follows from the second equation in (22,24)

$$\dot{p} = -(p + 1)\gamma'(x) + Dp$$

that

$$p^*(t) = 0 \implies \frac{dp^*}{dt}(t) = \gamma'(x^*(t)) = 0 \implies x^*(t) = x_*$$

The value of the optimal control, $D^*(t) = D_*$, follows from the first equation in (22,24)

$$\dot{x} = \gamma(x) - Dx$$

Actually

$$x^*(t) = x_* \implies \frac{dx^*}{dt}(t) = \gamma(x_*) - D^*(t)x_* = 0 \implies D^*(t) = D_*$$

□

We must study the behaviour of discontinuous right hand side Hamiltonian system (22,24). To have a better understanding of what can happen we begin by the study of the smooth Hamiltonian system (22) with Hamiltonian

$$H(p, x) = (p + 1)\gamma(x) - Dpx$$

where D is fixed ($D = D_{min}$ or $D = D_{max}$), that is :

$$\begin{cases} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p}(x, p) = \gamma(x) - Dx \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x}(x, p) = -(p + 1)\gamma'(x) + Dp \end{cases} \quad (26)$$

Notice that the trajectories of (22,24) is obtained by taking the trajectories of (26), with $D = D_{min}$ in the half plane $p > 0$ and the trajectories of (26), with $D = D_{max}$ in the half plane $p < 0$.

The equilibria of (26) are given by the solutions of equations

$$\begin{cases} 0 = \gamma(x) - Dx \\ 0 = -(p+1)\gamma'(x) + Dp \end{cases}$$

Hence, we must solve equation

$$\gamma(x) = Dx \quad \text{with} \quad 0 \leq x \leq s_{in} \quad (27)$$

This equation has always $x = 0$ as a solution and may have or not other solutions.

Lemma 7. *If $\mu(s)$ is of Monod type then (27) has at most one positive solutions. If $\mu(s)$ is of Haldane type then (27) can have at most two positive solutions x_1 and x_2 . These solutions satisfy $x_* > x_1 > x_2$ if $D > D_*$ and $x_1 > x_* > x_2$ if $D < D_*$, respectively.*

Proof. If $\mu(s)$ is of Monod type then (27) has no positive solution if $D > \mu(s_{in})$ and one positive solution if $D \leq \mu(s_{in})$. For the case of a Haldane type function, we first notice that from Hypotheses 5 and 7 we deduce that $0 < s_* < \bar{s}$. Actually, since

$$\gamma'(x) = \mu(s_{in} - x) - x\mu'(s_{in} - x),$$

from $\gamma'(x_*) = 0$ we deduce $\mu(s_{in} - x_*) = x_*\mu'(s_{in} - x_*)$ and hence $\mu'(s_*) > 0$. That is to say $0 < s_* < \bar{s}$. Therefore, equations $\mu(s) = D$ can have at most two solutions s_1 and s_2 which satisfy $s_* < s_1 < \bar{s} < s_2$, if $D > D_*$, and $s_1 < s_* < \bar{s} < s_2$, if $D < D_*$. Hence (27) will have at most two solutions x_1 and x_2 such that $x_* > x_1 > x_2$, if $D > D_*$, and $x_1 > x_* > x_2$ if $D < D_*$. \square

Lemma 8. *The Hamiltonian system (26) admits the boundary equilibrium $E_0 = (0, p_0)$ where $p_0 = \frac{\gamma'(0)}{D - \gamma'(0)}$. This equilibrium is a saddle point whose separatrices are given by equations $(p+1)\gamma(x) - Dpx = 0$. The particular solution $x = 0$ of this equation is the unstable separatrix of E_0 .*

If (27) has no positive solution, then (26) has no other equilibrium point. If (27) has a positive solution, which is denoted by x_D , then (26) has one interior equilibrium $E_D = (x_D, p_D)$, where $p_D = \frac{\gamma'(x_D)}{D - \gamma'(x_D)}$. This equilibrium is a saddle point whose separatrices are given by equation $(p+1)\gamma(x) - Dpx = Dx_D$. The particular solution $x = x_D$ of this equation is the unstable separatrix of E_D .

Proof. If $x_D \in [0, s_{in}]$ is a solution of (27), then $E_D = (x_D, p_D)$ is an equilibrium if and only if $0 = -(p_D + 1)\gamma'(x_D) + Dp_D$ that is to say $p_D = \frac{\gamma'(x_D)}{D - \gamma'(x_D)}$. The nature of the equilibrium follows from the examination of the Jacobian matrix. Since the eigenvalues are $\gamma'(x_D) - D$ and $D - \gamma'(x_D)$, they are real and of opposite sign, so that the equilibrium E_D is a saddle point.

The vertical line $x = x_D$ is the unstable separatrix of E_D . The stable one is obtained by solving the Hamiltonian equation

$$H(p, x) = H(p_D, x_D)$$

which reduces to $(p+1)\gamma(x) - Dpx = Dx_D$. Notice that $x = x_D$ satisfies also this equation. \square

The isocline $\dot{x} = 0$ of (26) is given by $x = 0$ or $x = x_D$, where x_D is a positive solution, if it exists, of (27). The isocline $\dot{p} = 0$ of (26) is given by

$$p = \frac{\gamma'(x)}{D - \gamma'(x)}$$

The isoclines $\dot{x} = 0$ and $\dot{p} = 0$ intersect at the saddle points E_0 and E_D (if this equilibrium exists, that is if (27) has a positive solution). The separatrices of E_0 and E_D are the orbits of equations $H(p, x) = 0$ and $H(p, x) = Dx_D$ respectively. As noticed before these equations have as particular solutions the vertical lines $x = 0$ or $x = x_D$, which are the unstable separatrices of E_0 and E_D respectively.

Lemma 9. *Except the vertical lines $x = 0$ or $x = x_D$, where x_D is a positive solution, if it exists, of (27), which are orbits of (26), all other orbits of (26) are the graphs of the functions $p = \frac{h - \gamma(x)}{\gamma(x) - Dx}$, where h is a constant.*

Proof. Since the Hamiltonian $H(p, x)$ is constant along an orbit, all orbits are given by equation

$$H(p, x) = (p+1)\gamma(x) - Dpx = h$$

where h is a constant. Therefore, the orbit is the graph of equation $p = \frac{h - \gamma(x)}{\gamma(x) - Dx}$. \square

Besides the separatrices of E_0 and E_D , which are obtained with $h = 0$ and $h = Dx_D$ respectively (these orbits are plotted in blue on Fig. 10), the orbit of point $(x_*, 0)$, whose equation is

$$H(p, x) = h, \quad h = H(0, x_*) = \gamma(x_*)$$

will play an important role in the solution of the Hamiltonian system (22,23,24). This orbit is plotted in green on Fig. 10. Notice that the point $(0, x_*)$ is the intersection of the isocline $\dot{p} = 0$ with the x -axis (which is plotted in black on Fig. 10). All other orbits are plotted in red on Fig. 10. These orbits are graphs of functions, as shown in Lemma 9.

Using the previous lemmas, it is easy to plot the phase portrait of (26). The plots of Figure 10 show the orbits of the Hamiltonian system (26) for various and typical situations, which will be useful for the analysis of the cases depicted in Figure 3.2.

We go now to the proofs of Props. 3, 4 and 5. We use the notation $x(t, t_0, x_0, D)$ for the solution of

$$\dot{x} = \gamma(x) - Dx, \quad x(t_0) = x_0$$

We have

$$\int_{x_0}^{x(t, t_0, x_0, D)} \frac{dx}{\gamma(x) - Dx} = t - t_0 \quad (28)$$

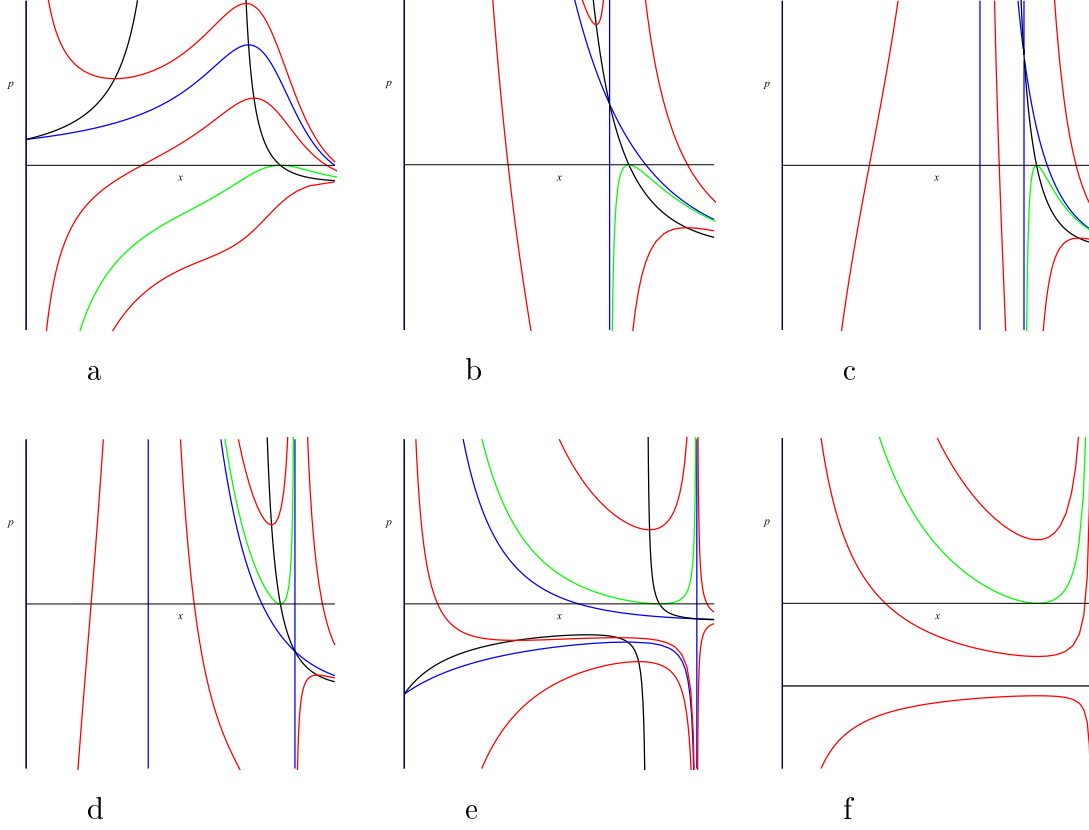


FIGURE 10 – Orbits of the hamiltonian system (26). Panel a : $D > D^*$ and (27) has no positive solution. Panel b : $D > D^*$ and (27) has one positive solution. Panel c : $D > D^*$ and (27) has two positive solutions. Panel d : $D < D^*$ and (27) has two positive solutions. Panel e : $D < D^*$ and (27) has one positive solutions. Panel f : $D = 0$.

.2 Proof of Proposition 3

We give the analysis of the case illustrated on Fig. 3.2a or Fig. 3.2b (wher the possibility $D_{min} = 0$ is allowed). From Hypothesis 4, (27) with $D = D_{min}$ has at most one positive solution Hence, the orbits of (22,24), for $p > 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10e or Fig. 10f. Similarly, (27) with $D = D_{max}$ has possibly 0, 1 or 2 positive solutions. Therefore, the orbits of (22,24), for $p < 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10a, Fig. 10b or Fig. 10c.

Let us solve now (22,23,24). We begin with the case $x_0 \leq x_*$. We denote by $x_- = x(-T, 0, x_*, D_{min})$. Using (28), x_- is defined by

$$\int_{x_*}^{x_-} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{min}x} = -T$$

Therefore $x_- < x_*$. To avoid cumbersome notation, is used here as long as necessary, the abbreviation $x(t) = x(t, 0, x_0, D_{min})$.

Lemma 10. *Let $x_0 \leq x_-$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x(t)$ and*

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x(t))}{\gamma(x(t)) - D_{min}x(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. From $x_0 \leq x_-$ it follows that $x_T = x(T) \leq x_*$ and $x(t) \leq x_T$ for all $t \in [0, T]$. Hence $p^*(t) > 0$ for all $t \in [0, T)$ and $p^*(T) = 0$. From Lemma 9 it follows that $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24).

The uniqueness follows from the fact that for any $p_0 > p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will satisfy the condition the condition $p(t) > 0$ for all $t \in [0, T]$, so that $p(T) > 0$. On the other hand, for any $p_0 < p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will attain the switching curve \mathcal{S} for some $t_s < T$, at some point $x_s < x_T \leq x_*$ and, since by Lemma 6, it cannot stay on to switching curve \mathcal{S} , switch to the half plane $p < 0$ so that $p(T) < 0$. \square

When $x_- \leq x_0 \leq x_*$, we consider the solution, corresponding to the orbit of $(x_*, 0)$, which attains this point for some $t_* \leq T$ and stays at this point for $t_* \leq t \leq T$, using the admissible singular the control $D^*(t) = D_* \in [D_{min}, D_{max}]$. More precisely, we have the following result.

Lemma 11. *Let $x_- < x_0 \leq x_*$. Let $t_* < T$ be such that $x(t_*) = x_*$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by*

$$x^*(t) = \begin{cases} x(t) & \text{if } 0 \leq t < t_* \\ x_* & \text{if } t_* \leq t \leq T \end{cases}$$

and

$$p^*(t) = \begin{cases} \frac{\gamma(x_*) - \gamma(x(t))}{\gamma(x(t)) - D_{min}x(t)} & \text{if } 0 \leq t < t_* \\ 0 & \text{if } t_* \leq t \leq T \end{cases}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. From $x_- < x_0 \leq x_*$ it follows that $x_T = x(T) > x_*$, so that there exists $t_* < T$ such that $x(t_*) = x_*$. Using (28), t_* is defined by

$$\int_{x_0}^{x_*} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{min}x} = t_*$$

Since $p^*(t) = 0$ and $x^*(t) = x_*$ for $t \in [t_*, T]$, from Lemma 9 and Lemma 6 it follows that $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24) corresponding to the singular control $D^*(t) = D_*$ on the subinterval $[t_*, T]$.

The uniqueness follows from the fact that for any $p_0 > p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will satisfy the condition $p(t) > 0$

for all $t \in [0, T]$, so that $p(T) > 0$. On the other hand, for any $p_0 < p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will attain the switching curve \mathcal{S} for some $t_s < T$, at some point $x_s < x_T \leq x_*$ and, since by Lemma 6, it cannot stay on to switching curve \mathcal{S} , switch to the half plane $p < 0$ so that $p(T) < 0$. \square

We consider now the case $x_0 \geq x_*$. We denote by $x_+ = x(-T, 0, x_*, D_{max})$. Using (28), x_+ is defined by

$$\int_{x_*}^{x_+} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{max}x} = -T$$

Therefore $x_+ > x_*$. To avoid cumbersome notation, is used here the abbreviation $x(t) = x(t, 0, x_0, D_{max})$. Using the same arguments as above we can prove the following result.

Lemma 12. *Let $x_0 \geq x_+$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x(t)$ and*

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x(t))}{\gamma(x(t)) - D_{max}x(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Let $x_+ > x_0 \geq x_$. Let $t_* < T$ be such that $x(t_*) = x_*$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by*

$$x^*(t) = \begin{cases} x(t) & \text{if } 0 \leq t < t_* \\ x_* & \text{if } t_* \leq t \leq T \end{cases}$$

and

$$p^*(t) = \begin{cases} \frac{\gamma(x_*) - \gamma(x(t))}{\gamma(x(t)) - D_{max}x(t)} & \text{if } 0 \leq t < t_* \\ 0 & \text{if } t_* \leq t \leq T \end{cases}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Therefore, from the previous lemma it follows that the optimal strategy consist simply in taking $D = D_{min}$ for $x \leq x_*$ and $D = D_{max}$ for $x \geq x_*$. This proves Proposition 3.

Remark 4 It should be noticed that the vertical line $x = x_{min}$, where x_{min} is a possible positive solution of $\gamma(x) = D_{min}x$, which is the unstable separatrix of the saddle point $E_{D_{min}}$ corresponding to the solution x_{min} appears in the half plane $p > 0$, but on the right of x_* . Therefore it has any effect on the description of the orbits of the Hamiltonian system in the case $x_0 < x_*$. Similarly, if $\gamma(x) = D_{max}x$ has one solution (or two) $x = x_{max}$ in the interval $[0, s_{in}]$, then $x_* > x_{max}$ (for both solutions x_{max}), so that the vertical line $x = x_{max}$ (which is the unstable separatrix of the saddle point $E_{D_{max}}$) appears in the half plane $p < 0$, on the left of x_* . It has no effects on the description of the orbits of the Hamiltonian system in the case $x_0 > x_*$.

However, if Hypothesis 8 is not satisfied, and the growth function $\mu(s)$ is of Haldane type, then equation $\gamma(x) = D_{min}x$ has two solutions x_1 and x_2 such that $x_1 > x_* > x_2$. Therefore, if $x_0 < x_1$ then the solution converges toward 0 and if $x_0 > x_1$ it converges toward x_2 so that it can attain x_* . Even if the optimal control is well posed, we excluded this case since there is no hope to maximize the biogas production if the minimal control which is allowed leads to system to the washout of the species.

.3 Proof of Proposition 4

We give the analysis of the case illustrated on Fig. 3.2c (the possibility $\mu(s_{in}) > D_{max}$ is allowed). From Hypothesis 8, (27) with $D = D_{min}$ has at most one positive solution. Hence, the orbits of (22,24), for $p > 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10e or Fig. 10f. Similarly, (27) with $D = D_{max}$ has one or two positive solutions. Therefore, the orbits of (22,24), for $p < 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10d or Fig. 10e.

Let us solve now (22,23,24). We begin with the case $x_0 \leq x_{max}$. We denote by $x_- = x(-T, 0, x_*, D_{min})$. Using (28), x_- is defined by

$$\int_{x_*}^{x_-} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{min}x} = -T$$

Therefore $x_- < x_*$. To avoid cumbersome notation, are used here the abbreviations $x_m(t) = x(t, 0, x_0, D_{min})$ and $x_M(t) = x(t, 0, x_0, D_{max})$.

Lemma 13. *Let $x_0 \leq x_-$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x_m(t)$ and*

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{min}x^*(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. From $x_0 \leq x_-$ it follows that $x_T = x_m(T) \leq x_*$ and $x_m(t) \leq x_T$ for all $t \in [0, T]$. Hence $p^*(t) > 0$ for all $t \in [0, T)$ and $p^*(T) = 0$. From Lemma 9 it follows that $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24).

The uniqueness follows from the fact that for any $p_0 > p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will satisfy the condition $p(t) > 0$ for all $t \in [0, T]$, so that $p(T) > 0$. On the other hand, for any any $p_0 < p^*(0)$, the solution of the Hamiltonian system (22,24) with initial condition $x(0) = x_0$ and $p(0) = p_0$ will attain the switching curve \mathcal{S} for some $t_s < T$, at some point $x_s < x_T \leq x_*$ and, since by Lemma 6, it cannot stay on to switching curve \mathcal{S} , switch to the half plane $p < 0$, and satisfies $p(T) < 0$. \square

When $x_- \leq x_0 \leq x_*$, we cannot, as in the WDAC consider the solution, corresponding to the orbit of $(x_*, 0)$, that satisfies $x(t_*) = x^*$, $p(t_*) = 0$, and stays at this point for $t_* \leq t \leq T$, because now the singular arc $x = x_*$ is not admissible, since the control $D^*(t) = D_*$ that permits to stay on it does not an admissible control $D^*(t) \in [D_{min}, D_{max}]$.

There is another possibility to solve (22,23,24) as shown by the following result.

Lemma 14. *Consider a solution that attains the singular curve \mathcal{S} for some $t_c \leq T$, at some point $(x_c = x_m(t_c), 0)$, using the control D_{min} , then switch to the control D_{max} , and follows the orbit of $(x_c = x_m(t_c), 0)$ until point $(x_T = x_M(T), 0)$. We must have $\gamma(x_c) = \gamma(x_T)$ and $t_c = \tau_c(x_c)$ where $\tau_c(x)$ is the function defined by (3.15,3.16).*

Proof. Using (28), t_c , x_c and x_T must satisfy the following equations

$$\int_{x_c}^{x_T} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{max}x} = T - t_c$$

and since the Hamiltonian is conserved, we must have

$$H(x_c, 0) = H(x_T, 0) \implies \gamma(x_c) = \gamma(x_T)$$

Therefore $t_c = \tau_c(x_c)$ where $\tau_c(x)$ is the function defined by (3.15,3.16). □

Let x_+ , be such that $\tau_c(x_+) = 0$, and let x_{++} be such that $\gamma(x_+) = \gamma(x_{++})$. Therefore we have

$$\int_{x_+}^{x_{++}} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{max}x} = T$$

that is to say, the solution of $\dot{x} = \gamma(x) - D_{max}x$ takes time T to go from x_+ to x_{++} .

Lemma 15. *Let $x_0 \geq x_+$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x_M(t)$ and*

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{max}x^*(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Let $x_- \leq x_0 < x_+$. Let $(x^(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by*

$$x^*(t) = \begin{cases} x(t) & \text{if } 0 \leq t < t_c \\ x(t, t_c, x_c, D_{max}) & \text{if } t_c \leq t \leq T \end{cases}$$

and

$$p^*(t) = \begin{cases} \frac{\gamma(x_c) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{min}x^*(t)} & \text{if } 0 \leq t < t_c \\ \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{max}x^*(t)} & \text{if } t_c \leq t \leq T \end{cases}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. If $x_+ \leq x_0 \leq x_{max}$, then $x_T = x_M(T) < x_{max}$. If $x_0 > x_{max}$, then $x_T = x_M(T) > x_{max}$. Since $p^*(T) = 0$, $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24). The uniqueness follows from arguments similar to those used in the previous lemmas.

We consider now the case $x_- \leq x_0 \leq x_+$. Let $t_c < T$ and $x_c = x(t_c)$ be such that

$$x(t, t_c, x_c, D_{max}) = x_T, \quad t_c = \tau_c(x_c) \quad \gamma(x_c) = \gamma(x_T)$$

Since $p(t_T) = 0$, $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24). It is the unique solution of this system. □

Therefore, the optimal strategy consist simply in taking $D = D_{min}$ for $t > \tau_c(x)$ and $D = D_{max}$ for $t < \tau_c(x)$. This proves Proposition 4.

.4 Proof of Proposition 5

We give the analysis of the case illustrated on Fig. 3.2d (the possibility $D_{max} < \max(\mu(s))$ is allowed). From Hypothesis 8, (27) with $D = D_{min}$ has one and only positive solution. Hence, the orbits of (22,24), for $p > 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10e. Similarly, (27) with

$D = D_{max}$ has one or two positive solutions. Therefore, the orbits of (22,24), for $p < 0$ are similar to the orbits shown in Fig. 10d or Fig. 10e.

Let us solve now (22,23,24). We begin with the case $x_0 \geq x_{min}$. We denote by $x_- = x(-T, 0, x_*, D_{max})$. Using (28), x_- is defined by

$$\int_{x_*}^{x_-} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{max}x} = -T$$

Therefore $x_- > x_*$. To avoid cumbersome notation, are used here the abbreviations $x_m(t) = x(t, 0, x_0, D_{min})$ and $x_M(t) = x(t, 0, x_0, D_{max})$.

Lemma 16. *Let $x_0 \geq \min(s_{in}, x_-)$, Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x_M(t)$ and*

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{max}x^*(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. From $x_0 \geq \min(s_{in}, x_-)$ it follows that $x_T = x_M(T) \geq x_*$ and $x_M(t) \geq x_T$ for all $t \in [0, T]$. Hence $p^*(t) < 0$ for all $t \in [0, T)$ and $p^*(T) = 0$. From Lemma 9 it follows that $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24).

The uniqueness follows from arguments similar to those used in the previous lemmas. \square

When $x_- \geq x_0 \geq x_*$, we cannot, as in the WDAC consider the solution, corresponding to the orbit of $(x_*, 0)$, that satisfies $x(t_*) = x^*$, $p(t_*) = 0$, and stays at this point for $t_* \leq t \leq T$, because now the singular arc $x = x_*$ is not admissible, since the control $D^*(t) = D_*$ that permits to stay on it does not an admissible control $D^*(t) \in [D_{min}, D_{max}]$.

There is another possibility to solve (22,23,24) as shown by the following result.

Lemma 17. *Consider a solution that attains the singular curve \mathcal{S} for some $t_c \leq T$, at some point $(x_c = x_m(t_c), 0)$, using the control D_{max} , then switch to the control D_{min} , and follows the orbit of $(x_c = x_m(t_c), 0)$ until point $(x_T = x_M(T), 0)$. We must have $\gamma(x_c) = \gamma(x_T)$ and $t_c = \tau_c(x_c)$ where $\tau_c(x)$ is the function defined by (3.17,3.18).*

Proof. Using (28), t_c , x_c and x_T must satisfy the following equations

$$\int_{x_c}^{x_T} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{min}x} = T - t_c$$

and since the Hamiltonian is conserved, we must have

$$H(x_c, 0) = H(x_T, 0) \implies \gamma(x_c) = \gamma(x_T)$$

Therefore $t_c = \tau_c(x_c)$ where $\tau_c(x)$ is the function defined by (3.17,3.18). \square

Let x_+ , be such that $\tau_c(x_+) = 0$, and let x_{++} be such that $\gamma(x_+) = \gamma(x_{++})$. Therefore we have

$$\int_{x_+}^{x_{++}} \frac{dx}{\gamma(x) - D_{min}x} = T$$

that is to say, the solution of $\dot{x} = \gamma(x) - D_{min}x$ tooks time T to go from x_+ to x_{++} .

Lemma 18. Let $x_0 \leq x_+$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by $x^*(t) = x_M(t)$ and

$$p^*(t) = \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{max}x^*(t)}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Let $x_- \geq x_0 > x_+$. Let $(x^*(t), p^*(t))$ be defined, for $0 \leq t \leq T$, by

$$x^*(t) = \begin{cases} x_M(t) & \text{if } 0 \leq t < t_c \\ x(t, t_c, x_c, D_{min}) & \text{if } t_c \leq t \leq T \end{cases}$$

and

$$p^*(t) = \begin{cases} \frac{\gamma(x_c) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{max}x^*(t)} & \text{if } 0 \leq t < t_c \\ \frac{\gamma(x_T) - \gamma(x^*(t))}{\gamma(x^*(t)) - D_{min}x^*(t)} & \text{if } t_c \leq t \leq T \end{cases}$$

It is the unique solution of (22,23,24).

Proof. If $x_+ \leq x_0 \leq x_{max}$, then $x_T = x_M(T) < x_{max}$. If $x_0 > x_{max}$, then $x_T = x_M(T) > x_{max}$. Since $p^*(T) = 0$, $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24). The uniqueness follows from arguments similar to those used in the previous lemmas.

We consider now the case $x_- \leq x_0 \leq x_+$. Let $t_c < T$ and $x_c = x(t_c)$ be such that

$$x(t, t_c, x_c, D_{max}) = x_T, \quad t_c = \tau_c(x_c) \quad \gamma(x_c) = \gamma(x_T)$$

Since $p(t_T) = 0$, $(x^*(t), p^*(t))$ is a solution of (22,23,24). It is the unique solution of this system.

□

Therefore, the optimal strategy consist simply in taking $D = D_{max}$ for $t > \tau_c(x)$ and $D = D_{min}$ for $t < \tau_c(x)$. This proves Proposition 5.



Conclusions générales et perspectives

L'étude présentée dans cette thèse s'articule autour de l'analyse et le contrôle optimal de la digestion anaérobie en vue de la maximisation de biogaz.

Dans un premier temps, nous avons rappelé les concepts généraux de la digestion anaérobie. Cette succession de réactions biologiques, dans laquelle un substrat organique est transformé essentiellement en CO_2 et CH_4 , implique un écosystème particulièrement complexe, dont le fonctionnement n'est pas encore entièrement connu.

Pour garantir un bon fonctionnement de ce procédé, divers paramètres environnementaux (température, pH, alcalinité,...) revêtent une importance capitale. En effet, la sensibilité de certaines populations bactériennes à certains composés intermédiaires, ainsi qu'aux paramètres environnementaux, rend le procédé potentiellement instable. Les conséquences d'une mauvaise conduite d'un digesteur anaérobie constituent en cela un vrai risque. Un manque d'expertise dans la gestion de ces procédés peut conduire à l'acidification du milieu ce qui, dans les cas extrêmes, nécessite l'arrêt et le redémarrage de l'unité de traitement, ce qui n'est pas rentable du point de vue pratique et économique. A cet effet, de nombreuses solutions technologiques ont donc été proposées pour améliorer le procédé et le rendre plus fiable.

Les stratégies de contrôle reposent bien évidemment sur des modèles mathématiques, ces derniers doivent représenter le plus fidèlement possible les systèmes étudiés. Après avoir passé en revue les différents modèles de digestion anaérobie existants dans la littérature, nous pouvons classer les modèles en deux catégories : selon l'objectif pour lequel ils ont été développés.

- les modèles de grandes dimensions, développés par les praticiens pour reproduire le comportement phénoménologique du système,
- les modèles simplifiés développés pour le contrôle, décrivant de manière macroscopique la digestion anaérobie en un faible nombre d'étapes en cascade et ayant une dimension limitée.

Le problème de contrôle optimal, même en petite dimension, est compliqué et difficile à résoudre. Dans la mesure où certains auteurs ont démontré que la digestion anaérobie pouvait être modélisée par un modèle en une seule étape, nous nous sommes attachés à résoudre ce

problème. c'est donc ce modèle que nous avons utilisé tout le long de ce travail de thèse.

En ce qui concerne la commande des procédés de digestion anaérobie, nous avons recensé différentes approches existantes dans la littérature, allant des classiques (PI, PID, ect...) aux heuristiques.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes attachés à développer des solutions aux problèmes relatifs au contrôle optimal de la digestion anaérobie en vue de la maximisation du biogaz sur un horizon de temps donné. En effet, nous avons résolu un problème de commande optimale de digesteur anaérobie en une seule étape. Pour des conditions initiales particulières et pour une classe de contraintes sur l'actionneur, l'élaboration de la stratégie de contrôle a été obtenue dans trois cas : WDAC, UDAC et ODAC.

Les résultats importants auxquels nous avons abouti sont :

Dans le cas WDAC, le contrôle optimal a été obtenu en utilisant une approche par comparaison des trajectoires du système dynamique. Selon la position de l'état $x(t)$ par rapport à l'état optimal x_* , le digesteur est à sa capacité minimale ($D = D_{min}$) ou maximale ($D = D_{max}$) jusqu'à atteindre l'arc singulier ($D = D_*$). Ce dernier permet au système de le maintenir sur l'optimum x_* où la production du biogaz est maximale. Ce contrôle est équivalent à aller le plus rapidement possible vers x_* et d'y rester.

En ce qui concerne les cas UDAC et ODAC, une approche différente a été utilisée pour déterminer la stratégie de contrôle optimal. Il s'agit d'une approche hamiltonienne (Principe du Maximum de Pontryagin). L'analyse et la représentation des orbites du système hamiltonien dans le plan (x, p) nous ont permis de déduire la solution optimale parmi toutes celles vérifiant les conditions nécessaires d'optimalité données par le Principe du maximum de Pontryagin.

Théoriquement, la stratégie de commande consiste à appliquer le contrôle $D = D_{min}$ tant que l'état $x(t)$ est en dessous d'une certaine courbe de commutation $t_c(x)$. Dès que $x(t)$ traverse cette courbe, le contrôle $D = D_{max}$ est appliqué.

Dans ce cas, que nous appelons UDAC, le contrôle est sous-dimensionné, c'est-à-dire, que sa valeur maximale est inférieure à la valeur qui permet de maintenir l'équilibre du système qui maximise la production de gaz. En d'autres termes, la pompe d'alimentation n'est pas assez puissante pour délivrer le débit d'alimentation qui maintiendrait le débit de gaz autour de son maximum. Dans ce cas, nous ne pouvons pas atteindre la cible x_* et le mieux que l'on puisse faire est de s'en rapprocher.

De même, lorsque le contrôle est sur-dimensionné (cas ODAC), la stratégie adoptée consiste à appliquer le contrôle $D = D_{max}$ tant que $x(t)$ est en dessus de la courbe de commutation $t_c(x)$ puis le contrôle $D = D_{min}$.

Le problème de contrôle dans les UDAC et ODAC est très intéressant à résoudre du point de vue mathématique. Cependant, il nous semble que sa mise en pratique dans le cas réel est

difficile dans le sens où nous ne sommes pas en mesure de donner une signification voir une explication pratique de cette courbe de commutation.

Suite à ces résultats, l'optimalité d'une stratégie de commande heuristique proposée par Steyer et coll. [53] a été discutée. Nous avons montré que cette loi de commande conduisait le système vers le même point optimal mais en davantage de temps. En ce sens précis, nous pouvons dire qu'elle est sous-optimale par rapport à la stratégie de contrôle proposée. En revanche, son énorme avantage est qu'elle nécessite très peu d'informations et est relativement facile à appliquer sur un procédé réel.

Lorsque l'hypothèse $x_0 + s_0 = s_{in}$ n'est pas vérifiée, le problème de contrôle est difficile à résoudre. L'intérêt de Bocop [7] est de pouvoir observer numériquement ce qui se passe et d'avoir une intuition sur les solutions optimales lorsque ces dernières sont difficiles à déterminer analytiquement. Nous avons complété nos travaux par une comparaison avec une approche purement numérique "Bocop", qui est une boîte à outil "open-source" pour résoudre les problèmes de contrôle optimal. Le principe de cette méthode est basé sur la discrétisation du problème et la détermination de la trajectoire optimale parmi les trajectoires candidates, et ceci en utilisant les outils de l'optimisation numériques. Ce logiciel nécessite seulement, la connaissance du critère à optimiser, le modèle du système et les contraintes imposées sur le contrôle.

De nombreuses simulations ont été réalisées. Dans le cas où l'hypothèse sur la condition initiale $x_0 + s_0 = s_{in}$ est vérifiée, Bocop délivre un signal de contrôle et des valeurs de production totale de biogaz équivalentes à la stratégie proposée. En revanche, dans le cas où $x_0 + s_0 = s_{in}$ n'est pas vérifiée, Bocop présente de fortes oscillations des trajectoires du système autour de l'arc singulier. Les principales raisons à l'origine de ce phénomène est la discontinuité du contrôle au moment de commuter vers l'arc singulier. Pour éviter ce phénomène de broutement, appelé réticence ou "chattering" en anglais, nous avons introduit un terme de pénalité dans le critère à optimiser. D'une part, les performances du contrôle optimale avec et sans pénalité sur la commande dans le critère ainsi que la production totale de biogaz ont été comparées avec la stratégie proposée. Les résultats obtenus sont comparables et jugés satisfaisants.

D'autre part, ces résultats suggèrent que l'application de la loi de commande proposée dans la proposition 1 lorsque l'hypothèse 2 n'est pas vérifiée, devrait donner des résultats raisonnablement bons en termes de production de biogaz et que la solution optimale est donc assez robuste par rapport aux conditions initiales tant que s est mesurée.

Tous ces résultats ont fait l'objet de participation à des congrès internationaux (CARI'12, ICA'13, Ecoles chercheurs,...) et de publications scientifiques :

Article 1 : Maximizing biogaz production from anaerobic digestion

Article en anglais décrivant la résolution du problème de commande optimale pour maximiser la production de biogaz dans un digesteur anaérobie dans le cas WDAC. Cet article a fait l'objet du chapitre 2 du manuscrit. A paraître dans Journal of Process Control.

Article 2 : Optimal control of anaerobic digestion process

Article en anglais du problème de commande optimale pour maximiser la production de biogaz dans un digesteur anaérobie dans les cas UDAC et ODAC. Dans cet article, la résolution du problème est détaillée et une analyse de contrôlabilité des arcs singuliers est faite. Cet article était au cœur du chapitre 3 de la thèse. Soumis dans Automatica.

L'originalité de notre approche réside en sa généralité. En effet, les résultats sont établis pour une grande classe de lois de croissance. Cela dit, pour l'illustrer, nous avons besoin de connaître la cinétique de croissance. Les résultats restent valables pour les cinétiques de croissance $\mu(s)$ qui font que la fonction de biogaz soit non monotone et admet un maximum. Les outils développés dans ce manuscrit contribuent à fiabiliser le fonctionnement des digesteurs anaérobie, et à améliorer leurs performances, ce qui devrait contribuer à accroître l'attractivité de cette technologie de traitement.

Dans la continuité de ce travail, les perspectives sont nombreuses. Plusieurs points mériteraient d'autres investigations plus poussées :

Tout d'abord, la résolution du problème de contrôle optimal a nécessité l'utilisation d'hypothèses restrictives, notamment, à l'ensemble des conditions initiales. Il serait judicieux de pouvoir relâcher cette hypothèse et résoudre le problème général.

Il nous semble intéressant d'évaluer si cette loi de commande pourrait permettre d'optimiser la production de biogaz du modèle *AM2* ([5], [18]), qui nous le rappellons, est un modèle plus réaliste de digestion anaérobie en deux étapes où le substrat est transformé par une cascade de deux réactions biologiques. une première approche consisterait à se ramener à un problème en dimension 2 en considérant les invariants du système en dimension 4.

Des raffinements supplémentaires sont envisageables en utilisant une cinétique de croissance présentant plusieurs maximums. Dans ce cas, quelle serait la stratégie de contrôle à adopter ? Des recherches sont encore nécessaires pour répondre à ces préoccupations.

Certaines grandeurs requises pour cette stratégie de contrôle ne peuvent cependant pas être déterminées en-ligne, comme le taux de croissance des bactéries, ou la concentration de la biomasse. L'idée de construire des observateurs pour ces deux grandeurs, à partir de la seule mesure du débit de méthane et l'intégrer au contrôle présenterai un intérêt majeur.

Enfin, un point important à aborder concerne la mise en pratique de la stratégie de commande proposée. Il serait intéressant de la tester sur un digesteur pilote. En effet, à la suite de plusieurs échanges avec les collègues du laboratoire de LBE de l'INRA de Narbonne, il est apparu qu'il était très intéressant d'envisager une extension des travaux de contrôle optimal à une classe plus générale de systèmes biologiques et notamment aux systèmes impliquant une

biomasse fixée sur un support.

Conclusions générales et perspectives

Bibliographie

- [1] V. ALCARAZ GONZALEZ., *Estimation et commande robuste non-linéaire des procédés biologiques de dépollution des eaux usées : Application à la digestion anaérobie*, DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE PERPIGNAN, (2001).
- [2] V. Alcaraz-Gonzalez., A. Maloum., J. Harmand., A. Rapaport., J. P. Steyer., V. Gonzalez-Alvarez., C. Pelayo Ortiz., *Robust interval-based SISO and SIMO regulation for a class of highly uncertain bioreactors : application to the anaerobic digestion*, Proceedings of the 39th IEEE CDC, Sydney, Australia, 12-15 December, (2000).
- [3] J. F. ANDREWS., *A Mathematical Model for the Continuous Culture of Microorganisms Utilizing Inhibitory Substrates*, Biotechnology and Bioengineering, vol. 10, no 6, p.707-723, (1968).
- [4] G., Bastin, et D.Dochain, *On-line Estimation and Adaptive Control of Bioreactors*. Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, Elsevier, (1990).
- [5] O., Bernard., Z., Hadj-Sadok., D., Dochain., A., Genovesi., J-P., Steyer., *Dynamical model development and parameter identification for an anaerobic wastewater treatment process*, Biotechnology and Bioengineering 75 (4), (2001).
- [6] O.BERNARD. , CHACHUAT, A., HELIAS, A., RODRIGUEZ, J., *Can we assess the model complexity for a bioprocess ?*, *Theory and example of the anaerobic digestion process*, Water Science and Technology, (2006)
- [7] F. J. Bonnans.,P., Martinon., V. Grélard *Bocop - A collection of examples*, Research Report - <http://hal.inria.fr/hal-00726992>, (2012).
- [8] B. Benyahia., T. Sari., B. Cherki., and J. Harmand., *Sur le modèle AM2 de digestion anaérobie*, In CARI'10, Yamoussoukrou, Côte d'Ivoire, (2010).

BIBLIOGRAPHIE

- [9] B., Benyahia, *Modélisation et observation des bioprocédés à membranes : Application à la digestion anaérobie*, Université de Tlemcen et de Montpellier 2, (2012).
- [10] B. Benyahia., T. Sari., B. Cherki., and J. Harmand., *Bifurcation and stability analysis for monitoring anaerobic digestion processes*, Journal of Process Control, 22(6) :1008-1019, (2012).
- [11] B. Benyahia., B. Cherki., J. Harmand., and T. Sari., *Quelques résultats sur l'observation du modèle AM2b*, In CARI'12, Alger, Algérie, (2012).
- [12] CRESSON, R., *Etude du démarrage de procédés intensifs de méthanisation*, Université de Montpellier 2, (2006).
- [13] G. D'Ans., P.Kokotovic., D. Gottlieb., *Time-optimal control for model of bacterial growth*, Journal of optimization theory and applications, 7,1, (1971).
- [14] N. Dimitrova., M. Karastanov., *Nonlinear stabilizing control af uncertain bioprocess*, Int. J. Appl. Math Comput. Sci, 19(3) : 441-454, (2009).
- [15] N. Dimitrova., M. Karastanov., *Nonlinear adaptative control of a model of an uncertain fermentation process*, Int. J. Robust Nonlinear Control, 20 ; 1001-1009, (2010).
- [16] N. Dimitrova., M. Karastanov., *Nonlinear adaptative stabilising control of an anaerobic digestion model with unknown kinetics*, Int. J. Robust Nonlinear Control, Published on line in Wiley Online Library (wileyonlinelibrary.com). DOI : 10.1002/rnc.1782, (2011).
- [17] D. DOCHAIN (coordinateur), *Automatique des bioprocédés*, vol. Systèmes Automatisés, Hermès Science, (2001).
- [18] D. Dochain, J. Harmand, *Basic concepts of bioprocess control*. In Bioprocess Control, D. Dochain (ed.), In CAM Control System, Robotic and Mnuufacturing Series, ISTE Ltd, John Wiley and Sons, Inc. 134- 171, (2008).
- [19] D. Dochain. *State and parameter estimation in chemical and biochemical processes : a tutorial*. Journal of Process Control, 13 : 801-818, (2003).
- [20] A. Feitz. *Gaz : la filière biométhane démarre doucement*, afeiz@lesechos.fr
- [21] *Biogaz : La france cherche son modèle*, Alternatives économiques, No 344, (mars 2015).

-
- [22] *Etapes de la digestion anaérobie*. Disponible sur :http://www.atestoc.com/default_fichiers/methanisation.html.
- [23] ENYARD, J., *Modélisation, Optimisation, dynamique et commande d'un méthaniseur par digestion anaérobie*. Rapport PFE, (2006- 2007).
- [24] R. Fekih-Salem., *Modèles Mathématiques pour la compétition et la coexistence des espèces microbiennes dans un chémostat*, Université de Montpellier 2 et L'université de TUNIS EL MANAR, TUNISIE, (2013).
- [25] LE FIGARO. *Un gros déficit en eau menace la planète*, LeFigaro.fr-Actualités.
- [26] C.Garcia-Diéguez., O. Bernard., E., Roca., *Reducing the anaerobic digestion model No. 1 for its application to an industrial wastewater treatment plant winery effluent wastewater*, Bioresource Technology, 132, 244-253, (2013).
- [27] A. Ghouali., T. Sari., J. Harmand., *Maximizing biogas production from the anaerobic digestion*, Journal of Process control, under review.
- [28] GRAEF, S. et ANDREWS, J. F., *Mathematical modeling and control of anaerobic digestion*, Water Research, 8, pp. 262-289, (1974).
- [29] J. Harmand., *Contribution à l'analyse et au contrôle des systèmes biologiques : application aux bioprocédés de dépollution*, Habilitation, Laboratoire de Biotechnologie de l'Environnement de l'INRA, (2004).
- [30] J.Hess., *Modélisation de la qualité du biogaz produit par un fermenteur méthanogène et stratégie de régulation en vue de sa valorisation*, Université de Nice - Sophia Antipolis, (2007).
- [31] IWA. *Anaerobic digestion model no. 1 (ADM1)*. Technical report. IWA Task Group for Mathematical Modeling of Anaerobic Digestion Processes, (2001).
- [32] IWA *Task Group for Mathematical Modeling of Anaerobic Digestion Processes. Anaerobic Digestion Model No.1 (ADM1)*, Scientific and Technical Report No. 13, IWA Publishing, London, (2002).
- [33] J. Liu., G. Olsson., B. Mattiasson., *Extremum-seeking with variable gain control for intensifying biogas production in anaerobic fermentation*, Water Science and Technology, 53 :4 – 5, 35 – 44, (2006).

BIBLIOGRAPHIE

- [34] C. Lobry., T. Sari., *Equations différentielles à second membres discontinus*, in Contrôle non linéaire et Applications, Travaux en Cours no. 64, Hermann, Paris, 255-289, (2005).
- [35] G. Lyberatos and I.V. Skiadas., *Modelling of anaerobic digestion - a review*. Global Nest : the Int. J., 1(2) :63-76, (1999).
- [36] F. J. Bonnans., P. Martinon., V. Grélard., *BOCOP-A collection of examples*, Research Report- [http ://hal.inria.fr/hal-00726992](http://hal.inria.fr/hal-00726992), (2012).
- [37] L. MAILLERET ., *Stabilisation Globale de Systèmes Dynamiques Positifs Mal Connus. Applications en Biologie*, Thèse de doctorat, Université de Nice-Sophia Antipolis, (mai 2004).
- [38] L. MAILLERET., O. B ERNARD., J.-P. STEYER., *Robust regulation of anaerobic digestion process*
- [39] F. Mazenc., J. Harmand., H. Mounier., *Stabilization of the chemostat with delayed sampled measurements.*, NOLCOS 2013, September 4-6, Toulouse, France, (2013).
- [40] Pũnal., J. PLAZZOTTO., J-C. BOUVIER., T. CONTE., J.P. STEYER., *Automatic control of Volatile Fatty Acids in anaerobic digestion using a fuzzy logic based approach*, Water science and technology, Vol.48, N 6,p.103 – 110, (2003).
- [41] *Méthanisation*. Disponible sur :[http : //www.france – biogaz.fr/biogaz – en – bref/methanisation.html](http://www.france-biogaz.fr/biogaz-en-bref/methanisation.html).
- [42] J. MONOD, *Recherches sur la croissance des cultures bactériennes*, Hermann end cie, (1942).
- [43] F. E. MOSEY.,*Mathematical modelling of the anaerobic digestion process : regulatory mechanisms for the formation of short-chain volatile acids from glucose*, Water Science and Technology, vol.15, p. 209 – 232, (1983)
- [44] T. Rehl., J. Müller *CO₂ abatement costs of greenhouse gas (GHG) mitigation by different biogas conversion pathways.*, Journal of Environmental Management, 114 :15,13-25, (2013).
- [45] RENARD, P., DOCHAIN, D., BASTIN, G., NAVEAU, H. et NYNS, E.,*Adaptative control of anaerobic digestion process-a pilot-scale aplication*, *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 31, N 4,p. 287 – 294, (1988).

-
- [46] J. Rodryguez., G. Ruiz., F. Molina., E. Roca and J.M. Lema., *A hydrogen-based variable-gain controller for anaerobic digestion processes*, Water Science and Technology, 54 :2, 57 – 62, (2006).
- [47] M. Sbarciog., M. Loccufier., A.V. Wouwer., *An optimizing start-up Strategy for a Bio-methanor*. Bioprocess and Biosystems Engineering, 35 : 565- 578, (2012).
- [48] M. Sbarciog., M. Loccufier., E. Noldus., *Determination of appropriate operating strategies for anaerobic digestion systems*, Biochemical Engineering Journal, 51, 180-188, (2010).
- [49] M. Sbarciog., M. Loccufier., A. Vande Wouwer., *On the optimisation of Biogas Production in Anaerobic Digestion Systems*, In preprints of the 18th IFAC World Congress, 7150-7155, Milano Italy, (2011).
- [50] M. Sbarciog., M. Loccufier., A. Vande Wouwer., *A biogas- Based switching control policy for anaerobic digestion systems*, Perprints of the 8th IFAC Symposium on advanced control of chemical processes, (2012).
- [51] H.L. Smith and P. Waltman., *The Theory of the Chemostat, Dynamics of Microbial Competition*, Cambridge University Press, (1995).
- [52] K. Stamatelatou., G. Lybratos., C. Tsiligiannis., S. Pavlou, P. Pullammanappallil and S.A. Svoros., *Optimal and suboptimal control of anaerobic digesters*, Environmental Modeling and Assessment 2, 355-363, (1997).
- [53] J.P. Steyer, P. Buuffière, D. Rolland, R. Moletta., *Advanced control of anaerobic digestion processes throug disturbances modeling*, Wat. Res. Vol. 33, No. 9, pp. 2059-2068, (1999).
- [54] E. Trélat., *Contrôle optimal Théorie et Applications*, Deuxième Edition, Mathématiques Concrètes, VUIBERT, (2008).
- [55] Unicef., *Rapport Unicef : Génération 2030/ Afrique*, [http : //www.unicef.org/french/publications/index_74751.html](http://www.unicef.org/french/publications/index_74751.html), (août 2013).

Résumé

Cette thèse porte sur l'analyse et le contrôle optimal d'un digesteur anaérobie. L'objectif est de proposer une stratégie de commande optimale pour maximiser la quantité de biogaz produit dans un bioréacteur anaérobie sur une période de temps donnée. Plus particulièrement, à partir d'un modèle simple de bioprocédé et en considérant une classe importante de cinétiques de croissance, nous résolvons un problème de maximisation de biogaz produit par le système pendant un temps fixé, en utilisant le taux de dilution $D(\cdot)$ comme variable de contrôle. Dépendant des conditions initiales du système, l'analyse du problème de contrôle optimal fait apparaître des degrés de difficulté très divers. Dans une première partie, nous résolvons le problème dans le cas où le taux de dilution permettant de maximiser le débit de gaz à l'équilibre est à l'intérieur des bornes minimales et maximales du débit d'alimentation pouvant être appliqué au système : il s'agit du cas WDAC (Well Dimensioned Actuator Case). La synthèse du contrôle optimal est obtenue par une approche de comparaison de trajectoires d'un système dynamique. Une étude comparative des solutions exactes avec celle obtenues avec une approche numérique directe en utilisant le logiciel "BOCOP" est faite. Une comparaison des performances du contrôleur optimal avec celles obtenues en appliquant une loi heuristique est discutée. On montre en particulier que les deux lois de commande amènent le système vers le même point optimal. Dans une deuxième partie, dans le cas où l'actionneur est sous- (ou sur-) dimensionné, c'est-à-dire si la valeur du taux de dilution à appliquer pour obtenir le maximum de biogaz à l'équilibre est en dehors de la valeur minimale ou maximale de l'actionneur, alors nous définissons les cas UDAC (Under dimensioned Actuator Case) et ODAC (Over Dimensioned Actuator Case) que nous résolvons en appliquant le principe du maximum de Pontryagin.

Mots clés : Contrôle optimal, bioréacteur, maximisation, biogaz, digestion anaérobie.

Abstract

This thesis focuses on the optimal control of an anaerobic digester for maximizing its biogas production. In particular, using a simple model of the anaerobic digestion process, we derive a control law to maximize the biogas production over a period of time using the dilution rate $D(\cdot)$ as the control variable. Depending on initial conditions and constraints on the actuator, the search for a solution to the optimal control problem reveals very different levels of difficulty. In the first part, we consider that there are no severe constraints on the actuator. In particular, the interval in which the input flow rate lives includes the value which allows the biogas to be maximized at equilibrium. For this case, named WDAC (Well Dimensioned Actuator Case) we solve the optimal control problem using classical tools of differential equations analysis. Numerical simulations illustrate the robustness of the control law with respect to several parameters, notably with respect to initial conditions. We use these results to show that an heuristic control law proposed in the literature is optimal in a certain sense. The optimal trajectories are then compared with those given by a purely numerical optimal control solver (i.e. the "BOCOP" toolkit) which is an open-source toolbox for solving optimal control problems. When the exact analytical solution to the optimal control problem cannot be found, we suggest that such numerical tool can be used to intuit optimal solutions. In the second part, the problem of maximizing the biogas production is treated when the actuator is under (-over) dimensioned. These are the cases UDAC (Under Dimensioned Actuator Cases) and ODAC (Over Dimensioned Actuator Cases). Then we solve these optimal problems using the Maximum Principle of Pontryagin.

Keywords : Optimal control, bioreactor, maximizing, biogas, anaerobic digestion.