OPTIMISATION DES PROCESSUS DE FERMENTATION EN CONTINU

J. BLUM

Laboratoire d'Analyse Numérique

C.N.R.S et PARIS VI

4, Place Jussieu

75005 - PARIS - FRANCE

Abstract.

The knowledge of a mathematical model of the kinetics of growth of single cell microorganisms and of the physical system enabling to cultivate them leads to the mathematical formulation of the problem.

Duality and gradient methods have been used to realize the minimisation of the industrial cost of the process, the production of biomasse per hour being given. Because of non linearity of the state equations and of non convexity of the cost function, Uzawa and Arrow-Hurwicz algorithms have been improved so that the convergence is obtained in 30 sec. on Univac 1110.

Ce travail entre dans le cadre de la préparation d'un Doctorat d'Etat ès Sciences Mathématiques à l'Université Paris VI. Je remercie le Professeur LIONS de m'avoir permis d'entreprendre ce travail, le Professeur KERNEVEZ de m'avoir mis en contact avec l'équipe de microbiologistes de Dijon, et le Professeur GLOWINSKI pour ses nombreux et judicieux conseils. Je remercie également toute l'équipe de la Station de Génie Microbiologique de l'INRA de Dijon, et en particulier MM. PERINGER et BLACHERE, pour leur fructueuse collaboration.

INTRODUCTION

De façon très générale, on entend par "fermentation" la production en culture de microorganismes unicellulaires à partir de matières premières appelées substrats (sucres, mélasses,...) et à l'aide d'un agent fermenteur.

On distingue trois types de telles cultures :

- la culture batch : elle se fait à l'intérieur d'un fermenteur sans adjonction ni prélèvement d'un produit , jusqu'à épuisement du substrat. Ce type de culture est utilisé pour la fabrication d'antibiotiques et de vitamines.
- la culture en continu : on injecte du substrat de façon continue et on soutire ce qui se trouve dans le fermenteur de façon à ce que le volume reste constant. Ce type de culture est récent, encore peu industrialisé, mais utilisé pour obtenir les levures fourragères servant à l'alimentation animale.
- la culture en semi-continu : c'est un procédé mixte. On laisse la fermentation se faire en batch puis, au bout d'un certain temps, on injecte du substrat avec un débit variable au cours du temps. Il se produit une expansion de volume ; quand le volume du liquide atteint celui du fermenteur, on vidange et on recommence. Ce procédé est utilisé pour la fabrication de la levure de boulangerie.

On se propose ici de réaliser une optimisation de la production de microorganismes unicellulaires en continu. La résolution de ce problème nécessite la connaissance du comportement du système biologique constitué par ces microorganismes ainsi que celle du système physique permettant de les cultiver.

La modélisation du système biologique a été étudiée en culture batch par l'équipe de la Station de Génie Microbiologique de l'I.N.R.A de Dijon [1] [2], et généralisée au cas de la culture en continu [3]. La modélisation du système physique est celle présentée par Aiba, Humphrey et Millis dans [4]. Le problème consiste alors à minimiser le coût industriel du process, dépendant des paramètres biologiques et physiques.

Deux schémas de fermentation ont été étudiés ; le premier est un schéma à un seul fermenteur standard avec recyclage, le second à deux fermenteurs couplés et avec recyclage. Les techniques employées sont présentées dans le cas le plus simple du schéma à un seul fermenteur.

I - MODELISATION.1) Flow-sheet général.

Ce flow-sheet simplifié résume bien la réalité industrielle des fermentations en continu.

Fig. 1 Fermenteur standard avec recyclage, aération et agitation.

On injecte dans le fermenteur de volume utile V du substrat de concentration S_0 avec un débit F constant au cours du temps. A chaque instant la concentration du substrat à l'intérieur du fermenteur est $S(t)$ et celle de la biomasse produite est $x(t)$. On soutire du fermenteur de façon continue le milieu de culture avec le même débit F de sorte que le volume reste constant. On recycle avec le coefficient de recyclage α une fraction de la biomasse soutirée et on recueille l'autre fraction ainsi que le substrat résiduel. De plus on injecte de l'air avec un débit Q constant et on agite le milieu, la vitesse de rotation de l'agitateur étant N .

• Le bilan en masse pour ce qui est de la biomasse s'écrit :

$$(1) \quad V \frac{dx}{dt} = \mu x V - F(1-\alpha)x$$

μ étant le taux de croissance spécifique de la biomasse .

• Le bilan en masse pour ce qui est du substrat s'écrit :

$$(2) \quad V \frac{dS}{dt} = F(S_0 - S) - V_S x V$$

V_S étant la vitesse spécifique d'absorption du substrat.

• Le développement des microorganismes nécessite la consommation de l'oxygène dissous

dans le milieu de culture. Cet oxygène dissous, de concentration C_L , est transféré de la phase gazeuse dans la phase liquide par l'intermédiaire de l'aération et de l'agitation de la culture. Le bilan d'oxygène s'écrit :

$$(3) \quad \frac{dC_L}{dt} = T_R \times K_{LA} \times (100 - C_L) - (V_R + V_{RE}) \times$$

K_{LA} étant le coefficient de transfert du système, V_R la vitesse spécifique de respiration des microorganismes, V_{RE} la vitesse spécifique de respiration endogène et T_R une constante .

• A l'équilibre on aura donc :

$$(4) \quad \mu V = F(1 - \alpha)$$

$$(5) \quad F(S_o - S) = V_S \times V$$

$$(6) \quad T_R \times K_{LA} \times (100 - C_L) = (V_R + V_{RE}) \times$$

• La quantité de biomasse recueillie à l'équilibre par unité de temps est

$$(7) \quad \text{PROD} = F(1 - \alpha) \times$$

2) Modélisation du système biologique [1] [2] [3]

Le taux de croissance spécifique μ de la biomasse, qui caractérise le système biologique, est une combinaison linéaire de V_S et de V_R :

$$(8) \quad \mu = P_o V_S + Q_o V_R$$

Le système biologique est donc défini par la façon dont V_S et V_R dépendent de S et de la concentration d'oxygène dissous C_L . On a :

$$(9) \quad V_S = V_{SM} \times \frac{S}{K_S + S} \times \frac{1}{1 + \frac{BE \times C_L}{K_B + C_L}}$$

où V_{SM} est la vitesse spécifique maximale d'absorption du substrat, K_S , K_B et BE étant des constantes.

$$(10) \quad V_R = \frac{S \times (K_2 V_1 + V_2 S)}{K_1 K_2 + K_2 \left(1 + \frac{K_1}{K_3}\right) S + W S^2} \times \frac{C_L}{K_L + C_L}$$

V_1 , V_2 , K_1 , K_2 , K_3 , K_L , W étant des constantes.

De plus, la vitesse spécifique V_{RE} de la respiration endogène est donnée par l'expression suivante :

$$(11) \quad V_{RE} = V_{REM} \times \frac{C_L}{K_{LE} + C_L}$$

V_{REM} étant sa valeur maximale et K_{LE} une constante.

3) Modélisation du système physique [4]

Le système physique englobe la description de la géométrie du fermenteur et les divers processus de transfert de masse et d'énergie.

- La hauteur H_L du liquide dans le fermenteur cylindrique étant choisie égale au diamètre de celui-ci, le volume utile du fermenteur est donné par :

$$(12) \quad V = \frac{\pi}{4} H_L^3$$

- L'aération du fermenteur est caractérisée par un indice NAE appelé nombre d'aération. Cet indice est lié au débit d'air injecté Q et à la vitesse de rotation de l'agitateur N par la relation :

$$(13) \quad NAE = \alpha_1 \frac{Q}{N \times H_L^3}$$

- Soient PU la puissance absorbée par l'agitation en absence d'aération et PG celle absorbée par l'agitation en présence d'aération. PU est donnée par :

$$(14) \quad PU = \beta_1 N^3 H_L^5 \quad \text{où } \beta_1 \text{ est une constante.}$$

La courbe donnant $\frac{PG}{PU}$ en fonction de NAE est une relation empirique :

$$(15) \quad PG = PU \times h(NAE)$$

- La vitesse linéaire V_L de l'air traversant la section principale du fermenteur et ramenée à cette section vaut :

$$(16) \quad V_L = \frac{Q}{\pi/4 H_L^2}$$

- Le coefficient de transfert K_{LA} dépend de la géométrie du fermenteur; de la pression PR de l'air à l'intérieur du fermenteur (exprimée en mm Hg), de la puissance d'agitation PG et de la vitesse de l'air V_L par la relation :

$$(17) \quad K_{LA} = \delta_1 \times \left[2 \times \left(1 + \frac{PR-760}{760} \right) + \frac{H_L}{10,3} \right] \times \left(\frac{PG}{V} \right)^{0,95} \times V_L^{0,67}$$

où δ_1 dépend de PR et de la température T de fermentation.

- D'une aération intense résulte une augmentation apparente du volume utile du fermenteur qui, exprimé en o/o, est appelée hold-up HOL et est donnée par la relation :

$$(18) \quad HOL = \left[\left(\frac{PU}{V} \right)^{0,4} \times V_L^{0,5} - 2,75 \right] / 0,725$$

Le volume total du fermenteur, compte-tenu d'une formation éventuelle de mousse V_o évaluée à 0,2 V , vaut alors :

$$(19) \quad V_T = V + V \times \frac{HOL}{100} + V_o = V \times \left(1,2 + \frac{HOL}{100} \right)$$

II - FORMULATION MATHEMATIQUE DU PROBLEME

Pour optimiser le process le biologiste a la possibilité de jouer sur un certain nombre de paramètres qui, une fois fixés, déterminent totalement le système : ce sont les variables de contrôle du système.

On prendra pour vecteur de contrôle :

$$u = (F, S_o, \alpha, H_L, NAE, C_L) \in \mathbb{R}^6$$

Le vecteur d'état y est alors :

$$y = (S, x, K_{LA}, N, Q, PU, PG, V_L, HOL, V_T) \in \mathbb{R}^{10}$$

1) Equations d'état

A l'équilibre, y est déterminé à partir de u par les équations implicites (4), (5), (6) et (13) à (19). Ce système sera noté :

$$A(u, y) = 0$$

où A est non linéaire.

2) Contraintes

a) Contraintes sur le contrôle :

Les variables de contrôle sont soumises aux contraintes suivantes :

$$0 < F \leq F_{\max}$$

$$0 < S_o \leq S_o_{\max}$$

$$0 \leq \alpha < 1$$

$$0 < H_L \leq H_L_{\max}$$

$$0 < NAE \leq 12$$

$$1 < C_L < 100$$

On transformera les inégalités strictes en inégalités larges : par exemple $F > 0$ sera remplacé par $F \geq F_{\min}$ où $F_{\min}$ est suffisamment voisin de 0 pour que la signification physique de la contrainte reste la même. On peut alors écrire : $u \in K_o$, où K_o est un convexe fermé borné de $\mathbb{R}^6$.

b) Contraintes sur l'état :

Pour que le modèle du I soit valable il nous faut imposer les contraintes suivantes :

$$x \leq 50 \text{ g/l}$$

$$V_L \leq 150 \text{ m/h}$$

$$0,1 \text{ HP/m}^3 \leq \frac{P}{V} \leq 2,5 \text{ HP/m}^3$$

$$\frac{N \times H_L^2 \times \rho}{9 \times \text{VIS}} \geq 6000$$

ρ étant la densité du milieu, VIS sa viscosité, cette contrainte signifie que le nombre de Reynolds est suffisamment grand pour qu'on soit en régime turbulent.

On notera ces contraintes sous la forme : $f(u,y) \leq 0$ où $f \in R^5$

c) Contrainte " spéciale "

Lorsque u est fixée, pour résoudre le système des équations d'état, on utilise (4) :

$$\mu(S, C_L) = \frac{F(1-\alpha)}{\pi/4 H_L^3}$$

Mais on doit avoir $S < S_0$ pour assurer la positivité de x et des autres variables d'état ; μ étant strictement croissante par rapport à S , on doit avoir :

$$F(1-\alpha) - \pi/4 H_L^3 \mu(S_0, C_L) < 0$$

qu'on note $g(u) < 0$.

3) Fonction-coût :

Le coût global du process est composé par les coûts unitaires d'investissement et de fonctionnement des postes qui le composent : production (PROD), matières premières (FS₀), agitation (PG), aération (Q), épuration (FS), écoulement (F), recyclage (RE), fermenteur (V_T). Il s'écrit :

$$\begin{aligned} \text{COUT} = & Q_1 \text{ PROD} + Q_2 \text{ FS} + Q_3 \text{ FS}_0 + Q_4 \text{ PG}^{E_1} + Q_5 \text{ Q}^{E_2} + Q_6 \text{ F} + Q_7 \text{ V}_T + Q_8 \text{ V}_T^{E_3} + Q_9 \text{ P}_G^{E_4} \\ & + Q_{10} \text{ Q}^{E_5} + Q_{11} \text{ RE} + Q_{12} \text{ PROD} + Q_{13} \end{aligned}$$

le coefficient de recyclage RE étant donné par :

$$\text{RE} = 0 \quad \text{si } \alpha = 0 \text{ (pas de recyclage)}$$

$$\text{RE} = 1 \quad \text{si } \alpha > 0 \text{ (nécessité d'un système de recyclage)}$$

On désire également que la production de biomasse PROD donnée par (7) soit proche d'une valeur K qui représente la production désirée de biomasse.

On prendra alors pour critère à minimiser une somme pondérée de COUT et de $(\text{PROD}-K)^2$:

$$J = \text{COUT} + C(\text{PROD}-K)^2$$

C étant la constante permettant au biologiste de donner plus ou moins d'importance à la contrainte sur la production.

COUT contient un terme non différentiable $Q_{11}\text{RE}$, qui est une fonction en escalier. J peut donc se mettre sous la forme : $J = J_0 + J_1$ où J_0 est différentiable et où J_1 est une fonction en escalier.

4) Formulation du problème d'optimisation :

Existe-t-il $(u_0, y_0) \in K \times R^{10}$ tel que :

$$A(u_0, y_0) = 0, \quad g(u_0) < 0, \quad f(u_0, y_0) \leq 0$$

$$\text{et} \quad J(u_0, y_0) = \inf_{\substack{u \in K \\ y \in R^{10}}} J(u, y)$$

$$A(u, y) = 0 \quad (P)$$

$$g(u) < 0$$

$$f(u, y) \leq 0$$

III - RESOLUTION DU PROBLEME D'OPTIMISATION (P)

On démontre aisément à l'aide du théorème des fonctions implicites et par des arguments de compacité que (P) admet au moins une solution.

A étant non linéaire et J non convexe il y a tout lieu de penser qu'il existe plusieurs minima locaux. Ce sont ces minima qu'on va chercher à atteindre.

Soit $K' = \{u \in K_0 : g(u) < 0\}$

g étant non convexe, K' n'est pas convexe.

Le problème de recherche des optima locaux se pose alors ainsi :

Existent-ils $(u_0, y_0) \in K' \times R^{10}$ et un voisinage V' de u_0 dans R^6 tels que

$$A(u_0, y_0) = 0, \quad f(u_0, y_0) \leq 0$$

et

$$J(u_0, y_0) = \inf_{\substack{u \in V' \cap K' \\ y \in R^{10} \\ A(u,y) = 0 \\ f(u,y) \leq 0}} J(u,y) \quad (P')$$

Principe de la méthode :

L'idée est de résoudre (P') par une méthode de type gradient, en traitant la contrainte $u \in K$ par projection, $g(u) < 0$ par continuité, $f(u,y) \leq 0$ à l'aide de multiplicateurs de Lagrange et $A(u,y) = 0$ par l'introduction d'un état adjoint.

1) Recherche d'un point-selle pour résoudre la contrainte $f(u,y) \leq 0$

Pour traiter la contrainte $f(u,y) \leq 0$, on introduit le lagrangien

$$\mathcal{L}(u,y,q) = J(u,y) + (q, f(u,y)) \quad , \quad q \in R_+^5$$

$\mathcal{L}$ peut se mettre sous la forme :

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + Q_{11} RE = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1$$

où $\mathcal{L}_0$ est différentiable et $\mathcal{L}_1$ une fonction en escalier.

q_0 est vecteur de Kuhn-Tucker ^[5] pour (P') si :

$$\inf_{\substack{u \in V' \cap K' \\ y \in R^{10} \\ A(u,y) = 0}} \mathcal{L}(u,y,q_0) = \inf_{\substack{u \in V' \cap K' \\ y \in R^{10} \\ A(u,y) = 0 \\ f(u,y) \leq 0}} J(u,y)$$

On sait que, pour que u_0 et y_0 soient solutions de (P') et pour que q_0 soit vecteur de Kuhn-Tucker associé, il faut et il suffit que $((u_0, y_0), q_0)$ soit point-selle de $\mathcal{L}$ sur $(V' \cap K') \times R^{10} \times R_+^5$.

Du fait de la non-convexité, l'existence de point-selle n'est pas assuré, mais pour trouver u_0 et y_0 on emploiera malgré tout une technique de recherche de point-selle. [6] [7]

a) Algorithme (A_1) de type Uzawa

On part de $u_1 \in K'$, $q_1 \in R_+^5$.

A la n^e itération, on calcule u_n , y_n et q_n de la façon suivante :

$$(a_1) \begin{cases} u_n \in V' \cap K_n \cap K' \\ A(u_n, y_n) = 0 \\ \mathcal{L}(u_n, y_n, q_{n-1}) = \inf_{\substack{u \in V' \cap K_n \cap K' \\ y \in \mathbb{R}^{10} \\ A(u, y) = 0}} \mathcal{L}(u, y, q_{n-1}) \end{cases}$$

$$q_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}_+^5} (q_{n-1} + \rho' f(u_n, y_n)) \quad \rho' > 0$$

Choix de K_n :

Soit k un réel positif compris entre 0 et 1.

Soit $\mathcal{H}_n$ l'homothétie de centre u_n et de rapport k .

K_n est l'homothétique de K_0 par la transformation $\mathcal{H}_n$.

Fig. 2 : Construction de K_n (représentation dans $\mathbb{R}^2$)

A chaque itération de cet algorithme, la recherche de u_n et de y_n nous amène à résoudre le problème de contrôle optimal (a_1) qu'on traitera plus bas.

Il convient également de remarquer que, si cet algorithme converge, ce sera vers un point maximum de $\mathcal{L}$ et non nécessairement vers un point-selle. Il faudra donc s'assurer que u_0 et y_0 sont bien solutions de (P') .

b) Algorithme (A_2) de type Arrow-Hurwicz :

Du système des équations d'état $A(u, y) = 0$, on peut, comme $\frac{\partial A}{\partial y}$ est inversible, exprimer en théorie, y en fonction de u : $y = \bar{y}(u)$.

D'où $\mathcal{L}_0(u, y, q) = \mathcal{L}_0(u, \bar{y}(u), q) = \bar{\mathcal{L}}_0(u, q)$

L'algorithme (A_2) peut alors s'écrire ainsi :

- On part de $u_1 \in K'$, $q_1 \in \mathbb{R}_+^5$.
- A la n^e itération, on calcule u_n , y_n et q_n de façon suivante :

$$\begin{cases} u_n = \text{Proj}_{K_n} (u_{n-1} - \rho_n \frac{\partial \bar{\mathcal{L}}_0}{\partial u} (u_{n-1}, q_{n-1})) \\ A(u_n, y_n) = 0 \\ q_n = \text{Proj}_{\mathbb{R}_+^5} (q_{n-1} + \rho' f(u_n, y_n)), \quad \rho' > 0 \end{cases}$$

K_n est défini de la même façon que dans (A_1) et ρ_n sera précisé plus tard. Si

cet algorithme converge, il faudra également s'assurer que u_0 et y_0 sont solutions de (P') .

2) Résolution du problème de contrôle (a_1) et calcul de $\frac{\partial \bar{L}_0}{\partial u}$:

L'idée, pour résoudre (a_1) , est de traiter les équations d'état sous forme de contraintes [8] [9] et donc d'introduire le lagrangien :

$$M_{n-1}(u, y, p) = J(u, y) + (q_{n-1}, f(u, y)) + (p, A(u, y)) \quad p \in \mathbb{R}^{10}$$

On démontre aisément le théorème suivant :

THEOREME Pour que (u_n, y_n, p_n) soit point-selle de M_{n-1} sur $((V' \cap K' \cap K_n) \times \mathbb{R}^{10}) \times \mathbb{R}^{10}$, il faut que :

$$A(u_n, y_n) = 0$$

$$\frac{\partial J_0}{\partial y}(u_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial y}(u_n, y_n) q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial y}(u_n, y_n) p_n = 0$$

$$\left(\frac{\partial \bar{L}_0}{\partial u}(u_n, q_{n-1}), u - u_n \right)_{\mathbb{R}^6} + \mathcal{L}_1(u) - \mathcal{L}_1(u_n) \geq 0 \quad \forall u \in V' \cap K_n \cap K' \quad (20)$$

avec :

$$\frac{\partial \bar{L}_0}{\partial u}(u_n, q_{n-1}) = \frac{\partial J_0}{\partial u}(u_n, y_n) + \frac{\partial f}{\partial u}(u_n, y_n) q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial u}(u_n, y_n) p_n$$

Pour résoudre le problème de contrôle (a_1) on pourra alors utiliser l'algorithme de type gradient projeté suivant : [10] [11]

- On part de $u_n^0 = u_{n-1}$
- La i^e itération donnant y_n^i, p_n^i et u_n^{i+1} à partir de u_n^i s'écrit :

$$A(u_n^i, y_n^i) = 0$$

$$\frac{\partial J_0}{\partial y}(u_n^i, y_n^i) + \frac{\partial f}{\partial y}(u_n^i, y_n^i) q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial y}(u_n^i, y_n^i) p_n^i = 0$$

$$u_n^{i+1} = \text{Proj}_{K_n} \left(u_n^i - \rho_n \left(\frac{\partial J_0}{\partial u}(u_n^i, y_n^i) + \frac{\partial f}{\partial u}(u_n^i, y_n^i) q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial u}(u_n^i, y_n^i) p_n^i \right) \right)$$

- $u_n^\infty = u_n$

Choix de ρ_n^i :

ρ_n^i sera choisi localement optimal pour le lagrangien $\mathcal{L}$, pour que l'algorithme converge vers un minimum local. Si on a par exemple une fonction $\mathcal{L}$ de ce type :

c'est ρ_0 qu'on retiendra. C'est dans ce sens que la minimisation de $\mathcal{L}$ est effectuée à l'intérieur d'un voisinage V' de u_0 comme cela a été défini dans l'algorithme (A_1) .

ρ_n^i devra également être tel que u_n^{i+1} appartienne à K' .

• Pratiquement on déterminera d'abord $\rho_{n \max}^i$ tel que les ρ de l'intervalle $[0, \rho_{n \max}^i]$ soient en bijection avec les points du projeté sur K_n de la demi-droite de descente d'origine u_n^i .

Dans la recherche du ρ optimal, il n'est pas judicieux de procéder par dichotomie du fait du caractère non convexe de $\mathcal{L}$. On divisera les intervalles en dix intervalles égaux, ce qui permet de mieux suivre l'évolution de $\mathcal{L}$ en fonction de ρ .

On calculera $\mathcal{L}(\text{Proj}_{K_n}(u_n^i - \frac{j}{10} \rho_{n \max}^i \frac{t_{\partial \bar{\mathcal{L}}_0}}{\partial u}(u_n^i, q_{n-1})))$

et

$$g(\text{Proj}_{K_n}(u_n^i - \frac{j}{10} \rho_{n \max}^i \frac{t_{\partial \bar{\mathcal{L}}_0}}{\partial u}(u_n^i, q_{n-1})))$$

pour j allant de 1 à 10 et dès que $\mathcal{L}$ ne décroît plus ou que g devient positif (pour un certain j_0), on recommence l'opération sur l'intervalle

$$I = \left[u_n^i - \frac{j_0 - 2}{10} \rho_{n \max}^i \frac{t_{\partial \bar{\mathcal{L}}_0}}{\partial u}, u_n^i - \frac{j_0}{10} \rho_{n \max}^i \frac{t_{\partial \bar{\mathcal{L}}_0}}{\partial u} \right]$$

(si $j_0 \neq 1$) jusqu'à ce que $\mathcal{L}$ soit minimum avec la précision qu'on souhaite. On est amené à considérer l'intervalle I ci-dessus car on peut avoir les deux configurations suivantes :

- On constate que, si on a utilisé le gradient de $\mathcal{L}_0$ dans l'algorithme, c'est $\mathcal{L}$ qu'on minimise par l'intermédiaire de ρ_n^i en accord avec (20) où $(\mathcal{L}_1(u) - \mathcal{L}_1(u_n))$ vaut soit 0 soit Q_{11} .
- ρ_n^i est donc tel que u_n^{i+1} soit le premier minimum local de $\mathcal{L}$ à partir de u_n^i sur le projeté sur K_n de la demi-droite de descente à condition que g soit resté négatif ou à défaut est tel que u_n^{i+1} annule g pour la première fois sur le projeté de cette demi-droite. C'est donc le choix de ρ_n^i qui permet de faire comme on l'a vu dans la définition de (A_1) une minimisation de $\mathcal{L}$ sur $V' \cap K_n \cap K'$, V' à cause du ρ localement optimal, K_n de la projection et K' parce qu'on oblige u_n^i à rester dans K' .

3) Formes définitives des algorithmes (A_1) et (A_2) :

a) Algorithme (A_1) :

- On part de $u_1 \in K'$, $q_1 = 0$
- On calcule u_n à partir de u_{n-1} et q_{n-1} à l'aide de l'algorithme suivant :
- $u_n^0 = u_{n-1}$
- la i^{e} itération donnant u_n^{i+1} à partir de u_n^i s'écrit :

$$A(u_n^i, y_n^i) = 0$$

$$\frac{\partial J_0}{\partial y}(u_n^i, y_n^i) + \frac{\partial f}{\partial y}(u_n^i, y_n^i)q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial y}(u_n^i, y_n^i)p_n^i = 0$$

$$u_n^{i+1} = \text{Proj}_{K_n} \left[u_n^i - \rho_n^i \left(\frac{\partial J_0}{\partial u}(u_n^i, y_n^i) + \frac{\partial f}{\partial u}(u_n^i, y_n^i)q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial u}(u_n^i, y_n^i)p_n^i \right) \right]$$

- $u_n^\infty = u_n$
- $A(u_n, y_n) = 0$
- $q_n = \text{Proj}_{R_+^5}(q_{n-1} + \rho' f(u_n, y_n))$ $\rho' > 0$

b) Algorithme (A_2) :

On part de $u_1 \in K'$, $q_1 = 0$

- u_n, y_n et q_n se calculent à partir de u_{n-1}, y_{n-1} et q_{n-1} de la façon suivante :

$$\frac{\partial J_0}{\partial y}(u_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{\partial f}{\partial y}(u_{n-1}, y_{n-1})q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial y}(u_{n-1}, y_{n-1})p_{n-1} = 0$$

$$u_n = \text{Proj}_{K_n} \left(u_{n-1} - \rho_n \left(\frac{\partial J_0}{\partial u}(u_{n-1}, y_{n-1}) + \frac{\partial f}{\partial u}(u_{n-1}, y_{n-1})q_{n-1} + \frac{\partial A}{\partial u}(u_{n-1}, y_{n-1})p_{n-1} \right) \right)$$

$$A(u_n, y_n) = 0$$

$$q_n = \text{Proj}_{R_+^5}(q_{n-1} + \rho' f(u_n, y_n)) \quad \rho' > 0$$

ρ_n est choisi de la même façon que ρ_n^0 dans (A_1) .

Remarque :

Justification du traitement spécial de la contrainte $g(u) < 0$

- Nous avons vu que cette contrainte équivaut à $S < S_0$. La contrainte $S < S_0$ aurait pu être incluse dans f et traitée par dualité, mais on constate que les algorithmes proposés nécessitent à chaque itération la résolution du système des équations d'état $A(u, y) = 0$. Or si la contrainte $S < S_0$ était traitée à l'aide de multiplicateurs de Lagrange on pourrait avoir au cours de l'algorithme $S_n > S_0$ donc $x_n < 0$ ce qui n'a plus de signification physique et empêche de résoudre le système des équations d'état.
- On aurait également pu penser traiter $g(u) < 0$ par projection sur K' au lieu de projeter sur K , mais K' n'est pas convexe et cette projection serait difficile.
- On a donc traité $g(u) < 0$ par continuité ; g étant continue, $g(u_n)$ négatif, il existe un voisinage de u_n où g est négatif et l'optimisation se fait dans ce voisinage. En fait cette contrainte ne peut devenir bloquante que dans les premières itérations car :

$$g(u) = 0 \Rightarrow x = 0 \Rightarrow \text{PROD} = 0 \Rightarrow J = \text{COUT} + CK^2$$

J est alors très grand et ne peut donc être un minimum.

IV - MISE EN OEUVRE - RESULTATS

1) Mise en oeuvre

Le choix de la valeur initiale u_1 dans les algorithmes est important du fait de la convergence vers des minima locaux. On a effectué un maillage de K_0 et étudié J , f et g aux noeuds de ce maillage. Les algorithmes ont été mis en oeuvre à partir de valeurs u_1 telles que $J(u_1)$ soit "assez petit" et que les contraintes soient vérifiées en ces points.

Rappelons que le lagrangien $\mathcal{L}$ s'écrit :

$$\mathcal{L}(u, y, q) = J(u, y) + \sum_{j=1}^5 q_j f_j(u, y)$$

Pour assurer une bonne pondération dans le lagrangien entre J et les termes $q_j f_j$, on a remplacé f_j par $K_j f_j$ et choisi K_j de sorte que $q_j f_j$ ait sensiblement comme ordre de grandeur le 1/10 de la valeur de J .

La constante ρ des algorithmes (A1) et (A2) a été prise égale à 1. On a adopté pour test d'arrêt des algorithmes l'optimalité de J à 10^{-5} près et la nullité de $q_j f_j$ pour $j \in \{1, \dots, 5\}$. Les valeurs numériques adoptées sont celles de la cinétique du *Saccharomyces Cerevisiae*.

2) Importance du rapport d'homothétie k et comparaison de (A1) et (A2).

alg. k	A 1	A 2
$\frac{1}{2}$	45 itérations 37 s $J_{\text{fin}} = 3560$	200 itérations 1 mn $J_{\text{fin}} = 5085$
1	200 itérations 1 mn $J_{\text{fin}} = 4800$	81 itérations 38 s $J_{\text{fin}} = 3560$

$$J_{\text{initial}} = 7017$$

Fig. 3 Comparaison de (A₁) et (A₂) suivant diverses valeurs de k sur un exemple.

Les essais numériques à partir de diverses valeurs initiales u_1 montrent que l'algorithme (A1) de type Uzawa, pris avec $k=1$, c'est à dire avec optimisation dans tout K , converge vers un optimum médiocre après de nombreuses itérations. La raison en est que J est brutalement minimisé dans les premières itérations, que les contraintes deviennent alors fortement positives et que les multiplicateurs de Lagrange agissent alors si brutalement pour les ramener en-dessous de 0 que J atteint des valeurs très élevées, ce qui crée de très fortes oscillations de J dans les premières itérations et entraîne une convergence médiocre. C'est ce qui a conduit à utiliser une restriction homothétique et on constate en général que pour $k=1/2$, l'algorithme (A1) converge régulièrement et vite vers de bons optima locaux.

L'algorithme (A2) utilisé avec $k=1$ est meilleur que (A1) avec le même k , car on ne fait qu'une descente suivant le gradient à chaque itération et l'optimisation est donc moins forte, ne créant pas de brusques oscillations. Par contre pour k plus petit l'algorithme (A2) est en général moins bon que (A1), car il converge plus lentement et même parfois vers de moins bons optima.

En définitive il semble que la meilleure méthode soit d'adopter (A1) avec $k=1/2$ et, si on n'a pas une bonne et rapide convergence, soit de diminuer k en utilisant toujours (A1), soit d'utiliser (A2) mais en augmentant k .

REMARQUE : JUSTIFICATION DE L'ECRITURE DE J COMME SOMME PONDEREE DE COUT ET DE $(PROD-K)^2$:

On désire que la production $PROD$ de biomasse soit proche d'une certaine valeur K . On peut considérer cela comme une contrainte : $PROD=K$, ce qui revient à minimiser $J=COUT$ et à introduire $f_6=PROD-K$. Mais les essais numériques sur (A1) et (A2) ne permettent pas d'obtenir une bonne convergence de u ; J tend vers une certaine valeur mais pour u_n on observe un phénomène de "zigzag" de ce type :

Ce phénomène est lié à la non-convexité et le fait de poser : $J=COUT + C(PROD-K)^2$ est une sorte de pénalisation de cette contrainte, qui a l'avantage de "convexifier"

J dans une certaine mesure et d'assurer une bonne convergence des algorithmes.

3°) Interprétation biologique des résultats

La recherche d'optima locaux à partir de différentes valeurs initiales de u permet de tirer un certain nombre de conclusions sur le système biologique à employer :

a) Le fait de s'imposer la production de biomasse nous impose la dimension optimale du fermenteur. En effet, en prenant une production de 20 000g/h de biomasse, tous les optima sont tels que le diamètre H_L du fermenteur est très voisin de 2m.

b) La concentration C_L d'oxygène dissous est très faible pour les u optimaux, la contrainte $C_L > 1\%$ s'avérant en général bloquante. Cela correspond à une minimisation de K_{LA} et donc du coût du transfert de l'oxygène de la phase gazeuse dans la phase liquide.

c) Le nombre d'aération NAE, qui peut varier dans l'intervalle $[0,12]$, est proche de 0,2 pour les optima ; en corrélation avec lui la vitesse d'aération Q est petite. Cela correspond à la minimisation du coût de l'aération. [12]

d) L'introduction d'un recyclage de la biomasse est intéressante, mais ce recyclage n'est pas indispensable quand la concentration S_0 du substrat injecté est grande.

CONCLUSION

L'optimisation de J nous impose la géométrie du fermenteur, nous montre l'intérêt du recyclage et nous apprend qu'il faut réduire au minimum indispensable le transfert d'oxygène de la phase gazeuse dans la phase liquide, en diminuant le plus possible l'aération. Telles sont les premières conclusions qu'on peut tirer de la mise en oeuvre de cette technique d'optimisation des processus de fermentation en continu. Une étude systématique est en cours à l'INRA de Dijon, dans l'idée de mettre en pratique ces algorithmes pour l'optimisation réelle des processus de fermentation en continu sur des installations pilotes et plus tard industrielles.

BIBLIOGRAPHIE

1. P.PERINGER,H.BLACHERE,G.CORRIEU et A.G.LANE : "Mathematical model of the kinetics of growth of *Saccharomyces Cerivisiae* 4th Int. Ferment. Symp.,Kyoto,Japan,1972.
2. P.PERINGER,H.BALCHERE,G.CORRIEU et A.G. LANE : "A Generalized Mathematical Model for the Growth Kinetics of *Saccharomyces Cerivisiae* with Experimental Determination of Parameters". Biotechnology and Bioengineering, Vol. XVI,1974.
3. J.BLUM,P.PERINGER,H.BLACHERE : "Optimal Single Cell Protein Production from Yeasts in a Continuous Fermentation Process". 1st Intersectional Congress of the International Association of Microbiological Societies. Sept.74. Tokyo.
4. S.AIBA,A.HUMPHREY,N.MILLIS : Biochemical Engineering Academic Press. 1965.
5. KUHN,TUCKER : "Non linear Programming" :Proceedings of the Second Berkeley Symposium on Mathematical Statistics and Probability" University of California Press. 1961.
6. ARROW-HURWICZ-UZAWA : Studies in Linear and Non Linear Programming : Stanford University Press. 1958.
7. R.GLOWINSKI : "Méthodes Itératives Duales pour la minimisation de fonctionnelles convexes". CIME 1971. Edizioni Cremonese. Rome 1973.
8. J.L.LIONS : Some aspects of the Optimal Control of Distributed Parameter Systems: SIAM. Philadelphia. 1972.
9. J.P. YVON : "Application des méthodes duales au contrôle optimal". Cahier de l'IRIA. 1971.
10. D.LEROY : "Méthodes numériques en contrôle optimal". Thèse 3ème cycle. Paris 1972.
11. J.CEA : Optimisation. Théorie et Algorithmes. Dunod 1971.
12. M. OKABE,S.AIBA,M.OKADA : "The modified complex Method as Applied to an Optimization of Aeration and Agitation in Fermentation". J. Ferment. Technol. Vol. 51. N°8. 1973.