

Estimation d'état et de paramètres cinétiques pour une classe de bioréacteurs

Denis GUILLAUME, Pierre ROUCHON

Centre Automatique et Systèmes

École des Mines de Paris,

60, boulevard Saint-Michel,

75272 Paris Cedex, FRANCE

E-mail: guillaume@cas.ensmp.fr

Mots clefs : bioréacteur, identification non linéaire, observateur non linéaire, injection de sortie.

Résumé

Le bioréacteur [3] obéissant à une loi de Monod et d'équations $\dot{s} = D(s_0 - s) - (\bar{\mu}s/(k + s))x$, $\dot{x} = (\bar{\mu}s/(k + s) - D)x$, d'état (x, s) (s le substrat, x la biomasse), de paramètres de Monod $(\bar{\mu}, k)$ inconnus, ($\bar{\mu} = \dot{k} = 0$), de sortie mesurée $y = s$, soumis aux perturbations mesurées $w(t) = (D(t), s_0(t))$, est équivalent, via un changement global de coordonnées sur l'état étendu $(s, x, \bar{\mu}, k)$ à un système d'ordre 4 de la forme $\dot{X} = A(y, w)X + b(y, w)$ avec une équation de sortie de la forme $C(y, w)X = d(y, w)$. Ainsi, les estimations de l'état x et des paramètres $(\bar{\mu}, k)$ peuvent être conduites simultanément grâce à des techniques linéaires classiques de moindres carrés récursifs. Des simulations illustrent l'intérêt de l'observateur non linéaire ainsi obtenu.

1 Introduction

L'observation et l'identification des systèmes non linéaires est un problème majeur qui n'a pas encore trouvé de solutions générales. La dernière décennie a été très fructueuse avec en particulier l'introduction des techniques de construction d'observateur par linéarisation et injection de sortie [11, 13], les techniques grands gains [6, 5], les observateurs par modes glissants [14]. Plus récemment des travaux ont été effectués sur la bilinéarisation par injection de sortie [8] et sur les classes de systèmes affines en l'état non mesuré [2]. L'identification des paramètres d'un système non linéaire présente d'importantes similitudes avec le problème de l'observation : un paramètre peut être considéré comme un état dont la dynamique est nulle.

Le but de cette note est de montrer, sur une classe de bioréacteurs obéissant à la loi de Monod, l'intérêt de la question plus abstraite suivante et généralisant la

linéarisation par injection de sortie (voir aussi [8, 2]) : la caractérisation des systèmes $\dot{x} = f(x, u, w)$, $y = h(x, u, w)$ équivalent, via un changement sur l'état, à un système de la forme $\dot{X} = A(y, w)X + b(y, w)$ et où l'équation de sortie admet la forme plus générale suivante $C(y, w)X = d(y, w)$. L'intérêt d'une telle forme canonique repose sur le fait que des moindres carrés récursifs sont alors possibles pour estimer X et donc x .

La dynamique des systèmes biologiques et chimiques comporte souvent des cinétiques fortement non linéaires. Ces non linéarités concernent tant l'état que la paramétrisation. Nous présentons ici des techniques de construction d'observateur et d'identification pour une classe de bioréacteurs étudiés dans [10]. Cette classe de bioréacteurs présente un intérêt tant au niveau de l'observation — on ne mesure souvent que le substrat s et on cherche à estimer la biomasse x —, qu'au niveau de l'identification — estimation des paramètres de la loi de Monod —.

Dans la section 2, nous présentons cette classe de bioréacteurs. La section 3 aborde l'estimation de la biomasse x lorsque les paramètres de Monod $(\bar{\mu}, k)$ sont connus. L'identification des paramètres $(\bar{\mu}, k)$ à partir de la mesure de l'état complet (x, s) fait l'objet de la section 4. Le problème simultané de l'observation de la biomasse x et de l'identification des paramètres $(\bar{\mu}, k)$ à partir de la mesure du substrat est traité dans la section 5. Enfin, dans la section 6, des simulations viennent illustrer la convergence des algorithmes d'estimations.

2 Le modèle de bioréacteur

Considérons la classe de bioréacteurs qui a fait l'objet d'une étude dans [10], décrite par les équations différentielles suivantes :

$$\dot{s} = D(s_0 - s) - \mu(s)x \quad (1)$$

$$\dot{x} = (\mu(s) - D)x \quad (2)$$

$$y = s \quad (3)$$

$$\mu(s) = \frac{\bar{\mu}s}{k+s} \quad (4)$$

Il s'agit d'un procédé de fermentation continu limité par un seul substrat, où x et s sont respectivement les concentrations de la biomasse et du substrat. D est le taux de dilution, s_0 est la concentration d'entrée en substrat et $\mu(s)$ le taux de croissance cellulaire.

3 Observation de x

L'estimation de la biomasse x à partir du substrat s et lorsque les paramètres k et $\bar{\mu}$ sont connus, trouve plusieurs solutions dans la littérature. Les techniques de grands gains [10], de linéarisation par injection de sortie [9] sont applicables à cette classe de réacteurs. Deux observateurs très simples peuvent être mis en oeuvre comme dans [7], le premier utilisant la passivité du système et la notion d'invariant chimique, le second est un observateur exponentiel réduit par injection de sortie.

On remarquera cependant que l'observateur par passivité défini par

$$\dot{\hat{z}} = D(s_0 - \hat{z}) \quad (5)$$

$$\hat{z} = \hat{x} + s \quad (6)$$

ne dépend pas de la cinétique du système. Quant à l'observateur réduit de type Luenberger défini par :

$$\dot{\hat{z}} = \hat{x} + ls \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \dot{\hat{z}} &= (\mu(s)(1-l) - D)\hat{z} \\ &\quad + lD(s_0 - s) \\ &\quad - ls(\mu(s)(1-l) - D) \end{aligned} \quad (8)$$

il converge trivialement pour $l \geq 1$ mais nécessite la connaissance de la loi $\mu(s)$.

4 Identification de k et $\bar{\mu}$

Nous cherchons maintenant à identifier les paramètres cinétiques, l'état complet (s, x) étant supposé connu. Nous avons donc deux paramètres à estimer, k et $\bar{\mu}$ (paramètres de la loi de Monod), qui apparaissent non linéairement dans les équations d'état. Nous allons ici présenter une méthode inspirée de [4].

Reprenons l'équation de la dynamique du substrat :

$$\dot{s} = D(s_0 - s) - \frac{\bar{\mu}s}{k+s}x \quad (9)$$

En multipliant de part et d'autre par $k+s$:

$$(k+s)\dot{s} = D(k+s)(s_0 - s) - \bar{\mu}s x \quad (10)$$

Nous obtenons alors l'équation :

$$k(\dot{s} - D(s_0 - s)) + \bar{\mu}s x = sD(s_0 - s) - s\dot{s} \quad (11)$$

qui dépend maintenant linéairement des paramètres.

Filtrons l'équation par un premier ordre. Cela revient à multiplier l'équation par le noyau

$$\phi(\tau, t) = e^{\lambda(\tau-t)} \quad (12)$$

avec λ positif, et à intégrer une fois pour $\tau \in]-\infty, t]$.

Après filtrage, nous obtenons une équation linéaire par rapport à k et $\bar{\mu}$:

$$k(s - \bar{w}_1(t)) + \bar{\mu}\bar{w}_2(t) = \bar{y}(t) - \frac{1}{2}s^2 \quad (13)$$

où :

$$\dot{\bar{w}}_1 = -\lambda\bar{w}_1 - \lambda s - D(s_0 - s) \quad (14)$$

$$\dot{\bar{w}}_2 = -\lambda\bar{w}_2 + s x \quad (15)$$

$$\dot{\bar{y}} = -\lambda\bar{y} + sD(s_0 - s) + \frac{\lambda}{2}s^2 \quad (16)$$

Nous pouvons alors appliquer les techniques classiques. On pourra se référer à [15], pour l'estimation de paramètres par la méthode des moindres carrés récurrents avec oubli exponentiel, et diverses variantes de l'algorithme.

Nous évoquerons ici la version simplifiée suivante où nous noterons $W = (\bar{w}_1, \bar{w}_2)$ et $p = (k, \bar{\mu})'$

$$\dot{\hat{p}} = -\alpha W'(Wp - y) \quad (17)$$

avec $\alpha > 0$. Notons $\tilde{p} = p - \hat{p}$ l'erreur d'estimation des paramètres. Sachant que nous avons $\dot{p} = 0$, la dynamique de l'erreur s'écrit :

$$\dot{\tilde{p}} = -\alpha W'W\tilde{p} \quad (18)$$

L'algorithme précédent converge exponentiellement si et seulement si il existe $T > 0$ et $\nu > 0$ tel que pour tout t ,

$$\int_t^{t+T} W'W d\tau \geq \nu I_d \quad (19)$$

Cette version ne présente pas les inconvénients d'explosion des gains lorsque les signaux mesurés ne sont plus assez excitants.

5 Estimation simultanée de x , k et $\bar{\mu}$

Nous étudions maintenant le cas où seule la concentration du substrat est mesurée et où la concentration en biomasse et les paramètres de la cinétique sont à estimer. Dans 5.1, nous présentons une méthode simple qui combine les résultats des deux sections précédentes. Dans la section 5.2, la distinction entre état et paramètres disparaît : nous montrons comment par des changements de variables bien choisis, on se ramène au linéaire.

5.1 Estimation en cascade

L'observateur réduit (5) est indépendant des paramètres et donc fournit une estimation de x qui peut être directement utilisée dans la méthode d'identification de la section 4. Cette solution particulièrement simple utilise pleinement la structure particulière de la classe de bioréacteurs.

5.2 Transformation globale en système affine

Nous établissons ici un résultat de mise sous forme affine. Notons que la forme affine obtenue ici constitue une extension des formes affines considérées dans [8] et [2] car la loi de sortie admet une forme plus générale. L'observateur correspondant est présenté avec un critère de convergence.

Notons : $Z = (s, x, \bar{\mu}, k)$, $w = (D, s_0)$, $h(Z, w) = s$ et

$$f(Z, w) = \begin{pmatrix} D(s_0 - s) - \mu(s)x \\ (\mu(s) - D)x \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

Le bioréacteur admet donc la forme 21 :

$$\begin{aligned} \dot{Z} &= f(Z, w) \\ y &= h(Z, w) \end{aligned} \quad (21)$$

Soit le difféomorphisme global de $\mathbb{R}^{+*} \times \mathbb{R}^{+*}$ dans $\mathbb{R} : (u, v) \rightarrow (u, g(u, v) = u \log(v/\alpha) + v)$ où α est une constante arbitraire. Nous noterons de manière abusive $g^{-1}(u, w)$ l'application qui à $u \in \mathbb{R}^{+*}$ et $w \in \mathbb{R}$ fixés associe l'unique $v \in \mathbb{R}^{+*}$ tel que $g(u, v) = w$.

Introduisons les ensembles I et J définis par : $I = \{Z = (Z_1, Z_2, Z_3, Z_4), Z_1 > 0, Z_2 \geq 0, Z_3 > 0, Z_4 > 0\}$ et $J = \{X = (X_1, X_2, X_3, X_4), X_1 \in \mathbb{R}, X_3 \in \mathbb{R}^{+*}, X_4 \in \mathbb{R}^{+*}, X_2 \geq X_3 g^{-1}(X_4, X_1)\}$

Proposition 1 *Le système (21) correspondant à la classe de bioréacteurs peut se mettre sous une forme affine en l'état non mesuré :*

$$\dot{X} = A(y, w)X + b(y, w) \quad (22)$$

$$y = C(y)X \quad (23)$$

par le difféomorphisme d'état global ϕ de I dans $J : Z =$

$$\begin{pmatrix} s \\ x \\ \bar{\mu} \\ k \end{pmatrix} \rightarrow X = \phi(Z) = \begin{pmatrix} k \log\left(\frac{s}{s_{max}}\right) + s \\ \bar{\mu}(x + s) \\ \bar{\mu} \\ k \end{pmatrix} \quad (s_{max}$$

est une constante positive arbitraire), où A , b et C sont données par les formules suivantes :

$$y = s \quad (24)$$

$$A(y, w) = \begin{pmatrix} a_1(y, w) & -1 & s & 0 \\ 0 & -D & Ds_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$b(y, w) = \begin{pmatrix} a_2(y, w) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (26)$$

$$C(y) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -\log\left(\frac{s}{s_{max}}\right) \end{pmatrix} \quad (27)$$

$$a_1(y, w) = \frac{D(s_0 - s)}{\log\left(\frac{s}{s_{min}}\right) s} \quad (28)$$

$$a_2(y, w) = -\frac{D(s_0 - s)}{\log\left(\frac{s}{s_{min}}\right)} + D(s_0 - s) \quad (29)$$

Preuve : Il suffit de dérouler les calculs.

Nous pouvons alors construire l'estimateur suivant inspiré des techniques moindres carrés [6] :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{X}} &= A(y, w)\hat{x} + b(y, w) \\ &\quad - P^{-1}C'(y)(C(y)\hat{X} - y) \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} \dot{P} &= -\theta P - A'(y, w)P - PA(y, w) \\ &\quad + C'(y)C(y) \end{aligned} \quad (31)$$

Un tel observateur converge tant que $P \geq \nu I_d$ avec $\nu > 0$ (critère de persistance). La preuve est immédiate avec l'introduction de la fonction de Lyapounov $V(\tilde{X}) = \tilde{X}'P\tilde{X}$.

Plus généralement nous avons :

Proposition 2 *Soit un système non linéaire (21) équivalent par difféomorphisme global à un système affine en l'état non mesuré :*

$$\dot{X} = A(y, w)X + b(y, w) \quad (32)$$

$$d(y, w) = C(y, w)X \quad (33)$$

alors l'observateur de la forme :

$$\begin{aligned} \dot{\hat{X}} &= A(y, w)\hat{X} + b(y, w) \\ &\quad - P^{-1}C'(y, w)(C(y, w)\hat{X} - d(y, w)) \end{aligned} \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \dot{P} &= -\theta P - A'(y, w)P - PA(y, w) \\ &\quad + C'(y, w)C(y, w) \end{aligned} \quad (35)$$

est convergent si les signaux y et w sont persistents, c'est-à-dire tels que $P \geq \nu I_d$ avec $\nu > 0$.

Preuve : la démonstration de la convergence, repose aussi sur l'introduction de la fonction de Lyapounov : $V(\tilde{X}) = \tilde{X}'P\tilde{X}$, avec $\tilde{X} = X - \hat{X}$. D'autres critères de convergence peuvent être déduits de [1, 12].

6 Simulations

Les simulations présentées correspondent à l'évolution de l'observateur avec une concentration en substrat en entrée constante s_0 et un débit constant D .

Nous reprenons les données numériques de l'article [10] :

$$\begin{aligned}\bar{\mu} &= 1.25h^{-1} \\ k &= 0.27gL^{-1} \\ s_0 &= 5gL^{-1} \\ D &= 1h^{-1}\end{aligned}$$

Les figures 1, 2 et 3 illustrent la synthèse de l'observateur par transformation en système affine. Les figures 1 et 2 représentent les paramètres et leurs estimations. La figure 3 représente l'estimation de la concentration de la biomasse.

Pour les simulations nous avons pris $\theta = 10$.

Nous constatons que malgré les erreurs importantes de conditions initiales, l'observateur par transformation affine converge avec un taux de convergence plus grand que la dynamique du système (environ 4h). Nous constatons que la convergence des estimations est très satisfaisante pour le paramètre $\bar{\mu}$ et la concentration en biomasse x , mais que l'estimation pour le paramètre k échappe temporairement à la contrainte physique $k \geq 0$.

Cette dernière constatation soulève le problème de la construction d'observateur dont les estimées satisfassent les contraintes physiques du système.

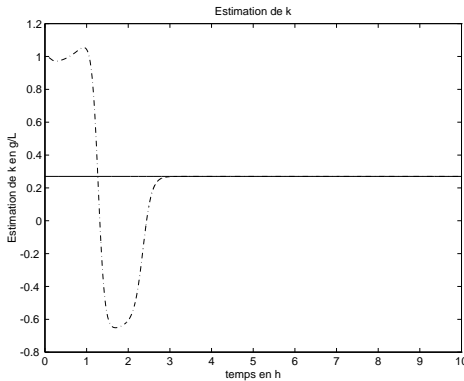


FIG. 1: Estimation de k (-).

7 Conclusion

Dans cette note nous étudions le problème de l'estimation de la concentration en biomasse d'un fermenteur ainsi que de l'identification des paramètres de la loi de Monod à partir de la mesure du substrat. Un rappel bref des méthodes existantes anticipe la contribution principale, le fait que cette classe de bioréacteurs est équivalente à un système affine en l'état par un difféomorphisme global non trivial et dont la loi de sortie est linéaire en l'état

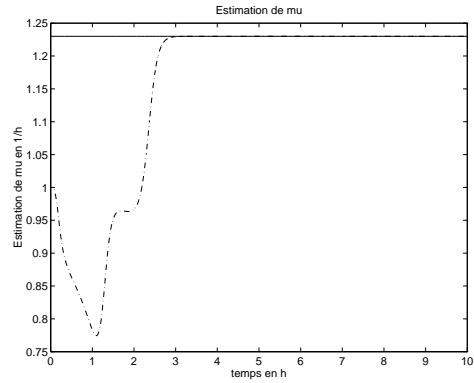


FIG. 2: Estimation de μ (-).

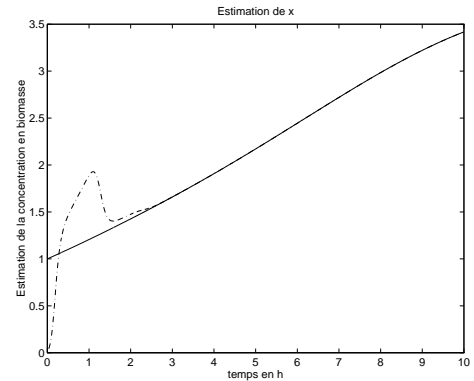


FIG. 3: Estimation de x (-).

mais non linéaire en la sortie. A notre connaissance la caractérisation de tels systèmes reste un problème ouvert.

Par ailleurs cet exemple pose le problème du respect par les estimées des contraintes physiques du système comme le respect des contraintes de l'état lors de la synthèse d'un contrôleur.

Références

- [1] Anderson B., 1977, Exponential Stability of Linear Equations arising from Adaptive Identification, *IEEE Trans. on Aut. Cont.* **22**,1, pp. 83-88.
- [2] Besançon, G. et Bornard, G., 1997, On Characterizing Classes of Extended-State-affine-Equivalent Systems up to Input/Output Injection. à paraître *Proceedings of the 4th European Control Conference ECC97*
- [3] Bastin, G. et Dochain, D., 1990, On-line Estimation and Adaptive Control of bioreactors. *Elsevier*
- [4] Chen, L. and Bastin, G., 1991, On the model identifiability of stirred tank reactors. *Proceedings of the 1st European Control Conference.* **1**, pp. 242-247.
- [5] Gauthier J.P, Hammouri, H., et Othman, S., 1992, A Simple Observer for Nonlinear Systems - Applications

- to bioreactors, *IEEE Trans. on Auto. Control*, **37**, 6, pp. 875-880.
- [6] Gibon-Fargeot, A.M., Hammouri, H. et Celle, F., 1994, Nonlinear observers for chemical reactors. *Chem. Engng Sci.* **49**, pp. 2287-2300
- [7] Guillaume, D., Rouchon, P. and Rudolph, J., 1997, Two Simple Observers for a Class of Polymerization Reactors. à paraître dans *Proceedings of the 4st European Control Conference ECC97*
- [8] Hammouri, H. et Gauthier, JP., 1992, Global Time-varying linearization up to output injection. *SIAM J. Control Optim.* **30**, 6, pp. 1295-1310.
- [9] Kantor, J.C., 1989, A finite dimensionnal nonlinear observer for an exothermic stirred-tank reactor. *Chem. Engng Sci.* **44**, pp. 1503-1510.
- [10] Kazakos, DJ., Manesis, SA. et Pimenides, TG., 1993, Nonlinear observers for fermentation processes and bioreactors. *Proceedings of the 2nd European Control Conference.* **1**, pp. 280-283.
- [11] Krener, A.J. and Respondek, W., 1985, Nonlinear observers with linearizable error dynamics. *SIAM J. Control Optim.* **23**, pp. 197-216.
- [12] Lohmiller, W. et Slotine JJ., 1996, On Metric Analysis and Observers for Nonlinear systems. *NSL-961001*.
- [13] Rudolph, J. and Zeitz, M., 1994, A Block Triangular Nonlinear Observer Normal Form. *Syst. Contr. Letters* **23**, 1-8.
- [14] Slotine, J.J, Hedrick, J.K et Misawa, E.A, 1987, Sliding Observers for Nonlinear Systems, *ASME-J. of Dynamics Syst., Meas. Control* **109**, pp. 245-252.
- [15] Slotine, J.J. et Li, W. Applied Nonlinear Control. (1991) *Prentice Hall*, pp. 358-388.