

X. YUAN

S. ZHANG

L. PIBOULEAU

S. DOMENECH

Une méthode d'optimisation non linéaire en variables mixtes pour la conception de procédés

RAIRO. Recherche opérationnelle, tome 22, n° 4 (1988),
p. 331-346

http://www.numdam.org/item?id=RO_1988__22_4_331_0

© AFCET, 1988, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « RAIRO. Recherche opérationnelle » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

UNE MÉTHODE D'OPTIMISATION NON LINÉAIRE EN VARIABLES MIXTES POUR LA CONCEPTION DE PROCÉDÉS (*)

par X. YUAN, S. ZHANG ⁽¹⁾, L. PIBOULEAU ⁽¹⁾ et S. DOMENECH ⁽¹⁾

Résumé. — Un algorithme d'optimisation mixte permettant de traiter des problèmes à grande échelle, soumis à des contraintes non linéaires, est présenté dans cet article. En supposant le problème convexe et en s'appuyant sur les concepts de la méthode de décomposition généralisée de Benders, on montre tout d'abord que la solution du problème original est équivalente à celle d'une séquence finie de problèmes mixtes linéaires comportant un nombre fini de contraintes. On montre également que la convergence des solutions de cette séquence de problèmes vers celle du problème original est obtenue lorsque deux solutions en variables entières sont identiques dans la séquence.

Après une présentation des étapes de l'algorithme, où l'on utilise une méthode de gradient réduit et une procédure de programmation mixte linéaire, deux exemples numériques sont détaillés. Le premier concerne un problème purement mathématique comportant des contraintes non linéaires. Le second, issu de la littérature, est relatif à la conception optimale d'un réseau de transport de gaz naturel, et montre l'adéquation de la procédure d'optimisation au traitement de problèmes à grande échelle, relatifs à des exemples industriels réels.

Mots clés : Programmation mixte non linéaire; Décomposition généralisée de Benders; Gradient réduit; Programmation mixte linéaire; Réseau de transport d'énergie.

Abstract. — A mixed-integer programming method for solving large-scale nonlinearly constrained problems is presented in this paper. Assuming the problem convexity, the equivalence of the solution of the original problem with the solution of a finite sequence of mixed-integer linear problems, involving a finite number of constraints is first proved by using the principles of the generalized Benders decomposition method. Then we show that the convergence of the solutions of this problem sequence towards the solution of the original problem, is reached when two integer solutions into the sequence are identical.

After a presentation of the logical steps of the algorithm, where a reduced gradient method and a mixed-integer linear programming procedure are implemented, two numerical examples are detailed. The first one is a mathematical problem involving nonlinear constraints. The second one, found in the literature, is related to the optimal design of a gas transportation network, and shows the capability of the procedure for solving large-scale problems derived from actual industrial cases.

Keywords : Mixed-integer nonlinear programming; Generalized Benders decomposition; Reduced gradient; Mixed-integer linear programming; Energy transportation network.

(*) Reçu octobre 1987.

(1) E.N.S.I.G.C., U.A.-C.N.R.S. n° 192, Chemin de la Loge, 31078 Toulouse Cedex, France.

INTRODUCTION

Les performances technico-économiques d'un procédé de fabrication de produits à partir de matières premières données et de diverses utilités (eau industrielle, vapeur, électricité,...) dépendent du choix et de l'ordonnement des opérations unitaires (réacteurs, séparateurs, échangeurs de chaleur, compresseurs,...) mais aussi de leurs conditions opératoires (taux de conversion, pression, température,...). La conception optimale du procédé constitue un problème mixte à grande échelle dont les variables discrètes (entières) représentent le choix et l'interconnexion (liaisons directes, recyclages) des unités et les variables continues sont relatives aux conditions opératoires.

On peut distinguer deux approches pour aborder ce problème de CAO :

- les méthodes fondées sur des techniques d'intelligence artificielle qui gèrent des règles heuristiques issues d'un apprentissage expérimental;
- les méthodes algorithmiques qui utilisent des procédures développées en programmation mathématique.

Les méthodes répertoriées dans la première approche sont à leur premier stade de développement et ne peuvent, en aucun cas, garantir une solution optimale du problème, c'est pourquoi le présent travail est orienté vers une approche algorithmique mixte.

TRAVAUX ANTÉRIEURS

La résolution d'un problème mixte a été généralement abordée par deux voies qui consistent, soit à :

- résoudre le problème en variables entières après avoir discrétisé l'ensemble des variables continues [15];
- traiter le problème de programmation non linéaire obtenu en substituant les variables entières par des approximations continues [14].

La première démarche met généralement en œuvre des méthodes de type Branch and Bound [5, 15], certes rapides et efficaces pour un choix donné des variables continues, mais présente l'inconvénient d'un important caractère combinatoire par suite du choix toujours délicat de la discrétisation des variables continues. La seconde approche nécessite une lourde formulation du problème par suite de la définition d'une superstructure [6, 7, 14] contenant toutes les structures possibles par l'intermédiaire de paramètres structuraux.

Le problème de programmation non linéaire résultant est en général de grande taille et nécessite la mise en œuvre d'algorithmes appropriés [16, 17].

La formulation et le traitement des problèmes en variables mixtes permet de supprimer les inconvénients précités et d'obtenir simultanément la structure et les conditions opératoires optimales d'un procédé complexe.

L'approche mixte peut être abordée dans le cas de problèmes entièrement linéaires [9, 10] mais ceci réduit le champ d'application en génie chimique dans la mesure où les modèles sont généralement non linéaires; c'est pourquoi il est préférable de développer une procédure de programmation mixte entière non linéaire (MINLP). Dans cette optique, on peut recenser deux approches principales, les méthodes de type Branch and bound [1, 11, 12] et celles fondées sur la décomposition généralisée de Benders [2, 8] (DGB).

Le premier type consiste à explorer l'arborescence des variables entières et à déterminer, en chaque sommet, les variables continues par résolution d'un problème NLP. Bien qu'il existe des possibilités pour réduire la fraction explorée de l'arborescence, la méthode nécessite cependant un volume de calculs important pour des problèmes à grande échelle. Toutefois le développement récent des machines à architectures parallèles et de l'algorithmique parallèle, comme en témoignent les nombreuses communications sur ce sujet au dernier Congrès TIMS/ORSA [18], contribuera à réduire de façon importante le temps de calcul. Dans la mesure où l'étude des problèmes mixtes constitue un thème de recherche récent en génie chimique, nous n'avons pas dans cette phase exploratoire orienté nos travaux vers la parallélisation des algorithmes. Nous présentons donc ci-après le développement d'une procédure MINLP s'appuyant sur les concepts de la méthode DGB.

PRINCIPE GÉNÉRAL DE RÉOLUTION DU PROBLÈME

Le problème (P) se présente sous la forme suivante:

$$\begin{array}{ll} \text{Min } f(x, y) & (1) \\ \text{(P)} \quad \begin{array}{l} x, y \\ g(x, y) \leq 0 \\ x \in X, \quad y \in Y \end{array} & \begin{array}{l} \\ (2) \\ (3) \end{array} \end{array}$$

où x représente le vecteur des variables continues $\in R^{n_1}$; y représente le vecteur des variables entières $\in N^{n_2}$; X est le domaine de définition de x ; Y est le domaine de définition de y et g est une application de $R^{n_1} \times N^{n_2}$ dans R^m , m étant le nombre de contraintes.

Dans les méthodes mentionnées dans la littérature, les fonctions f et g présentent généralement certaines propriétés particulières, comme par exemple le fait d'être linéaires et séparables en y [3, 4, 19].

On définit l'espace acceptable V de y par :

$$V = \{y : g(x, y) \leq 0, \text{ si } x \in X\} \quad (4)$$

En donnant à y une valeur particulière $\bar{y} \in Y \cap V$, on définit l'espace acceptable de x correspondant par :

$$A(\bar{y}) = \{x : g(x, \bar{y}) \leq 0\} \quad (5)$$

et un sous-problème $(S(\bar{y}))$ par :

$$(S(\bar{y})) \quad Z(\bar{y}) = \min_{x \in A(\bar{y})} f(x, \bar{y}).$$

La méthode de Benders [2, 8] consiste à effectuer une projection sur l'espace des y pour obtenir une forme (P_p) équivalente au problème original (P) :

$$(P_p) \quad \min_{y \in Y \cap V} Z(y)$$

La résolution consiste à fixer diverses valeurs de y afin d'obtenir l'ensemble des $A(y)$ représentant l'espace acceptable pour x (méthode de décomposition). On résout ensuite les problèmes $S(y)$ afin d'obtenir les valeurs de $Z(y)$ permettant de résoudre le problème (P_p) qui fournit la solution optimale y^* et le x^* correspondant par $S(y^*)$. Nous avons utilisé des notions de décomposition et projection combinées avec des procédures de linéarisation des fonctions f et g que nous supposons convexes en x et y pour résoudre le problème (P) .

Considérons le problème (P_1) suivant, qui est équivalent au problème (P) :

$$\min_{x, y, \mu_0} \mu_0 \quad (6)$$

$$(P_1) \quad f(x, y) - \mu_0 \leq 0 \quad (7)$$

$$g(x, y) \leq 0 \quad (8)$$

$$x \in X, \quad y \in Y, \quad \mu_0 \in R \quad (9)$$

Dans l'hypothèse où les fonctions f et g sont convexes, tout hyperplan tangent en (x_i, y_i) vérifie la propriété de minoration suivante :

$$f(x_i, y_i) + \nabla f_x(x_i, y_i)(x - x_i) + \nabla f_y(x_i, y_i)(y - y_i) \leq f(x, y) \quad (10a)$$

$$g(x_i, y_i) + \nabla g_x(x_i, y_i)(x - x_i) + \nabla g_y(x_i, y_i)(y - y_i) \leq g(x, y) \quad (10b)$$

L'espace des contraintes (7-8) peut être représenté par l'ensemble infini des demi-espaces (contenant les solutions acceptables) engendrées par les hyperplans (10) correspondant à tout couple (x, y) vérifiant les contraintes (7-8).

Compte tenu du caractère discret de y , la construction des hyperplans est effectuée en considérant l'ensemble continu \tilde{V} suivant: $\tilde{V} = \{\tilde{y} : g(x, \tilde{y}) \leq 0, \text{ si } x \in X\}$, et on a donc: $(Y \cap V) \subset (Y \cap \tilde{V})$. La linéarisation des contraintes (7-8) en (x_i, y_i) conduit au demi-espace défini par l'hyperplan tangent :

$$1_f(x_i, \tilde{y}_i) = f(x_i, \tilde{y}_i) + \nabla f_x(x_i, \tilde{y}_i)(x - x_i) + \nabla f_y(x_i, \tilde{y}_i)(y - \tilde{y}_i) - \mu_0 \leq 0 \quad (11 a)$$

$$1_g(x_i, \tilde{y}_i) = g(x_i, \tilde{y}_i) + \nabla g_x(x_i, \tilde{y}_i)(x - x_i) + \nabla g_y(x_i, \tilde{y}_i)(y - \tilde{y}_i) \leq 0 \quad (11 b)$$

$$\tilde{y}_i \in (Y \cap \tilde{V}), x_i \in X.$$

En étendant la linéarisation à tous les points acceptables (x_i, \tilde{y}_i) , on obtient la forme équivalente (P_2) du problème (P_1)

$$\begin{array}{l} \text{Min } \mu_0 \\ x, y, \mu_0 \end{array} \quad (12)$$

$$(P_2) \quad l_f(x_i, \tilde{y}_i) \leq 0 \quad (13)$$

$$l_g(x_i, \tilde{y}_i) \leq 0 \quad (14)$$

$$\forall x_i \in X, \quad \forall \tilde{y}_i \in (Y \cap \tilde{V}), \quad x \in X, \quad y \in Y, \quad \mu_0 \in R \quad (15)$$

Le problème (P_2) ainsi formulé ne comporte que des contraintes linéaires; cependant, compte tenu de l'infinité de contraintes, il n'est pas possible de mettre en œuvre une procédure classique de programmation mixte linéaire pour le résoudre. Cette difficulté peut être surmontée en remarquant que Y est un ensemble discret et fini. En effet, en linéarisant les contraintes (7-8) sur l'ensemble des couples (x_i, y_i) tels que $x_i \in X$ et $y_i \in (Y \cap V)$, on obtient le problème (P_3) équivalent à (P_1) :

$$\begin{array}{l} \text{Min } \mu_0 \\ x, y, \mu_0 \end{array} \quad (16)$$

$$(P_3) \quad l_f(x_i, y_i) \leq 0 \quad (17)$$

$$l_g(x_i, y_i) \leq 0 \quad (18)$$

$$\forall x_i \in X, \quad \forall y_i \in (Y \cap V), \quad x \in X, \quad y \in Y, \quad \mu_0 \in R \quad (19)$$

Compte tenu de l'infinité des points $x_i \in X$, le problème (P_3) comporte encore un nombre infini de contraintes. Il est nécessaire de formuler un quatrième et dernier problème équivalent (P_4) comportant un nombre fini de contraintes.

Considérons le problème (P_4) suivant :

$$\begin{aligned} & \text{Min } \mu_0 & (20) \\ & \quad x, y, \mu_0 \\ (P_4) \quad & l_f(x_i, y_i) \leq 0, & \forall i \in T & (21) \\ & l_g(x_i, y_i) \leq 0, & \forall i \in T & (22) \\ & x \in X, \quad y \in Y, \quad \mu_0 \in R & (23) \end{aligned}$$

où T est l'ensemble des indices i tels que x_i est une solution optimale du sous-problème $S(y_i)$, $\forall y_i \in (Y \cap V)$.

Cette démarche revient à ne conserver, parmi l'ensemble infini des contraintes de (P_3) , que celles qui correspondent à des points situés sur la projection de (P_1) .

L'équivalence des problèmes (P_4) et (P_1) est établie par le théorème 1 suivant, que nous donnons ici sans démonstration.

THÉORÈME 1 : *Si $\nabla f_x(x^*, y^*) \neq 0$, toute solution optimale (x^*, y^*) de (P_4) est solution optimale de (P_1) et inversement.*

La résolution directe de (P_4) nécessite celle de tous les sous-problèmes $S(y_i)$, $\forall y_i \in (Y \cap V)$ et conduit à un volume de calculs trop important que l'on peut limiter en mettant en œuvre une stratégie de relaxation analogue à celle proposée par Geoffrion [8].

Ainsi, la procédure itérative est donnée par le schéma suivant pour la k -ième itération :

$$\begin{aligned} & \text{Min } \mu_0 & (24) \\ & \quad x, y, \mu_0 \\ (P_4^k) \quad & l_f(x_i, y_i) \leq 0, & \forall i \in T^k & (25) \\ & l_g(x_i, y_i) \leq 0, & \forall i \in T^k & (26) \\ & x \in X, \quad y \in Y, \quad \mu_0 \in R & (27) \\ & T^k = \{i : i = 1, 2, \dots, k\} \quad \text{avec } T^k \subset T. & (28) \end{aligned}$$

La solution (\hat{x}^{k+1}, y^{k+1}) de (P_4^k) est obtenue à l'aide d'un algorithme classique de programmation mixte linéaire. On résout ensuite le sous-problème $S(y^{k+1})$ pour générer un nouveau point x^{k+1} qui permet de définir le problème (P_4^{k+1}) en ajoutant les contraintes associées à x^{k+1} . On réitère la procédure jusqu'à la convergence.

PROPRIÉTÉS DE CONVERGENCE

Une première possibilité d'arrêt de l'itération consiste à comparer les bornes et admettre la convergence lorsqu'elles sont arbitrairement proches. Toutefois, cette démarche dépend du choix toujours délicat de la valeur de l'écart admise. Pour pallier cette difficulté, on préfère utiliser le test de convergence fourni par le théorème 2, également donné sans démonstration.

THÉORÈME 2 (propriété de répétition) : *Si la solution y^{k+1} du problème (P_4^k) est analogue à celle y^p du problème (P_4^{p-1}) avec $p \leq k$, alors $y^* = y^p$ est solution du problème original (P).*

Pour les variables continues, la solution x^* est celle du sous-problème $S(y^p)$. Ce critère de convergence présente le double avantage d'effectuer un test d'arrêt sur des valeurs entières et d'éviter une résolution supplémentaire du sous-problème S .

ALGORITHME

Les différentes étapes sont résumées ci-après.

Étape 1 : Initialisation.

On initialise le numéro de l'itération k avec la valeur 1, la borne supérieure $Z_{\text{sup}} = +\infty$. On choisit une valeur de y^k dans l'ensemble $Y \cap V$.

Étape 2 : Programmation non linéaire.

La résolution du problème continu non linéaire $S(y^k)$, permet d'obtenir le point x^k et la valeur correspondante du critère $Z(y^k)$; la procédure de résolution est indiquée dans les références [16, 17].

Étape 3 : Actualisation de la borne supérieure.

Si la valeur de $Z(y^k)$ est supérieure ou égale à Z_{sup} , on va à l'étape 4. Sinon, on actualise Z_{sup} avec cette valeur, et on pose temporairement $y^* = y^k$ et $x^* = x^k$.

Étape 4 : Formulation du problème relaxé (P_4^k) .

On linéarise f et g sur le couple (x^k, y^k) pour définir le problème (P_4^k) ; les gradients par rapport aux variables discrètes sont évalués en utilisant la notion de sous-gradient.

Étape 5 : Programmation mixte linéaire.

La résolution du problème (P_4^k) par une méthode classique de programmation mixte linéaire [13] fournit un nouveau compte (\hat{x}^{k+1}, y^{k+1}) dont seul y^{k+1} présente de l'intérêt pour la suite de la procédure.

Étape 6: Test de convergence.

On compare y^{k+1} avec tous les y^p , $p=1$ à k , afin d'effectuer le test de répétition. S'il existe un indice p tel que $y^p = y^{k+1}$ ($p \leq k$), la solution optimale du problème original est le dernier couple mémorisé (x^*, y^*) à l'étape 3. Sinon, on incrémente d'une unité l'indice d'itération et l'on revient à l'étape 2.

Remarques: 1. Puisque l'espace de définition Y des variables entières est supposé fini, le test de répétition utilisé dans l'algorithme permet d'atteindre la convergence en un nombre fini d'itérations.

2. Pour démontrer le théorème 1, il est nécessaire de supposer que $\nabla f_x(x^*, y^*)$ est non nul, car dans le cas contraire cela signifierait que la solution de (P_4) est indépendante de x . En fait, on ne résoud pas le problème (P_4) , mais la séquence finie de problèmes (P_4^k) . La propriété de répétition permet toujours de déterminer le point solution y^* ; le point x^* correspond alors à la solution du sous-problème $S(y^*)$ déjà trouvée dans la séquence.

3. Les démonstrations des diverses équivalences de problèmes et des théorèmes sont toutes détaillées dans la référence [20].

EXEMPLES NUMÉRIQUES

1. Problème P1

Ce problème purement mathématique comporte des contraintes non linéaires, il s'exprime par :

$$\begin{aligned} \min_{x, y} & (y_1 - 1)^2 + (y_2 - 2)^2 + (y_3 - 1)^2 - \text{Log}(y_4 + 1) \\ & + (x_1 - 1)^2 + (x_2 - 2)^2 + (x_3 - 3)^2. \\ 2y_1 + y_2 + y_3 + x_1 + x_2 + x_3 & \leq 5, \quad y_3^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^3 \leq 5,5, \\ y_1 + x_1 & \leq 1,2, \quad y_2^2 + x_2^2 \leq 1,64, \\ y_2 + x_2 & \leq 1,8, \quad y_3^2 + x_3^2 \leq 4,25, \\ y_3 + x_3 & \leq 2,5, \quad y_2^2 + x_3^2 \leq 4,64, \\ y_4 + x_1 & \leq 1,2, \quad x_i \geq 0, i = 1 \text{ à } 3, \\ & y_i = 0 \text{ ou } 1, i = 1 \text{ à } 4. \end{aligned}$$

Nous avons choisi pour point initial $y^0 = [0 \ 1 \ 1 \ 0]$. La convergence a été obtenue en sept itérations et conduit à la solution optimale suivante :

$$x^{*T} = [0,2 \ 0,8 \ 1,908], \quad y^{*T} = [0 \ 1 \ 0 \ 1], \quad Z^* = 5,5796$$

L'évolution des bornes inférieures et supérieures à chaque itération est représentée sur la figure 1.

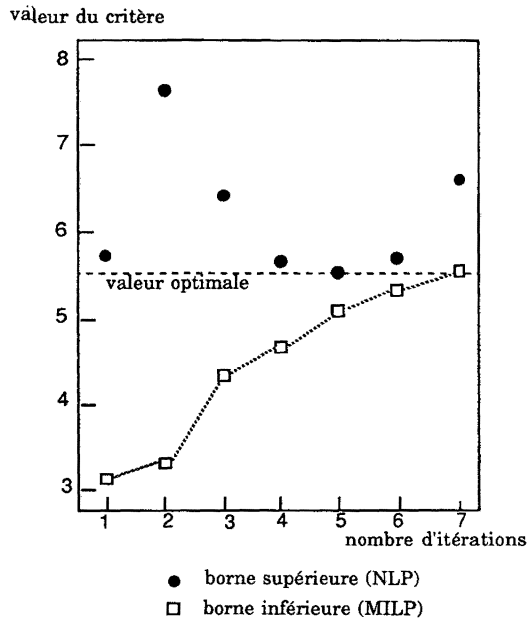


Figure 1. — Évolution des bornes pour le problème P1.

2 Problème P2

Ce problème a trait à la recherche de la structure et des conditions opératoires optimales d'un réseau de transport de gaz naturel; il a été formulé par Duran et Grossmann [4]. Les variables discrètes sont binaires et représentent la présence ou l'absence d'un compresseur dans le réseau. Les variables continues sont relatives d'une part aux conditions opératoires (pressions d'aspiration et de refoulement, puissances des compresseurs) et d'autre part aux coordonnées géographiques des compresseurs (implantation sur le site).

Le critère considéré est le coût total annuel représentant la somme des coûts opératoires et de maintenance et des coûts d'investissement annualisés

des compresseurs et des lignes de canalisation. La variable binaire traduisant l'absence ou la présence d'un compresseur dans le réseau apparaît de façon multiplicative dans le coût d'investissement. On recherche le réseau optimal à l'intérieur d'une superstructure contenant un nombre maximal de branches et de compresseurs dans chacune d'elles. Un exemple comportant 10 compresseurs, un point de production et deux points de livraison est représenté sur

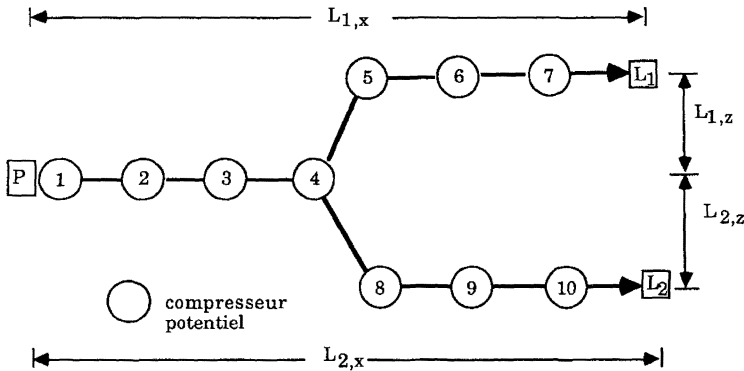


Figure 2. — (a) Superstructure pour le problème des compresseurs.

la figure (2 a). La notion de superstructure dans laquelle les variables binaires sont remplacées par des approximations continues a déjà été évoquée par Floquet *et al.* [7] dans le cadre de l'utilisation d'une procédure de gradient réduit pour la synthèse optimale de procédés. L'approche mixte présente l'intérêt de pouvoir réduire considérablement le nombre de variables continues représentant les paramètres structuraux. Le problème se formule ainsi :

$$\begin{aligned} \text{Min } Z = \text{Min} \left\{ C_f \sum_{i=1}^{10} y_i + C_0 (x_1 + x_5 + x_{10} + x_{15} + x_{20} \right. \\ \left. + x_{25} + x_{30} + x_{35} + x_{40} + x_{45}) \right\} \\ + B_1 (x_3^2 + x_4^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_2) - \exp(2x_6)]^{-\alpha} \\ + B_2 (x_8^2 + x_9^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_7) - \exp(2x_{11})]^{-\alpha} \\ + B_3 (x_{13}^2 + x_{14}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_{12}) - \exp(2x_{16})]^{-\alpha} \\ + B_4 (x_{18}^2 + x_{19}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_{17}) - \exp(2x_{21})]^{-\alpha} \\ + B_4 (x_{50}^2 + x_{51}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_{17}) - \exp(2x_{36})]^{-\alpha} \\ + B_5 (x_{23}^2 + x_{24}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_{22}) - \exp(2x_{26})]^{-\alpha} \\ + B_6 (x_{28}^2 + x_{29}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2x_{27}) - \exp(2x_{31})]^{-\alpha} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + B_7 (x_{33}^2 + x_{34}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2 x_{32}) - \text{Pout } 8^2]^{-\alpha} \\
& + B_8 (x_{38}^2 + x_{39}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2 x_{37}) - \exp(2 x_{41})]^{-\alpha} \\
& + B_9 (x_{43}^2 + x_{44}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2 x_{42}) - \exp(2 x_{46})]^{-\alpha} \\
& + B_{10} (x_{48}^2 + x_{49}^2)^{1/2 (\alpha+1)} [\exp(2 x_{47}) - \text{Pout } 12^2]^{-\alpha} \}
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
& x_6 - x_7 \leq 0, & x_{26} - x_{27} \leq 0, & x_8 \leq U_x y_2, & x_{33} \leq U_x y_7, \\
& x_{11} - x_{12} \leq 0, & x_{31} - x_{32} \leq 0, & x_{13} \leq U_x y_3, & x_{38} \leq U_x y_8, \\
& x_{16} - x_{17} \leq 0, & x_{36} - x_{37} \leq 0, & x_{23} \leq U_x y_5, & x_{43} \leq U_x y_9, \\
& x_{21} - x_{22} \leq 0, & x_{41} - x_{42} \leq 0, & x_{28} \leq U_x y_6, & x_{48} \leq U_x y_{10}, \\
& x_6 - x_2 \leq -\varepsilon, & x_{26} - x_{22} \leq -\varepsilon, & -x_8 \leq U_x y_2, & -x_{33} \leq U_x y_7, \\
& x_{11} - x_7 \leq -\varepsilon, & x_{31} - x_{41} \leq -\varepsilon, & -x_{13} \leq U_x y_3, & -x_{38} \leq U_x y_8, \\
& x_{16} - x_{12} \leq -\varepsilon, & x_{36} - x_{17} \leq -\varepsilon, & -x_{23} \leq U_x y_5, & -x_{43} \leq U_x y_9, \\
& x_{21} - x_{17} \leq -\varepsilon, & x_{41} - x_{37} \leq -\varepsilon, & -x_{28} \leq U_x y_6, & -x_{48} \leq U_x y_{10}, \\
& & x_{46} - x_{42} \leq -\varepsilon, & & \\
& -x_2 \leq -\ln(\text{Pin } 1), & x_9 \leq U_z y_2, & -x_9 \leq U_z y_2, & \\
& -x_{32} \leq -\ln(\text{Pout } 8), & x_{14} \leq U_z y_3, & -x_{14} \leq U_z y_3, & \\
& -x_{47} \leq -\ln(\text{Pout } 12), & x_{24} \leq U_z y_5, & -x_{24} \leq U_z y_5, & \\
& x_1 \leq U_c y_1, & x_{25} \leq U_c y_6, & x_{29} \leq U_z y_6, & -x_{29} \leq U_z y_6, \\
& x_5 \leq U_c y_2, & x_{30} \leq U_c y_7, & x_{34} \leq U_z y_7, & -x_{34} \leq U_z y_7, \\
& x_{10} \leq U_c y_3, & x_{35} \leq U_c y_8, & x_{39} \leq U_z y_8, & -x_{39} \leq U_z y_8, \\
& x_{15} \leq U_c y_4, & x_{40} \leq U_c y_9, & x_{44} \leq U_z y_9, & -x_{44} \leq U_z y_9, \\
& x_{20} \leq U_c y_5, & x_{45} \leq U_c y_{10}, & x_{49} \leq U_z y_{10}, & -x_{49} \leq U_z y_{10}, \\
& x_3 + x_8 + x_{13} + x_{18} + x_{23} + x_{28} + x_{33} = L_1 x, \\
& x_3 + x_8 + x_{13} + x_{38} + x_{43} + x_{48} + x_{50} = L_2 x, \\
& x_4 + x_9 + x_{14} + x_{19} + x_{24} + x_{29} + x_{34} = L_1 x, \\
& x_4 + x_9 + x_{14} + x_{39} + x_{44} + x_{49} + x_{51} = L_2 x, \\
& \exp \{ b [x_2 - \ln(\text{Pin } 1)] \} - F_1 x_1 - 1 \leq 0, \\
& \exp [b (x_1 - x_6)] - F_2 x_5 - 1 \leq 0, \\
& \exp [b (x_{12} - x_{11})] - F_3 x_{10} - 1 \leq 0, \\
& \exp [b (x_{17} - x_{16})] - F_4 x_{15} - 1 \leq 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\exp [b (x_{22}-x_{21})]-F_5 x_{20}-1 \leq 0, \\
&\exp [b (x_{27}-x_{26})]-F_6 x_{25}-1 \leq 0, \\
&\exp [b (x_{32}-x_{31})]-F_7 x_{30}-1 \leq 0, \\
&\exp [b (x_{37}-x_{36})]-F_8 x_{35}-1 \leq 0, \\
&\exp [b (x_{42}-x_{41})]-F_9 x_{40}-1 \leq 0, \\
&\exp [b (x_{47}-x_{46})]-F_{10} x_{45}-1 \leq 0.
\end{aligned}$$

Il comporte 10 variables binaires, 51 variables naturelles continues auxquelles il faut ajouter les variables d'écart dont le nombre n'est pas constant au cours des itérations (il est de l'ordre de 25), 67 contraintes linéaires (y compris les contraintes de bornes) et 10 contraintes non linéaires.

En admettant que tous les compresseurs sont identiques, les termes C_f et C_0 représentent respectivement les coûts d'investissement et opératoires d'un compresseur. Les coefficients B_i , $i=1$ à 12 sont déterminés par la relation : $B_i = C_p \text{ Sg } T [P_0 / (0,375 T_0)]^2 (q_{\text{out},i})^2$ et le terme b est donné par : $b = z (\gamma - 1) / \gamma$.

Les paramètres F_i , $i=1$ à 10 sont définis par :

$$F_i = [(\gamma - 1) \eta / (4,0426 T \gamma)] / q_{\text{in},i}$$

Au niveau de chaque compresseur, on admet une perte de débit de 0,5%, ce qui permet de calculer à partir de $q_{\text{in},1}$ les divers débits $q_{\text{in},i}$ et $q_{\text{out},i}$ avec $i \geq 1$.

Le problème étant issu de la référence [4], nous avons conservé les mêmes unités pour l'ensemble des données que nous avons rassemblées dans le tableau I.

Signification des variables continues

Pour un compresseur j quelconque ($j \neq 1$), les variables x_{5j-7} et x_{5j-6} représentent les coordonnées rapportées au compresseur qui le précède, x_{5j-5} représente sa puissance, x_{5j-4} et x_{5j-3} sont les logarithmes des pressions d'aspiration et de refoulement. Les coordonnées du premier compresseur et des deux points de livraison sont données.

Résultats: Nous avons effectué trois essais à partir de points initiaux différents afin de comparer la vitesse de convergence. Les résultats sont consignés dans le tableau II. On obtient la même valeur du critère avec un nombre égal d'itérations. Cependant, la différence que l'on constate entre la durée des calculs provient de la recherche automatique du point de base dans

TABLEAU I

Données pour le problème des compresseurs.

Données économiques	Divers constantes
$C_f = 10\,000$ \$/an $C_o = 103,93$ \$/an $C_p = 21\,283,77$ \$ km ⁻¹ . m ⁻¹ . an ⁻¹ —	$\alpha = 3/16$, $Z = 1$, $\eta = 1$ $\gamma = 1,26$, $S_g = 0,76$ $P_o = 0,1013$ MPa, $T_o = 288,9$ k $T = 288,9$ k, $\varepsilon = 10^{-8}$
Bornes	Spécifications
$U_c = 7\,457$ kW $U_x = 281,63$ km $U_z = 80,46$ km $L_{1x} = 281,63$ km $L_{2x} = 321,86$ km $L_{1z} = 80,46$ km $L_{2z} = 0$ km	$P_{in, 1} = 3,447$ MPa $P_{out, 7} = 4,137$ MPa $P_{out, 10} = 2,068$ Mpa — $q_{in, 1} = 16,992$ MMm ³ /jour $q_{in, 5} = q_{in, 8} = (q_{out, 4})/2$ —

TABLEAU II

Résultats du problème des compresseurs.

Configuration initiale y^{0T}	0 1 0 0 1 0 0 0 0 0	1 1 0 1 0 0 0 1 0 0	1 1 1 0 0 0 0 1 0 0
Nombre d'itérations.	3	3	3
Solutions z^* :	$7,8368 \times 10^6$ (\$)	$7,8368 \times 10^6$ (\$)	$7,8368 \times 10^6$ (\$)
Solution y^{*T} :	1 1 1 0 0 0 0 0 0 0	1 1 1 0 0 0 0 0 0 0	1 1 1 0 0 0 0 0 0 0
Temps CPU (z)	168,5	420,6	223,4

la méthode du gradient réduit projeté, par suite d'initialisations différentes. La structure optimale est présentée sur la figure (2 b).



Figure 2. — (b) Configuration optimale pour le problème des compresseurs.

On constate que le réseau ne comporte que trois compresseurs tous situés au point de production et de même puissance (7 457 kW). Le taux de compression est également identique (1,44) pour chaque appareil.

CONCLUSION

Nous avons présenté dans cette étude une procédure d'optimisation MINLP s'appuyant sur les principes de décomposition et de projection proposés par Benders. Cette procédure présente l'avantage, par rapport aux travaux antérieurs, de pouvoir traiter les problèmes non linéaires en variables discrètes et continues et non nécessairement séparables. Les étapes de projection et de linéarisation permettent de construire un problème mixte linéaire équivalent au problème original. Cette démarche permet alors de le traiter aisément par une méthode classique de programmation mixte linéaire, contrairement aux autres procédures qui traitent le problème mixte non linéaire à l'aide des formes duales du problème original (celle de Geoffrion par exemple).

Par ailleurs, la propriété de répétition de deux solutions entières du problème mixte linéaire, utilisée comme critère de convergence, permet d'éviter le choix toujours délicat de la tolérance du test d'arrêt classique qui consiste à comparer les valeurs des bornes inférieures et supérieures.

NOTATIONS

Lettres majuscules

$A(y)$,	espace acceptable des variables continues pour une valeur acceptable des variables entières (inclus dans R^{n_1});
T ,	ensemble d'indices;
V ,	espace acceptable des variables entières (inclus dans N^{n_2});
\tilde{V} ,	espace continu contenant l'espace acceptable des variables entières (inclus dans R^{n_2});
X ,	domaine de définition des variables continues (inclus dans R^{n_1});
Y ,	domaine de définition des variables entières (inclus dans N^{n_2});
Z ,	valeur de la fonction objectif (élément de R);
Z_{\sup} ,	borne supérieure sur la valeur optimale Z^* du critère f (élément de R);
Z_{\inf} ,	borne inférieure sur la valeur optimale Z^* du critère f (élément de R);
Z^k ,	valeur optimale du critère obtenue à la k -ième résolution du problème MILP;
$Z(y)$,	valeur optimale d'un sous-problème continu du problème original lorsque les variables entières sont fixées et acceptables (élément de R);
Z^* ,	valeur optimale du critère f (élément de R);

Lettres minuscules

f ,	fonction objectif à minimiser (fonction de $R^{n_1} \times N^{n_2}$ dans R);
∇f_x ,	gradient de f par rapport aux variables continues (vecteur de R^{n_1});
∇f_y ,	gradient de f par rapport aux variables entières (vecteur de R^{n_2});
g ,	contraintes linéaires et non linéaires (application de $R^{n_1} \times N^{n_2}$ dans R^m);
∇g_x ,	jacobien des contraintes par rapport aux variables continues [matrice $(m \times n_1)$];
∇g_y ,	jacobien des contraintes par rapport aux variables entières [matrice $(m \times n_2)$];

l_f ,	linéarisation de la fonction objectif (fonction de $R^{n_1} \times N^{n_2}$ dans R);
l_g ,	linéarisation des contraintes (fonction de $R^{n_1} \times N^{n_2}$ dans R^m);
m ,	nombre de contraintes;
n_1 ,	nombre de variables continues;
n_2 ,	nombre de variables entières;
x_i ,	variables continues (vecteur de R^{n_1});
\bar{x}^k ,	valeurs optimales des variables continues obtenues à la k -ième résolution du problème MILP (vecteur de R^{n_1});
x^* ,	valeurs optimales des variables continues (vecteur de R^{n_1});
y_i ,	variables entières (vecteur de N^{n_2});
\bar{y}^k ,	valeurs optimales des variables entières obtenues à la k -ième résolution du problème MILP (vecteur de N^{n_2});
y^* ,	valeurs optimales des variables entières (vecteur de N^{n_2});
\bar{y} ,	valeurs fixées acceptables des variables entières (vecteur de N^{n_2});
\tilde{y} ,	variables continues définies sur l'espace $Y \cap \tilde{V}$ (vecteur de R^{n_2}).

Lettres grecques

μ_0 ,	variable réelle utilisée comme fonction objectif d'un problème équivalent au problème original;
μ_0^* ,	valeur optimale de μ_0 .

Abréviations

MILP,	programmation mixte entière linéaire (Mixed Integer Linear Programming);
MINLP,	programmation mixte entière non linéaire (Mixed Integer Nonlinear Programming);
NLP,	programmation non linéaire en variables continues (Nonlinear Programming).

BIBLIOGRAPHIE

1. D. H. ALLEN, *How to Use Mixed-Integer Programming*, Chem. Engng., vol. 83, 1976, p. 114.
2. J. F. BENDERS, *Partitioning Procedures for Solving Mixed-Variable Programming Problems*, Numerische Mathematik, vol. 4, 1962, p. 238.
3. M. A. DURAN et I. E. GROSSMANN, *An Outer-Approximation Algorithm for a Class of Mixed-Integer Nonlinear Programs*, Mathematical Programming, 36, 1986, p. 307.
4. M. A. DURAN et I. E. GROSSMANN, *A Mixed-Integer Nonlinear Programming Algorithm for Process System Synthesis*, AIChE J., vol. 32, 1986, p. 592.
5. P. FLOQUET, *Procédures discrète et continue d'optimisation et de CAO en Génie Chimique. Étude de cas*, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 1986.
6. P. FLOQUET, L. PIBOULEAU et S. DOMENECH, *Optimisation de cascades de réacteurs avec ou sans recyclage*, Chem. Eng. J., vol. 30, 1985, p. 11.
7. P. FLOQUET, L. PIBOULEAU et S. DOMENECH, *Conception optimale de procédés chimiques à l'aide de paramètres structuraux*, Entropie, n° 132, 1986, p. 75.
8. A. M. GEOFFRION, *Generalized Benders Decomposition*, JOTA, vol. 10, 1972, p. 237.
9. I. E. GROSSMANN, *Mixed-Integer Programming Approach for the Synthesis of Integrated Process Flowsheets*, Comp. and Chem. Eng. J., vol. 4, 1985, p. 463.

10. I. E. GROSSMANN, *Applications of Mixed-Integer Linear Programming in Process Synthesis*, Comp. and Chem. Eng., J., vol. 4, 1980, p. 205.
11. O. K. GUPTA, *Branch and Bound Experiments in Nonlinear Integer Programming*, Ph. D. Thesis, School of industrial engineering, Purdue University, West Lafayette, IN, 1980.
12. O. K. GUPTA et A. RAVINDRAM, *Nonlinear Mixed-Integer Programming and Discrete Optimization*, in R. W. WAYNE et K. M. RAGSDALL éd., Progress in Engineering Optimization, A.S.M.E., New York, 1981, p. 27.
13. A. H. LAND et A. G. DOIG, *An Automatic Method of Solving Discrete Programming Problems*, Econometrica, vol. 28, 1969, p. 497.
14. N. NISHIDA et G. J. POWERS, *On the Computational Technique of Optimal Synthesis Problem Using Structure Parameters*, Journal of Chemical Engineering of Japan, vol. 11, 1978, p. 396.
15. L. PIBOULEAU et S. DOMENECH, *Une procédure arborescente pour la séparation de mélanges complexes dans l'industrie chimique. Application à un train de colonnes de rectification*, R.A.I.R.O. Recherche Opérationnelle, vol. 19, 1985, p. 35.
16. L. PIBOULEAU, P. FLOQUET et S. DOMENECH, *Optimisation de procédés chimiques par une méthode de gradient réduit. Partie I: Présentation de l'algorithme*, R.A.I.R.O. Recherche Opérationnelle, vol. 19, 1985, p. 247.
17. L. PIBOULEAU, P. FLOQUET et S. DOMENECH, *Optimisation de procédés chimiques par une méthode de gradient réduit. Partie II: Exemples d'illustration. Comparaison avec d'autres méthodes*, R.A.I.R.O. Recherche Opérationnelle, 19, 1985, p. 321.
18. Proceedings of TMS/ORSA 88, Washington DC, avril 1988.
19. J. A. VASELENAK, I. E. GROSSMANN et A. W. WESTERBERG, *Optimal Retrofit Design of Multiproduct Batch Plants*, Ind. Eng. Chem. Res., vol. 26, 1987, p. 718.
20. X. YUAN, *Conception optimale de procédés par programmation mixte non linéaire*, Thèse de Doctorat de l'Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 1988.