

L. PIBOULEAU

P. FLOQUET

S. DOMENECH

**Optimisation de procédés chimiques par une méthode de gradient réduit. Partie II. Exemples d'illustration. Comparaison avec d'autres méthodes**

*RAIRO. Recherche opérationnelle*, tome 19, n° 4 (1985), p. 321-350

[http://www.numdam.org/item?id=RO\\_1985\\_\\_19\\_4\\_321\\_0](http://www.numdam.org/item?id=RO_1985__19_4_321_0)

© AFCET, 1985, 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/>

**OPTIMISATION DE PROCÉDÉS CHIMIQUES  
PAR UNE MÉTHODE DE GRADIENT RÉDUIT (\*)**  
**PARTIE II.**  
**EXEMPLES D'ILLUSTRATION.**  
**COMPARAISON AVEC D'AUTRES MÉTHODES**

par L. PIBOULEAU <sup>(1)</sup>, P. FLOQUET <sup>(1)</sup> et S. DOMENECH <sup>(1)</sup>

---

**Résumé.** — *Un algorithme de type gradient réduit, conçu pour traiter de nombreux problèmes d'optimisation rencontrés en Génie Chimique, a été présenté dans une première partie. Cet algorithme est comparé, ici, avec d'une part les méthodes d'optimisation non contrainte de Hooke et Jeeves, de Rosenbrock et du gradient conjugué, nécessitant donc certaines transformations de la formulation des problèmes, et d'autre part avec la méthode d'optimisation contrainte de Rosen. Pour ce faire, les résultats du traitement de trois problèmes numériques, ainsi que de trois problèmes de Génie Chimique — calcul d'un équilibre chimique, optimisation d'une cascade de compresseurs et optimisation simplifiée d'un atelier de fabrication d'acétate de cellosolve, sont détaillés.*

*L'algorithme du gradient réduit est plus particulièrement illustré à l'aide de sept exemples, pouvant comporter un nombre élevé de variables (302), et comprenant quatre problèmes numériques, ainsi que l'optimisation d'une production d'acétate d'éthyle, d'un réacteur chimique industriel, et d'une unité de fabrication d'acétate de cellosolve.*

*Pour des problèmes comportant peu de variables ( $\leq 5$ ), la méthode de Rosen et celle du gradient réduit sont comparables. Par contre, l'avantage de la méthode du gradient réduit est d'autant plus prononcé, que le nombre de variables augmente ( $\geq 20$ ).*

**Mots clés :** Problèmes à grande échelle, contraintes linéaires et non linéaires, optimisation, gradient réduit, problèmes de Génie Chimique.

**Abstract.** — *A reduced gradient algorithm, designed for solving several optimization problems in the field of Chemical Engineering has been presented in a previous article. The algorithm is now compared, on the one hand, with some unconstrained optimization methods (Hooke and Jeeves, Rosenbrock, conjugate gradient) needing some transformations of the problem statements, and on the other hand, with the Rosen's projection method. The resolution of three numerical problems and of three chemical engineering problems (chemical equilibrium, compressors sequence, and simplified cellosolve acetate plant optimization) is detailed.*

*Then, the reduced gradient algorithm is particularly illustrated by the means of seven examples including four numerical large-scale problems (up to 302 variables), and the optimization of an ethyl acetate production, of an industrial reactor and of a complete cellosolve acetate plant.*

*The reduced gradient algorithm and the Rosen's method are nearly equivalent for solving problems involving few variables ( $\leq 5$ ). Nevertheless, the advantage of the reduced gradient procedure is greater as the number of variables increases ( $\geq 20$ ).*

**Keywords:** Large-scale problem, linear and nonlinear constraints, optimization, reduced gradient, Chemical Engineering problems.

---

(\*) Reçu mars 1984.

<sup>(1)</sup> Institut du Génie Chimique, U.A. C.N.R.S. n° 192, chemin de la Loge, 31078 Toulouse Cedex.

## NOTATIONS

*Lettres majuscules*

- $F$ , débit total du mélange des réactifs ( $Ft^3/mn$ );  
 $F_1$ , débit de l'alimentation en composé pur (1) (mole/mn);  
 $F_2$ , débit de l'alimentation en composé pur (2) (mole/mn);  
 $G$ , fonction globale de Gibbs;  
 $GC$ , méthode du gradient conjugué;  
 $GR$ , méthode du gradient réduit;  
 $HJ$ , méthode de Hooke et Jeeves;  
 $L_0, L_I, L_{II}, L_{III}, L_{IV}, L_V, L_{VI}$ , débits liquides (mole/mn);  
 $P$ , pression totale ( $kg/cm^2$ );  
 $P_n$ , facteur de pénalisation;  
 $P_p$ , profil annuel de l'unité de production;  
 $P_0, P_1, P_2, P_3, P_4$ , pressions (atm);  
 $P_2^0, P_4^0$ , pression de vapeur saturante des corps (2) et (4) ( $kg/cm^2$ );  
 $R$ , constante des gaz parfaits ( $J/mole/K$ );  
 $RB$ , méthode de Rosenbrock;  
 $RS$ , méthode de Rosen;  
 $T$ , température (K);  
 $T_E$ , température d'entrée (K);  
 $T_S$ , température de sortie (K);  
 $V_0, V_I, V_{II}, V_{III}, V_{IV}, V_V, V_{VI}$ , débits vapeurs (mole/mn);  
 $Vol_I, Vol_{II}, Vol_{III}, Vol_{IV}$ , volumes des réacteurs ( $m^3$ );  
 $X_A$ , taux de conversion (défini par rapport à NaOH);  
 $X_{i,j}$ , fraction molaire liquide du constituant ( $i$ ) dans le réacteur  $j$ ;  
 $X_{2,0}$ , composition de l'azéotrope (colonne 0);  
 $Y_{i,j}$ , fraction molaire vapeur du constituant ( $i$ ) dans le réacteur  $j$ ;  
 $Y_{2,0}$ , composition de l'azéotrope (colonne 0);  
 $Y_{2,v}$  et  $Y_{4,v}$  fractions molaires vapeur des constituants (2) et (4) dans la colonne V;

*Lettres minuscules*

- $f$ , critère à minimiser (fonction de  $R^n$  dans  $R$ );  
 $k$ , constante de réaction chimique;  
 $l$ , borne inférieure pour les variables (vecteur de  $R^n$ );

- $m$ , nombre de contraintes;  
 $n$ , nombre de variables;  
 $n_i$ , nombre de moles du constituant  $i$ ;  
 $q$ , contraintes non linéaires ( $\in R^m$ );  
 $\bar{q}$ , contraintes linéarisées ( $\in R^m$ );  
 $r_i$ , vitesse de la réaction dans le réacteur I (mole/l/mn);  
 $u$ , borne supérieure pour les variables (vecteur de  $R^n$ );  
 $x$ , variables du critère ( $\in R^n$ );  
 $x^0, x^{01}, x^{02}, x^{03}, x^{04}$ , divers points initiaux ( $\in R^n$ );  
 $y_i, z_i$ , changement de variable sur  $x_i$ .

#### *Lettres grecques*

- $\varepsilon_\alpha$ , tolérance sur la précision de la recherche monodimensionnelle;  
 $\lambda$ , paramètres de Lagrange ( $\in R^m$ );  
 $\mu_i^0$ , potentiel chimique de référence du constituant  $i$ ;  
 $\mu_i$ , potentiel chimique;  
 $\rho$ , coefficient de pénalisation.

#### INTRODUCTION

Afin de faciliter le traitement de nombreux problèmes d'optimisation rencontrés en Génie Chimique, un algorithme de type gradient réduit a été développé dans une première partie de l'étude. Des exemples numériques classiques, ainsi que des problèmes propres au Génie Chimique, permettent d'effectuer dans cette partie, une étude comparative de plusieurs méthodes d'optimisation, afin d'évaluer les performances et les modalités d'utilisation de l'algorithme décrit précédemment.

Parmi les méthodes utilisées, on peut distinguer celles qui sont spécifiques à l'optimisation non contrainte, et nécessitent donc des transformations des problèmes contraints, de celles qui sont propres au traitement de problèmes contraints.

L'analyse des résultats permet de constater la nette supériorité de ce dernier type de méthodes, la méthode du gradient réduit étant la plus performante dans la majorité des cas.

## MÉTHODES D'OPTIMISATION UTILISÉES

Les méthodes d'optimisation utilisées sont énumérées ci-dessous. Pour des raisons de compacité, elles sont identifiées par des sigles.

*HJ*, méthode de recherche directe de Hooke et Jeeves [8];

*RB*, méthode de recherche directe de Rosenbrock [8];

*GC*, méthode du gradient conjugué [3];

*RS*, méthode de projection de Rosen [6];

*GR*, méthode du gradient réduit développée dans la première partie de cette étude.

Les trois premières méthodes sont programmées dans des bibliothèques standards [3], par contre la méthode *RS* a été considérablement modifiée par rapport à celle décrite dans la référence [6]. Le premier groupe de modifications concerne le nombre de contraintes saturées, qui peut être quelconque (alors que sa valeur est limitée à 2 dans cette référence; les paramètres de Lagrange associés sont calculés par inversion d'une matrice symétrique). Le deuxième groupe de modifications a trait à la recherche unidimensionnelle le long de la direction de descente, qui a été effectuée comme dans la méthode du gradient réduit par un algorithme du nombre d'or.

Les méthodes *HJ*, *RB* et *GC* ne permettent pas de traiter des problèmes contraints (linéairement ou non) et à variables bornées. Il est donc nécessaire, d'une part de choisir un facteur de pénalisation  $P_n$  pour introduire les contraintes dans le critère, et d'autre part d'effectuer des changements de variables pour obtenir des problèmes non bornés. Pour éliminer des bornes du type :

$$l_i \leq x_i \leq u_i.$$

Box [4] propose un certain nombre de changements de variables, mais nous suggérons ici la transformation suivante :

$$x_i = l_i + (u_i - l_i) \frac{z_i^2}{1 + z_i^2},$$

qui est plus satisfaisante pour traiter les problèmes considérés.

La méthode *RS* n'envisage que des contraintes linéaires de type inégalité. Afin de pouvoir traiter des contraintes linéaires de type égalité, il est nécessaire d'encadrer les valeurs de ces dernières par des bornes arbitrairement voisines. Toutefois cette procédure induit le choix judicieux des valeurs des tolérances sur l'admissibilité des solutions.

Dans les méthodes GC, RS et GR, le vecteur gradient du critère est évalué selon un schéma aux différences finies d'ordre 1, qui nécessite donc un nombre d'appel au critère égal à celui de ses variables.

Dans la procédure GR, en présence de contraintes non linéaires, le vocable itération majeure correspond au nombre de linéarisations de ces dernières, et l'expression itération mineure désigne le nombre d'itérations nécessaires à la résolution d'un problème à contraintes linéarisées. De plus, toutes les tolérances utilisées dans cette méthode ont été définies dans la première partie.

La comparaison de l'efficacité des diverses méthodes utilisées a été effectuée en considérant le nombre d'appels à la fonction objectif.

## PROBLÈMES CLASSIQUES

### 1. Problème P<sub>1</sub>

Ce problème comporte une forme quadratique mal conditionnée, dont la solution optimale est connue. Il se présente sous la forme :

$$\begin{aligned} \text{Min } f(x) = & 1\,000 x_1^2 + \frac{1}{1\,000} x_2^2 \\ & + (x_3 - 1)^2 + (x_4 - 0,5)^2 + (x_5 - 1)^2 \\ & + (x_6 - 5)^2 + (x_7 - 3)^2 + 110(x_8 - 1)^2. \end{aligned}$$

Les variables sont soumises aux contraintes suivantes :

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 & 1 & 3 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 3 & 0 & -4 & 1 \\ 0 & 0 & -2 & 0 & 8 & 0 & -5 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 0 & 9 & 1 & 17 & 0 \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} 2,5 \\ -8 \\ -9 \\ 65 \end{bmatrix}$$

et :

$$l \leq x \leq u,$$

ou :

$$\begin{aligned} l^T &= \begin{bmatrix} 0 & -5 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \\ u^T &= \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 & 2 & 4 & 10 & 6 & 1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Les contraintes et les bornes ont été choisies de telle sorte que la solution du problème contraint corresponde à celle du problème non contraint. Il est

à remarquer toutefois que si la solution est intérieure au domaine, les méthodes de pénalité risquent d'être plus performantes.

Le point initial utilisé pour obtenir les résultats consignés dans le tableau I est  $x^{0T} = [1 \ 0 \ 1 \ -0,5 \ 1 \ 2 \ 3 \ 0]$ . Sauf indications contraires, les tolérances de la méthode GR sont toutes fixées à la valeur  $10^{-4}$ , et les calculs effectués en double précision sur IBM 3033.

TABLEAU I  
Traitement du problème  $P_1$  par différentes méthodes.

Méthode	Itérations	Nombre d'appels au critère	Solution				Valeur du critère
HJ(*) ( $P_n=1$ ). . . . .		756	0,000 1,001	$-8,203 \cdot 10^{-3}$ 4,998	1,003 3,000	0,495 1,000	$-4,24 \cdot 10^{-5}$
HJ(**) ( $P_n=1$ ). . . . .		1 858	0,000 1,000	$-0,236 \cdot 10^{-3}$ 5,000	1,000 3,000	0,499 1,000	$-0,82 \cdot 10^{-8}$
RS ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	12	408	$0,446 \cdot 10^{-5}$ 0,999	$-0,126 \cdot 10^{-1}$ 5,021	0,996 2,999	0,498 1,000	$0,21 \cdot 10^{-4}$
GR ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	5	170	$0,367 \cdot 10^{-3}$ 1,000	$-0,267 \cdot 10^{-3}$ 5,000	1,000 3,000	0,500 1,000	$0,13 \cdot 10^{-3}$

(\*) arrêt de la recherche après 10 divisions du pas par 2.  
(\*\*) arrêt de la recherche après 20 divisions du pas par 2.

## 2. Problème B de Box [4]

Il s'agit de minimiser la fonction :

$$f(x) = ((x_1 - 3)^2 - 9) \frac{x_2^3}{27\sqrt{3}},$$

dans laquelle les variables sont soumises aux contraintes :

$$\begin{aligned} x_2 - x_1/\sqrt{3} &\leq 0, \\ x_1 + \sqrt{3}x_2 &\leq 6 \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} x_1 &\geq 0, \\ x_2 &\geq 0. \end{aligned}$$

Dans la méthode *GR*, où les tolérances sont fixées à la valeur  $10^{-4}$ , les deux contraintes d'inégalité sont transformées en contraintes d'égalité en ajoutant deux variables d'écart.

Les points initiaux utilisés pour obtenir les résultats consignés dans le tableau II, sont :

$$x^{01T} = \begin{bmatrix} 1 & 0,1 \end{bmatrix},$$

$$x^{02T} = \begin{bmatrix} 1 & 0,5 \end{bmatrix}.$$

Les valeurs initiales des variables d'écart sont choisies de telle sorte que les contraintes soient vérifiées. Les méthodes *HJ* et *RB* sont mises en échec sur cet exemple. Après un nombre important de divisions du pas, elles s'arrêtent sur un point ne vérifiant pas les contraintes et doivent donc être rejetées. Cela soulève le problème du choix du paramètre de pénalisation.

TABLEAU II  
Traitement du problème B de Box par différentes méthodes.

Méthode	Itérations	Nombre d'appels au critère	Point initial	Solution		Valeur du critère
<i>HJ</i> ( $P_n = 10$ ). . . . .		7 092	$x^{01}$	2,974	1,762	-1,052
<i>RB</i> ( $P_n = 300$ ). . . . .		15 000	$x^{01}$	2,999	1,733	-1,002
<i>RS</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	3	84	$x^{01}$	3,000	1,732	-1,000
<i>GR</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	3	84	$x^{01}$	3,000	1,732	-1,000
<i>RS</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	3	84	$x^{02}$	3,000	1,732	-1,000
<i>GR</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	3	84	$x^{02}$	3,000	1,732	-1,000

### 3. Problème POP (Post office Parcel [4])

Ce problème consiste à minimiser la fonction :

$$f(x) = -x_1 x_2 x_3,$$

dans laquelle les variables sont soumises aux contraintes :

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 2x_3 &\leq 72, \\ 0 \leq x_i &\leq 42, \quad i = 1, 2, 3. \end{aligned}$$



Comme dans le cas précédent les tolérances de la méthode *GR* sont fixées à la valeur  $10^{-4}$ , et il est nécessaire d'introduire une variable d'écart positive. On peut formuler la même remarque que dans le cas précédent au sujet de la méthode *HJ*.

Le point initial utilisé pour obtenir les résultats rassemblés dans le tableau III est :

$$x^{0T} = \begin{bmatrix} 5 & 10 & 10 \end{bmatrix}$$

TABLEAU III  
Traitement du problème POP par différentes méthodes.

Méthode	Itérations	Nombre d'appels au critère	Solution			Valeur du critère
<i>HJ</i> ( $P_n = 500$ ). . . . .		729	24,15	12,07	11,93	-3476,6
<i>RS</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	4	116	24,00	12,00	12,00	-3456,0
<i>GR</i> ( $\varepsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	8	232	24,00	12,00	12,00	-3456,0

#### 4. Problème A de Box [4]

Ce problème comporte huit variables soumises à trois contraintes non linéaires; le critère comprend uniquement les cinq premières variables. Il s'agit de minimiser la fonction :

$$f(x) = C_0 + C_1 x_1 + C_2 x_1 x_2 + C_3 x_1 x_3 + C_4 x_1 x_4 + C_5 x_1 x_5,$$

en présence des contraintes et des bornes suivantes :

$$x_6 = C_6 x_1 + C_7 x_1 x_2 + C_8 x_1 x_3 + C_9 x_1 x_4 + C_{10} x_1 x_5,$$

$$x_7 = C_{11} x_1 + C_{12} x_1 x_2 + C_{13} x_1 x_3 + C_{14} x_1 x_4 + C_{15} x_1 x_5,$$

$$x_8 = C_{16} x_1 + C_{17} x_1 x_2 + C_{18} x_1 x_3 + C_{19} x_1 x_4 + C_{20} x_1 x_5,$$

$$0 \leq x_1,$$

$$1,2 \leq x_2 \leq 2,4,$$

$$20 \leq x_3 \leq 60,$$

$$9 \leq x_4 \leq 9,3,$$

$$6,5 \leq x_5 \leq 7,$$

$$0 \leq x_6 \leq 294\,000,$$

$$0 \leq x_7 \leq 294\,000,$$

$$0 \leq x_8 \leq 277\,200.$$

Les valeurs des divers coefficients  $C_i$  sont données dans le tableau ci-dessous :

$C_0$	$C_1$	$C_2$	$C_3$
-24 345	-8 720 288,849	150 512,525 3	-156,695 032 5
$C_4$	$C_5$	$C_6$	$C_7$
476 470,322 2	729 482,827 1	-145 421,402	2 931,150 6
$C_8$	$C_9$	$C_{10}$	$C_{11}$
-40,427 932	5 106,192	15 711,36	-155 011,108 4
$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{14}$	$C_{15}$
4 360,533 52	12,949 234 4	10 236,884	13 176,786
$C_{16}$	$C_{17}$	$C_{18}$	$C_{19}$
-326 669,510 4	7 390,684 12	-27,898 697 6	16 643,076
$C_{20}$			
30 988,146			

Le point initial choisi, donné par Box [4], vérifie les contraintes :

$$x^{0T} = \underline{2,52 \quad 2,00 \quad 37,50 \quad 9,25 \quad 6,80 \quad 32\,745,83 \quad 96\,991,97 \quad 130\,368,00}.$$

Les résultats du traitement de ce problème sont reportés dans le tableau IV.

## 5. Problème $P_2$

Il s'agit de minimiser une forme quadratique à 30 variables, dont les 8 premières sont soumises à 2 contraintes linéaires et 2 contraintes non linéaires :

$$\text{Min } f(x) = \sum_{i=1}^{30} (x_i - i)^2,$$

avec :

$$\sum_{i=1}^7 x_i = 28,$$

$$x_1 - 2x_3 + x_8 = 3,$$

$$(x_1/x_2)^2 + x_8^2 - 64,25 = 0,$$

$$(x_8/x_1)^2 - 200 x_2 + 336 = 0$$

(les variables ne sont pas bornées).

Le point initial, qui ne vérifie aucune des quatre contraintes, est donné par :

$$x^{0T} = \boxed{4 \quad 4 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 10 \quad 15 \quad 15 \dots 15}.$$

22 fois

Les contraintes ont été choisies de façon à ce que les solutions du problème contraint et du problème non contraint soient identiques. On peut encore ici formuler la même remarque qu'au problème  $P_1$ .

Le tableau IV contient les résultats du traitement de ce problème.

### 6. Problème $P_3$

On considère la minimisation d'une forme quadratique à 100 variables soumises à 3 contraintes linéaires :

$$\text{Min } f(x) = \sum_{i=1}^{100} (x_i - i)^2,$$

TABLEAU IV

Traitement de différents problèmes par la méthode GR  
(tolérances fixées à  $10^{-4}$ ;  $\epsilon_n = 10^{-5}$ ).

Problème	Point initial généralisé par l'algorithme: $x_D$	Itérations majeures	Itérations mineures	Nombre d'appels au critère	$f(x_D)$	Valeur optimale du critère
A Box. . .	$x_D = x^0$ (car $x^0$ vérifie les contraintes)	3	17	527	$-2,351 \cdot 10^6$	$-5,280 \cdot 10^6$
$P_2$ . . . . .	-70,62    2,88    -31,81 1            1            1 124,60    10            15 (22 fois)	7	69	3864	$2,156 \cdot 10^4$	$0,210 \cdot 10^{-2}$
$P_3$ . . . . .	5 584,2    3 727,0    3 091,7 1 (97 fois)	Linéaire	247	31 122	$5,492 \cdot 10^7$	2,381

avec :

$$\sum_{i=1}^{100} x_i - 2x_2 = 5\,046,$$

$$\sum_{i=1}^{50} x_i - 3x_2 = 1\,269,$$

$$\sum_{i=1}^{10} x_i - 4x_3 = 43$$

et :

$$x_i \geq 0, \quad i = 1 \text{ à } 100.$$

Le point initial suivant, utilisé pour obtenir les résultats consignés dans le tableau IV, ne vérifie aucune des trois contraintes :

$$x^{0T} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix}}_{100 \text{ fois}}.$$

### 7. Problème P<sub>4</sub>

Cet exemple, qui est adapté du problème de contrôle optimal décrit dans la référence [7] comporte 302 variables soumises à 200 contraintes (100 linéaires et 100 non linéaires). Il s'agit de minimiser le critère quadratique :

$$f(z) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{101} z_i^2,$$

en présence des contraintes et des bornes suivantes :

$$\begin{aligned} z_{i+1} &= z_i + 0,2 y_i, & i = 1 \text{ à } 100, \\ y_{i+1} &= y_i - 0,01 y_i^2 - 0,004 z_i + 0,2 u_i, & i = 1 \text{ à } 100, \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} 10 &\leq z_1, \\ -1 &\leq y_i, & i = 1 \text{ à } 101, \\ -0,2 &\leq u_i \leq 0,6, & i = 1 \text{ à } 100. \end{aligned}$$

A chaque itération majeure, la matrice  $C$  du jacobien des contraintes (dimension  $200 \times 302$ ) est extrêmement creuse, dans la mesure où elle com-

porte uniquement 700 éléments non nuls, soit un taux de remplissage de 1,16 %.

Les valeurs initiales des variables ont été déterminées à l'aide des relations de récurrence en tenant compte des bornes, de façon à obtenir le point initial acceptable  $x^0$  suivant :

$$x^{0T} = \begin{bmatrix} z^{0T}, y^{0T}, u^{0T} \end{bmatrix},$$

avec :

$$z^{0T} = \begin{bmatrix} 10, 10, \dots, 10, 10 \end{bmatrix}$$

101 fois

$$y^{0T} = \begin{bmatrix} 0, 0, 0, \dots, 0, 0 \end{bmatrix},$$

101 fois

$$u^{0T} = \begin{bmatrix} 0,2, 0,2, \dots, 0,2, 0,2 \end{bmatrix}.$$

100 fois

Les résultats du traitement de ce problème par la méthode GR (avec  $\varepsilon_x = \varepsilon_f = \varepsilon_g = \varepsilon_h = 10^{-4}$ ,  $\varepsilon_a = 10^{-5}$  et  $\varepsilon_c = 10^{-4}$ ) sont consignés dans le tableau V.

## PROBLÈMES DE GÉNIE CHIMIQUE.

### 1. Calcul d'un équilibre chimique

Le problème [1] consiste à déterminer la composition d'équilibre à 1 000 K et 101,325 kPa, d'un système contenant les espèces gazeuses  $\text{CH}_4$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{CO}_2$  et  $\text{H}_2$ . On suppose que le système contient avant la réaction, deux moles de  $\text{CH}_4$  et trois moles de  $\text{H}_2\text{O}$ . A l'équilibre, la fonction globale de Gibbs

$G = \sum_{i=1}^5 n_i \mu_i$  est minimale par rapport aux nombres de moles  $n_i$ , sous réserve

des contraintes imposées par les équations de bilan matière. Les données du problème sont les suivantes :

	$\text{CH}_4$ (1)	$\text{H}_2\text{O}$ (2)	$\text{CO}$ (3)	$\text{CO}_2$ (4)	$\text{H}_2$ (5)
$\mu_i^0$ (J/mole). . . . .	19 300	-192 720	-200 715	-396 110	0

TABLEAU V  
 Traitement du problème  $P_*$  par la méthode GR.

Critère optimisé	$\rho$ Initial	$\lambda$ Initial	Itérations majeures	Itérations mineures	Valeur optimale de $f$	Valeur optimale du critère	Valeur maximale des contraintes	Nombre d'appels au critère
$f$			3	54	858,8	858,8	$1,92 \cdot 10^{-5}$	6901
$f - \lambda^T(q - \bar{q})$		$0(\epsilon R^{100})$	3	45	858,7	858,1	$1,84 \cdot 10^{-5}$	5312
$f + (1/2)\rho(q - \bar{q})^T(q - \bar{q})$	10		4	68	858,8	858,9	$1,80 \cdot 10^{-5}$	8430
$f - \lambda^T(q - \bar{q}) + (1/2)\rho(q - \bar{q})^T(q - \bar{q})$	10	$0(\epsilon R^{100})$	3	52	858,8	858,5	$1,81 \cdot 10^{-5}$	6401
$f - \lambda^T(q - \bar{q})$		$\lambda_1$	3	41	858,7	858,1	$1,83 \cdot 10^{-5}$	5082

Valeur initiale de  $f = 5050$ .  
 $\lambda_1$  est le vecteur des paramètres de Lagrange (associés aux contraintes non linéaires) obtenu à la fin de la première itération majeure correspondant au traitement du deuxième critère  $f - \lambda^T(q - \bar{q})$ .  
 Le gradient est évalué par différences finies d'ordre 1.

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \text{Log} \frac{n_i}{\sum_{i=1} n_i},$$

$$RT = 8314 \text{ J/mole.}$$

Les contraintes sur les variables indépendantes  $n_i$  sont données par :

$$0 \leq n_i \leq 10, \quad i = 1 \text{ à } 5,$$

$$n_1 + n_3 + n_4 = 2,$$

$$4n_1 + 2n_2 + 2n_5 = 14,$$

$$n_2 + n_3 + 2n_4 = 3.$$

Partant du point initial  $x^{0T} = \begin{bmatrix} 1 & 1,5 & 0,5 & 0,5 & 3,5 \end{bmatrix}$  qui vérifie les contraintes, les résultats obtenus par différentes méthodes sont reportés dans le tableau VI.

TABLEAU VI

Traitement de l'équilibre chimique par différentes méthodes.

Méthode	Itérations	Nombre d'appels au critère	Solution			Valeur du critère
HJ ( $P_n = 10^6$ ). . . . .		8 747	0,301 4 0,366 1	1,038 5,360	1,334	-0,683 4. $10^6$
GC ( $P_n = 10^3$ ). . . . .	4		0,134 8 9,977	9,957 0,317 6	9,921	-0,642 2. $10^7$
RS ( $\varepsilon_n = 10^{-6}$ ). . . . .	80	2 880	0,172 3 0,312 4	0,859 8 5,791	1,525	-0,664 4. $10^6$
GR ( $\varepsilon_n = 10^{-6}$ ). . . . .	4	144	0,172 4 0,312 1	0,860 3 5,795	1,515	-0,662 3. $10^6$

Compte tenu du choix toujours délicat du paramètre de pénalisation et malgré de nombreuses tentatives, les résultats donnés par les deux premières méthodes (tableau VI) ne vérifient pas les contraintes linéaires. Dans la méthode du gradient réduit, toutes les tolérances sont fixées à la valeur  $10^{-4}$ . L'influence du point initial a été étudiée, en partant du vecteur  $x^{02T} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0,5 & 0,5 & 1 \end{bmatrix}$ , qui ne vérifie pas les contraintes linéaires. Le point acceptable de base généré par l'algorithme est très voisin du point  $x^{01}$ , et conduit à la même convergence. Pour apprécier l'erreur due à la linéarisation numérique, le jacobien des contraintes linéaires a été évalué selon un schéma





TABLEAU VII

Traitement de la séquence de compresseurs par différentes méthodes.

Méthode	Itérations	Nombre d'appels au critère	Solution			Valeur du critère
HJ ( $P_n = 500$ ) . . . . .		6 951	2,547 3,939	6,486 11,21	17,70	8,399
RB ( $P_n = 500$ ) . . . . .	175	37 000	3,477 4,007	7,484 19,06	26,54	8,228
GC ( $P_n = 0,1$ ) . . . . .	7		2,492 4,574	6,903 13,41	20,59	8,189
RS ( $\epsilon_x = 10^{-6}$ ) . . . . .	266	9 044	2,994 5,974	8,968 17,902	26,87	8,000 1
GR ( $\epsilon_x = 10^{-6}$ ) . . . . .	8	272	3,001 6,001	9,002 18,00	27,00	8,000

soit numériquement :

$$P_p = 1,365 5 \cdot 10^4 FX_A - 132,5 (T_S - T_E),$$

avec :

$F$ , débit total du mélange des réactifs;

$X_A$ , taux de conversion (défini par rapport au réactif NaOH);

$T_S$ , température de sortie du réacteur (K);

$T_E$ , température d'entrée du réacteur (fixée à 293 K).

Les contraintes sont les suivantes :

$$X_A - 0,020 64 \frac{k}{T_S} (1 - X_A)^2 = 0,$$

$$k = 1,76 \cdot 10^9 e^{-(5 800/T_S)}.$$

Le problème comporte quatre variables ( $F$ ,  $X_A$ ,  $T_S$ ,  $k$ ), liées par les deux contraintes non linéaires ci-dessus; la fonction objectif  $f = -P_p$  ne comprend que les trois premières variables, qui sont bornées comme suit :

$$0 \leq k \leq 30,$$

$$0 \leq X_A \leq 1,$$

$$0 \leq F \leq 0,5,$$

$$293 \leq T_S \leq 323.$$

Ce problème a été traité par la méthode GR, dans laquelle toutes les tolérances sont fixées à la valeur  $10^{-5}$ , sauf la tolérance sur les contraintes non linéaires, fixée à la valeur  $10^{-3}$ .

La fonction objectif  $f$  est pénalisée avec le terme  $(1/2) \rho (q - \bar{q})^T (q - \bar{q})$ , qui représente l'erreur due à la linéarisation des contraintes. Faute d'avoir une estimation correcte des paramètres de Lagrange, le terme  $\lambda_k^T (q - \bar{q})$  n'a pas été introduit dans cette pénalisation. Partant du point initial  $x^{01T} = [7 \ 0,3 \ 0,2 \ 300]$ , qui ne vérifie pas les contraintes non linéaires, des essais successifs ont permis de déterminer la valeur initiale acceptable 5 000 pour  $\rho$ . Les résultats obtenus avec cette valeur sont consignés dans le tableau VIII. La solution réalisable obtenue a été affinée, en prenant cette dernière comme point initial et en choisissant 0 pour valeur de  $\rho$ , les résultats correspondants sont reportés dans le tableau IX.

TABLEAU VIII

Résultats de l'optimisation de la production de l'acétate d'éthyle par la méthode GR, avec  $\rho = 5000$ .

Point initial	7	0,3	0,2	300
Point solution. . . . .	15,53	0,3628	0,3587	312,7
Critère. . . . .	-838,9			
Itérations majeures. . . . .	13			
Itérations mineures. . . . .	3+3+15+4+4+4+15+3+4+4+4+1+1=65			
Nombre d'appels au critère ( $\epsilon_\alpha = 10^{-6}$ ).	2 210			
Valeur des contraintes. . . . .	$0,1 \cdot 10^{-7}$	$0,2 \cdot 10^{-12}$		

TABLEAU IX

Résultats de l'optimisation de la production de l'acétate d'éthyle par la méthode GR, avec  $\rho = 0$ .

Point initial. . . . .	15,53	0,3628	0,3587	312,7
Point solution. . . . .	27,99	0,4593	0,3676	323
Critère. . . . .	-844,1			
Itérations majeures. . . . .	2			
Itérations mineures. . . . .	4+2=6			
Nombre d'appels au critère ( $\epsilon_\alpha = 10^{-6}$ ).	204			
Valeur des contraintes. . . . .	$0,27 \cdot 10^{-3}$			$-0,4 \cdot 10^{-3}$

#### 4. Optimisation d'un réacteur

Ce problème a été soumis par une société industrielle et a trait à l'optimisation d'un réacteur; il consiste à minimiser une fonction à cinq variables, soumises à quatre contraintes non linéaires, de type inégalité. Les variables sont bornées de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 170 &\leq x_1 \leq 220 \\
 1 &\leq x_2 \leq 2 && \text{variables naturelles,} \\
 0,01 &\leq x_3 \leq 0,1 \\
 2 &\leq x_4 \leq 8 \\
 0 &\leq x_5 \leq +\infty \\
 0 &\leq x_6 \leq +\infty && \text{variables d'écart,} \\
 0 &\leq x_7 \leq +\infty \\
 0 &\leq x_8 \leq +\infty \\
 40 &\leq x_9 \leq 120 && \text{variable naturelle.}
 \end{aligned}$$

La variable naturelle  $x_9$ , qui n'intervient pas dans les contraintes non linéaires, a été rangée à la fin du vecteur des inconnues. Le changement de variable suivant, facilite l'écriture du critère et des contraintes,

$$\begin{aligned}
 y_1 &= (x_1 - 190)/10 \\
 y_2 &= (x_2 - 1,6)/0,3 \\
 y_3 &= (x_3 - 0,06)/0,04 \\
 y_4 &= (x_4 - 4,5)/1,5 \\
 y_9 &= (x_9 - 65)/25.
 \end{aligned}$$

Le critère et les contraintes sont alors donnés par :

$$\begin{aligned}
 f(y) &= -(58 + 6,5 y_1 - 9,2 y_2 + 7,4 y_3 \\
 &\quad + 2,8 y_4 - 3,5 y_1 y_3 - 2,1 y_1 y_9 + 1,8 y_2 y_4 - 2,2 y_3 y_9), \\
 S &\leq 20 && \Leftrightarrow S - 20 + x_5 = 0 \quad (x_5 \geq 0), \\
 \frac{T}{U} &\leq 0,1 && \Leftrightarrow \frac{T}{U} - 0,1 + x_6 = 0 \quad (x_6 \geq 0), \\
 U &\geq 9 && \Leftrightarrow U - 9 - x_7 = 0 \quad (x_7 \geq 0), \\
 V &\leq 2,477 && \Leftrightarrow V - 2,477 + x_8 = 0 \quad (x_8 \geq 0),
 \end{aligned}$$

où :

$$S = 17,8 - 1,9 y_1 - 4,6 y_2 - 1,7 y_3 - 1,4 y_4 + 0,8 y_1 y_3 + 0,6 y_1 y_4$$

$$T = 1 + 0,25 y_1 + 0,77 y_2 - 0,14 y_3 - 0,17 y_4 - 0,12 y_1 y_2 - 0,1 y_2 y_4$$

$$U = 9,8 - 0,13 y_1 + 1,6 y_2 - 0,3 y_3 + 0,11 y_1 y_2$$

$$V = 2,58 + 0,143 y_1 + 0,19 y_2 + 0,46 y_3 + 0,07 y_4 + 0,03 (y_1 y_2 + y_2 y_3)$$

Les valeurs initiales des variables naturelles ont été fixées expérimentalement. Les valeurs initiales des variables d'écart ont été choisies de telle sorte que les contraintes soient vérifiées. Le point initial  $x^0$  est le suivant :

$$x^{0T} = \boxed{2,49 \quad -0,34 \quad -0,91 \quad -0,79 \quad 5,707 \quad 0,0504 \quad 0,1122 \quad 0,0955 \quad 0,603},$$

où :

$$x^{0T} = \boxed{y_1 \quad y_2 \quad y_3 \quad y_4 \quad x_5 \quad x_6 \quad x_7 \quad x_8 \quad y_9}.$$

La solution déterminée par la société industrielle correspond à une valeur du critère de  $-85,2$ . Les résultats obtenus pour différentes valeurs des paramètres de la procédure GR sont reportés dans le tableau X où la tolérance imposée sur les contraintes non linéaires est égale à  $10^{-3}$ , et la tolérance  $\epsilon_x$  est fixée à la valeur  $10^{-6}$ .

## 5. Optimisation d'une unité de production d'acétate de cellosolve

Contrairement aux quatre exemples précédents, dont la structure est figée, il s'agit ici de rechercher la structure optimale (problème de CAO) d'un atelier de fabrication d'acétate de cellosolve. La réaction chimique permettant d'obtenir ce produit est la suivante :

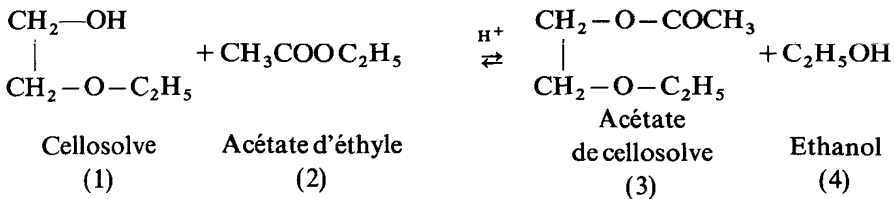


TABLEAU X  
 Résultats de l'optimisation d'un réacteur pour différentes valeurs des paramètres de la méthode GR ( $\epsilon_a = 10^{-6}$ ).

Tolérances	Critère optimisé	$\rho_{\text{initial}}$	$\lambda_{\text{initial}}$	Itérations majeures	Itérations mineures	Nombre d'appels au critère	Valeur optimale du critère	Valeur maximale des contraintes
$10^{-2}$ . . . . .	$f$			Non convergence				
$10^{-2}$ . . . . .	$f + \frac{\rho}{2}(q-\bar{q})^T(q-\bar{q})$	10		10	25	900	-92,85	$0,35 \cdot 10^{-14}$
$10^{-5}$ . . . . .	$f + \frac{\rho}{2}(q-\bar{q})^T(q-\bar{q})$	100		10	27	972	-92,85	$0,36 \cdot 10^{-14}$
$10^{-5}$ . . . . .	$f + \frac{\rho}{2}(q-\bar{q})^T(q-\bar{q})$	1 000		10	30	1 080	-92,85	$0,71 \cdot 10^{-14}$
$10^{-5}$ . . . . .	$f - \lambda^T(q-\bar{q}) + \frac{\rho}{2}(q-\bar{q})^T(q-\bar{q})$	10	[0, 0, 0]	2	19	684	-90,99	$0,70 \cdot 10^{-12}$

Elle a lieu dans une série de quatre réacteurs à cuves fonctionnant à contre-courant; la séparation des produits est effectuée en début et en fin de chaîne grâce à des colonnes à distiller; les produits n'ayant pas réagi sont recyclés. Le schéma de principe de l'unité de production est donné sur la figure 1.

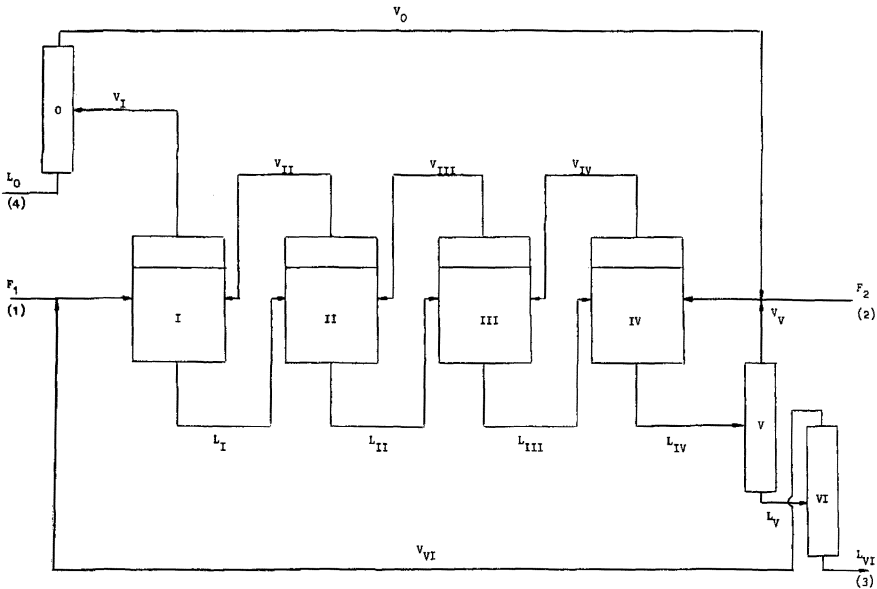


Figure 1. — Unité de production d'acétate de cellosolve.

Les hypothèses considérées pour modéliser le système sont les suivantes :

- les mélanges ont un comportement idéal;
- les alimentations  $F_1$  et  $F_2$  sont constituées des corps purs (1) et (2);
- les séparations effectuées dans les colonnes V et VI sont tranchées (alors que dans la colonne 0, on peut noter la présence d'un azéotrope, c'est-à-dire même composition pour le liquide et la vapeur);
- les composés (1) et (3) sont absents de la phase vapeur de chaque réacteur.

Le système est représenté, comme suit, par les contraintes de somme, d'équilibre liquide-vapeur et chimique, et de bilan matière (global et partiel),

$$X_{1,i} + X_{2,i} + X_{3,i} + X_{4,i} = 1;$$

$$i = I \text{ à } IV,$$

$$Y_{2,i} + Y_{4,i} = 1;$$

$$i = I \text{ à } V$$

(somme);

$$Y_{2, i} = X_{2, i} \frac{P_2^0}{P}, \quad i = I \text{ à IV},$$

$$Y_{4, i} = X_{4, i} \frac{P_4^0}{P}, \quad i = I \text{ à IV}$$

(équilibre liquide-vapeur);

$$\frac{X_{1, i}}{X_{3, i}} \geq 2,82 \frac{X_{4, i}}{X_{2, i}}, \quad i = I \text{ à IV}$$

(équilibre chimique);

$$F_1 + F_2 = L_0 + L_{VI} \quad (\text{Bilan matière global});$$

$$F_1 + V_{VI} + V_{II} = V_I + L_I,$$

$$F_1 + V_{VI} - L_I X_{1, I} = L_I X_{3, I},$$

$$V_{II} Y_{2, II} - V_I Y_{2, I} - L_I X_{2, I} = L_I X_{3, I} \quad (\text{Bilan matière, réacteur I});$$

$$L_I + V_{III} = V_{II} + L_{II},$$

$$L_I X_{1, I} - L_{II} X_{1, II} = L_{II} X_{3, II} - L_I X_{3, I},$$

$$L_I X_{2, I} + V_{III} Y_{2, III} - L_{II} X_{2, II} - V_{II} Y_{2, II} = L_{II} X_{3, II} - L_I X_{3, I} \quad (\text{Bilan matière, réacteur II})$$

$$L_{II} + V_{IV} = V_{III} + L_{III},$$

$$L_{II} X_{1, II} - L_{III} X_{1, III} = L_{III} X_{3, III} - L_{II} X_{3, II},$$

$$L_{II} X_{2, II} + V_{IV} Y_{2, IV} - L_{III} X_{2, III} - V_{III} Y_{2, III} = L_{III} X_{3, III} - L_{II} X_{3, II} \quad (\text{Bilan matière, réacteur III})$$

$$L_{III} + F_2 + V_0 + V_V = L_{IV} + V_{IV},$$

$$L_{III} X_{1, III} - L_{IV} X_{1, IV} = L_{IV} X_{3, IV} - L_{III} X_{3, III},$$

$$L_{III} X_{2, III} + V_0 Y_{2,0} + V_V Y_{2, V} - L_{IV} X_{2, IV} - V_{IV} Y_{2, IV} + F_2 = L_{IV} X_{3, IV} - L_{III} X_{3, III} \quad (\text{Bilan matière, réacteur IV})$$

$$V_I = L_0 + V_0,$$

$$V_I Y_{2, I} = L_0 X_{2,0} + V_0 Y_{2,0} \quad (\text{Bilan matière, colonne 0});$$

$$L_{IV} = V_V + L_V,$$

$$L_{IV} X_{2, IV} = V_V Y_{2, V},$$

$$L_{IV} X_{4, IV} = V_V Y_{4, V} \quad (\text{Bilan matière, colonne V})$$

$$L_V = L_{VI} + V_{VI} \quad (\text{Bilan matière-colonne VI}).$$

Les volumes des réacteurs (supposés parfaitement agités) sont donnés par les équations suivantes :

$$\text{Vol}_I = L_I X_{3, I} / r_I / 1000 \quad (\text{réacteur I}),$$

$$\text{Vol}_i = (L_i X_{3, i} - L_{i-1} X_{3, i-1}) / r_i / 1000;$$

$$i = \text{II à IV}$$

(réacteurs II, III, IV),

où la loi de vitesse  $r$  de la réaction s'écrit :

$$r_i = (9,91 \cdot 10^{-4} X_{1, i} X_{2, i} - 2,8 \cdot 10^{-3} X_{3, i} X_{4, i}) \left( \frac{N_T}{A} \right)^2,$$

avec :

$$\frac{N_T}{A} = 10,33 X_{1, i} + 10,23 X_{2, i} + 7,38 X_{3, i} + 17,15 X_{4, i}$$

$$i = \text{I à IV}.$$

Les volumes définis ci-dessus sont exprimés en mètres cubes et les débits en mole par minute. Les divers paramètres du modèle ont les valeurs suivantes :

$T$ (°C)	$P_2^0$ (kg/cm <sup>2</sup> )	$P_4^0$ (kg/cm <sup>2</sup> )	$X_{2,0}$	$Y_{2,0}$	$F_1$ (mole/mn)	$F_2$ (mole/mn)	$P$ (kg/cm <sup>2</sup> )
120	4	5	0	0,73	100	100	2,2

où  $T$  est la température dans chaque réacteur, supposé isotherme.

Le critère à minimiser est la somme des volumes des quatre réacteurs, directement liée au coût de l'installation.

### 5.1. Problème simplifié

Ce problème consiste à considérer uniquement cinq variables d'optimisation qui sont d'une part les débits molaires partiels,  $L_I X_{3, I}$ ,  $L_{II} X_{3, II}$  et  $L_{III} X_{3, III}$ , des trois premiers réacteurs et d'autre part, l'entrée  $F_1 + V_{VI}$  et la sortie  $V_I Y_{2, I}$  du premier réacteur. En effet, on peut remarquer que la connaissance de ces cinq variables permet de déterminer tous les débits du procédé, mais



il est alors impossible de tenir compte des contraintes dues aux équilibres chimiques dans chaque réacteur. Les contraintes liant les cinq variables sont les suivantes :

$$0 < L_I X_{3, I} < L_{II} Y_{3, II} < L_{III} X_{3, III} < 100.$$

Ces variables sont bornées comme suit :

$$\begin{aligned} 0 < L_i X_{3, i} < 100, \quad i = I, II, III, \\ F_1 + V_{v1} > 100, \\ V_1 Y_{2, I} > 0. \end{aligned}$$

Par suite de ces contraintes inégalité, ce problème comporte cinq variables naturelles et deux variables d'écart. Comme dans la majorité des cas précédents, toutes les tolérances de la méthode GR sont fixées à  $10^{-4}$ . Les résultats obtenus avec différentes méthodes et différents points initiaux sont consignés dans le tableau XI. Les points initiaux considérés sont les suivants :

$$\begin{aligned} x^{01T} &= \begin{bmatrix} 10 & 20 & 50 & 210 & 274 \end{bmatrix}, \\ x^{02T} &= \begin{bmatrix} 10 & 20 & 50 & 500 & 500 \end{bmatrix}, \\ x^{03T} &= \begin{bmatrix} 10 & 20 & 50 & 1000 & 1000 \end{bmatrix}, \\ x^{04T} &= \begin{bmatrix} 30 & 50 & 80 & 1000 & 1000 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Dans la méthode GR, les variables d'écart ont été choisies de telle sorte que les contraintes soient vérifiées.

## 5.2 Problème complet

Les contraintes dues aux équations d'équilibres chimiques ne sont pas nécessairement satisfaites lorsque l'on considère le nombre réduit de variables d'optimisation précédent. Pour pallier cet inconvénient, il est préférable d'augmenter le nombre de variables d'optimisation, en introduisant celles qui apparaissent dans les équilibres et dans les équations de bilan. Les équations d'équilibre liquide-vapeur permettent de substituer dans les équations de somme, les variables  $Y_{2, i}$  et  $Y_{4, i}$  en fonction de  $X_{2, i}$  et  $X_{4, i}$ . Le problème comporte alors 37 (30 variables naturelles et 7 variables d'écart positives) variables soumises à 15 contraintes linéaires et à 17 contraintes non linéaires.

TABLEAU XI

*Atelier de fabrication d'acétate de cellosolve.  
Problème simplifié.*

Méthode	Point initial	Itérations	Nombre d'appels au critère	Volumes				Critère IV $\sum_{i=1} \text{Vol}_i$
				Vol <sub>I</sub>	Vol <sub>II</sub>	Vol <sub>III</sub>	Vol <sub>IV</sub>	
RS ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{01}$	91	2 821	0,900	1,186	1,280	1,653	5,019
GR ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{01}$	113	3 503	1,082	1,243	1,393	1,594	5,312
RS ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{02}$	95	2 945	0,902	1,209	1,253	1,627	4,991
GR ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{02}$	103	3 193	0,860	1,075	1,235	1,825	4,995
RS ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{03}$	9	279	0,993	1,092	1,393	1,432	4,910
GR ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{03}$	8	248	0,907	1,108	1,219	1,679	4,913
RS ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{04}$	4	124	1,000	1,265	1,211	1,451	4,927
GR ( $\epsilon_\alpha = 10^{-5}$ ). . . . .	$x^{04}$	3	93	0,916	1,186	1,357	1,468	4,927

Les 18 variables représentant des fractions molaires, sont bornées par 0 et 1, les 12 variables représentant les débits ainsi que les 7 variables d'écart sont positives.

Le point initial, qui correspond à une valeur du critère de 23,20 m<sup>3</sup>, est le suivant :

$$\begin{aligned}
 x_0^T = & [0,452 \quad 0,220 \quad 0,064 \quad 0,264 \\
 & 0,381 \quad 0,272 \quad 0,125 \quad 0,222 \\
 & 0,331 \quad 0,335 \quad 0,162 \quad 0,172 \\
 & 0,284 \quad 0,389 \quad 0,198 \quad 0,129 \quad 0,752 \quad 0,248 \\
 & 471,3 \quad 481,0 \quad 491,2 \quad 504,4 \quad 243,2 \\
 & 121,2 \quad 221,2 \quad 449,3 \quad 459,0 \quad 471,2 \quad 461,2 \quad 143,2 \\
 & 5 \cdot 10^{-2} \quad 2 \cdot 10^{-2} \quad 3 \cdot 10^{-2} \quad 4 \cdot 10^{-2} \quad 30 \quad 20 \quad 20],
 \end{aligned}$$

où :

$$\begin{aligned}
 x_0^T = & [X_{1, I} \quad X_{2, I} \quad X_{3, I} \quad X_{4, I} \\
 & X_{1, II} \quad X_{2, II} \quad X_{3, II} \quad X_{4, II} \\
 & X_{1, III} \quad X_{2, III} \quad X_{3, III} \quad X_{4, III}
 \end{aligned}$$

$$\begin{array}{cccccc}
 X_{1, \text{IV}} & X_{2, \text{IV}} & X_{3, \text{IV}} & X_{4, \text{IV}} & Y_{2, \text{V}} & Y_{4, \text{V}} \\
 L_{\text{I}} & L_{\text{II}} & L_{\text{III}} & L_{\text{IV}} & L_{\text{V}} & \\
 V_{\text{O}} & V_{\text{I}} & V_{\text{II}} & V_{\text{III}} & V_{\text{IV}} & V_{\text{V}} & V_{\text{VI}} \\
 \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \alpha_4 & \alpha_5 & \alpha_6 & \alpha_7].
 \end{array}$$

La valeur des variables d'écart  $\alpha_i$  ont été choisies de façon à ce que les contraintes soient vérifiées. Les résultats du traitement de ce problème par la procédure *GR* sont consignés dans le tableau XII. Les paramètres de cette procédure sont fixés à la valeur  $10^{-4}$ , et la tolérance  $\epsilon_x$  est prise égale à  $10^{-6}$ . Dans ce tableau, la fonction  $f$  est la somme des volumes des réacteurs. Sans introduire de terme de pénalisation, le problème ne converge pas, probablement à cause de la non-unimodalité et/ou de la non-convexité du critère. Faute d'estimer correctement les paramètres de Lagrange, il n'a pas été possible de faire converger le problème en introduisant ces derniers dans la pénalisation. Une valeur initiale élevée pour le paramètre  $\rho$ , fait porter tout l'effort de minimisation sur la pénalisation, et entraîne alors une convergence très lente. Partant de 10, la valeur du paramètre  $\rho$  est progressivement réduite, pour atteindre 0,07 à la solution. Les valeurs des volumes  $\text{Vol}_{\text{I}}$ ,  $\text{Vol}_{\text{II}}$ ,  $\text{Vol}_{\text{III}}$  et  $\text{Vol}_{\text{IV}}$  correspondant à cette solution sont les suivantes : 0,862, 1,290, 1,517, 1,681. A la solution, la valeur du critère est légèrement plus élevée que dans le cas du problème simplifié à cause du grand nombre de variables et de contraintes.

## CONCLUSION

Le but de cette étude est la mise au point d'une procédure d'optimisation suffisamment générale permettant de traiter divers problèmes de Génie Chimique dont les principales caractéristiques communes sont un jacobien des contraintes creux, ainsi qu'une fonction objectif dont le gradient doit être évalué numériquement.

L'algorithme présenté est de type gradient réduit, combiné avec des techniques numériquement stables d'algèbre linéaire, permettant en particulier de traiter des matrices creuses. Moyennant le choix de paramètres de Lagrange et de pénalisation, cet algorithme peut être étendu au cas de contraintes non linéaires, grâce à une procédure numérique de linéarisation.

La détermination automatique d'une solution acceptable de base, la possibilité d'évaluer le nombre d'appels au critère (et donc le temps de calcul) en fonction du nombre maximal d'itérations souhaité, la faible occupation

TABEAU XII  
*Atelier de fabrication d'acétate de cellosolve. Problème complet.*

Critère optimisé	$\rho_{\text{initial}}$	$\lambda_{\text{initial}}$	Itérations majeures	Itérations mineures	Nombre d'appels au critère	Valeur optimale du critère	Valeur maximale des contraintes
$f$ . . . . .			Non convergence				
$f + \frac{\rho}{2}(q - \bar{q})^T (q - \bar{q})$	> 10		Convergence très lente				
$f + \frac{\rho}{2}(q - \bar{q})^T (q - \bar{q})$	10		24	175	10675	5,350	0,5
$f + \frac{\rho}{2}(q - \bar{q})^T (q - \bar{q}) - \lambda^T (q - \bar{q})$	10	$0(\epsilon R^{17})$	Non convergence				
$f - \lambda^T (q - \bar{q})$ . . . . .		$0(\epsilon R^{17})$	Non convergence				

mémoire (stockage compact des matrices creuses et réutilisation de ces dernières), ainsi que plusieurs possibilités d'utilisation de schémas de dérivation numérique, constituent les points essentiels de cet algorithme.

La comparaison avec d'autres méthodes d'optimisation a permis de valider cet algorithme, la base de comparaison retenue étant le nombre d'appels au critère.

A la lueur des nombreux problèmes traités et des exemples présentés à titre d'illustration, plusieurs remarques importantes peuvent être formulées.

Les méthodes de recherche directe de Hooke et Jeeves et de Rosenbrock, n'utilisant pas le gradient du critère, pourraient paraître aisément adaptées au traitement de la classe de problèmes considérée dans la mesure où le gradient de la fonction objectif doit être évalué numériquement; cependant la recherche de la direction de descente monodimensionnelle nécessite en général (tableaux I, II, III, VI et VII) un très grand nombre d'évaluations du critère.

Les méthodes d'optimisation non contrainte utilisées (Hooke et Jeeves, Rosenbrock, gradient conjugué) qui nécessitent donc l'introduction d'une pénalisation, conduisent souvent à de mauvais résultats; en particulier la méthode du gradient conjugué n'a presque jamais donné de solution. Les résultats sont d'autant plus inacceptables que le nombre de variables augmente. Ceci est probablement dû au fait que les méthodes de pénalité ont une stabilité et une convergence assez aléatoire; en effet, on aurait pu penser que ces méthodes auraient été plus performantes pour traiter les problèmes  $P_1$  et  $P_2$ , qui sont tels que leur solution est intérieure au domaine défini par les contraintes et les bornes, mais les résultats ont montré le contraire.

Par contre, la méthode de Rosen est comparable à celle du gradient réduit pour des problèmes de faible dimension (nombre de variables  $\leq 5$ ). L'avantage de la méthode du gradient réduit est d'autant plus prononcé que le nombre de variables augmente ( $\geq 20$ ).

Compte tenu, d'une part des mauvais résultats obtenus avec les méthodes Hooke et Jeeves, Rosenbrock et Gradient conjugué, et d'autre part du fait que la méthode de Rosen n'a pas été étendue au cas de contraintes non linéaires, toutes les comparaisons ont été faites sur des problèmes à contraintes linéaires. Il est à noter que lorsqu'une méthode n'est pas mentionnée dans les tableaux comparatifs, cela signifie l'échec de cette dernière.

En présence de contraintes linéaires, les performances de l'algorithme du gradient réduit sont très satisfaisantes, notamment au vu du problème  $P_3$ , qui présente la difficulté de comporter 3 contraintes seulement pour 100 variables, ce qui implique un nombre élevé de variables superbase (égal à 97 au cours de la recherche).

Pour le traitement de problèmes à contraintes non linéaires, la solution la plus simple consiste à tenter la résolution du problème comportant pour critère, uniquement la fonction  $f$  (problèmes A de Box et P<sub>2</sub>).

Toutefois, la faible taille des problèmes précités entraîne des instabilités numériques difficilement appréciables. Nous avons donc résolu un problème à plus grande échelle (problème P<sub>4</sub>) comportant 302 variables soumises à 200 contraintes.

Lorsqu'il est possible d'estimer correctement les valeurs de paramètres de Lagrange, le problème de la minimisation de la fonction lagrangienne converge rapidement (tableau V). Pour le problème P<sub>4</sub>, la pénalisation a pour effet de ralentir la convergence; ceci peut s'expliquer, soit par la convexité de la fonction  $f$  et la faible erreur due à la linéarisation des contraintes, soit par un mauvais choix de la valeur initiale du facteur de pénalisation.

Nous avons toujours constaté, d'une part, qu'une bonne estimation des paramètres de Lagrange a pour effet d'accroître de façon sensible la vitesse de convergence, et d'autre part que des valeurs initiales de  $\rho$  relativement faibles, entraînent une convergence plus rapide. Ce dernier point peut s'expliquer par le fait qu'il paraît souhaitable d'éviter que tout l'effort de minimisation porte sur le terme  $\rho/2 (q - \bar{q})^T (q - \bar{q})$ .

Toutefois, une mauvaise estimation de ces valeurs peut conduire à la divergence de la méthode (tableau XII), il est alors nécessaire de procéder par essais successifs.

Indépendamment de la nature des contraintes, la réinitialisation de la matrice de projection avec la matrice identité, peut accélérer la convergence. Une option a été prévue à cet effet; elle déclenche la réinitialisation lorsque le nombre d'itérations est un multiple d'une valeur arbitraire donnée, ou bien dans le cas d'une convergence trop lente.

L'algorithme qui vient d'être présenté est un outil efficace pour traiter des problèmes dont le jacobien des contraintes est creux. De plus, en présence de problèmes à contraintes non linéaires, l'utilisation de la notion de lagrangien augmenté permet de pallier les difficultés d'instabilités numériques, moyennant le choix de valeurs initiales correctes pour les paramètres de Lagrange, et éventuellement, en cas de forte non convexité du critère, pour le facteur de pénalisation.

#### BIBLIOGRAPHIE

1. M. M. ABBOT et M. C. VAN NESS, *Théorie et applications de la thermodynamique*, Série Schaum, 1978.
2. R. H. ARIS, R. BELLMAN et A. KALABA, *Some Optimization Problems in Chemical Engineering*, C.E.P. Symposium Series, vol. 56, 1960, p. 95.

3. *Bibliothèque mathématique CII. Manuel d'utilisation*, Gamme 10070 IRIS n° 3460 E1/FR, 1972.
4. M. J. BOX, *A Comparison of Several Current Optimization Methods, and the Use of Transformations in Constrained Optimization*, Computer Journal, 9, 1966, p. 67.
5. HO THI DIEU, *Optimisation continue d'un procédé chimique au moyen d'un calculateur analogique*, Thèse M.S., Université de Laval, 1968.
6. J. L. KUESTER et J. H. MIZE, *Optimization Techniques with Fortran*, McGraw-Hill, 1973.
7. P. S. RITCH, *Discrete Optimal Control with Multiple, Constraints U: Constraint Separation and Transformation Technique*, Automatica, 9, 1973, p. 415.
8. D. J. WILDE, *Optimum Seeking Methods*, Prentice Hall, 1964.