Chapitre 2

Synthèse des travaux de recherche présentés

Chacun des huit articles que nous présentons ici appartient à l'une des trois catégories suivantes : l'optimisation numérique, l'optimisation globale et l'optimisation linéaire avec variables entières. Ces catégories sont clairement non-étanches, elles sont même emboîtées : la dernière étant un cas particulier de la seconde, qui est elle-même un cas particulier de la première.

2.1 Optimisation numérique

Trois articles traitent, au sens large, de problèmes d'optimisation dont l'ensemble de recherche est un sous-ensemble de $\mathbb{R}^n$ (n étant un entier donné). Dans le premier, nous introduisons un cadre général permettant d'aborder des problèmes mettant en jeu des fonctions qui ne sont non seulement pas différentiables mais qui présentent également des discontinuités : les fonctions affines par morceaux. L'extension au cas plus général est également considérée : des résultats numériques sont présentés pour le problème d'allocation de débit dans une centrale hydro-électrique impliquant des fonctions discontinues *quadratiques* par morceaux.

Un outil essentiel est celui de pénalisation, dans la mesure où il permet de se ramener à l'optimisation sans contraintes d'une fonction affine par morceaux, moyennant l'utilisation d'une pénalisation du type valeur absolue. Dans le second article, nous traitons de méthodes de pénalisation. Nous étudions la façon d'ajuster automatiquement la valeur du paramètre de pénalité à chacune des itérations des méthodes de pénalisation exacte.

Enfin, notre troisième article présente une application de l'optimisation numérique à un problème classique d'analyse numérique, le problème de valeurs propres généralisé. Cette façon d'aborder le problème semble particulièrement adaptée au cas des matrices entraînant des coûts de calcul prohibitifs pour la résolution de systèmes linéaires.

2.1.1 Optimisation discontinue de fonctions affines par morceaux [1]

Un cadre théorique et un algorithme pratique sont présentés pour résoudre les problèmes d'optimisation affine par morceaux traitant de fonctions pour lesquelles les *faîtes* sont connus. Une approche par pénalisation nous permet de considérer de tels problèmes soumis à un large éventail de contraintes impliquant des fonctions affines par morceaux. Quoique la théorie soit exposée en détails pour le cas particulier des fonctions *affines* par morceaux, elle se généralise aisément aux fonctions non-linéaires (discontinues et différentiables par morceaux), à l'aide de techniques courantes d'optimisation numérique.

L'algorithme de descente proposé fait appel aux approches d'ensemble de contraintes actives et de gradient projeté. Il s'agit d'une généralisation des idées utilisées par A.R. Conn pour traiter la non-différentiabilité dans la fonction de pénalisation exacte de type l_1. On se base ici sur un concept de *décomposition* d'une fonction en une partie lisse et une partie non-lisse. Le cas avec contraintes est ramené à la minimisation sans contraintes d'une fonction de pénalisation exacte du type l_1 (linéaire par morceaux). Nous traitons également une modification de l'algorithme lorsque des points *dégénérés* sont rencontrés. Des résultats numériques préliminaires sont présentés : l'algorithme est appliqué à des problèmes d'optimisation discontinue issus de modèles en Génie industriel.

2.1.2 Ajustement automatique du paramètre de pénalité dans les méthodes de pénalisation exacte [7]

Cet article présente une analyse du rôle du paramètre de pénalité dans les méthodes de pénalisation exacte. Cette étude nous conduit à proposer des modifications à la boucle externe standard gérant la décroissance du paramètre de pénalité (typiquement cette boucle divise simplement le paramètre par une constante). La procédure présentée est basée sur la simple idée de rendre explicite la dépendance de la fonction de pénalisation par rapport au paramètre de pénalité. Elle est illustrée sur le problème de programmation linéaire avec la fonction de pénalité exacte du type l_1 et une approche d'ensemble de contraintes actives. Lorsque la procédure décroît la valeur du paramètre de pénalité, c'est à la valeur *maximale* qui permet à l'algorithme interne de minimisation de quitter l'itéré courant. De plus, la procédure évite des calculs superflus à l'itération suivant une décroissance du paramètre de pénalité. Nous présentons des résultats numériques démontrant que cette méthode peut exiger moins d'itérations que la façon habituelle de mettre à jour le paramètre de pénalité. Notre approche permet également une meilleure compréhension de la performance des méthodes de pénalisation exacte.

2.1.3 Calcul des éléments propres de matrices symétriques par des méthodes d'optimisation [8]

Dans certaines circonstances, il est avantageux d'utiliser une approche par optimisation pour résoudre le problème de valeurs propres généralisé, $Ax = \lambda Bx$, où A et B sont des matrices symétriques réelles et B est de plus définie positive. C'est en particulier le cas lorsque les matrices A et B sont de très grande taille *et* le coût de calcul, pour la résolution précise de systèmes d'équations mettant en jeu ces matrices, est prohibitif. Habituellement l'approche par optimisation utilise le quotient de RAYLEIGH comme fonction-objectif.

Dans un premier temps, nous proposons d'autres fonctions-objectifs pour résoudre le problème de valeurs propres (généralisé) par optimisation (sans contraintes) et nous décrivons les propriétés variationnelles de ces fonctions.

Nous introduisons ensuite quelques algorithmes d'optimisation (basés sur une des formulations variationnelles proposées) conçus pour calculer la plus grande valeur propre et un vecteur propre correspondant. Selon les expériences numériques préliminaires que nous avons conduites, ce travail pourrait ouvrir la voie à des méthodes pratiques pour le calcul de la plus grande valeur propre (et d'un vecteur propre correspondant) d'une paire de matrices réelles symétriques de très grande taille.

2.2 Optimisation globale avec applications au Génie chimique

La nature essentiellement non-convexe des problèmes d'optimisation avec discontinuités nous a amené à l'optimisation globale. C'est ainsi que nous nous sommes intéressé au problème du calcul de la plus grande valeur propre d'une matrice symétrique réelle donnée, A. En effet, les fonctions-objectifs que nous avons étudiées admettent un point-selle correspondant à chacune des valeurs propres de A, sauf pour la plus grande valeur propre pour laquelle il s'agit d'un minimum global. Cependant, notre expérience a démontré qu'une méthode d'optimisation *locale* (telle la méthode quasi-Newton BFGS à mémoire limitée) trouve toujours ce minimum global.

La difficulté intrinsèque du problème *général* d'optimisation globale lorsque l'ensemble de recherche est un continuum (par exemple $\mathbb{R}^n$) a longtemps fait baisser les bras aux numériciens. La demande de la part de l'Industrie et des Services existe cependant et de nombreuses méthodes générales ont été proposées récemment, le plus souvent elles ont été évaluées par leurs auteurs mêmes et ces derniers les testent sur des problèmes très particuliers. Le premier article que nous présentons dans cette section tente de faire un point sur différentes approches, testées de façon indépendante et sur des problèmes-tests issus de la pratique. Dans notre conclusion, il nous apparaît essentiel que la connaissance propre au domaine d'application d'un problème d'optimisation globale donné soit exploitée.

Une façon de faire est de tirer parti, si possible, d'une structure mathématique particulière à la classe de problèmes étudiée. Le problème d'équilibre des phases se pose lors de l'étude des réservoirs pétroliers. Il peut se formuler avec une fonction-objectif qui est combinaison convexe de fonctions (modèles thermodynamiques), sous des contraintes exprimées comme une (même) combinaison convexe de fonctions (liées à la composition chimique des substances initiales). Cette structure mathématique particulière est exploitée dans le second article afin de ramener l'optimisation globale dans un espace de recherche de dimension réduite. L'algorithme générique (pour cette classe de problèmes de Génie chimique) résultant alterne optimisation locale dans tout l'espace de recherche et optimisation globale dans l'espace réduit.

Le pas d'optimisation globale est mis en oeuvre dans le troisième article avec une méthode d'optimisation globale *déterministe* particulièrement bien adaptée au contexte d'application : l'analyse par intervalles. Nous exploitons ainsi systématiquement la forme explicite de la fonction-objectif, de son gradient et de sa matrice hessienne afin d'encadrer de façon sûre la position du minimum global grâce à une énumération et évaluation implicite de l'ensemble de recherche.

2.2.1 Comparaison de logiciels du domaine public pour les problèmes d'optimisation globale du type boîte noire [6]

Nous faisons état de notre expérience avec l'utilisation de six logiciels du domaine public pour l'optimisation globale et présentons des résultats numériques comparatifs obtenus sur un ensemble de onze problèmes-tests. Les techniques utilisées par les logiciels étudiés incluent l'optimisation globale intégrale, les algorithmes génétiques, le recuit simulé, ainsi que les méthodes de regroupement en grappes, de recherche aléatoire, de continuation, bayésiennes, de tunnel et multi-niveaux. L'ensemble de problèmes-tests contient des problèmes issus de la pratique : la régression du type médiane de moindres carrés, le repliement de protéines et la représentation multidimensionnelle dans le plan. Ces problèmes couvrent des cas de fonctions-objectifs non-différentiables et même discontinues, certains admettent un nombre exponentiel de minima locaux. La dimension de l'espace de recherche varie de un à vingt. Nous évaluons les logiciels du point de vue d'ingénieurs aux prises avec des problèmes d'optimisation globale du type boîte noire, c'est-à-dire des problèmes avec une fonction-objectif qui n'est pas donnée sous forme explicite et dont chaque évaluation est coûteuse. De tels problèmes se présentent souvent dans l'industrie. La fonction-objectif peut par exemple être donnée sous la forme de programmes informatiques mettant en jeu une simulation.

2.2.2 Un algorithme d'optimisation globale générique pour le problème d'équilibre des phases [3]

Cet article étudie le problème suivant : trouver le nombre, K, de phases présentes à l'équilibre ainsi que leur composition dans un mélange chimique de n_s substances. Cet équilibre correspond à un minimum de l'énergie libre de GIBBS du système, soumis à des contraintes représentant la conservation de m_b quantités indépendantes, où $m_b = n_s$ dans le cas sans réaction chimique et $m_b \leq n_e + 1$ dans le cas où une réaction est possible, n_e étant le nombre d'éléments en présence. Après un survol des travaux précédents dans ce domaine, en insistant sur les questions fondamentales, nous généralisons la condition nécessaire et suffisante d'optimalité globale, basée sur le *critère du plan tangent avec réaction*, au cas impliquant différents modèles thermodynamiques (le cas où plusieurs *classes* de phase sont présentes—par exemple liquide et vapeur). Nous introduisons ensuite une approche algorithmique qui ramène ce problème d'optimisation globale (avec espace de recherche à $m_b(n_s - 1)$ dimensions) à une suite finie de pas d'optimisation *locale* dans l'espace à $K(n_s - 1)$ dimensions ($K \leq m_b$) et de pas d'optimisation *globale* dans l'espace à $n_s - 1$ dimensions. Le pas global exploite le critère du plan tangent afin de déterminer si la solution courante est optimale et, si elle ne l'est pas, trouve une meilleure solution réalisable mettant en jeu soit le même nombre de phases, soit une phase supplémentaire. Le pas global détermine également la classe de la phase à ajouter dans ce dernier cas. Étant données une procédure de minimisation locale trouvant un point de Karush-Kuhn-Tucker et une procédure d'optimisation globale (pour un espace de recherche à plus petite dimension) donnant un minimum global, nous démontrons que l'algorithme converge vers un minimum global en un nombre fini des pas locaux et globaux décrits ci-dessus. La théorie présentée est validée par des résultats numériques encourageants.

2.2.3 Optimisation globale par analyse par intervalles pour le problème d'équilibre des phases [2]

Nous nous intéressons dans cet article au problème pratique de la minimisation de l'énergie libre de Gibbs dans le problème d'équilibre de phases avec réaction impliquant différents modèles thermodynamiques. L'approche algorithmique utilisée est basée sur le critère du plan tangent de Gibbs, telle que présentée plus haut (Section 2.2.2). Plus précisément, le pas d'optimisation globale se fait dans un espace de recherche de dimension réduite.

Nous décrivons ici un algorithme mettant en oeuvre ce pas d'optimisation globale avec des techniques de l'analyse par intervalles. Nous faisons état de très bons résultats numériques obtenus sur divers exemples de problèmes de minimisation de l'énergie libre de Gibbs.

2.3 Optimisation linéaire avec variables entières : applications dans l'industrie aéronautique

Les deux derniers articles que nous présentons mettent en jeu des variables de décision, essentiellement discrètes. Positionne-t-on tel conteneur à tel endroit dans la soute de l'avion, oui ou non ? Le nombre de possibilités (la *complexité*) du problème avec variables entières (ici booléennes) est tel qu'il est inconcevable d'arriver à le résoudre sans prendre de précaution lors de sa modélisation. Il s'agit notamment dans le premier article d'utiliser un minimum de variables booléennes afin d'arriver, en utilisant des contraintes logiques, à un modèle *linéaire* des contraintes, essentiellement combinatoires, de capacité des soutes. Le but de ce travail était de fournir une méthodologie mise en oeuvre dans un logiciel qu'Airbus fournira à ses clients.

Dans le deuxième article, on se demande si on utilise, oui ou non, un vérin pour soutenir l'aéronef à tel endroit. Si oui, quelle force appliquer alors avec ce vérin ? Il s'agit d'un problème d'optimisation mixte (variables booléenne et variables continues) en Mécanique des structures que nous parvenons à modéliser avec des fonctions affines, ce qui est essentiel pour qu'il soit résoluble en un temps de calcul acceptable.

2.3.1 Optimisation du chargement des conteneurs aériens [5]

Nous traitons le problème qui consiste à charger le plus de fret possible dans un avion tout en équilibrant la charge afin de minimiser la consommation de carburant et de satisfaire aux exigences de stabilité et de sécurité. Notre formulation de ce problème permet de résoudre le problème sur un ordinateur personnel, en moins de dix minutes, à l'aide de logiciel standard d'optimisation linéaire avec variables entières. La méthode permet de désigner les conteneurs à charger (et dans quel compartiment) et ceux à laisser au sol.

2.3.2 Le problème de levage des aéronefs lors des opérations de maintenance [4]

Nous étudions le problème de la détermination de forces à appliquer en différents points de support d'un avion afin d'affaiblir les efforts internes résiduels aux endroits où une opération de maintenance doit être effectuée. Nous introduisons une modélisation sous la forme optimisation linéaire mixte (avec variables continues *et* entières) et faisons état de résultats numériques encourageants sur des données historiques. Notre méthodologie est en cours d'industrialisation chez AIRBUS, où elle sera utilisée comme outil d'aide à la décision.

Bibliographie

[1] A. R. Conn and M. Mongeau. Discontinuous piecewise linear optimization. *Mathematical Programming*, 80(3) :315–380, 1998.

[2] K. I. M. McKinnon, C. G. Millar, and M. Mongeau. Global optimization for the chemical and phase equilibrium problem using interval analysis. In C. Floudas and P. Pardalos, editors, *State of the Art in Global Optimization*, pages 365–382. Kluwer, 1996.

[3] K. I. M. McKinnon and M. Mongeau. A generic global optimization algorithm for the chemical and phase equilibrium problem. *Journal of Global Optimization*, 12(4) :325–351, 1998.

[4] M. Mongeau and C. Bès. Aircraft maintenance jacking problem via optimization. 2003. Soumis pour publication.

[5] M. Mongeau and C. Bès. Optimization of aircraft container loading. *IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems*, 39(1) :140–150, 2003.

[6] M. Mongeau, H. Karsenty, V. Rouzé, and J.-B. Hiriart-Urruty. Comparison of public-domain software for black box global optimization. *Optimization Methods & Software*, 13(3) :203–226, 2000.

[7] M. Mongeau and A. Sartenaer. Automatic decrease of the penalty parameter in exact penalty function methods. *European Journal of Operational Research*, (83) :686–699, 1995.

[8] M. Mongeau and M. Torki. Computing eigenelements of real symmetric matrices via optimization. Technical Report MIP 99-54, Labo MIP, Université Paul Sabatier, Toulouse, France, 1999. Soumis pour publication.