



HAL
open science

Gestion des contraintes de bornes pour l'optimisation avec la méthode simplexe

Nelson Ibaseta, Ludovic Montastruc, Catherine Azzaro-Pantel, Luc Pibouleau,
Serge Domenech

► **To cite this version:**

Nelson Ibaseta, Ludovic Montastruc, Catherine Azzaro-Pantel, Luc Pibouleau, Serge Domenech. Gestion des contraintes de bornes pour l'optimisation avec la méthode simplexe. SFGP 2005, Sep 2005, Toulouse, France. pp.0. hal-04037702

HAL Id: hal-04037702

<https://hal.science/hal-04037702>

Submitted on 20 Mar 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Gestion des contraintes de bornes pour l'optimisation avec la méthode simplexe

IBASETA Nelson, MONTASTRUC Ludovic, AZZARO-PANTEL Catherine* , PIBOULEAU Luc, DOMENECH Serge

Laboratoire de Génie Chimique

UMR CNRS/INP/UPS 5503

5, Rue Paulin Talabot, 31106 TOULOUSE Cedex 1, France

Résumé

L'optimisation est un ensemble de techniques permettant de trouver les valeurs des variables qui rendent optimale une fonction objectif afin de déterminer les meilleures conditions opératoires. La plupart des méthodes d'optimisation ont été développées pour traiter le problème d'un point de vue mathématique, en supposant que le procédé peut être décrit par un modèle représentatif. Ce sont les méthodes classiques, telles que les méthodes de gradient réduit ou de programmation quadratique successive. Néanmoins, le modèle du procédé n'est pas toujours connu ou est trop complexe et nécessite un temps de calcul prohibitif, ce qui nécessite l'utilisation d'autres méthodes, en particulier la méthode Simplex. De plus, il est important de noter, dans beaucoup d'applications en génie des procédés, que la précision requise sur l'optimum n'est pas drastique car il s'agit uniquement de fixer des conditions opératoires.

Après avoir décrit la méthode originale de W. Spendley, G. R. Hext et F. R. Himsworth, une gestion des contraintes est proposée. Dans une troisième partie, l'étude de l'influence de divers paramètres, tels que le point et le pas initiaux est développée sur plusieurs cas théoriques.

Mots-clés : Optimisation, Contraintes, Simplex

Introduction

Les méthodes d'optimisation sont nombreuses et choisies en fonction du problème à traiter, en particulier, s'il s'agit d'un problème comportant des variables entières ou continues ou encore en fonction de la linéarité ou non du problème. Cependant, pour des problèmes où le calcul de la fonction objectif est difficile et peut conduire à un temps de calcul très élevé, d'autres méthodes peuvent être utilisées, notamment la méthode du simplexe. Cette méthode a été choisie dans le cadre de cette étude car le temps de calcul de la fonction est très long car il implique l'utilisation d'un simulateur de procédé. Afin de pouvoir utiliser la méthode du simplexe, des modifications ont été effectuées pour tenir compte des contraintes de bornes. Ces modifications sont proposées dans cet article après une description de la méthode originale. Les différents paramètres sont décrits en fonction du choix du point initial. Certes, une modification de la méthode du Simplex a été réalisée par M. J. Box (1965) sous le nom de Complex. Cependant, les deux approches sont différentes car notre but est de trouver une méthode qui permettrait d'obtenir une bonne solution en un minimum d'itérations. En effet, la méthode du Complex est initialisée à partir d'un point satisfaisant les bornes mais déterminé de façon aléatoire.

1. Présentation de la méthode

La méthode, originale de W. Spendley et al. (1962), consiste à choisir un point de base. A partir de ce point de base, k expériences sont effectuées de façon à former une figure régulière, à $k+1$ sommets, appelée simplexe (k est le nombre de variables du procédé). Les réponses en ces points sont comparées et le plus mauvais point est déterminé. Le principe de la méthode est de s'éloigner de ce plus mauvais point

* Auteur/s à qui la correspondance devrait être adressée : Catherine.Azzaro@ensiacet.fr

et pour ce faire, une nouvelle expérience est réalisée en un point situé à l'opposé de ce plus mauvais point, de façon à obtenir un nouveau simplexe. Cette procédure est répétée jusqu'à l'optimum. Cette méthode est aussi applicable dans le cas d'un problème avec des contraintes. Il suffit, en cas de violation d'une contrainte, de donner une valeur à la fonction objectif infiniment grande pour une minimisation ou infiniment petite pour une maximisation. Il se peut qu'après la réflexion du plus mauvais point, un point déjà écarté soit obtenu. Dans ce cas, la réflexion est réalisée à partir du deuxième plus mauvais point. Un exemple peut être observé dans la figure 1. Le simplexe original est WNB. Ces sommets sont B (le meilleur point), W (le plus mauvais point) et N (le deuxième plus mauvais point). La réflexion de W génère le simplexe NBW' dont W' est le pire point. Alors, une réflexion de W' revient à W et au simplexe NBW. Pour sortir de cette boucle sans fin, la réflexion de N est réalisée.

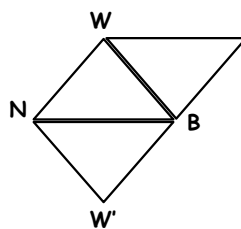


Figure 1: Réflexion du deuxième plus mauvais point

2. Méthode du simplexe modifiée ou de Melder et Mead

L'intérêt de cette méthode est de tenir compte de l'amélioration apportée par la réflexion, ce qui augmente l'efficacité. Le principe de construction du simplexe reste le même; comme dans la méthode initiale, les points sont classés selon leur réponse B (la meilleure), W (la plus mauvaise) et N (la deuxième meilleure), et les coordonnées du point R, symétrique de W, sont déterminées. A ce moment précis, on distingue, selon la réponse en R, trois cas.

- ❖ Cas 1 : La réponse en R est la meilleure de tous les points W, B et N. La direction trouvée est considérée la bonne et le simplexe est dilaté vers le point E où une expérience est faite. Les coordonnées de E sont données par la relation suivante :

$$X_{E,j} = X_{G,j} + \alpha(X_{G,j} - X_{W,j}) \quad \forall j \in (1, k) \quad (1)$$

Une valeur de 2 est prise couramment pour le facteur d'accélération α . Si $\alpha = 2$, le point R, symétrique du point éliminé W, est obtenu. Les réponses en E et R sont comparées et le meilleur point est retenu pour construire le nouveau simplexe avec les points B et N.

- ❖ Cas 2 : La réponse en R est comprise entre celle de B et N, la direction W-R ne peut pas être considérée comme la bonne et la progression est poursuivie sans modification de la méthode initiale.
- ❖ Cas 3 : La réponse en R est inférieure à la réponse en N. Il est possible que la direction soit la bonne, mais que l'optimum ait été dépassé. Il y a alors deux possibilités : Soit la réponse en R est meilleure que la réponse en W et une contraction du côté de R est alors effectuée, soit elle est pire, et la contraction est alors réalisée du côté de W. Du point de vue mathématique, ceci est équivalent à prendre une valeur de 0,5 pour α dans le premier cas, et une valeur de -0,5 dans le deuxième cas. Si les contractions n'apportent aucune amélioration, la direction WR ne peut pas être considérée bonne et la réflexion du deuxième plus mauvais point est réalisée. Il peut aussi arriver que les contractions apportent une amélioration mais que les nouveaux points restent malgré tout les plus mauvais dans le nouveau simplexe. Dans ce cas, soit le symétrique du point

contracté est calculé (dans le cas où les réponses en W et R ne sont pas très différentes), soit une nouvelle contraction est réalisée (si le simplexe est suffisamment grand), soit le symétrique du deuxième plus mauvais point est pris.

Alors, dans cette méthode la taille et l'allure du simplexe vont être modifiées au cours de la procédure. Pour cette raison, il n'est pas nécessaire d'initialiser la méthode avec un simplexe régulier, et le chercheur a l'entière liberté de générer le simplexe initial de la façon qu'il désire.

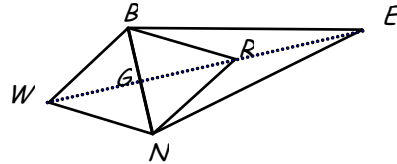


Figure 2: Expansion du simplexe selon la méthode de Nelder et Mead

3. Application de la méthode simplexe au problème considéré

Le modèle qui décrit le procédé est complexe et le temps de calcul pour chaque simulation, élevé, ce qui justifie l'application d'une méthode de type simplexe. En fait, la méthode du simplexe traditionnel peut avoir un peu de difficulté pour trouver un optimum situé aux proximités des bornes, ce que nous allons montrer à l'aide de la figure 3. Sur cette figure 3, l'évolution d'un simplexe aux proximités de deux bornes $X1_{max}$ et $X2_{max}$ peut être observée. Dans le simplexe initial, A est le meilleur point, B le plus mauvais point, C le deuxième meilleur point.

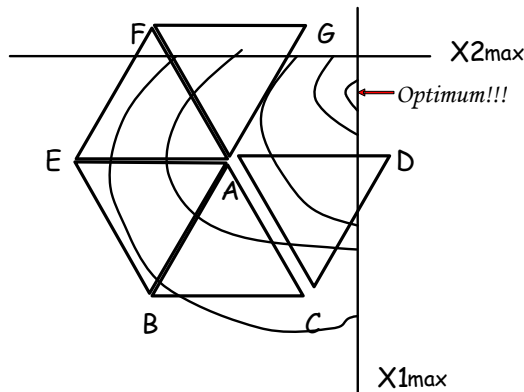


Figure 3: Problème de la méthode du simplexe pour trouver un optimum proche des bornes

D'après la méthode, le symétrique de B est calculé et le point D est obtenu. Ce point D se trouve hors de l'espace de recherche ($X1 > X1_{max}$) et donc une valeur infiniment grande (dans le cas d'une minimisation) doit être assignée à D. Ce point devient alors le plus mauvais point du nouveau simplexe, et donc son symétrique doit être obtenu. Ce point symétrique est le point B. En accord avec la procédure, le symétrique du deuxième plus mauvais point (C) est calculé.

Ce point (E) est encore le plus mauvais point du nouveau simplexe. Encore une fois, nous prenons le deuxième plus mauvais point de ce simplexe (B), et le point F est obtenu. Ce point dépasse la borne sur $X2$ et alors une valeur infiniment grande doit être assignée à la fonction objectif. F est alors le plus mauvais point du nouveau simplexe. Son symétrique est B, un point qui a été déjà écarté. Alors, il faut prendre le deuxième plus mauvais point E et calculer son symétrique, G. G est aussi hors de l'espace de recherche et alors une valeur infiniment grande de la fonction objectif lui est assignée. G étant le plus mauvais point du nouveau simplexe, et E étant son symétrique, il faut prendre le deuxième plus mauvais point, F. Nous revenons alors sur D, qui a déjà été évalué. Un cycle autour de A est réalisé et une deuxième

évaluation de la fonction objectif en A doit être faite. Finalement, A est considéré comme l'optimum du problème, même s'il n'est pas le vrai optimum.

4. Modification proposée à la méthode de Nelder et Mead

Le point de départ de la modification est la méthode de Nelder et Mead (1965), en lui ajoutant une modification : quand une des bornes est dépassée, la méthode n'affecte pas une valeur infiniment grande à la fonction objectif, mais calcule le point d'intersection entre la borne et la direction WGR. Cette modification est différente de celle de Box (1965) qui préconise une réinitialisation de la variable. L'avantage de notre méthode est d'évaluer le critère proche des bornes.

Du point de vue pratique, ceci équivaut à calculer la valeur de α maximale satisfaisant les bornes. Si cette valeur maximale est plus grande que la valeur correspondante à la méthode de Nelder et Mead (1 pour la réflexion, 2 pour l'expansion du point réfléchi), celle-ci est prise comme valeur par défaut. Par contre, dans le cas où cette valeur maximale est plus petite, elle est prise pour le calcul du point réfléchi R (ou du point étendu E).

Pour une variable j donnée, nous comparons les coordonnées du centre de gravité G et du plus mauvais point W . Si $X_{Gj} > X_{Wj}$, la borne maximale de la variable j risque d'être dépassée (figure 4). Le calcul de

α_{\max} satisfaisant les bornes est réalisé selon l'expression:

$$\alpha_{\max} = \frac{M_j - X_{Gj}}{X_{Gj} - X_{Wj}} \quad (2)$$

M_j étant la borne supérieure de la variable j .

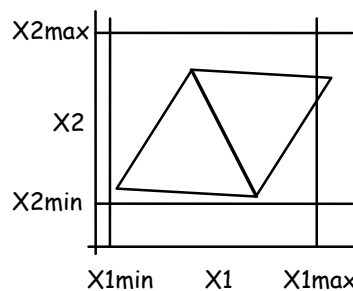


Figure 4: Calcul de alpha quand $G_j > W_j$

En revanche, si $X_{Gj} < X_{Wj}$, c'est la borne inférieure qui peut être dépassée (figure 5). Le calcul de α_{\max} satisfaisant les bornes est réalisé selon l'expression:

$$\alpha_{\max} = \frac{X_{Gj} - m_j}{X_{Wj} - X_{Gj}} \quad (3)$$

m_j étant la borne inférieure de la variable j .

Cette procédure est réalisée pour chaque variable j , et les valeurs obtenues de α_{\max} sont alors comparées.

La valeur la plus petite de α_{\max} est retenue. Cette valeur est aussi comparée avec la valeur par défaut de α . Si cette valeur par défaut est plus petite que α_{\max} , c'est la valeur par défaut qui est prise.

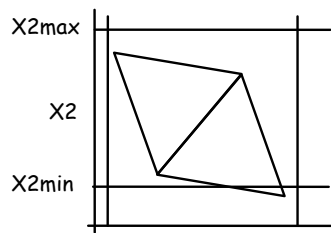


Figure 5: Calcul d' α quand $G_j < W_j$

L'algorithme de la méthode est alors le suivant :

- 1) Génération du simplexe initial. Ce simplexe est généré à partir d'un point fourni par l'utilisateur. Le reste des points est obtenu en ajoutant une certaine quantité (pas) alternativement à chaque variable. Par exemple, pour un simplexe à 3 variables dont le pas était 1 et le point de départ était (0,0,0), les autres trois sommets seraient (1,0,0), (0,1,0) et (0,0,1).
- 2) Evaluation de la fonction objectif pour chaque sommet.
- 3) Obtention, par comparaison des différents sommets, du maximum et minimum du simplexe.
- 4) Calcul des coordonnées du centre de gravité G. Chaque composante est calculée comme la moyenne des composantes de chaque sommet, hors le plus mauvais point.
- 5) Calcul de α_{\max} de la façon décrite ci-dessus. La valeur par défaut de α est prise égale à 1.
- 6) Calcul de R et évaluation de la fonction objectif en ce point.
- 7) Si la réponse au point R est meilleure que la réponse du meilleur point B, nous pouvons envisager de réaliser une extension comme dans la méthode de Nelder et Mead.
 - a) Si $\alpha < 1$, l'extension n'est pas possible (les bornes seraient dépassées). Le point R est retenu pour le nouveau simplexe.
 - b) Si non, la valeur de α_{\max} calculée est comparée avec la valeur par défaut pour l'expansion (2, comme dans la méthode de Nelder et Mead). Le point E est ainsi obtenu. Si la réponse de E est meilleure que la réponse de B, le point E est gardé pour le nouveau simplexe. Sinon, c'est le point R qui est employé pour le simplexe suivant.
- 8) Si la réponse au point R est pire que la réponse du meilleur point B, une contraction semblable à celle de Nelder et Mead est réalisée.
- 9) Une fois obtenu le nouveau simplexe, les pas 3) à 8) sont répétés jusqu'à satisfaire le critère d'arrêt. Ce critère d'arrêt est la non variation de la fonction objectif ($|Y_B - Y_W| < 10^{-4}$). La méthode peut être aussi arrêtée quand il n'y a pas de différences appréciables entre les valeurs des variables ; c'est-à-dire, quand l'écart type des valeurs de chaque composante pour une variable donnée est plus petit que 0,25.

$$|Y_B - Y_W| < 10^{-4} \quad \text{ou} \quad S = \frac{\sqrt{\left(\sum_{j=1}^k (X_j - \bar{X}_j)^2 \right)}}{k} < 0,25 \quad \forall j \in (1, k) \quad (4)$$

5. Application de la méthode modifiée

Dans un premier temps, la méthode modifiée a été validée avec des fonctions mathématiques dont la solution était déjà connue. Ces fonctions ont été optimisées par la méthode de Nelder et Mead originale et par la méthode modifiée. Le nombre d'itérations nécessaires pour chaque méthode a été comparé.

Pour déterminer si la méthode modifiée est satisfaisante, la distance entre l'optimum trouvé et le vrai optimum a été calculée.

$$distance = \sqrt{\sum_{i=1}^k (X_i - \mu_i)^2} \quad (5)$$

La solution trouvée par la méthode a été considérée bonne quand cette distance était plus petite que la distance qu'il y aurait entre l'optimum trouvé et le vrai optimum s'il y avait une erreur de 2% sur chaque variable. Par exemple, pour une fonction à 4 variables, la solution trouvée par notre méthode était considérée bonne quand cette distance était plus petite que 0,04.

$$\sqrt{0,02^2 + 0,02^2 + 0,02^2 + 0,02^2} = \sqrt{4 \cdot 0,02^2} = 0,04 \quad (6)$$

La solution était considérée mauvaise quand cette distance était plus grande que la distance qu'il y aurait s'il y avait une erreur de 5% sur chaque variable. Par exemple, pour une fonction à 4 variables, cette distance était 0,1. Pour des distances intermédiaires, la solution n'était considérée ni mauvaise ni bonne.

La méthode est très satisfaisante pour des fonctions à deux variables. Elle devient de moins en moins efficace quand le nombre de variables augmente (un nombre maximal de 5 variables a été testé). Dans ce cas, la solution était bonne dans 44,23% des cas, et mauvaise, dans 51,92% des cas, tandis que pour une fonction à deux variables, la solution était bonne dans environ 90% des cas et mauvaise dans les cas restants.

Dans les cas où la méthode marche bien le nombre d'itérations diminue le plus souvent. L'intérêt à employer cette méthode modifiée est donc démontré.

Tableau 1: Résultats obtenus pour les fonctions testées

FONCTION	INTERVALLE	% BONS RESULTATS	% MAUVAIS RESULTATS	% CAS AVEC MOINS D'ITERATIONS
1	[-20,0]	88,89	11,11	100
2	[0,1]	90,91	9,09	100
3	[-20,20]	66,35	28,85	95,65
4	[-20,20]	54,81	41,35	77,19
5	[-1,1]	37,50	51,67	88,89
6	[-1,1]	40,83	50,83	93,88
7	[-20,20]	44,23	51,92	76,09

Tableau 2: Fonctions employées pour tester la méthode

	FONCTION
1	$0,00025 \cdot (x^2 + y^2)$
2	$4(x^2 + y^2) - 2xy - 6(x + y) + 3$
3	$(x - 19)^2 + (y - 20)^2 + (z - 19,5)^2$
4	$(x - 19)^2 + (y - 20)^2 + (z - 19,5)^2 + (w - 19,75)^2$
5	$-2x + y - 2z + 1,5x_2 + 0,5y_2 + 2,5z_2 + 0,5w_2 + xz - xw + zw$
6	$x + z - w + x^2 + y^2 + z^2 + w^2 + zw$
7	$(x - 19)^2 + (y - 20)^2 + (z - 19,5)^2 + (w - 19,75)^2 + (u - 19,25)^2$

6. Conclusions

La méthode Nelder et Mead avec la modification que nous avons proposée est efficace:

- ❖ si le nombre de variables n'est pas trop élevé
- ❖ si le point de départ n'est pas trop éloigné de l'optimum
- ❖ si le pas n'est pas trop grand.

Un plan d'expériences peut aider à satisfaire les deux premières conditions, puisqu'il permet de déterminer les variables qui ont un effet significatif sur la réponse du système et de plus il donne une première estimation de la position de l'optimum.

La modification apportée à la méthode de Nelder et Mead permet traiter le cas d'un optimum proche des bornes, qui est fréquemment rencontré dans les problèmes de génie des procédés. Par ailleurs de façon générale, l'évaluation de la fonction objectif nécessite des temps de calcul élevés par suite de l'utilisation de modèles numériques complexes, rend délicat la mise en œuvre de méthodes classiques de programmation mathématique (Gradient conjugué, Programmation Quadratique Successive, Gradient réduit projeté, ...).

Références

- M.J. BOX. A new method of constrained optimization and a comparison with other methods. *Computer J.* Vol. 8, pp42-52 (1965).
- A. NELDER and R. MEAD. A simplex method for function minimization, *Computer J.* Vol. 7, no. 4, pp 308 (1965).
- W. SPENDLEY, G. R. HEXT and F. R. HIMSWORTH. Sequential application of simplex designs in optimization and evolutionary operation, *Technometrics*, Vol 4, no 4, pp 441 (1962).