

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE CONSTANTINE 3



FACULTE DU GENIE DES PROCEDES PHARMACEUTIQUES

DEPARTEMENT DE GENIE CHIMIQUE

N° d'ordre : .....

Série : .....

Mémoire de fin d'étude pour l'obtention du diplôme de Master

Option : Génie Chimique

Thème :

**Globalisation de la méthode de *Nelder-Mead*  
par l'utilisation de l'algorithme GBNM**

**(Global Bounded Nelder-Mead)**

**et Applications.**

Présenté par :

- AOUAD Halima
- BENDJAMA Hafida
- BENLATRECHE Meriem

Dirigé par :

Mme : N.Outil

Promotion 2014-2015

## Table des matières

Liste des tableaux

Liste des figures

Introduction générale ..... 1

### *Chapitre I : Méthodes d'optimisation et globalisation de Nelder-Mead*

I.1 Introduction..... 3

I.2 Définition de l'optimisation ..... 3

I.2.1 Fonction objectif ..... 4

I.2.2 Les contraintes ..... 5

I.2.3 Les extremums ..... 5

I.3 Utilisation de l'optimisation en génie des procédés..... 7

I.3.1 Utilisation de l'optimisation pour la commande des procédés..... 7

I.3.2 Utilisation de l'optimisation dans la phase de conception ..... 7

I.3.3 Utilisation de l'optimisation pour la modélisation ..... 7

I.4 Les étapes utilisées pour résoudre des problèmes d'optimisation ..... 7

I.5 Classement des méthodes numériques d'optimisation ..... 8

I.5.1 Méthodes d'optimisation déterministes ..... 8

I.5.2 Méthodes stochastiques ..... 9

I.6 Méthode de simplexe ..... 9

I.6.1 Définition mathématique du simplexe ..... 9

I.7 La méthode de Nelder-Mead ..... 10

I.7.1 Origines et histoire de Nelder Mead ..... 11

I.7.2 Présentation de l'algorithme initial de Nelder Mead ..... 11

I.7.3	Description d'une itération de l'algorithme de Nelder Mead .....	12
I.7.4	Algorithme de Nelder-Mead .....	15
I.7.5	Limitation des déformations du simplexe modifié .....	16
I.7.6	La différence entre les recherches locale et globale .....	17
I.8	La globalisation de la méthode de Nelder-Mead GBNM : .....	17
I.8.1	Description de la globalisation .....	18
I.8.2	Un modèle prédictif : la fenêtre de Parzen.....	18
I.8.2.1	Estimation de la densité de probabilité par la méthode de fenêtre de Parzen .....	18
I.8.2.2	Le principe de la méthode .....	18
I.8.2.3	Influence de la largeur de fenêtre.....	20
I.8.2.4	Exemple d'application de la méthode de Fenêtre de Parzen échantillonnage.....	20
I.8.3	Prise en compte des bornes .....	21
I.8.4	L'algorithme de GBNM.....	22
<b><i>Chapitre II : Calcul de l'équilibre thermodynamique</i></b>		
II.1	Introduction .....	23
II.2	Notions de la thermodynamique chimique .....	23
II.2.1	Système thermodynamique .....	23
II.2.2	Solutions idéales .....	23
II.2.3	Solutions non idéales .....	24
II.3	Equilibres liquide-vapeur .....	25
II.3.1	Diagrammes thermodynamiques .....	25
II.3.2	Conditions thermodynamiques de l'équilibre .....	27
II.4	Modèles thermodynamiques.....	28
II.4.1	Généralités sur les modèles à enthalpie libre d'excès .....	28
II.4.2	Les modèles semi-prédictifs .....	30
II.4.3	Les modèles prédictifs de contribution de groupes .....	31
II.4.4	Concept de composition locale .....	32

II.4.5	Extension de l'équation NRTL .....	33
II.4.5 .1	Application de modèle à l'équilibre des mélanges binaires .....	37
II.4.5.2	Estimation des paramètres d'interaction .....	37
II.5	Caractéristiques du modèle NRTL:.....	39
II.6	Importance du calcul de l'équilibre thermodynamique.....	40

### ***Chapitre III : Synthèse bibliographique***

III.1	Introduction .....	41
III.2	Les liquides ioniques .....	41
III.2.1	Nomenclature des liquides ioniques.....	43
III.2.2	Propriétés physico-chimiques des liquides ioniques.....	43
III.2.3	Domaines d'applications des liquides ioniques .....	44
III.3	Travaux précédents sur la globalisation de Nelder Mead .....	45
III.4	Travaux précédents sur l'application des liquides ioniques en équilibre thermodynamique .....	47
III.5	Travaux précédents sur l'estimation probabilisé par la fenêtre de Parzen .....	48

### ***Chapitre IV : Résultats et discussion***

IV.1	Introduction .....	52
IV.2	Application de Nelder-Mead classique.....	52
IV.2.1	Fonction analytique.....	52
IV.2.2.	Paramètres d'interaction du modèle NRTL.....	57
IV.3	Inconvénients de la méthode de Nelder-Mead globalisée par réinitialisation aléatoire ..	59
IV.4	Procédure de globalisation .....	60
IV.4.1	Taille du simplexe initial .....	60
IV.4.2	Projection des points externes sur les bornes .....	61
IV.4.3	Ré-initialisation probabilisée.....	62

IV.4.4 Application du programme GBNM .....	63
IV.5 Application de GBNM pour le calcul de l'équilibre chimique .....	67
IV.6 Conclusion .....	72
<b>Conclusion générale</b>	
<b>Références bibliographiques</b>	
<b>Annexe 1</b>	
<b>Annexe 2</b>	

## Résumé

Ce travail présente la méthode de Nelder Mead globalisée et bornée qui a été élaborée à travers des améliorations de l'algorithme de la méthode de Nelder Mead classique par la ré-initialisation aléatoire puis probabilisée, toutes les étapes de la procédure ont été présentées. Le programme de GBNM a été validé par des fonctions multimodales. Le programme final de l'algorithme GBNM a été utilisé pour ajuster les paramètres d'interaction du modèle thermodynamique NRTL des systèmes binaires. On a introduit les optimums globaux trouvés pour chaque système pour le calcul de l'équilibre liquide vapeur où on a trouvé une bonne concordance avec les données expérimentales tirées de la littérature.

**Mots clés :** globalisation, Nelder Mead, ré-initialisation probabilisée, Parzen, optimum global, paramètres d'interaction, NRTL, équilibre chimique.

## ملخص

هذا العمل يقدم طريقة Nelder Mead الشاملة و المحدودة المحصل عليه بادخال تحسينات في طريقة Nelder Mead الكلاسيكية عن طريق اعادة الانطلاق بالاحتمالات. تم التحقق من صحة هذا البرنامج GBNM بواسطة دوال متعددة القيم الحدية. طريقة GBNM استخدمت لضبط المعلمات من النموذج الحراري NRTL للأنظمة الثنائية. القيم الحدية المحصل عليها استعملت لرسم منحنيات التوازن سائل -بخار. النتائج اظهرت توافق مع البيانات الموجودة سابقا

**كلمات المفتاحية:** الشمولية، Nelde Mead ، إعادة الاحتمالات، قيم حدية عظمى، المعلمة التفاعل Parzen ،

## Abstract

This work present the method of globalized bounded Nelder Mead which was developed through improvements in the method of classic Nelder Mead algorithm, by probability resetting. The program of GBNM was validated by multimodal mathematic functions. The method of GBNM was used to adjust the interaction parameters of NRTL thermodynamic model for binary systems. The global optima found for each system was introduced to the vapor liquid equilibrium calculation, for which it has been found corresponding results to the given experimental data from the literature.

**key words:** globalization, Nelder Mead, resetting probability, Parzen, global optimum interaction parameter, NRTL, chemical equilibrium.