

Propagation garantie de contraintes ODE par morceaux pour l'optimisation globale

Hugo Joudrier, Khaled Hadj-Hamou

Université Grenoble Alpes, CNRS, G-SCOP, F-38000 Grenoble
hugo.joudrier@grenoble-inp.fr, khaled.hadj-hamou@grenoble-inp.fr

1. Introduction

Les systèmes dynamiques sont largement représentés dans le monde qui nous entoure. De natures physique, économique, chimique... ils peuvent être modélisés par des systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODE). Pour résoudre de manière garantie ces systèmes non-linéaires, nous utilisons les méthodes à base de calcul d'intervalles permettant d'encadrer les solutions et les trajectoires.

Considérons le système dynamique suivant décrit par l'équation 1 :

$$\begin{aligned} \mathbf{u}'(t) &= \mathbf{h}(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) \\ \mathbf{u}(t_0) &= \mathbf{u}_0 \\ \boldsymbol{\theta} &\subseteq \boldsymbol{\Theta} \end{aligned} \tag{1}$$

où :

- $t \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ est la variable temps, avec $\mathbb{I}\mathbb{R}$ l'ensemble des intervalles réels,
- $t_0 \in \mathbb{I}\mathbb{R}$ est le temps correspondant à l'état initial du système,
- $\mathbf{u}(t) \in \mathbb{I}\mathbb{R}^n$ est le vecteur de n variables d'état $\langle u_1(t), \dots, u_n(t) \rangle$ à l'instant t ,
- $\boldsymbol{\theta} \subseteq \boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{I}\mathbb{R}^p$ est le vecteur de p variables paramétriques $\langle \theta_1, \dots, \theta_p \rangle$ indépendantes du temps, et $\boldsymbol{\Theta} \in \mathbb{I}\mathbb{R}^p$ le domaine des paramètres.
- $\mathbf{h} : \mathbb{I}\mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{I}\mathbb{R}^n$ est le vecteur non-linéaire d'équations différentielles ordinaires, $\mathbf{h}$ est de classe C^1 .

L'objectif de ce travail est l'optimisation garantie d'un modèle dynamique appliqué au dimensionnement multi-physique (contacteur électromagnétique). Nous cherchons à déterminer la valeur optimale des variables paramétriques $\boldsymbol{\theta}^* \in \boldsymbol{\Theta}$ afin d'optimiser une fonction de coût :

$$\text{Min } f(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) \tag{2}$$

Nous traitons le problème particulier pour lequel les fonctions décrivant le système ODE sont des contraintes définies par morceaux permettant de traduire des changements de comportement induits par l'état du système. La description d'une contrainte ODE est faite par un ensemble de morceaux où chaque morceau est contraint par l'état dans lequel se trouve le système.

$$\mathbf{h}(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) := \begin{cases} h_1(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) & \text{si } c_1(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t) \\ \vdots \\ h_k(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) & \text{si } c_k(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}, t) \\ h_0(\mathbf{u}(t), \boldsymbol{\theta}) & \text{sinon} \end{cases} \tag{3}$$

avec $c_i \in (\mathbb{I}\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{I}\mathbb{R})^n \times \mathbb{I}\mathbb{R}^p \times \mathbb{I}\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{I}\mathbb{B}$, $i \in \{0, 1, \dots, k\}$. $\mathbb{I}\mathbb{B}$ est l'ensemble des booléens $\{\text{Vrai}, \text{Faux}\}$ augmenté d'une valeur d'incertitude $\{\text{Indéterminé}\}$.

Ce problème est difficile, de part la nature des variables (paramétriques et d'états) et du type de contraintes (algébriques et fonctionnelles, non-linéaires et non-convexes).

Nous proposons un ensemble de méthodes de propagation garantie des contraintes ODE par morceaux dans un algorithme de Branch & Bound à base d'intervalle. Nous

adaptons pour cela l'approche classique utilisant (1) l'opérateur de Picard-Lindelöf pour déterminer un encadrement global de la solution sur un intervalle de temps, (2) le modèle de Taylor pour la contraction du domaine de la solution et enfin (3) les techniques de propagation de contraintes afin de guider la résolution.

2. Résolution garantie d'ODE : état de l'art

L'objectif du solveur d'ODE est de générer un encadrement garanti, le plus petit possible, de la valeur de la trajectoire s^* pour un ensemble d'instant t du système (figure 1). Dans cette partie, nous présentons un ensemble de méthodes issues de la littérature, permettant une résolution garantie d'ODE sur un intervalle de temps.

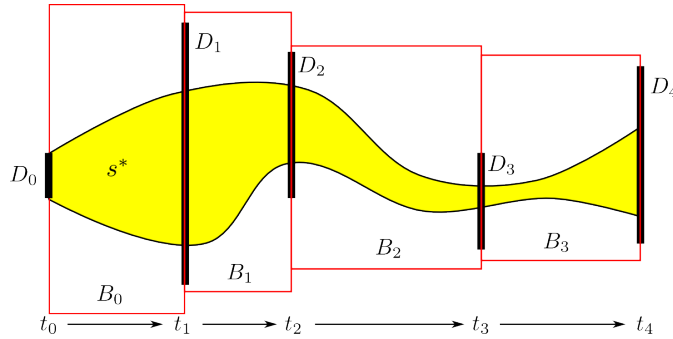


FIGURE 1. Résolution garantie d'une ODE sur $[t_0; t_4]$

Nedialkov et *al.* [8] introduisent une méthode de résolution globale et garantie des systèmes ODE avec des conditions initiales. Pour cela ils utilisent les propriétés de l'opérateur de Picard-Lindelöf (ou Cauchy-Lipschitz) [7] pour déterminer un encadrement global B_i de la solution d'une ODE sur un intervalle de temps $[t_i; t_{i+1}]$ à partir d'un encadrement D_i de la solution à l'instant t_i . En posant $D_{i+1} \leftarrow B_i$ il est possible d'itérer la procédure jusqu'à t_f en partant de la condition initiale définie par l'encadrement D_0 à t_0 .

À cet opérateur, est associée une méthode de contraction du domaine D_{i+1} de la solution sur un instant précis en utilisant la forme centrée de l'extension pour le calcul par intervalle du polynôme de Taylor et de son erreur. Pour gagner en précision, l'évaluation s'effectue de manière segmentée afin de limiter les effets sur-enveloppant de l'arithmétique d'intervalle.

Deville et *al.* [9] introduisent des concepts de consistances dans le but d'accroître la qualité de la résolution (réduire l'encadrement de la solution) en ajoutant la possibilité de pouvoir couper une partie du domaine.

Lin and Stadtherr [5] généralisent la résolution de ces systèmes avec la prise en compte d'incertitudes sur la valeur des paramètres. Des techniques de propagations de contraintes sont mises en place afin de réduire la propagation d'erreurs [1]. Dans la pratique, il est parfois possible que l'on connaisse l'état du système à des instants particuliers, en réalisant des mesures lors d'une expérimentation par exemple. Ces contraintes permettent de guider la résolution [2].

3. Contribution

Les méthodes citées précédemment ne permettent pas de résoudre de manière garantie des systèmes ODEs définis par morceaux. Dans la littérature nous n'avons trouvé que peu d'exemples de ce type de contraintes et à notre connaissance nous n'avons pas identifié de méthodes garanties pour traiter le problème général.

Nous avons identifié une littérature dans le domaine du génie des procédés traitant succinctement d'une sous-partie de ce problème [4]. Ces travaux, qui portent davantage sur l'optimisation, considèrent des problèmes comportant des contraintes ODEs classiques, dont les variables paramétriques $\langle \theta_1, \dots, \theta_p \rangle$ peuvent avoir des valeurs différentes selon des périodes de temps données. Néanmoins, cela ne permet pas de résoudre notre problème particulier. En effet, le point de rupture (changement d'état du système) n'est en général pas connu à l'avance. La prise en compte d'incertitudes via l'arithmétique d'intervalle ne permet pas également de réaliser le passage d'un morceau à l'autre à un instant précis, mais sur un intervalle de temps pendant lequel plusieurs morceaux du système doivent être considérés simultanément. Ce qui génère un ambiguïté dans le traitement des morceaux.

L'approche que nous proposons pour la résolution garantie des contraintes définis par morceaux est comparable à l'approche classique.

Nous utilisons d'abord l'opérateur de Picard-Lindelöf pour générer une inclusion globale de la solution. Si cette inclusion B_i est ambiguë (couvrant plusieurs morceaux), alors l'inclusion B_i est recalculée en considérant l'union sur chacun des morceaux.

Dans le cas d'une inclusion globale B_i ambiguë, il est impossible de calculer une contraction du domaine D_{i+1} sans perdre la garantie de l'encadrement. Dans ce cas, le pas d'itération entre t_i et t_{i+1} est alors réduit jusqu'à atteindre soit un seuil minimum donné ou une inclusion globale non-ambiguë. Une fois le seuil minimum atteint, avec B_i ambiguë, l'encadrement de départ D_i est segmenté en un ensemble $\{D_i^1 \dots D_i^m\}$ et le processus de résolution est appliqué entre t_i et t_{i+1} séparément sur chacun des D_i^j pour générer un ensemble d'inclusions globales B_i^j de la solution. Pour chaque inclusion globale B_i^j non-ambiguë, nous appliquons directement le processus de résolution classique. Pour les autres inclusions globales nous posons $D_{i+1}^j \leftarrow B_i^j$.

Le problème de cette méthode est qu'elle ne permet toujours pas de réaliser le changement de phase par inclusion des B_i^j ambiguës. L'idée est donc de procéder à la contraction de l'inclusion globale B_i^j sur l'instant t_{i+1} lorsque l'inclusion D_i est ambiguë sur les même morceaux que B_i^j au risque de perdre la garantie.

4. Résultats

Cette méthode de propagation *garantie* des contraintes ODE par morceaux est utilisée dans un algorithme d'optimisation globale de type Branch & Bound à base d'intervalle. Chaque nud contient l'espace des paramètres, ainsi que la valeur de l'objectif global et local (sur le point médian de l'espace des paramètres). Nous proposons un algorithme de coupes permettant d'approximer le résultat est de réduire le nombre d'itérations en jouant sur l'incertitude générée par la résolution des ODEs. Nous illustrons nos propositions sur un exemple académique définit ci-après :

$$\begin{aligned}
& \text{Min } f(x(t), y(t), \theta_1, \theta_2) = x(2) - x(0.5) \\
& \text{sc. } x'(t) = h(x(t), y(t), \theta_1) \quad \text{si } y(t) < 1 \\
& \quad \quad \quad x'(t) = h(x(t), y(t), \theta_2) \quad \text{sinon} \\
& \quad \quad \quad y'(t) = 1 \\
& \quad \quad \quad x(0) = 0, y(0) = 0 \\
& \quad \quad \quad \theta_1 \in [-50; 50], \theta_2 \in [-50; 50]
\end{aligned} \tag{4}$$

avec

$$h(x(t), y(t), \theta) := \begin{cases} 100 * (0.5 - y(t)) & \text{si } x(t) \geq 3 \\ \theta & \text{si } x(t) \geq -2 \\ \theta/10 & \text{sinon} \end{cases} \tag{5}$$

Les modèles traités sont des systèmes autonomes. Un système non-autonome peut se ramener à un système autonome en considérant la variable temps t comme une variable d'état avec une dérivée égale à 1, la variable d'état $y(t)$ dans cet exemple.

La solution optimale théorique est $\theta_1 = 50$ et $\theta_2 = -50$ pour laquelle la valeur théorique de l'objectif est -19.16 . Pour le test, l'espace des paramètres est limité à une subdivision de côté 0.1 avec une coupe d'approximation $\epsilon = 0$. L'algorithme s'arrête après 82 itérations au lieu de 9154 sans la coupe avec le résultat suivant : $b_{sup} = -18.96$, $\theta_1 = [49.76]$, $\theta_2 = [-49.95]$, objectif $f \in [-19.66; -18.96]$.

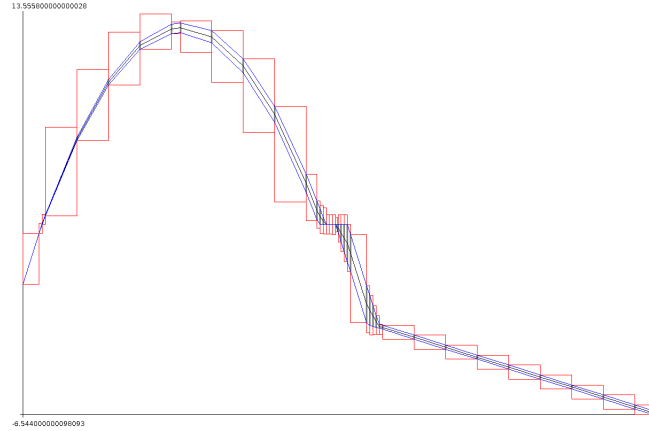


FIGURE 2. $x(t)$ pour $t \in [0; 2]$

5. Conclusion

Le travail présenté dans ce papier a été réalisé dans le cadre du Master 2 Recherche ([3]). Nous avons proposé des algorithmes à base de calcul d'intervalle pour encadrer et propager de manière garantie des équations différentielles définies par morceaux. Pour implémenter ces algorithmes nous avons développé un solveur d'ODEs spécifique.

Pour résoudre de manière efficace des problèmes complexes de dimensionnement multi-physique, il est nécessaire de propager simultanément les contraintes fonctionnelles et algébriques dans un algorithme d'optimisation globale.

Pour améliorer la qualité et la précision des résultats, une autre idée serait d'étudier l'impact d'une autre arithmétique (l'arithmétique affine [6]) en complément de l'arithmétique d'intervalle afin d'obtenir des résultats d'opérations beaucoup plus précis tout en gardant la garantie du résultat.

Références

1. J. Cruz and P. Barahona. Constraint satisfaction differential problems. In Francesca Rossi, editor, *CP*, volume 2833 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 259–273. Springer, 2003.
2. L. Jaulin. Nonlinear bounded-error state estimation of continuous-time systems. *Automatica*, 38(6) :1079–1082, 2002.
3. H. Joudrier. *Propagation de contraintes ODE par calcul d'intervalle pour l'optimisation globale*. Rapport de Master 2, Mathématiques Informatique. Université Joseph Fourier, Grenoble, 1966.
4. Y. Lin and M. A. Stadtherr. Deterministic global optimization for parameter estimation of dynamic systems. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 45(25) :8438–8448, 2006.
5. Y. Lin and M. A. Stadtherr. Validated solution of initial value problems for odes with interval parameters. In *Proceedings of 2nd NSF Workshop on Reliable Engineering Computing*, 2006.
6. F. Messine. Extensions of affine arithmetic : Application to global optimization. *Journal of Universal Computer Science*, 8(11) :992–1015, 2002.
7. R. E. Moore. *Interval Analysis*. Prentice-Hall series in automatic computation. Prentice-Hall, 1966.
8. K. R. Jackson N. S. Nedialkov and G. F. Corliss. Validated solutions of initial value problems for ordinary differential equations. *Applied Mathematics and Computation*, 105(1) :21–68, 1999.
9. M. Janssen Y. Deville and P. Van Hentenryck. Consistency techniques in odes, 2000.