HAL open science

Zonoèdres : de la géométrie algorithmique à la théorie de la séparation

Nicolas Szafran

To cite this version:

Nicolas Szafran. Zonoèdres : de la géométrie algorithmique à la théorie de la séparation. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1991. Français. NNT : . tel-00340412

HAL Id: tel-00340412

https://theses.hal.science/tel-00340412v1

Submitted on 20 Nov 2008

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.

THÈSE

présentée par

Nicolas SZAFRAN

pour obtenir le titre de

Docteur de l'Université Joseph FOURIER

(arrêté ministériel du 23 novembre 1988)

(Spécialité Mathématiques Appliquées)

***

ZONOÈDRES : DE LA GÉOMÉTRIE ALGORITHMIQUE À LA THÉORIE DE LA SÉPARATION

***

Date de soutenance : 25 octobre 1991

Composition du Jury :

Président :	Mr J. BLUM
Rapporteurs :	Mr J. D. BOISSONNAT Mr P. VALENTIN
Examinateurs :	Mme C. BANDLE Mr B. LACOLLE Mr P.-J. LAURENT

Thèse préparée au sein du laboratoire L.M.C.

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au sein du Laboratoire de Modélisation et de Calcul (L.M.C.) à Grenoble en collaboration avec le Centre de Recherches de ELF-Solaize (C.R.E.S.).

Je tiens à remercier Mr Bernard LACOLLE, qui a dirigé cette thèse. Son soutien, sa compétence et sa disponibilité m'ont aidé tout au long de ce travail et ces remarques judicieuses ont contribué à la rédaction de ce document.

Mr P.VALENTIN du C.R.E.S. m'a accueilli dans ce centre et m'a permis d'aborder des problèmes concrets; je le remercie pour sa gentillesse et son aide apportée tout au long de ces trois années de travail.

Je remercie Mr Jacques BLUM, de me faire l'honneur de présider le jury.

Je remercie Mr Jean-Daniel BOISSONNAT d'avoir accepté d'être un de mes rapporteurs et Mme Catherine BANDLE et Mr Pierre-Jean LAURENT de faire partie du jury.

Je remercie particulièrement François-Régis DEGOTT pour son amitié et avec qui j'ai partagé le bureau 53 pendant ces trois années, André EBERHARD pour son aide technique au début de ma thèse qui m'a permis par la suite le développement de logiciels sur Macintosh, et Jean-Loup DUPUIS pour son amitié et sa bonne humeur.

Je remercie toute l'équipe de Géométrie Algorithmique pour son aide et sa sympathie, de m'avoir accueilli et mis à disposition d'excellentes conditions de travail.

à mes parents

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION

CHAPITRE I - ZONOÈDRES :
REPRÉSENTATION ET CONSTRUCTION

I-1 Définitions - Propriétés 3

• *Cas général* 3

• *Quelques propriétés pour n=3 - Les zonoèdres* 7

• *Zonoèdre vu comme polyèdre convexe* 9

I-2 Diagrammes projectifs - Un premier algorithme 10

• *Diagrammes projectifs* 10

• *Détermination d'un zonogone* 14

• *Un algorithme de détermination des faces d'un zonoèdre* 15

I-3 - Vers un algorithme optimal
Représentation par une structure de bords 16

• *Lien avec le partitionnement de la sphère par des plans* 17

• *Lien avec le partitionnement du plan*
par n droites (non parallèles) 18

• *Une structure par bords de type Arête ailée* 20

• *L'algorithme.* 23

I-4 - Résultats expérimentaux 30

Conclusion 33

CHAPITRE II - FAISABILITÉ D'UN MÉLANGE ET OPTIMISATION

II-1 Un modèle géométrique de la fabrication d'un mélange 37

II-2 Un critère pertinent d'optimalité pour la production 39

• *Le problème du marchand de peinture* 39

• *Faisabilité, optimisation et programmation mathématique* 42

II-3 Particularités géométriques des cas p-n = 1 ou 2 44

• *Cas p-n=1* 46

• *Cas p-n=2* 48

II-4 Coupes et intersections 52

• *Intersection plan / polyèdre convexe* 53

• *Intersection droite / polyèdre* 53

• *Appartenance d'un point dans un polyèdre convexe* 54

• *Intersection plan / zonoèdre* 54

• *Appartenance d'un point à un zonoèdre* 54

• *Coupes parallèles* 55

II-5 Des mélanges binaires à la méthode de la corde pour les zonoèdres 57

• *Mélanges binaires* 57

• *Méthode de la corde* 59

Conclusion 70

CHAPITRE III - APPLICATION À UN LOGICIEL D'AIDE À LA FABRICATION DE MÉLANGES

III-1 Présentation du logiciel MBAC 73

III-2 Les données numériques réelles (A) 75

III-3 Le noyau mathématique (B) 76

• *Les fonctions de transfert* 76

• *La partie géométrique* 76

III-4 L'interface graphique (C) 78

• *Repérage d'un bac sur le zonoèdre* 80

• *Ensemble de produits de même espèce* 80

• *Faisabilité d'un mélange* 81

• *Méthode de la corde* 84

• *Compléments* 85

Conclusion 86

CHAPITRE IV - ZONOÏDES ET ZONOÈDRES

IV-1 Rappels sur les zonoïdes 89

• *Approximation par des zonotopes* 90

IV-2 Zonoïdes définis par une famille différentielle 91

• *Problématique de la fabrication des mélanges dans le cas d'un processus continu* 91

• *Famille différentielle* 92

• *Zonoïdes et équations aux dérivées partielles* 93

• *Plans tangents à un zonoïde et zone* 94

• *Intersection zonoïde - plan* 95

• *Appartenance d'un point dans un zonoïde* 96

IV-3 Zonoïdes dans $\mathbb{R}^3$ 96

• *Approximation par un zonoèdre* 97

• *Calcul de volume approché* 98

• *Sélectivité totalement régulière* 101

• *Etudes de fonctions de base* 104

IV-4 Faisabilité approchée d'un mélange dans le cas de la sélectivité totalement régulière 112

• *Du zonoïde au zonoèdre approximant* 112

• *Méthode de décomposition d'un mélange sur un zonoèdre régulier* 113

• *Résultats expérimentaux* 118

Conclusion 118

BIBLIOGRAPHIE 121

ANNEXE

A-1 Parallèle entre construction d'un zonoèdre et arrangement de droites dans le plan 131

A-2 Algorithmes d'intersection 134

• *Intersection d'un polyèdre et d'un plan* 134

• *Intersection d'un polyèdre et d'une droite* 138

A-3 Les zonoèdres qui pavent l'espace 140

A-4 La beauté des zonoèdres 146

INTRODUCTION

Lors du siècle dernier, E.S. FEDOROV introduit le terme de *zonoèdre* dans le domaine de la cristallographie. Certains cristaux se générant par expansions successives dans différentes directions, les formes ainsi créées sont des polyèdres convexes qui sont la *somme de Minkowski* de plusieurs segments de droites. E.S. FEDOROV s'intéressait plus particulièrement aux formes géométriques - zonoèdres -qui pavait l'espace.

Jusqu'aux environs de 1970, les zonoèdres, et plus généralement les *zonotopes*, ont uniquement fait l'objet de nombreuses études du point de vue géométrique et topologique. H.S.M. COXETER, puis G.C. SHEPARD et P. McMULLEN ont étudiés ces objets et ont établi divers théorèmes concernant le pavage de l'espace .

Depuis une vingtaine d'année, les zonotopes commencent à apparaître dans d'autres domaines appliqués. Pour information, on peut citer :

- En automatique, les états atteignables sont représentés par un zonoïde [HER69].
- En économie, les productions possibles d'un groupe d'entreprise sont modélisés par un zonotope [HIL81].
- En architecture, dans son article "Polyhedral Habitat", J. BARACS utilise les zonoèdres comme module de base dans l'occupation de l'espace.

Le sujet qui nous intéresse concerne les produits chimiques, plus particulièrement les produits pétroliers. Le concept de convexe de mélange qui a été développé par P. VALENTIN propose une modélisation géométrique de la séparation par des zonotopes : en chimie, via des *lois linéaires de mélange*, l'ensemble des mélanges faisables à partir d'un nombre fini de produits distincts est représenté par un zonotope (*convexes de mélange*).

Dans une raffinerie, certains produits issus du raffinage du pétrole brut servent comme base à la fabrication d'autres produits. Un des problèmes de la fabrication des produits finis est la gestion des stocks de produits de base. Pendant longtemps, cette fabrication s'est faite de manière empirique.

Certaines méthodes mathématiques sont peu à peu appliquées à ce problème. En particulier, l'introduction des lois linéaires de mélange a mené à considérer des modèles tels que les zonotopes.

Les travaux effectués et présentés ci-après sont essentiellement basés sur la Géométrie

Algorithmique en dimension trois. D'une part, la spécificité des zonoèdres permet d'obtenir des algorithmes optimaux pour les représenter, d'autre part, dans le cas concret de la fabrication des mélanges les outils développés s'avèrent être rapides et robustes. Le but final est le développement d'un logiciel géométrique et graphique destiné aux techniciens de fabrication en raffinerie afin d'apporter une aide dans la gestion des stocks pétroliers et plus généralement en chimie.

La partie Géométrie Algorithmique développée dans le premier chapitre revient sur les définitions et propriétés des zonotopes et zonoèdres. Le concept de *diagrammes projectifs*, représentations topologiques des zonoèdres, permet d'obtenir un algorithme de construction simple à mettre en œuvre mais ne présentant pas un caractère optimal (temps d'exécution). En effet les zonoèdres étant une classe particulière de polyèdres, les relations d'adjacence entre éléments (sommets, arêtes et faces) formant le bord doivent être prises en compte dans la perspective de la conception d'algorithmes optimaux.

Le deuxième diagramme projectif mène naturellement à établir un lien dual entre la construction d'un zonoèdre et le *partitionnement du plan par des droites*. Or ce dernier problème est résolu par des algorithmes optimaux en temps.

L'utilisation d'une *structure de données B-Rep*, plus précisément de type *Arête-Ailée* permet l'obtention d'un algorithme optimal pour la représentation de zonoèdres. Un comparatif est fait entre cet algorithme optimal et un autre sous-optimal afin de montrer les avantages et inconvénients de chacun.

L'application à la fabrication des mélanges pétroliers est abordé dans le deuxième chapitre. Le modèle vectoriel basé sur l'utilisation de lois linéaires de mélange est exposé. Ce modèle implique que l'ensemble des mélanges faisables à partir d'un nombre fini de produit de base est représenté géométriquement par un zonotope. Le problème de la gestion des mélanges est de gérer au mieux le stock de produits de base afin de pouvoir réaliser plusieurs mélanges. Un critère d'optimalité pour résoudre le problème de *faisabilité d'un mélange,* basé sur le volume du *convexe résidu,* est rappelé et mène à une méthode d'optimisation classique. Nous proposons une méthode simplifiée dans deux cas de figure particuliers.

Cependant ces méthodes classiques d'optimisation présentent l'inconvénient de travailler non pas directement sur l'espace de représentation des mélanges mais sur l'espace des décompositions d'un mélange et de ne donner qu'une seule solution au problème de faisabilité d'un mélange.

Notre but dans ce chapitre est de montrer que des outils de Géométrie Algorithmique permettent d'apporter de manière simple et rapide d'autres solutions à ce problème.

L'algorithme d'intersection plan-polyèdre convexe, basé sur une structure de type Arête-

Ailée, fournit plusieurs méthodes de manipulation et visualisation rapides et robustes et, particulièrement bien adaptées au cas concret où le nombre de vecteurs de base est faible (inférieur à la dizaine).

La *méthode de la corde*, qui s'inspire du caractère géométrique de la décomposition optimale des *mélanges binaires*, fournit, dans la majorité des cas, un éventail de solution au problème de décomposition de mélange.

L'application des zonoèdres dans la fabrication des mélanges pétroliers a conduit au développement d'un logiciel géométrique et graphique. Basé sur les structures de données et algorithmes décrits dans les deux premiers chapitres, il fournit à l'utilisateur des outils de manipulation et de visualisation interactifs apportant une aide à la décision dans la fabrication des mélanges pétroliers. Afin de bien montrer l'intérêt des algorithmes développés, différentes situations réelles sont présentées en précisant la méthode algorithmique employée dans chaque cas.

La théorie des zonoïdes appliquée à la séparation en chimie permet la modélisation des convexes de mélange dans le cas de *processus continu*, via le concept de *famille différentielle*. Cependant le caractère continu de ces objets ne facilite pas leur manipulation du point de vue algorithmique.

Dans le cadre plus large des équations aux dérivées partielles, les zonoïdes peuvent servir comme outils géométriques dans l'étude des solutions.

L'approximation des zonoïdes par des zonotopes permet d'utiliser les algorithmes propres aux zonotopes dans le cas de zonoïdes, notamment pour les visualiser. Une étude expérimentale montre que l'erreur d'approximation d'un zonoïde défini par une famille différentielle par un zonoèdre est plus faible que dans le cas général.

Quelques fonctions de base sont étudiées afin d'illustrer cette méthode d'approximation.

La propriété de *sélectivité totalement régulière* permet l'écriture d'un algorithme résolvant le problème de faisabilité pour un processus continu, de manière approchée avec une complexité linéaire par rapport au nombre de vecteurs de base du zonoèdre approximant le zonoïde

CHAPITRE I

ZONOÈDRES : REPRÉSENTATION ET CONSTRUCTION

I-1 Définitions - Propriétés

• *Cas général*

Dans ce paragraphe, nous allons donner un certain nombre de définitions et propositions sur les zonotopes et zonoèdres, et établir un certain nombre de propriétés qui serviront pour la suite.

Préliminaire : Dans tout ce qui suit $\mathbb{R}^n$ est l'espace euclidien de dimension n muni du produit scalaire classique $\langle .,. \rangle$ et de la norme euclidienne $\|.\|$. S'il n'y a pas d'ambiguïté, nous utiliserons la notation N_i pour le vecteur $\overrightarrow{ON_i}$. Le segment reliant deux points A et B de $\mathbb{R}^n$ sera noté [A,B].

■ *Définition I-1-1* : Soient A et B deux ensembles de $\mathbb{R}^n$, la ***somme de Minkowski*** ou ***somme vectorielle*** de A et B, est définie par l'ensemble $A + B = \{ x+y \ ; \ x \in A \text{ et } y \in B \}$

■ *Définition I-1-2* [GRU67]: Un ***zonotope*** est la somme vectorielle de segments de droites fermés; c'est un polytope convexe de $\mathbb{R}^n$ à symétrie centrale ainsi que toutes ses faces de dimension inférieure .

Remarque : le nom zonotope vient de ***zone*** car le zonotope présente sur sa frontière un ensemble de zones, chacune d'elles étant associée à un vecteur de base (cf. figure I-1) et formée de faces de dimension n-1 ayant deux à deux en commun une arête de même longueur et même direction que ce vecteur de base. Une zone est un ensemble à symétrie centrale de faces de dimension n-1 "entourant" le zonotope (cf. figure I-1).

De la définition précédente, nous en déduisons un corollaire sur l'écriture de zonotopes à partir de vecteurs de $\mathbb{R}^n$.

■ *Corollaire I-1-3* : Soient $N_1, \ldots, N_p$ p points de $\mathbb{R}^n$. Alors l'ensemble

$$Z_p = Z[N_1, N_2, \ldots, N_p] = \{M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i,\ 0 \leq \lambda_i \leq 1,\ i=1 \text{ à } p\} = \sum_{i=1}^{p} [O,N_i]$$

(somme de Minkowski des segments $[O,N_i]$) est un zonotope dont le centre de symétrie est le point $\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p} N_i$.

Nous utiliserons parfois l'ensemble C_p défini par

$$C_p = C[N_1, N_2,\ldots, N_p].=\{ M = \sum_{i=1}^{p}\varepsilon_i.N_i,\ -1\leq\varepsilon_i\leq 1,\ i=1 \text{ à } p\} = \sum_{i=1}^{p}[-N_i, N_i]$$

qui est un zonotope dont le centre de symétrie est l'origine .

Il est aisé de montrer que $C_p = 2.Z_p - \sum_{i=1}^{p} N_i$ et $Z_p = \frac{1}{2}(C_p + \sum_{i=1}^{p} N_i)$

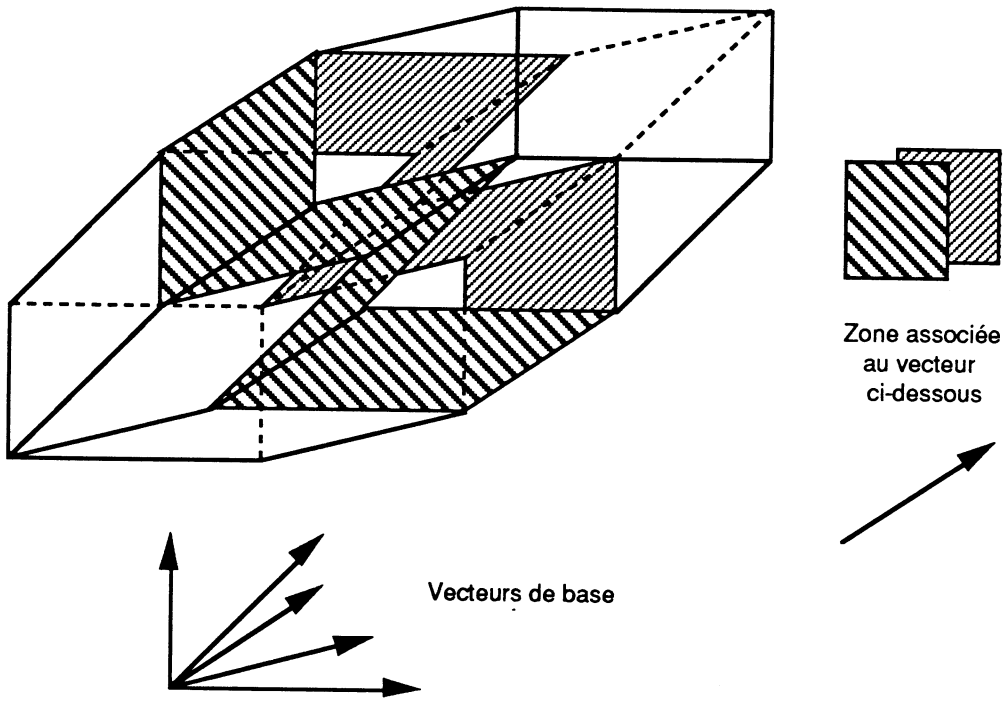


Figure I-1 - **Zonoèdre avec zone associée à un vecteur**

■ *Définition I-1-4* : L'ensemble $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ sera par la suite appelé ensemble des ***vecteurs de base*** ou ***base de vecteurs***.

■ *Lemme I-1-5* : Si $\overrightarrow{ON_1}$ et $\overrightarrow{ON_2}$ sont des vecteurs colinéaires et de même sens alors :

$$[-N_1,N_1] + [-N_2,N_2] = [-N_1-N_2,N_1+N_2]$$

Ainsi, si parmi les vecteurs de base deux vecteurs sont colinéaires, il suffit de les remplacer par un vecteur de même direction et de norme égale à la somme des normes des deux vecteurs pour obtenir le même zonotope C.

• La preuve de ce lemme est évidente. □

■ *Lemme I-1-6* : Le zonotope $Z\{-N_1,N_2,N_3,\ldots,N_p\}$ est égal au zonotope $Z\{N_1,N_2, N_3,\ldots,N_p\}$ translaté de $-N_1$.

• preuve : si $X \in Z\{-N_1,N_2, N_3,\ldots,N_p\}$,

$$X = -\lambda_1.N_1+\sum_{i=2}^{p}\lambda_i.N_i = -N_1+(1-\lambda_1).N_1+\sum_{i=2}^{p}\lambda_i.N_i \quad (\lambda_1,\ldots,\lambda_p \in [0,1])$$

$$= -N_1 + \sum_{i=1}^{p}\lambda_i'.N_i \quad \text{avec } \lambda_i'=\left\{\begin{matrix} 1-\lambda_1 \text{ si } i=1 \\ \lambda_i \text{ sinon} \end{matrix}\right\} \in [0,1]$$ □

■ *Lemme I-1.7* : Pour tout zonotope Z de $\mathbb{R}^n$, il existe p vecteurs $\{N_1, N_2,\ldots, N_p\}$ de $\mathbb{R}^n$ et un point T de $\mathbb{R}^n$ tels que $Z = T + C[N_1, N_2,\ldots, N_p]$.

• La preuve de ce lemme est évidente en prenant T comme centre de symétrie du zonotope Z. □

Ces trois lemmes vont nous permettre pour toute la suite de nous placer dans un cas particulier de disposition des vecteurs $\overrightarrow{O\,N_i}$ précisée dans la proposition ci-dessous.

■ *Corollaire I-1-8* : Soit Z un zonotope de $\mathbb{R}^n$, alors il existe p vecteurs $N_1,\ldots,N_p$ deux à deux non colinéaires, T un point et μ un vecteur de $\mathbb{R}^n$ tels que :

a) $Z = T + C_p = T + \sum_{i=1}^{p}[-N_i,N_i]$;

b) $\langle N_i,\mu\rangle > 0$ pour tout i de 1 à p.

Par la suite, nous supposerons (sauf cas contraire explicité) que les vecteurs N_i sont tels qu'il existe μ vecteur de $\mathbb{R}^n$ tel que $\langle N_i, \mu\rangle > 0$ pour tout i de 1 à p.

Ce corollaire permet de donner une autre interprétation des zonotopes

■ *Corollaire I-1.9* : Tout zonotope Z de $\mathbb{R}^n$ est l'image par une fonction affine de $[0,1]^p$, cube unité de $\mathbb{R}^p$.

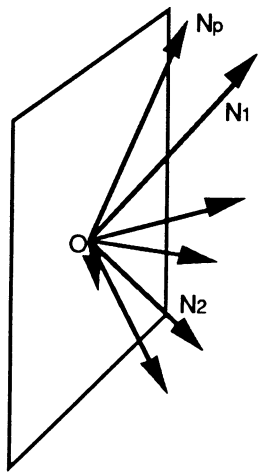
• preuve : D'après le corollaire précédent, tout zonotope Z s'écrit

$$T_1 + \sum_{i=1}^{p}[-\frac{N_i}{2},\frac{N_i}{2}] = T_2 + \sum_{i=1}^{p}[0,N_i] \quad \text{avec } T_2 = T_1 - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{p} N_i .$$

D'après le corollaire I-1-3, $Z = \varphi([0,1]^p)$ avec φ fonction affine définie par :

$$\varphi : \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n , \varphi(\lambda_1,\ldots,\lambda_p) = T_2 + \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i . \qquad \square$$

■ *Proposition I-1-10* [McM71]: Un point S du zonotope Z_p est un sommet si et seulement s'il existe η vecteur de $\mathbb{R}^n$ tel que $S = \sum_{<N_j,\eta>>0} N_j$.



■ *Définition I-1.11* : Nous appelons ***pôles*** du zonotope les deux points particuliers du zonotope Z_p que sont l'origine O et le point S_p sommet des p vecteurs N_i ($S_p = \sum_{i=1}^{p} N_i$). O est l'***origine*** du zonotope et S_p est appelé ***sommet distal.***

Ainsi C_p s'écrit à partir de Z_p et S_p sous la forme suivante :

$$C_p = 2.Z_p - S_p$$

Figure I-2 - **Vecteurs du même coté d'un plan**

Remarque : si n=2 ou si les vecteurs de base sont tous inclus dans un même sous-espace de dimension deux, nous parlerons de ***zonogone*** par analogie avec les polygones; de même, si n=3 ou si les vecteurs de base sont tous inclus dans un même sous espace de dimension trois, nous parlerons de ***zonoèdre*** par analogie avec les polyèdres.

• *Quelques propriétés pour n=3 - Les zonoèdres*

Les zonoèdres auxquels nous allons plus particulièrement nous intéresser par la suite correspondent au cas n=3. Leurs propriétés en font une classe de polyèdres remarquables.

Déjà, en 1885, E.S. FEDOROV, lors de travaux en cristallographie, énumère des polyèdres remarquables tous construits à partir d'un segment et d'un ensemble de translations et les nomme zonoèdres.

■ *Définition I-1-12* [FED53] : Un ***zonoèdre*** est un polyèdre à symétrie centrale ainsi que toutes ses faces.

Notations : Comme pour les polyèdres, sont appelés ***sommets***, ***arêtes*** et ***faces*** les différents éléments de la frontière du zonoèdre qui sont des zonotopes de dimension respective 0, 1 et 2.

■ *Corollaire I-1-13* [McM71]: De la proposition I-1-10, nous déduisons : soient F_1 une face de Z_p et F_2 la face symétrique à F_1 et η le vecteur normal à ces deux faces, orienté vers l'extérieur de F_1. Alors :

$$F_1 = \sum_{N_i.\eta>0} N_i + \sum_{N_i.\eta=0} [O,N_i] \quad \text{et} \quad F_2 = \sum_{N_i.\eta<0} N_i + \sum_{N_i.\eta=0} [O,N_i] \ .$$

■ *Proposition I-1-14*: Soit $\Pi = \{\Pi_1,\Pi_2,\ldots,\Pi_R\}$ l'ensemble des différents plans définis à partir de deux vecteurs de l'ensemble $\{N_1,\ldots,N_p\}$. Soit V_i le nombre de vecteurs de base appartenant au plan Π_i. Alors nous avons les relations suivantes :

a) R, nombre de plans différents, est inférieur à $C_p^2 = p.(p-1)/2$.

b) nF, nombre de faces du zonoèdre Z_p, est égal à 2.R et inférieur p.(p-1) .

c) nA, nombre d'arêtes du zonoèdre Z_p, est égal à $2.\sum_{i=1}^{R} V_i$ et inférieur à 2p.(p-1).

d) nS, nombre de sommets du zonoèdre Z_p, est inférieur à p.(p-1)+2 .

• preuve :

a) le nombre de vecteurs de base étant p, le nombre de doublets possibles (N_i,N_j) est égal

à C_p^2 d'où le résultat;

b) d'après le corollaire I-1-13, à chaque plan Π_i correspondent deux faces, d'où nF=2.R ;

c) le nombre d'arêtes formant le contour d'une face correspondante au plan Π_i est égal à $2.V_i$. Soit f_k le nombre de doublets de faces dont le contour est formé de 2k arêtes. La formule de FEDOROV [FED53] donne le résultat suivant :

$$p.(p-1) = \sum_{i=2}^{p} i.(i-1).f_i \qquad \text{or } nA = 2.\sum_{i=1}^{R} V_i = 2.\sum_{i=2}^{p} i.f_i \leq 2.\sum_{i=2}^{p} i.(i-1).f_i = 2.p.(p-1) \ ;$$

d) La formule d'EULER donne la relation suivante entre le nombre de faces (nF), arêtes (nA) et sommets (nS) pour les polyèdres convexes :

$$nA + 2 = nF + nS$$

Prenons le cas où il n'existe pas trois vecteurs coplanaires. Dans ce cas le nombre R est égal à p.(p-1) donc le zonoèdre correspondant est composé de p.(p-1) faces qui sont toutes des parallélogrammes (puisque générées à partir de deux vecteurs seulement), bornées par quatre arêtes. Chaque arête délimitant deux faces le nombre d'arêtes est donc 4.p(p-1) /2 soit 2p.(p-1).

La formule d'EULER implique que le nombre de sommets est alors p.(p-1)+2.

Ce nombre de sommets est le maximum que l'on puisse obtenir. En effet, le fait de rendre coplanaires des vecteurs de base diminue le nombre de faces, arêtes et sommets du zonoèdre : prenons le cas où il existe, parmi la base de vecteurs, un triplet unique de vecteur $\{N_i, N_j, N_k\}$ coplanaires. Dans ce cas R est égal à p.(p-1)/2-2 donc il y a p.(p-1)-6 faces tétragonales et deux faces hexagonales correspondant aux trois vecteurs coplanaires. Le nombre d'arêtes est donc (4.(p.(p-1)-6)+6.2)/2 soit 2p.(p-1)-6 et le nombre de sommets est p.(p-1), tous deux inférieurs aux bornes données. □

Cette proposition montre que les nombres de faces, arêtes et sommets d'un zonoèdre formé de p vecteurs de base sont majorés par des valeurs (respectivement p.(p-1), 2p.(p-1) et p.(p-1+2) de l'ordre de p^2.

Cet ordre ($O(p^2)$) sera la borne d'optimalité à atteindre pour différents algorithmes concernant les zonoèdres.

Remarque : Nous avons vu que ces bornes étaient atteintes dans le cas où il n'existe pas trois vecteurs coplanaires parmi la base de vecteurs.

A l'opposé, si tous les vecteurs N_i sont coplanaires, le zonoèdre est alors un zonogone et les nombres de faces, arêtes et sommets sont respectivement 2,2p et 2p .

■ *Proposition I-1-15* : Le zonoèdre $Z_{p+1} = Z[N_1,\ldots,N_p,N_{p+1}]$ est égal à l'enveloppe convexe des deux ensembles Z_p et Z_p+N_{p+1} ($\mathrm{conv}(Z_p,Z_p+N_{p+1})$).

• preuve : soit $M \in Z_{p+1}$, alors $M = \sum_{i=1}^{p+1} \lambda_i.N_i$. Posons $M' = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i$, $M' \in Z_p$ et $M'+N_{p+1} \in Z_p+N_{p+1}$.

Or $M=(1-\lambda_{p+1}).M'+\lambda_{p+1}.(M'+N_{p+1})$ qui est bien élément de $\mathrm{conv}(Z_p,Z_p+N_{p+1})$.

Réciproquement si $M \in \mathrm{conv}(Z_p,Z_p+N_{p+1})$, $M = \theta\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i +(1-\theta).(\sum_{i=1}^{p} \mu_i.N_i +N_{p+1})$

$= (\sum_{i=1}^{p} \theta.\lambda_i.N_i +(1-\theta).\mu_i.N_i)+(1-\theta).N_{p+1}) \in Z_{p+1}$. □

• *Zonoèdre vu comme polyèdre convexe*

Un zonoèdre étant un polyèdre convexe, nous pouvons utiliser des algorithmes propres aux polyèdres convexes afin de construire un zonoèdre.

■ *Construction par enveloppe convexe* : Une méthode possible pour construire un zonoèdre est de le considérer comme enveloppe convexe de certains points de $\mathbb{R}^3$.

La définition des zonotopes nous dit que Z_p est l'enveloppe convexe des points S_J donnée par :

$$S_J = \sum_{i \in J} N_i \text{ pour tout } J \subset \{1,2,\ldots,p\}$$

Le nombre des différents ensembles J étant 2^p et l'enveloppe convexe de m points de $\mathbb{R}^3$ pouvant être déterminée au mieux en O(m.log m) [PRE85], cette méthode a une complexité de l'ordre de $O(p.2^p)$. Ce résultat est loin du résultat optimal en $O(p^2)$ espéré et cet algorithme n'aurait aucun intérêt pratique.

Ceci montre l'intérêt de prendre en compte les spécificités des zonotopes afin d'établir des algorithmes rapides.

I-2 Diagrammes projectifs - Un premier algorithme

• *Diagrammes projectifs*

Les diagrammes projectifs ont été introduits par COXETER afin d'établir une classification des zonoèdres. Ce sont une particularisation aux zonoèdres des ***diagrammes de Gale***, diagrammes contenant l'information topologique d'un polyèdre convexe. Ceux-ci permettent de décrire par un même diagramme une classe de polyèdres topologiquement équivalents.

Plusieurs propriétés concernant les zonoèdres peuvent s'interpréter géométriquement à l'aide de ces diagrammes.

■ *Définition I-2-1* : On appelle ***premier diagramme projectif*** (***P.D.P.***) associé à un ensemble de points $\{N_1,\ldots,N_p\}$ de $\mathbb{R}^3$, le diagramme dans le plan construit de la manière suivante:

- nous supposons que tous les N_i sont tels qu'il existe $\mu \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle N_i, \mu \rangle > 0$ quelque soit i ;
- soit Π_μ le plan de $\mathbb{R}^3$ défini par $\Pi_\mu = \{x \in \mathbb{R}^3, \langle x,\mu \rangle = 1\}$
- pour chaque N_i , on calcule M_i l'intersection de la demi-droite $\mathbb{R}^+.N_i$ avec Π_μ ;
- toutes les droites (lignes) possibles passant par deux points M_i sont tracées.

Un exemple de premier diagramme projectif est donné dans la figure I-3.

Interprétations des plans d'appui : Considérons les deux plans d'appui Π_η^+ et Π_η^- à un zonoèdre Z_p ayant pour normale commune η. Soit Δ_η la droite intersection du plan Π_μ, support du P.D.P. avec le plan $\eta^\perp$. Le type d'intersection (face, arête ou sommet) des plans Π_η^+ et Π_η^- avec Z_p correspond au nombre de points M_i appartenant à la droite Δ_η :

- si aucun point M_i ne se trouve sur la droite Δ_η alors l'intersection est réduite à un sommet.
- si un seul point M_i se trouve sur la droite Δ_η alors l'intersection est réduite à une arête.
- si au moins deux points M_i se trouvent sur la droite Δ_η alors l'intersection est une face.

De ceci, nous déduisons deux corollaires concernant l'écriture des sommets et faces d'un zonoèdre et qui nous seront utiles par la suite.

■ *Corollaire I-2-2* : Si nous partitionnons, en deux sous-ensembles E_1 et E_2, l'ensemble des points M_i par une droite Δ ne contenant aucun de ces points alors les deux points $\sum_{M_i \in E_1} N_i$ et $\sum_{M_i \in E_2} N_i$ sont deux sommets de Z_p. Réciproquement, si $S = \sum_{i \in I} N_i$ est un sommet de Z_p alors les deux ensembles $E_1 = \text{conv}\{M_i, i \in I\}$ et $E_2 = \text{conv}\{M_i, i \notin I\}$ sont disjoints.

• preuve : la droite Δ est intersection du plan Π du P.D.P. avec un plan Π_η de normale η passant par l'origine. Le point $\sum_{M_i \in E_1} N_i$ (resp. $\sum_{M_i \in E_2} N_i$) s'écrit aussi $\sum_{N_i.\eta>0} N_i$ (resp. $\sum_{N_i.(-\eta)>0} N_i$) et est donc un sommet du zonoèdre Z_p.

Si $S = \sum_{i \in I} N_i$ est un sommet de Z_p il existe un vecteur η tel que $S = \sum_{N_i.\eta>0} N_i$. L'intersection du plan Π du P.D.P. avec le plan Π_η de normale η passant par l'origine est une droite qui partitionne l'ensemble des points M_i en deux sous-ensembles E_1 et E_2, les points de E_1 correspondant aux vecteurs N_i vérifiant $\langle N_i,\eta \rangle = 0$. □

■ *Corollaire I-2-3* : A chaque ligne L du P.D.P. correspondent deux faces F_1 et F_2 du zonoèdre Z_p. Soient M_i et M_j deux points appartenant à L, alors le plan défini par les deux vecteurs $\overrightarrow{ON_i}$ et $\overrightarrow{ON_j}$ est parallèle aux deux faces F_1 et F_2. Soient E_1 l'ensemble des points M_k se trouvant d'un côté de L et soit E_2 l'ensemble des points M_k se trouvant de l'autre côté de L. Alors :

$$F_1 = \sum_{M_k \in E_1} N_i + \sum_{M_i \in L} [O,N_i] \quad \text{et} \quad F_2 = \sum_{M_k \in E_2} N_i + \sum_{M_i \in L} [O,N_i].$$

■ *Corollaire I-2-4* :

a) Si k lignes du P.D.P. passent par le point M_i alors la zone associée au vecteur N_i est formée de 2k faces et contient 2k arêtes colinéaires au vecteur $\overrightarrow{ON_i}$.

b) Si une ligne du P.D.P. contient m points M_i, les deux faces qui lui correspondent

appartiennent toutes deux aux m mêmes zones et sont toutes deux des zonogones avec 2m arêtes sur leur contour.

• preuve : elle est évidente d'après la construction du P.D.P. . □

Le deuxième diagramme projectif présenté ci-dessous est une autre manière de décrire les zonoèdres. Il possède un lien dual avec le P.D.P. .

Rappels sur les ensembles polaires : Soit A un ensemble de $\mathbb{R}^2$, son ***ensemble polaire*** ou ***dual*** noté A*, est défini par :

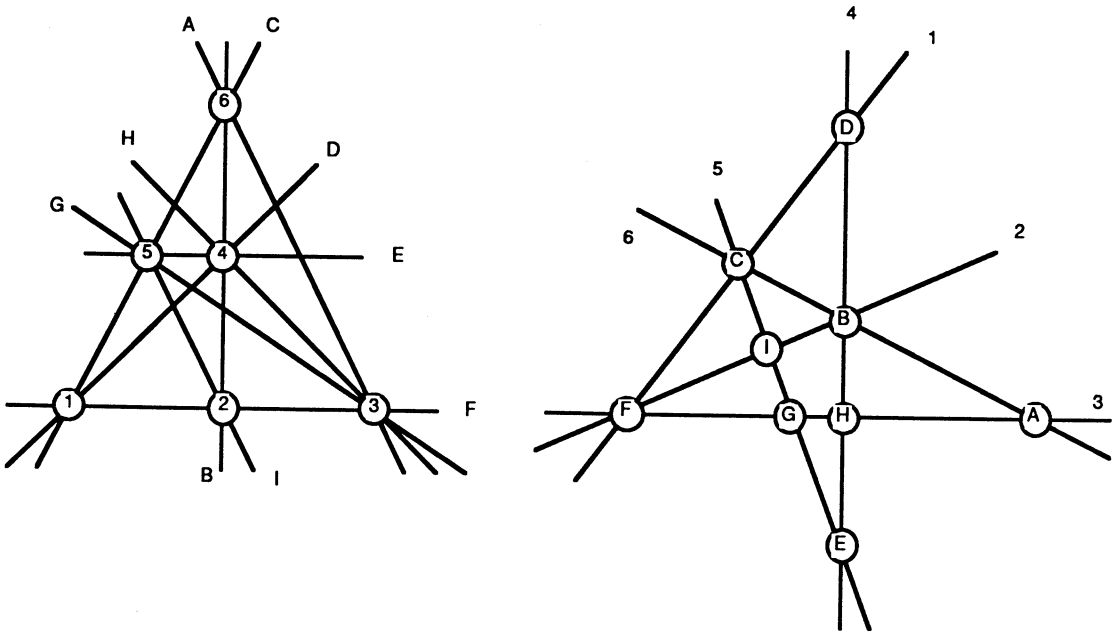
$$A^* = \{y \in \mathbb{R}^2, \langle x,y \rangle \leq 1;\ \forall x \in A\}$$

Si A est un réduit à un point différent de l'origine, A* est un demi-plan fermé.

Si A est une droite ne passant pas par l'origine, A* est une demi-droite passant par l'origine.

■ *Définition I-2-5* : On définit le ***deuxième diagramme projectif*** (***D.D.P.***) associé à un ensemble de vecteurs $\{N_1,\ldots,N_p\}$ de $\mathbb{R}^3$, comme le diagramme dans le plan, dual du P.D.P. Ce D.D.P. est formé de lignes, chacune correspondant à un point N_i. Les points d'intersections entre les lignes du D.D.P. correspondent aux lignes du P.D.P. .

La construction d'un D.D.P. se fait par dualité : par une transformation affine, on place le P.D.P. dans le plan $\mathbb{R}^2$ de manière qu'aucune de ses lignes ne passe par l'origine. Alors chaque ligne L'_i formant le D.D.P. est la droite frontière du demi-plan M_i^*, ensemble polaire du singleton $\{M_i\}$; de même chaque point M'_j intersection d'au moins deux lignes L'_{i1} et L'_{i2} du D.D.P. est le point extrémité de la demi-droite L_j^*, ensemble polaire de la ligne L_j du P.D.P. passant par les deux points M_{i1} et M_{i2}.



Premier diagramme projectif

Deuxième diagramme projectif

Figure I-3 - **Deux diagrammes projectifs associés**

Remarque : Pour illustrer l'aspect topologique de l'information contenue dans un diagramme projectif, citons l'exemple des cinq types de zonoèdres décrits par E.S. FEDOROV. Ces zonoèdres ont en effet la propriété de paver sans recouvrement l'espace tout entier par translations d'un même zonoèdre. H.S.M. COXETER montre que cette propriété est vraie pour un zonoèdre si et seulement si le P.D.P. présente la propriété suivante : chaque point a au plus trois lignes concourantes et chaque ligne contient au plus trois points [COX62]. Nous pouvons remarquer que dans ce cas le D.D.P. possède la même propriété.

Cette propriété a une généralisation dans le cas des zonotopes (n quelconque). Elle a été démontrée dans un premier temps par G.C. SHEPARD pour les cas n=3 et n=4 [SHE74b] puis dans le cas n quelconque par P. McMULLEN [McM75]

En annexe, on trouvera la description de ces cinq types de zonoèdres avec leurs diagrammes projectifs associés.

- *Détermination d'un zonogone*

Avant de considérer le cas des zonoèdres, faisons un rappel sur la construction d'un zonogone dans $\mathbb{R}^2$ à partir d'un ensemble de vecteurs de $\mathbb{R}^2$. En particulier, cela nous servira ensuite pour traiter les cas dégénérés dans $\mathbb{R}^3$ lorsqu'au moins trois vecteurs de base sont coplanaires.

Nous nous plaçons dans le cas de vecteurs non deux à deux colinéaires et se trouvant tous dans un demi-plan ouvert (i.e. qu'il existe μ tels que $\langle N_i,\mu\rangle > 0$ pour tout i). Pour simplifier, nous supposons que les vecteurs $N_i = \begin{pmatrix} N_i^1 \\ N_i^2 \end{pmatrix}$ ont toutes leur ordonnée (N_i^2) strictement positive.

La détermination des différents sommets du zonogone Z_p se fait de la manière suivante :

- les vecteurs N_i sont triés suivant l'angle $\widehat{\overrightarrow{ON_i}\overrightarrow{Ox}}$ fait avec l'axe Ox (l'angle est strictement compris entre 0 et π).

- les vecteurs N_i triés (i.e $\widehat{\overrightarrow{ON_i}\overrightarrow{Ox}} < \widehat{\overrightarrow{ON_j}\overrightarrow{Ox}} \Leftrightarrow i<j$), les 2p sommets du zonogone sont donnés par les relations suivantes :

$S_0 = O$;
$S_1 = N_1$;
$S_2 = N_1 + N_2$;
...
$S_{p-1} = N_1+N_2+\ldots+N_{p-1}$;
$S_p = N_1+N_2+\ldots+N_{p-1}+N_p$;
$S_{p+1} = N_2+ N_3 +\ldots+N_{p-1}+N_p$;
...
$S_{2p-2} = N_{p-1}+N_p$;
$S_{2p-1} = N_p$
$S_{2p} = O$

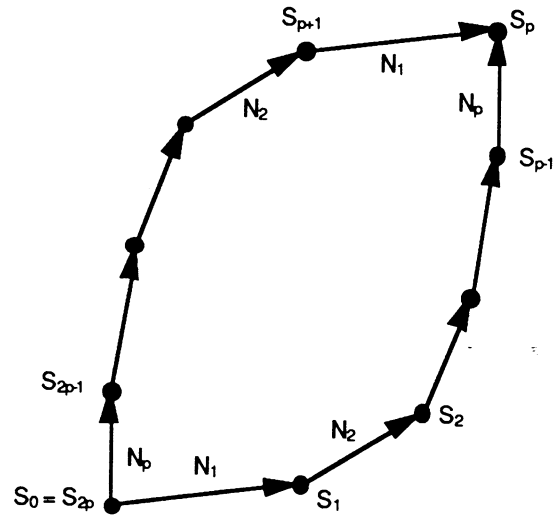


Figure I-4 - **Base de vecteurs triés et zonogone associé**

■ *Proposition I-2-6* [SLA86] : la méthode de construction de zonogone exposée ci-dessus a une complexité en temps de l'ordre de p.log p et cette méthode est optimale.

L'ordre total que l'on peut mettre sur des vecteurs de $\mathbb{R}^2$ font des zonogones une classe particulière parmi les zonotopes : certaines propriétés sur les zonogones ne se retrouvent pas dès que l'on passe en dimension supérieure ($n \geq 3$).

• *Un algorithme de détermination des faces d'un zonoèdre*

Une manière de représenter un zonoèdre est de déterminer l'ensemble de ces faces, voire une moitié seulement, l'autre moitié se déduisant par symétrie. La méthode décrite ci-dessous s'inspire directement du corollaire I-2-3.

A chaque ligne L_i du P.D.P. correspondant deux faces F_i^1 et F_i^2, ces deux faces étant des zonogones construits à partir des mêmes vecteurs de base N_{i_k} et translatés respectivement de S_i^1 et S_i^2.

Les vecteurs N_{i_k} correspondent aux points M_{i_k} se trouvant sur la droite L_i, le point S_i^1 (respectivement S_i^2) étant la somme des vecteurs correspondant aux points M_j se trouvant dans le demi-plan ouvert E_i^1 (respectivement E_i^2) (cf. figure I-5).

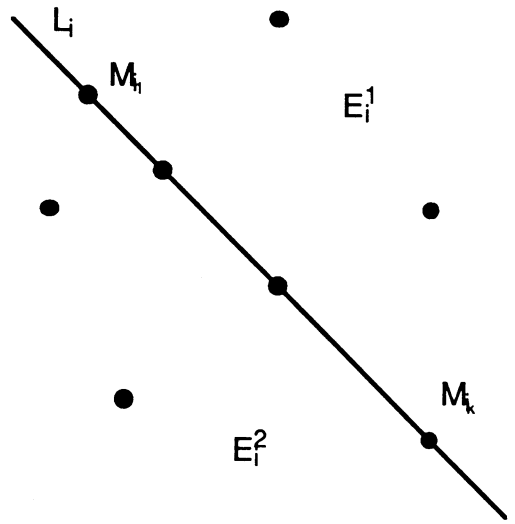


Figure I-5 -
Une ligne L_i du P.D.P. avec les points M_{ik} et les demi plans E_{i1} et E_{i2}

Ces quelques rappels faits concernant zonogones et zonoèdres, notre souci va être de mettre en œuvre une structure de données et des algorithmes de construction et de manipulation particulièrement adaptés aux zonoèdres.

L'algorithme de visualisation, utilisé notamment pour toutes les figures représentant des

zonoèdres, est l'algorithme classique pour visualiser des polyèdres convexes :

- le type de projection utilisée est la projection orthographique, i.e. que l'observateur est supposé se trouver à l'infini avec une direction de vue vers le polyèdre donnée par un vecteur d;
- à chaque face F du polyèdre est associée un vecteur normal v_F orienté vers l'extérieur de la face F;
- seules les faces vérifiant $\langle v_F, d \rangle < 0$ sont visualisées, l'ordre dans lesquelles elles le sont étant indifférent.

Nous donnons ci-dessous le principe de l'algorithme de construction par faces en nous plaçant dans le cas le pire, c'est à dire quand le nombre de faces est maximal, mais aussi le plus simple à traiter car chaque ligne du P.D.P. ne contient que deux points M_i.

Algorithme :

pour chaque couple (i,j) tel que $1 \leq i < j \leq p$:

calculer le vecteur $nij = N_i \wedge N_j$

calculer les points $S_{ij}^1 = \sum_{\langle N_k, nij \rangle > 0} N_k$ et $S_{ij}^2 = \sum_{\langle N_k, nij \rangle < 0} N_k$

la face F_{ij}^1 (resp. F_{ij}^2) est le zonogone $Z(N_i, N_j)$ translaté de S_{ij}^1 (resp. S_{ij}^2).

Complexité : pour chaque couple i,j, le temps de calcul des deux points S_{ij}^1 et S_{ij}^2 est linéaire en p. Cet algorithme a donc globalement une complexité en temps de l'ordre de $O(p^3)$.

Pour chaque doublet de faces(F_{ij}^1, F_{ij}^2), il suffit de conserver les indices i et j ainsi que les points S_{ij}^1 et S_{ij}^2.

Globalement, le nombre d'indices et le nombre de points à mémoriser est au plus $2p.(p-1)$. Donc la place mémoire utile est de l'ordre de $O(p^2)$.

Cet algorithme n'est pas optimal en temps d'exécution mais l'est par contre en place mémoire utile.

I-3 - Vers un algorithme optimal - Représentation par une structure de bords

Dans la méthode présentée dans le paragraphe précédent, le temps d'exécution de l'algorithme n'est pas optimal. Cela vient du fait que certaines informations topologiques du zonoèdres ne sont pas utilisées : dans la méthode présentée ci-dessus, les lignes du P.D.P. sont

traitées indépendamment les unes des autres; en particulier, il n'est pas tenu compte des relations d'adjacence entre les différents éléments composant le diagramme projectif.

Nous allons rappeler dans un premier temps que le problème de détermination des diagrammes projectifs est équivalent au problème de ***partitionnement du plan par des droites***.

Nous montrons ensuite le lien dual qui existe entre ce dernier problème et celui de construction d'un zonoèdre.

En introduisant une structure de données de type ***représentation par bords*** qui fait intervenir certaines relations d'adjacence, nous proposons un algorithme optimal en temps de construction de zonoèdre.

Nous montrerons enfin la dualité entre cet algorithme et l'algorithme optimal de partitionnement du plan par des droites.

• *Lien avec le partitionnement de la sphère par des plans*

Nous allons montrer dans ce paragraphe que le graphe d'adjacence des faces d'un zonoèdre C_p est équivalent au graphe d'adjacence des sommets dans le partitionnement de la sphère unité de $\mathbb{R}^3$ par p plans de $\mathbb{R}^3$ passant par l'origine.

■ *Proposition I-3-1* [BER87]: Soit P un polyèdre convexe fermé dont l'origine appartient à son intérieur ($O \in \text{int}(P)$), avec les sommets S_i et dont chaque face F_j est incluse dans le plan

$$\Pi_j = \{x \in \mathbb{R}^3, \langle x, v_j \rangle = 1\}.$$

Alors l'ensemble polaire de P, noté P* ***polyèdre dual***, est un polyèdre convexe fermé dont l'origine appartient à son intérieur et dont les faces (F_i') et les sommets (S_j') vérifient les propriétés suivantes :

- Chaque sommet S_j' est l'extrémité de la demi-droite Π_j^* et vérifie $\overrightarrow{OS_j'} = v_j$.
- Chaque face F_i' est incluse dans le plan Π_i' frontière du demi-espace S_i^*, défini par :

$$\Pi_i' = \{y \in \mathbb{R}^3, \langle v_i, y \rangle = 1\} \text{ avec } v_i = \overrightarrow{OS_i} .$$

Considérons le zonoèdre C_p et son dual C_p^*. Soit F une face de C_p de vecteur normal v_F, supposée formée des q premiers vecteurs N_i ($2 \leq q \leq p-1$) et vérifiant donc $\langle N_i, v_F \rangle = 0$ pour i=1 à q.

Donc le sommet S' de C_p^*, dual de la face F, vérifie $\langle S', N_i \rangle = 0$ pour i=1 à q; S' se trouve

à l'intersection des q plans orthogonaux aux vecteurs N_i.

Ainsi tous les sommets de C_p^*, duaux des faces appartenant à la zone associée au vecteur N_i, se trouvent dans le plan $N_i^{\perp}$.

De même, soit S un sommet de C_p, il existe $\eta \in \mathbb{R}^3$ tel que $S=2.\overline{S}-S_p$ avec $\overline{S}= \sum_{\langle N_i,\eta\rangle \geq 0} N_i$ ($\overline{S} \in Z_p$), F' la face de C_p^* duale de S se trouve dans l'intersection des demi-espaces :

$$H_i^* = \{x \in \mathbb{R}^3, \langle x,N_i\rangle \geq 0\}$$

et est limité par les plans $N_i^{\perp}$ pour N_i vérifiant $\langle N_i,\eta\rangle > 0$.

Sans modifier la topologie de C_p^*, on peut ramener les sommets de S' de C_p^* de manière qu'ils soient sur la sphère unité en étant toujours intersections des mêmes plans.

La figure I-6 montre la correspondance entre faces du zonoèdre et sommets à l'intersection des plans sur la sphère.

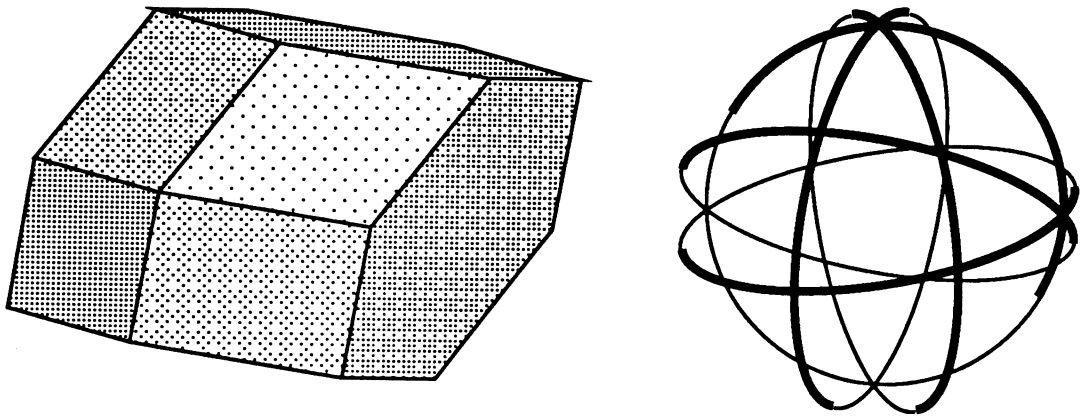


Figure I-6 - **Zonoèdre et partitionnement correspondant de la sphère unité**

• *Lien avec le partitionnement du plan par n droites (non parallèles)*

Considérons le partitionnement de la sphère unité S^2 par p plans différents $N_i^{\perp}$. Il est facile de voir que si on intersecte le plan $\Pi_\mu = \{x \in \mathbb{R}^3, \langle x,\mu\rangle = 1\}$ avec les p plans $N_i^{\perp}$, on obtient un plan partitionné par p droites non deux à deux parallèles.

Donc par dualité, le problème de construction d'un zonoèdre est équivalent à un partitionnement du plan par des droites.

En fait, cette propriété se généralise en dimension quelconque à savoir que le problème du partitionnement de S^{n-1} par p hyperplans de dimension n-1 passant par l'origine ou partitionnement de $\mathbb{R}^{n-1}$ par p hyperplans (non deux à deux parallèles) de dimension n-2 est équivalent à celui de la construction d'un zonotope à partir de p vecteurs de $\mathbb{R}^n$.[EDE87].

Pour revenir au notre problème précis (n=3), le partitionnement du plan par p droites a fait l'objet d'études diverses et aboutit à des algorithmes optimaux en $O(p^2)$.

Ce résultat vient du fait que l'ajout d'une nouvelle droite dans un partitionnement existant peut se faire en temps proportionnel au nombre de droites.

■ *Proposition I-3-2 (Zone theorem)* [CHA83][EDE86] : Soit le partitionnement du plan par p droites. Ce partitionnement est composé d'au plus p(p+1)/2+1 cellules (ouvertes ou fermées) délimitées par des arêtes. Le nombre d'arêtes des cellules intersectées par une nouvelle droite est majoré par 8.p.

Cette proposition implique qu'avec une structure de données adéquate, la détermination des différents éléments (cellules, arêtes et sommets) d'un partitionnement de plan par une nouvelle droite peut être faite en temps proportionnel au nombre de droites existantes.

L'algorithme développé ci-dessous est la version duale de la détermination de l'arrangement de p droites (non deux à deux parallèles) et construit donc directement le zonoèdre. En effet, cette méthode :

- évite le passage entre objets primaux et duaux : la construction d'un zonoèdre en utilisant un algorithme de partitionnement de plan par des droites obligerait par la suite à dupliquer la structure de données pour en créer une représentant le zonoèdre dual puis à utiliser un algorithme de calcul de polyèdre dual.
- illustre le fait que les zonoèdres se créent par expansions successives suivant différentes directions.

Nous faisons une présentation de la structure de données utilisée qui est de type Arête-Ailée, cette structure ayant été utilisée lors de la programmation de l'algorithme décrit ensuite.

• *Une structure par bords de type Arête-Ailée*

Les objets de type polyédriques se prêtent bien à l'utilisation de ***structure de données de représentation par bord*** ou ***B-Rep***. Celles-ci vont intervenir en temps qu'éléments de base les différents composantes (faces, arêtes et sommets) formant le bord du polyèdre.

L'information topologique est contenue dans la donnée de différents relations d'adjacence entre éléments. Cette information doit être assez complète afin de permettre la construction entière du polyèdre sans ambiguïté.

L'information géométrique est totalement contenue dans la donnée des coordonnées des sommets.

En combinant tous ou une partie des neuf relations d'adjacence possibles, on obtient environ cinq cent structures de données différentes. Celles-ci ont étudiées comparativement du point de vue algorithmique et place mémoire utilisée [WOO85], [WEI85]. De cette étude, il ressort que les structures de données présentant le meilleur compromis sont les structures de type ***Arête-Ailée***.

Ce type de structure fait intervenir les cinq relations d'adjacence suivantes :

- sommet - arête
- arête - sommet
- arête - arête
- face - arête
- arête - face

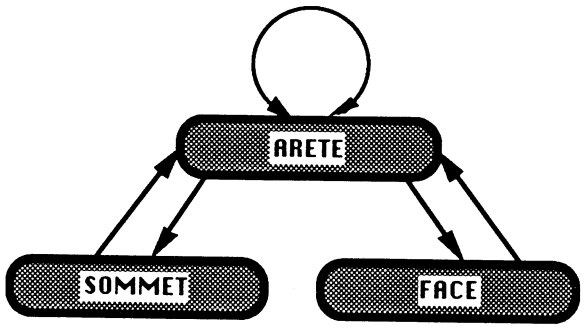


Figure I-7 - **Structure de type Arête-Ailée et liens d'adjacence mis en jeu**

La structure que nous allons utiliser par la suite sera appelée ***structure Quatre Liens arête-arête*** (***Four Edge-Edge Links***) ou ***structure QUA.L.A.*** (***F.E.E.L. structure***).

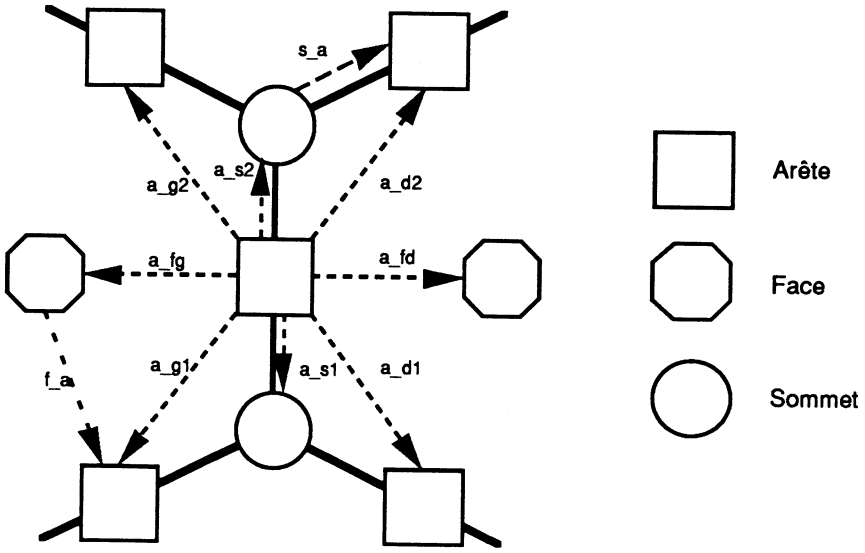


Figure I-8 - **Structure F.E.E.L.**

Les liens intervenant entre différents éléments sont les suivants :

- pour chaque sommet, un lien vers une arête incidente;
- pour chaque face, un lien vers une arête adjacente du contour;
- pour chaque arête, les deux liens vers les deux sommets (initial et final), les deux liens vers les deux faces adjacentes et quatre liens vers les quatre arêtes adjacentes ayant en commun avec celle-ci un sommet et une face.

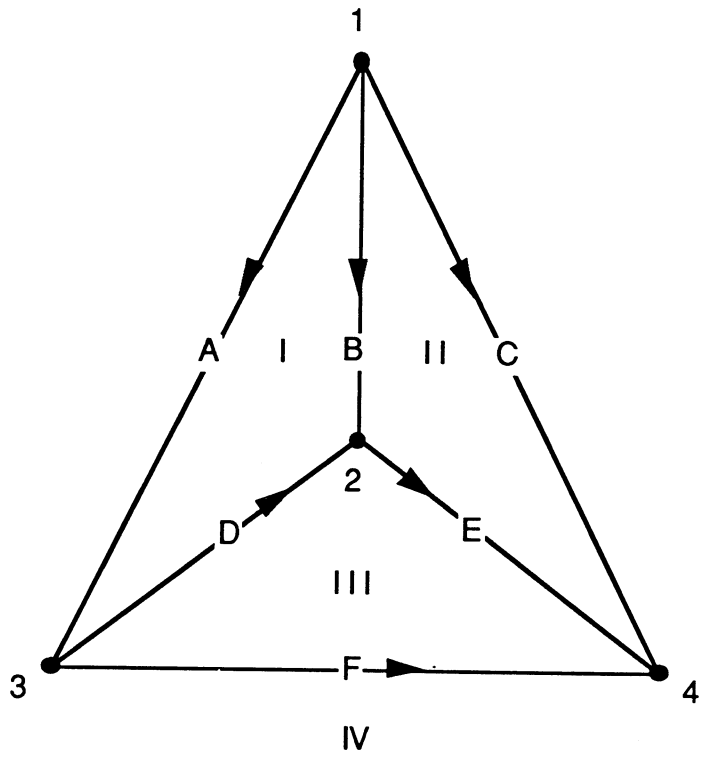
La figure suivante montre un exemple de structure de données générée pour le tétraèdre.

Cette structure de données est assez semblable avec la ***structure de données D.C.E.L.*** **(Doubly-Connected Edge List)** décrite dans [PRE85] : la structure F.E.E.L. est cependant plus complète - tous les liens existants dans la structure D.C.E.L. se retrouve dans cette structure - donc plus coûteuse en mémoire, mais par contre permet un parcours autour des faces et sommets plus aisé, cet aspect étant particulièrement utile dans l'algorithme décrit ci-dessous.

Arête	a_s1	a_s2	a_fg	a_fd	a_g1	a_d1	a_g2	a_d2
A	1	3	I	IV	B	C	D	F
B	1	2	II	I	C	A	E	D
C	1	4	IV	II	A	B	F	E
D	3	2	I	III	A	F	B	E
E	2	4	II	III	B	D	C	F
F	3	4	III	IV	D	A	E	C

Sommet	s_a
1	A
2	B
3	A
4	F

Face	f_a
I	B
II	B
III	E
IV	F



Graphe planaire d'adjacence
des sommets pour le tétraèdre

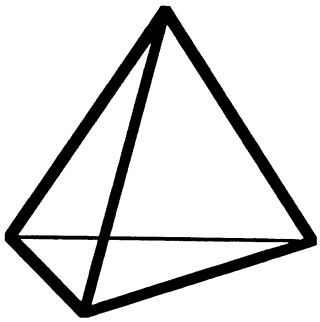


Figure I-9 - **Tétraèdre avec la structure correspondante**

• *L'algorithme.*

L'algorithme proposé permet la construction d'un zonoèdre en temps optimal ($O(p^2)$) à partir de p vecteurs de $\mathbb{R}^3$ vérifiant les hypothèses suivantes :

a) il existe $\mu \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle N_i,\mu \rangle > 0$ pour tout i de 1 à p

b) il n'existe pas deux vecteurs colinéaires

c) les vecteurs ne sont pas tous coplanaires (sinon le zonoèdre associé est en fait un zonogone). Nous supposons donc que les trois vecteurs N_1,N_2 et N_3 forment une base de $\mathbb{R}^3$.

L'idée de l'algorithme vient la proposition I-1.15 : pour construire le zonoèdre Z_p, on ajoute les vecteurs de la base les uns après les autres, i.e. on construit directement le zonoèdre parallélépipède $Z_3=[0,N_1] + [0,N_2] + [0,N_3]$ puis $Z_4 = conv(Z_3, Z_3+N_4)$ enveloppe convexe de Z_3 et de Z_3 translaté de N_4 jusqu'à $Z_p = conv(Z_{p-1}, Z_{p-1}+N_p)$. Le fait que Z_i et Z_i+N_{i+1} aient la même structure topologique, le calcul d'enveloppe convexe sera à chaque pas simple et rapide.

■ *Définition I-3-3* : Soit $Z_i = Z[N_1, N_2,\ldots, N_i]$ un zonoèdre et soit N_{i+1} un vecteur de $\mathbb{R}^3$, on définit la ***prézone*** de Z_i par rapport à N_{i+1} comme l'ensemble des points de la frontière de Z_i, points d'appui de plans contenant le vecteur N_{i+1}.

A chaque pas, seront effectuées deux étapes :

1) déterminer la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1}. Cette prézone est un ensemble de sommets, faces et arêtes de Z_i à partir de laquelle la zone de Z_{i+1} associée au vecteur N_{i+1} sera générée.

2) créer de nouveaux éléments (faces, arêtes et sommets) formant la zone de Z_{i+1} associée au vecteur N_{i+1}.

A chaque pas, le calcul d'enveloppe convexe va correspondre du point de vue topologique uniquement à la création de nouveaux éléments, les éléments existants de Z_i se retrouvant comme éléments de Z_{i+1}.

■ *Proposition I-3-4* : Soit F une face de Z_i de normale extérieure η. Alors si :

a) $\eta.N_{i+1}>0$, $F+N_{i+1}$ est une face de Z_{i+1}; nous dirons dans ce cas que la face F est ***translatée***.

b) $\eta.N_{i+1}<0$, F est une face de Z_{i+1}; nous dirons dans ce cas que la face F est ***non translatée***.

c) $\eta.N_{i+1}=0$, conv(F,F+N_{i+1}) est une face de Z_{i+1}; nous dirons dans ce cas que la face est ***prézonale***.

d) soit A une arête de Z_i, dont les deux faces adjacentes de normale extérieure η_1 et η_2 vérifient $\eta_1.N_{i+1}>0$ pour l'une, et $\eta_2.N_{i+1}<0$ pour l'autre, alors la somme de Minkowski de l'arête A et du segment [0 N_{i+1}] est une face de Z_{i+1}. De même que précédemment, nous dirons que l'arête est ***prézonale***.

• preuve :

a) et b) se déduisent immédiatement du corollaire I-1-13; en effet, si $\eta.N_{i+1}>0$ alors $F+N_{i+1} = \sum_{N_j.\eta>0,\ 1\le j\le i} N_j + \sum_{N_j.\eta=0} [O,N_j]+N_{i+1} = \sum_{N_j.\eta>0,\ 1\le j\le i+1} N_j + \sum_{N_j.\eta=0} [O,N_j]$ qui est une face de Z_{i+1}. De même si $\eta.N_{i+1}<0$ alors $F = \sum_{N_j.\eta>0,\ 1\le j\le i} N_j + \sum_{N_j.\eta=0} [O,N_j]$

$= \sum_{N_j.\eta>0,\ 1\le j\le i+1} N_j + \sum_{N_j.\eta=0} [O,N_j]$ qui est une face de Z_{i+1}.

c) se déduit du corollaire I-1-13 et de la proposition I-1-15;

d) se déduit des relations a) et b), d'après la définition de l'arête A. □

Remarque : Construire Z_{i+1} à partir de Z_i revient à prendre la structure de Z_i, la couper suivant la prézone par rapport à N_{i+1}, translater de N_{i+1} la partie "au-dessus" de la prézone et raccorder les deux parties par des faces (cas b) et d) de la proposition précédente).

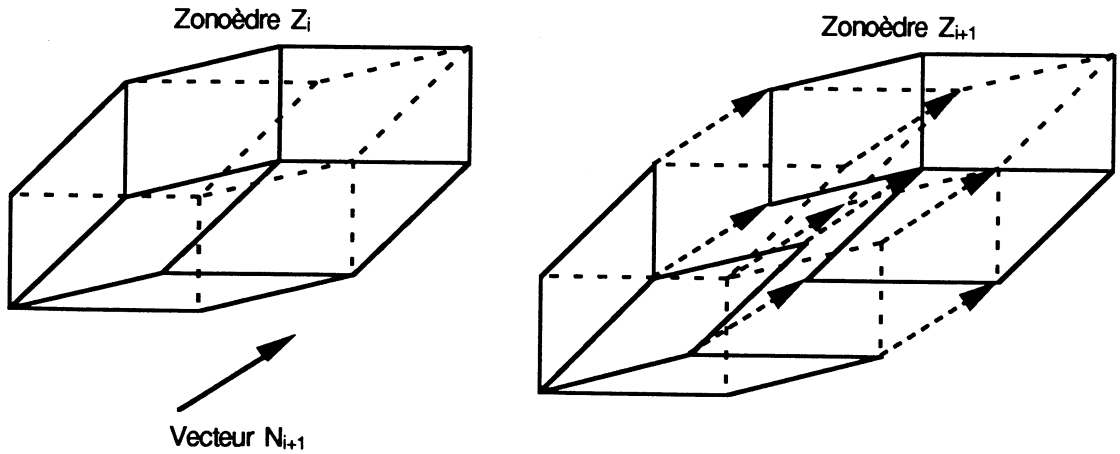


Figure I-10 - **Passage de Z_i à Z_{i+1}**

Algorithme : Nous allons décrire l'algorithme qui permet de calculer la structure de données de Z_{i+1} à partir de celle de Z_i et du vecteur N_{i+1}.

Lors de cette phase, la structure de données contient les informations topologiques décrites précédemment, ainsi que les informations géométriques suivantes :

- chaque arête est orientée dans la même direction que le vecteur de base N_i auquel elle correspond et lui est associée l'indice i de ce vecteur N_i.
- le sommet S0 correspondant à l'origine O est connu ;
- pour chaque face F, son vecteur normal extérieur v_F est connu.

Seules les coordonnées des sommets de Z_i ne seront pas calculées à chaque pas. Cependant, les informations (géométriques et topologiques) contenues dans la structure de données sont suffisantes pour permettre de calculer les coordonnées des sommets de Z_p, une fois ce dernier complètement construit.

Nous donnons ci-dessous quelques définitions et propositions afin de faciliter la compréhension de la méthode décrite par la suite.

■ *Proposition I-3-5* : Soit Z_p un zonoèdre construit à partir de p vecteurs de base et N_i un vecteur de cette base. Alors la zone associée à ce vecteur contient au plus 2(p-1) faces .

• preuve : Il y a au plus (p-1) plans Π_j généré par le vecteur N_i et un autre vecteur N_k de la base. A chaque plan Π_i étant associées deux faces, le résultat est vérifié. □

■ *Proposition I-3-6* : Soit une zone d'un zonoèdre Z_p formée de 2q faces. Soit a_i le nombre d'arêtes formant le contour de la i-ème face de cette zone. Alors on a la relation suivante :

$$\sum_{i=1}^{2q} a_i \leq 8.(p-1)$$

• preuve : Comme pour la proposition I-1-14, la borne est atteinte lorsqu'il n'y a pas trois vecteurs coplanaires parmi la base de vecteurs. Dans ce cas, chaque zone est formée de 2(p-1) faces ayant chacune 4 cotés d'où $\sum_{i=1}^{2q} a_i = 8.(p-1)$. □

■ *Proposition I-3-7* : Chaque zone de Z_i contient au moins une face ou une arête de la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1}.

• preuve : Soit une des faces de cette zone est prézonale, sinon la zone, du fait de la symétrie et étant connexe et composée pour moitié de faces translatées et pour moitié de faces non translatées, il existe nécessairement une arête séparant une face translatée et une face non translatée, donc une arête prézonale. □

■ *Corollaire I-3-8* : Soit Z_i le zonoèdre construit à partir des i premiers vecteurs de base. Alors la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1} contient au plus 2(p-1) faces ou arêtes et autant de sommets.

• preuve : elle est immédiate d'après les points c) et d) de la proposition I-3-4 et de la proposition précédente. □

L'algorithme se déroule en trois étapes :

Etape 1 : Recherche d'un sommet et d'un élément (face ou arête) appartenant tous deux à la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1}.

Nous allons nous déplacer sur le contour des faces appartenant à une même zone jusqu'à rencontrer une arête ou une face prézonale ainsi qu'un sommet de la prézone adjacent à cet élément.

L'algorithme se présente ainsi : soit F une face de Z_i et A une arête de son contour, soit k l'indice du vecteur correspondant à A (la recherche de l'élément prézonal se fera sur la zone associée à N_k)

répéter

si A ou F est prézonale l'élément recherché est trouvé

sinon parcourir les arêtes du contour de F jusqu'à trouver l'autre arête A'

correspondant à N_k. Soit F' l'autre face de A'. F' et A' deviennent resp. F et A.

jusqu'à ce qu'un élément prézonal soit trouvé

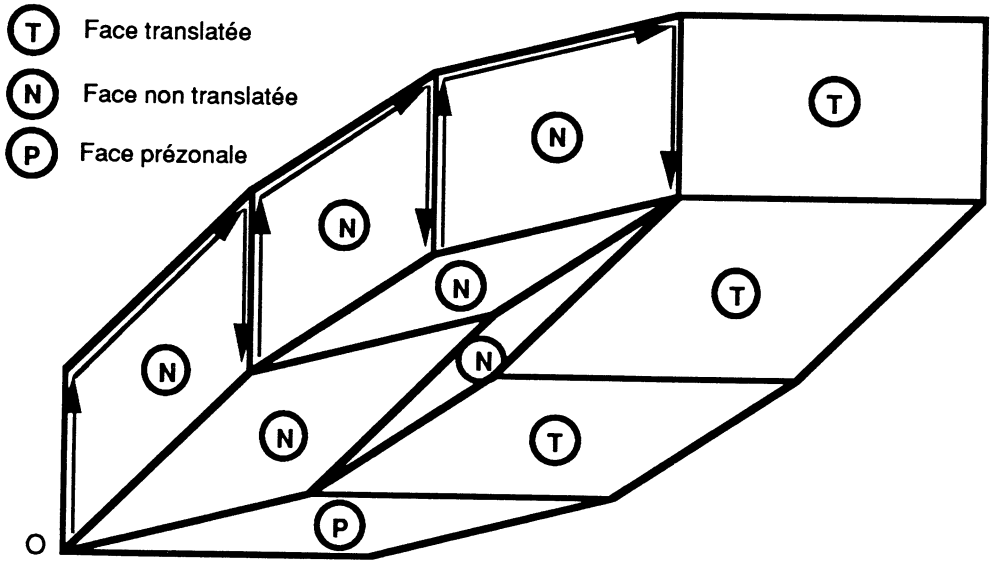


Figure I-11 - **Parcours d'une zone pour la recherche d'un élément de la prézone**

Si l'élément prézonal trouvé est une arête, nous prenons comme sommet S de la prézone un des sommets de A.

Sinon une face F a été trouvée comme élément de la prézone : il faut donc rechercher sur le contour de F un sommet qui appartienne à la prézone. Pour faire ceci, nous utilisons la méthode suivante :

Chercher sur le contour de F deux arêtes A1 et A2 ayant un sommet en commun et dont les deux autres faces (respectivement F1 et F2) sont pour l'une translatée pour l'autre non translatée.

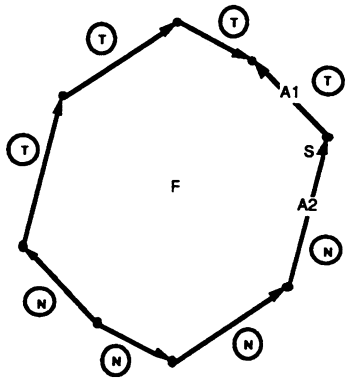


Figure I-12 - **Recherche d'un sommet de la prézone dans le cas d'une face prézonale**

Etape 2 : Détermination de la liste des éléments composant cette prézone

A ce stade-là, nous connaissons deux éléments consécutifs de la prézone. A partir de ces deux premiers éléments, nous allons rechercher l'ensemble formant la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1}.

Chaque phase de cette étape consiste à trouver les deux éléments (un sommet et une face ou arête) suivant les deux derniers éléments trouvés.

Chaque phase se divise de nouveau en deux pas :

1) trouver l'autre sommet S' de la prézone adjacent à la face ou arête.

Dans le cas d'une arête A, il suffit de prendre l'autre sommet extrémité de A

Dans le cas d'une face F, parcourir le contour de F pour trouver le sommet S' symétrique de S par rapport à F : pour cela, compter les deux 2q arêtes formant le contour de F et s'arrêter au q-ième sommet rencontré à partir de S.

2) connaissant ce nouveau sommet, chercher l'autre élément prézonal (A' ou F') qui lui est adjacent.

Connaissant S' et l'élément précédent A ou F, on effectue un parcours alterné d'arêtes et de faces autour de S' à partir de A ou F jusqu'à trouver une arête A' ou une

face F' prézonale.

Alors S' devient S et A'(ou resp. F') devient A (ou resp. F).

Cette étape s'arrête lorsqu'on retrouve le premier sommet trouvé lors l'étape 1.

Etape 3 : Création des nouveaux éléments formant la zone de Z_{i+1} associée à N_{i+1}.

Nous connaissons à ce stade une liste de tous éléments de la prézone composée alternativement de sommets et de faces ou arêtes.

Cette étape va consister à créer les éléments formant la zone de Z_{i+1} associée au vecteur N_{i+1}.

Chaque élément de la prézone va générer un élément de la zone de la manière suivante :

- chaque sommet S de la prézone donne une arête correspondant au vecteur N_{i+1}.
- chaque arête A de la prézone donne une face tétragonale pour la nouvelle zone .
- chaque face F de prézone avec 2q cotés donne une face de la nouvelle zone avec 2(q+1) côtés.

Cette étape se découpe en deux sous-étapes.

La première consiste à créer, à partir de chaque arête A de la prézone, une face F dont le contour est uniquement composée de deux arêtes colinéaires A et A'.

La figure ci-contre montre le passage de l'arête A à la face F.

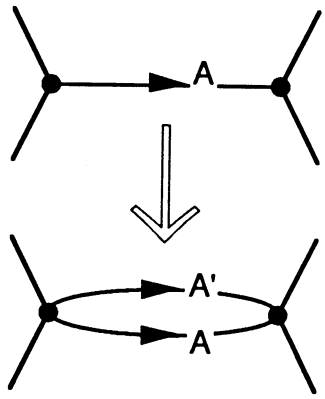


Figure I-13 - **Création de faces à partir des arêtes de la prézone**

La seconde phase consiste à générer les faces de nouvelle zone à partir des faces des la prézone.

L'opération consiste à créer à partir de chaque sommet de la prézone, une nouvelle arête correspondant au vecteur N_{i+1}. Chaque sommet de la prézone ayant alors deux faces prézonales adjacentes, après création de cette nouvelle arête, celles-ci ont deux arêtes supplémentaires et forment les faces de la zone associée à N_{i+1}.

C'est lors de cette phase que sont calculées les vecteurs normaux extérieurs aux nouvelles faces créées (ce calcul se fait en général en prenant le produit vectoriel de deux vecteurs correspondant à deux arêtes consécutives du contour d'une face).

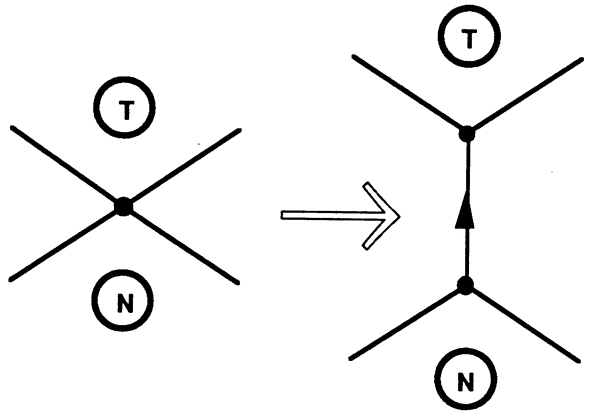


Figure I-14 - **Formation des faces de la zone**

A ce stade, la zone associée au vecteur N_{i+1} est construite, la structure de données représente alors le zonoèdre Z_{i+1}.

I-4 - Résultats expérimentaux

Afin de confirmer le résultat de complexité (on trouvera en annexe A-1 une description de la dualité entre cet algorithme et celui du partitionnement du plan par des droites, montrant le caractère optimal en place mémoire et en temps), nous allons comparer les deux méthodes présentées en considérant la place mémoire utilisée et le temps d'exécution des deux algorithmes décrits dans ce chapitre.

La méthode 1 est la méthode décrite dans le paragraphe I-2 et la méthode 2 est la méthode

décrite dans le paragraphe I-3.

Les tests ont été faits en considérant les deux bases de vecteurs suivantes :

$$B_p^1 = \{ \begin{pmatrix} \cos(\frac{2i\pi}{p}) \\ \sin(\frac{2i\pi}{p}) \\ 1 \end{pmatrix}, i \text{ variant de } 1 \text{ à } p\} \text{ et } B_p^2 = \{ \begin{pmatrix} 2i-\sqrt{p}+1 \\ 2j-\sqrt{p}+1 \\ 1 \end{pmatrix}, i \text{ et } j \text{ variant de } 1 \text{ à } \sqrt{p}\}$$

(pour la base B_p^2, p est le carré d'un entier).

En annexe, on trouvera les P.D.P. et zonoèdres correspondants à B_{64}^1 et B_{64}^2.

Dans un premier temps, comparons les temps des deux algorithmes dans le pire cas (aucun triplet de vecteurs de base coplanaires) : les résultats portent sur la base B_p^1 pour p variant de 20 à 200.

Figure I-15 -
Comparatif des temps d'exécution des deux algorithmes pour une même base de vecteurs

p	Méthode 1	Méthode 2
20	0,52	1,58
30	1,65	3,63
40	3,80	6,55
50	7,38	10,35
60	12,70	15,05
70	20,08	20,67
80	29,93	27,20
100	58,28	43,18
120	100,58	63,18

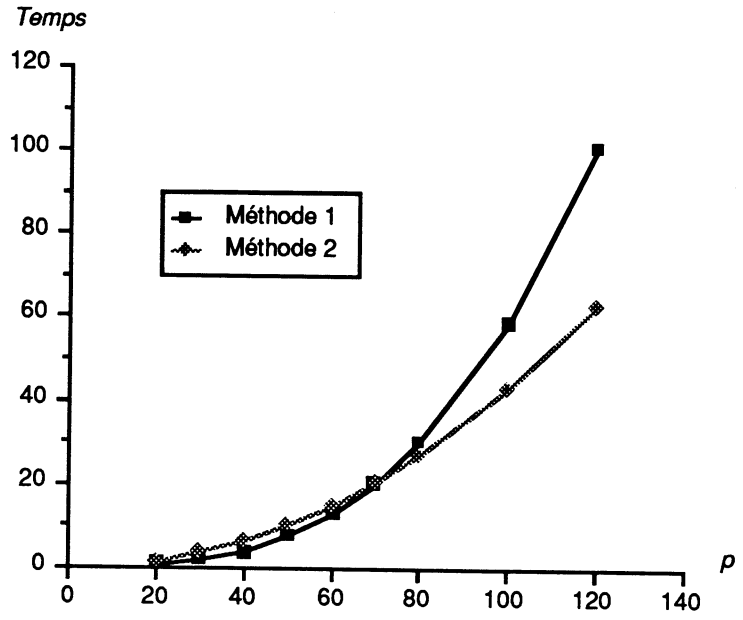


Figure I-16 - **Graphe comparatif des deux méthodes**

L'ajustement linéaire du graphe Log Temps = f(Log p) donne les résultats suivants : pour la méthode 1, le temps est de l'ordre de $p^{2,95}$ alors que pour la méthode 2, il est de l'ordre de $p^{2,06}$.

Ces deux résultats sont très proches des deux résultats théoriques, soit $O(p^3)$ pour la méthode 1 et $O(p^2)$ pour la méthode 2.

Enfin pour les deux algorithmes, nous montrons ci-dessous que le cas le plus coûteux, aussi bien en temps qu'en place mémoire, est obtenu quand il n'existe pas trois vecteurs coplanaires dans la base de vecteurs (par ex. B_p^1).

Il n'existe pas trois vecteurs de coplanaires dans B_p^1 alors que la base B_p^2 présente de nombreux cas de coplanarité entre plusieurs vecteurs de base.

Nous pouvons remarquer, aussi bien pour la méthode 1 que pour la méthode 2, que le rapport $\frac{\text{Temps}}{\text{Nombre de faces}}$ est plus faible dans le cas de la base B_p^1 que dans le cas de la base B_p^2 .

	Base B_1			Base B_2		
p	Temps Méthode 1	Temps Méthode 2	Nb faces zonoèdre	Temps Méthode 1	Temps Méthode 2	Nb faces zonoèdre
4	0,28	1,00	240	0,20	0,63	62
5	0,98	2,50	600	0,57	1,43	140
6	2,78	5,27	1260	1,65	3,02	306
7	6,93	9,93	2352	3,83	5,32	536
8	15,37	17,18	4032	8,62	9,13	938
9	31,07	27,92	6480	17,07	14,57	1492
10	58,28	43,18	9900	32,40	22,40	2306

Figure I-17 - **Comparatif suivant la configuration des vecteurs de base**

Ceci se comprend aisément du fait que les dégénérescences dues à plusieurs vecteurs de base coplanaires sont plus difficiles à traiter :

- dans la méthode 1, il faut trier les points M_{i_k} se trouvant sur une même ligne du diagramme projectif.
- dans la méthode 2, la présence de faces prézonales (étape 1) implique un traitement supplémentaire afin de trouver un sommet prézonal.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons montré que les zonoèdres, du fait de leurs particularités, permettent d'obtenir des algorithmes optimaux (au sens où leur complexité est de l'ordre du nombre d'éléments traités, ici le nombre de composantes (arêtes, faces et sommets) formant le bord du zonoèdre, soit le carré du nombre de vecteurs de base) ce qui n'est pas le cas en général pour des polyèdres convexes quelconques (par exemple, l'algorithme optimal d'enveloppe convexe de p points a une complexité en temps de l'ordre de p.log p).

Cependant, comme souvent en Algorithmique, les algorithmes sous-optimaux sont en général plus faciles à mettre en œuvre, nécessitent moins de place mémoire et, pour un petit nombre de données, sont souvent plus rapides que les algorithmes optimaux.

Le tableau I-21 confirme ceci : les temps d'exécution de la méthode 1 sont plus rapides pour les petites valeurs de p; de même l'expérimentation montre que la place mémoire utilisée par la méthode 1 est quatre fois inférieure à celle nécessaire pour la méthode 2.

CHAPITRE III

MODÈLE GÉOMÉTRIQUE DES MÉLANGES : FAISABILITÉ ET OPTIMISATION

II-1 Un modèle géométrique de la fabrication d'un mélange

Considérons un système composé de p produits P_i, chacun étant représenté par n spécifications s_j. Ainsi le produit P_i est représenté par le n-uplet $(s_1^i, s_2^i, \ldots, s_n^i)$.

■ *Définition II-1-1* : on appelle Ω_j, l'***espace de représentation*** de la spécification s_j. Par la suite, Ω_i sera en général $\mathbb{R}$ ou un intervalle de $\mathbb{R}$. $\Omega = \Omega_1 \times \Omega_2 \times \ldots \times \Omega_n$ sera appelé ***espace des phases***.

■ *Définition II-1-2* : Le n-uplet $B_i = (s_1^i, s_2^i, \ldots, s_n^i) \in \Omega$ est appelé ***donnée brute*** du produit P_i. Chaque valeur réelle s_j^i est appelée j-ième ***composante brute*** du produit P_i.

■ *Définition II-1-3* : la fonction f de Ω à valeurs dans une partie de $\mathbb{R}^n$ est dite une ***fonction additive*** si :

- f admet une fonction réciproque f^{-1};
- Pour tous produits P_1 et P_2, pour tous réels positifs a et b, le n-uplet B représentant le mélange d'une fraction a du produit P_1 avec une fraction b du mélange P_2 est donné par la formule :

$$B = f^{-1}(\alpha.f(B_1)+\beta.f(B_2)) \Leftrightarrow f(B) = \alpha.f(B_1)+\beta.f(B_2) \ \forall\ \alpha,\beta \in \mathbb{R}_+,\ \forall B_1,B_2 \in \Omega$$

On dit que f définit une ***loi linéaire de mélange***.

Exemple : Un produit pétrolier, précisément un gazole, est caractérisé par quatre spécifications : sa masse (m), sa masse volumique (d), son pourcentage en masse de soufre (s) et sa température de point de trouble (t).

L'espace des phases est $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times I$, où est un intervalle de température. La fonction f qui définit pour ces spécifications une loi linéaire de mélange est la fonction qui transforme les données brutes (m,d,s,t) en données additives (m,v,qs,qt) = (masse,volume,quantité de soufre,"quantité de trouble") de la manière suivante :

f est une fonction additive de $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times I$ dans $\mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{R}_+^*$.

$f(m,d,s,t) = (m\ ,\ \frac{m}{d}\ ,\ m.s\ ,\ m.fI(t))$, le terme $fI(t)$ est appelé ***indice de mélange*** associé au point de trouble; c'est un modèle théorique utilisé en raffinerie qui définit une loi de mélange linéaire pour la température de point de trouble. Ces lois de mélange ont fait récemment l'objet d'études et de modélisations à partir de splines [ODE90].

■ *Définition II-1-4* : On appelle ***donnée additive*** associée au produit P_i le vecteur N_i de $\mathbb{R}^n$ égal à $f(B_i)$. Chaque valeur N_i^j est appelée j-ième ***composante additive*** du produit P_i.

Ce modèle vectoriel utilisé pour la représentation des mélanges peut se résumer par le parallèle suivant dans le cas des produits pétroliers:

Produit P_i avec n spécifications	Vecteur N_i de $\mathbb{R}^n$ à composantes additives
Exemple masse = 10000 m. volum. = 0.885 T/m^3 % Soufre = 0.2 Pt. de trouble = -5°C	$\begin{pmatrix} 10000 \\ 11299.4 \\ 2000 \\ 144.791 \end{pmatrix}$
Opération de mélange	Somme vectorielle
Ensemble des mélanges faisables à partir de p produits de bases	Ensemble Z_p de $\mathbb{R}^n$: **zonotope** $Z_p = \{ M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i . N_i\ ,\ 0 \leq \lambda_i \leq 1 \}$
Trois spécifications : masse + 2 autres spécifications	**zonoèdre** : polyèdre convexe à symétrie centrale ainsi que ses faces

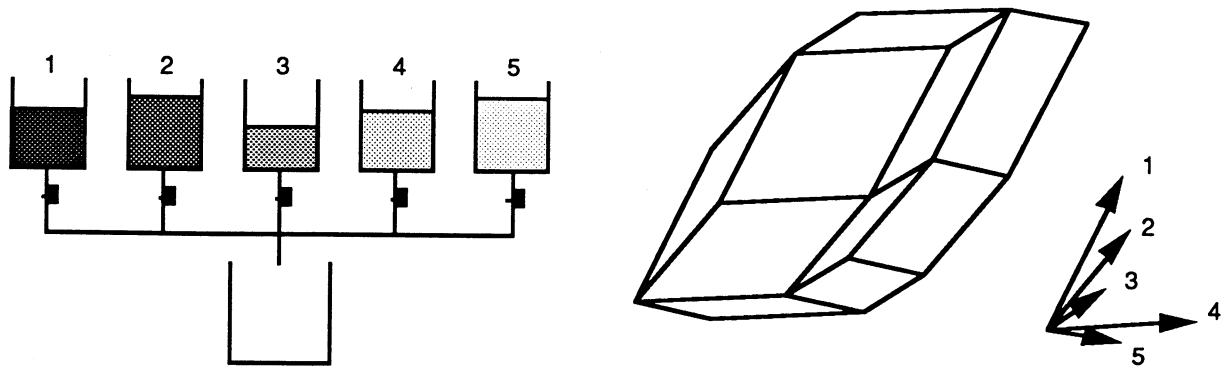


Figure II-1 - **Cinq bacs et le zonoèdre correspondant aux mélanges faisables**

II-2 Un critère pertinent d'optimalité pour la production

• *Le problème du marchand de peinture*

Afin d'introduire le concept de volume résiduel et volume optimal, nous allons considérer un exemple simple et réaliste de fabrication de mélange.

Considérons un marchand de peinture ne vendant que de la peinture grise, c'est à dire exclusivement faite à partir des deux composantes blanche et noire. Son stock est composé de trois récipients ou bacs de peinture : de la peinture blanche, noire ou gris moyen (égales proportions de blanc et de noir). Son fournisseur ne le livrant qu'une fois par semaine, il doit gérer au mieux son stock existant afin de pouvoir répondre aux diverses demandes des clients.

Nous voyons que chaque bac de peinture peut être représenté au moyen d'un vecteur de $\mathbb{R}^2$, l'abscisse représentant la masse de peinture noire et l'ordonnée la masse de peinture blanche composant la peinture contenue dans chaque bac. L'ensemble des peintures faisables est donc représenté par un zonogone formé de trois vecteurs de base : N_1 pour le bac de peinture blanche, N_2 pour le bac de peinture grise, N_3 pour le bac de peinture noire.

A un instant donné, il dispose du stock suivant : 100 kg de peinture blanche, 100 kg de peinture grise et 100 kg de peinture noire. Le modèle vectoriel introduit dans le paragraphe précédent permet de représenter ces données. Les produits sont représentés de la manière suivante :

- la masse de produit est égale à la norme $\|.\|_1$ ($\|N\|_1 = |N^1| + |N^2|$ avec $N = \begin{pmatrix} N^1 \\ N^2 \end{pmatrix}$) du vecteur correspondant;

- la teinte de gris d'un produit est donnée par l'angle entre le vecteur correspondant et l'axe Ox (axe du noir) : plus un produit est clair, plus l'angle est important.

La figure suivante représente les vecteurs de base ainsi que le convexe de mélange correspondant.

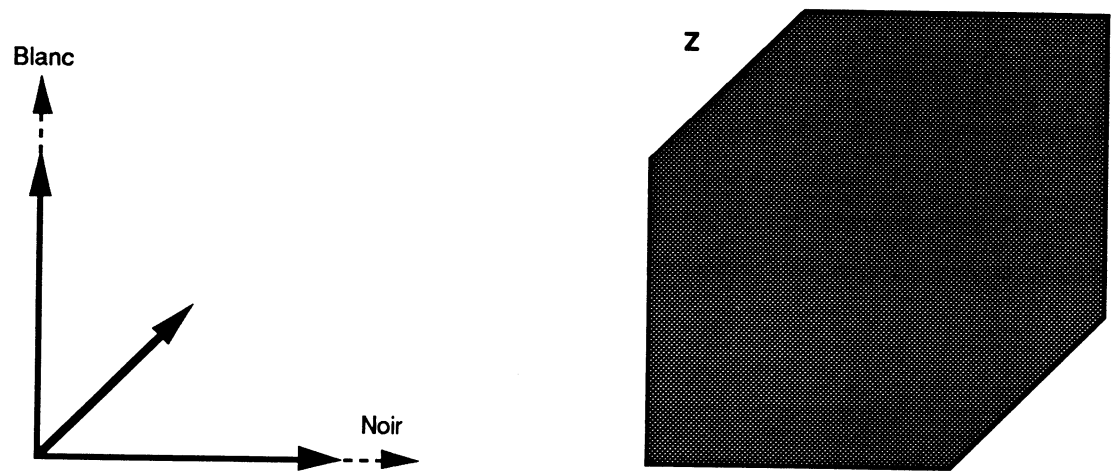


Figure II-2 - **Les trois vecteurs de base et le convexe de mélange Z**

Un client arrive et lui demande 100 kg de peinture gris clair (composé à 75 % de blanc et 25 % de noir). La demande peut être alors réalisée de différentes manières à partir des trois bases. Pour le marchand, il doit choisir la manière de faire qu'il lui permettra par la suite, avec ce qui restera dans son stock, de satisfaire l'éventail de demandes le plus large possible.

Envisageons les deux manières suivantes :

1) Le marchand utilise 75 kg de peinture blanche et 25 de peinture noire pour fabriquer les 100 kg de peinture demandés. Il lui restera ensuite 25 kg de peinture blanche, 75 kg de peinture noire et 100 kg de peinture grise. Représentons alors ce stock résiduel par les trois vecteurs correspondants ainsi que le convexe de mélange correspondant :

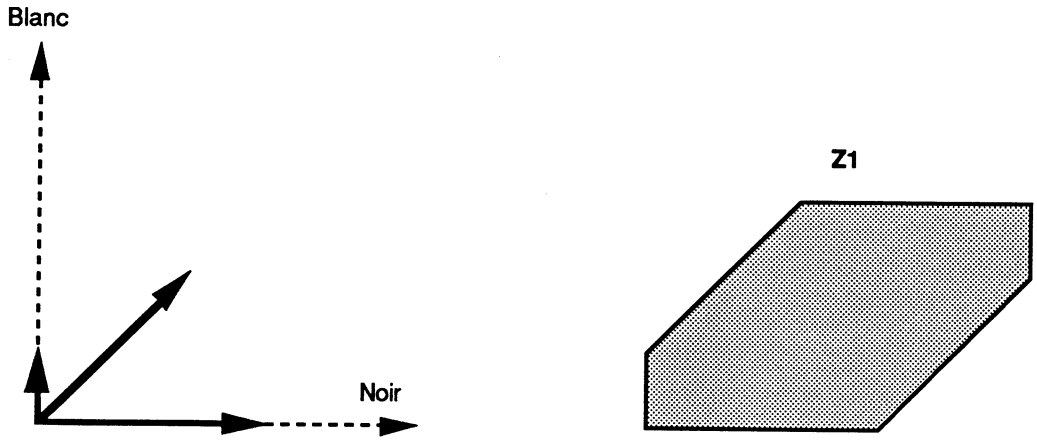


Figure II-3 -**Les trois vecteurs de base et le convexe de mélange Z1**

2) le marchand utilise 50 kg de peinture grise et 50 kg de peinture blanche. Il lui restera ensuite 50 kg de peinture blanche, 50 kg de peinture grise et 100 kg de peinture noire. Procédons comme précédemment :

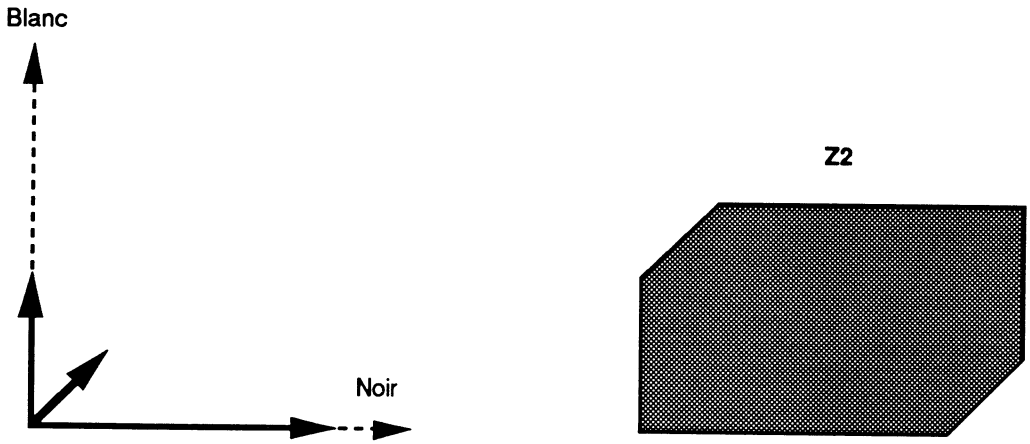


Figure II-4 -**Les trois vecteurs de base et le convexe de mélange Z2**

En plaçant les trois zonogones Z, Z1 et Z2 dans le même graphique, nous observons que le zonogone Z_1 est inclus dans le zonogone Z_2, donc si le marchand choisit la deuxième manière, il aura plus de facilités pour répondre ensuite aux diverses demandes que s'il opte pour la première manière. Le vecteur M représente la demande du client.

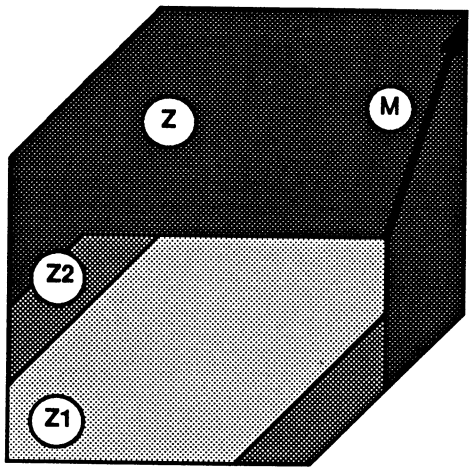


Figure II-5 -**Les trois convexes de mélange**

• *Faisabilité, optimisation et programmation mathématique*

■ *Définition II-2-1* : Un vecteur ou mélange M est dit ***faisable*** à partir des p vecteurs de base $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ si et seulement s'il existe p réels λ_i tous compris entre 0 et 1 tel que :

$$M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i \,.$$

■ *Définition II-2-2* : Soient $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ une base de vecteurs et M un mélange faisable à partir de cette base. Soit $\Lambda=(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_p)$ une décomposition de ce mélange. Nous appelons ***base résiduelle*** les vecteurs $\{(1-\lambda_1).N_1,(1-\lambda_2).N_2,\ldots,(1-\lambda_p).N_p\}$ et ***convexe de mélange résiduel*** ou ***résidu*** le zonotope Z_p^Λ associé à cette base résiduelle.

Formulation : La généralisation du problème du marchand de peinture est dû à GIRARD [GIR86] et se formalise ainsi :

Soient $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ une base de vecteurs de $\mathbb{R}^n$ et M un mélange faisable de $\mathbb{R}^n$. La décomposition optimale Λ_{opt} est solution du problème :

$$(P)\begin{cases} \underset{\Lambda \in \mathbb{R}^n}{\text{Max}} \ \text{Volume}(Z_p^\Lambda) \\ \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i = M \\ 0 \leq \lambda_i \leq 1 \ \text{ pour } i=1 \text{ à } p \end{cases}$$

Le volume est associé à la mesure usuelle de Lebesgue sur $\mathbb{R}^n$.

■ *Définition II-2-3* : Soient $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ une base de vecteurs et M un mélange faisable à partir de cette base. Nous appellerons ***domaine de faisabilité*** de M, l'ensemble de $\mathbb{R}^p$ suivant :

$$U_M = \{ \Lambda \in [0,1]^p, M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i \}$$

■ *Proposition II-2-4* : L'ensemble U_M est un polytope borné fermé de $\mathbb{R}^p$ inclus dans un hyper-plan de dimension p-n. Il est vide si M n'est pas faisable.

• preuve : Soit F l'application linéaire de $\mathbb{R}^p$ dans $\mathbb{R}^n$ qui à $(\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_p)$ fait correspondre le point $\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i$. Si M est un point de $\mathbb{R}^n$, l'ensemble $F^{-1}(\{M\})$ est un hyper-plan de $\mathbb{R}^n$ de dimension p-n.

De plus l'intersection d'un hyper-plan de $\mathbb{R}^p$ avec le cube unité $[0,1]^p$ est un polytope fermé borné. □

■ *Proposition II-2-5* [GIR86] : La fonction $\Lambda \rightarrow \sqrt[n]{\text{Volume}(Z_p^\Lambda)}$ est concave sur l'ensemble U_M, donc la fonction $\Lambda \rightarrow \text{Volume}(Z_p^\Lambda)$ admet un maximum global sur U_M.

Le problème ***(P)*** est un problème classique d'optimisation concave sur un domaine défini par des contraintes linéaires. Nous pouvons utiliser par exemple des méthodes de résolution de type Gradient Conjugué.

Dans le paragraphe suivant, nous traitons deux cas particuliers du problème ***(P)*** de manière plus géométrique.

II-3 Particularités géométriques des cas p-n = 1 ou 2

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons au problème de faisabilité d'un mélange à n spécifications avec une base de p produits dans le cas où p-n égal 1 ou 2. L'intéret de ces deux cas est qu'ils permettent d'une part, de visualiser la fonction Volume(Z_p^Λ) sur l'ensemble U_M, notamment au voisinage de l'optimum, et d'autre part, de mettre en œuvre des méthodes d'optimisation adapteés à ces cas et plus simples qu'une méthode générale.

Le problème général d'optimisation (volume du convexe résidu maximal) qui est résolu dans $\mathbb{R}^p$ équivaut à un problème d'optimisation dans $\mathbb{R}^{p-n}$. (dans le cas p-n=1 (resp. p-n=2), le problème général se ramène à un problème d'optimisation convexe dans $\mathbb{R}$ (resp. $\mathbb{R}^2$)).

Soient $N_1,\ldots,N_p$ p vecteurs de $\mathbb{R}^n$ représentant les p produits de base, soit M un vecteur de $\mathbb{R}^n$ représentant le mélange; le problème est de maximiser le volume du convexe résidu.

Hypothèses :

- p est strictement supérieur à n ;
- Soient $N_1,\ldots,N_p \in \mathbb{R}^n$ tels que $\{N_1,\ldots,N_n\}$ soit une base de $\mathbb{R}^n$;
- il existe un vecteur μ de $\mathbb{R}^n$ tel que $\langle N_i.\mu \rangle > 0$, $\forall$ i=1 à p ;

Notations : On notera

- **N** la matrice carrée de dimension n formée des n premiers vecteurs de la base : $\mathbf{N}=(N_1\ N_2 \ldots\ N_n)$;
- **P** la matrice n × p-n formée des p-n derniers vecteurs de la base :

$$\mathbf{P}=(N_{n+1}\ N_{n+2} \ldots\ N_p);$$

- $L=\begin{pmatrix}\lambda_1\\ \vdots \\ \lambda_n\end{pmatrix}$ vecteur de $\mathbb{R}^n$;
- $\overline{L}=\begin{pmatrix}\lambda_{n+1}\\ \vdots \\ \lambda_p\end{pmatrix}$ vecteur de $\mathbb{R}^{p-n}$;
- $\Lambda=\begin{pmatrix}L\\ \overline{L}\end{pmatrix}$ vecteur de $\mathbb{R}^p$.
- $U_M = \{\Lambda=(\lambda_1,\ldots,\lambda_p) \in [0,1]^p\ ;\ \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i = M\}$, le domaine de faisabilité de M;

• $Z = Z(N_1,\ldots, N_p) = \{ R \in \mathbb{R}^n, R=\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i, 0\leq\lambda_i\leq 1 \}$ le convexe de mélange.

• soit $\Lambda=(\lambda_1,\ldots,\lambda_p) \in [0,1]^p$, $Z(\Lambda) = Z((1-\lambda_1).\ N_1,\ldots,(1-\lambda_p).\ N_p)$ convexe résidu.

• $V : \quad U_M \rightarrow \mathbb{R}$

$\Lambda \longmapsto \text{Volume}(Z(\Lambda))=V(\Lambda)$;

$$V(\Lambda) = \sum_{1\leq i1<\ldots<in\leq p} (1-\lambda_{i1}).(1-\lambda_{i2}).\ldots.(1-\lambda_{in}).|N_{i1}\ N_{i2}\ldots N_{in}|$$

$$= \sum_{\substack{I\subset\{1,\ldots,p\}\\ card(I)=n}} \Big(\prod_{k\in I}(1-\lambda_k)\Big).\Delta_I, \quad (1)$$

où Δ_I est la valeur absolue du déterminant de la matrice carrée $n \times n$ formée des n vecteurs N_k pour k appartenant à I.

Le problème ***(P)*** s'écrit alors :

$$\text{Trouver } \overline{\Lambda} \in U_M \text{ tel que } V(\overline{\Lambda})=\underset{\Lambda\in U_M}{\text{Max}}\ V(\Lambda). \qquad (Z)$$

$$\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i = M \Leftrightarrow \mathbf{N}.L+\mathbf{P}.\overline{L}=M \Leftrightarrow L=\mathbf{N}^{-1}.(M-\mathbf{P}.\overline{L})$$

donc les $\lambda_1,\ldots, \lambda_n$ s'expriment en fonction des $\lambda_{n+1},\ldots, \lambda_p$ sous la forme

$$\lambda_i =\alpha_i^0+\sum_{j=1}^{p-n} \alpha_i^j.\lambda_{n+j} \quad , \mathbf{N}^{-1}.M = \begin{pmatrix} \alpha_1^0 \\ \vdots \\ \alpha_n^0 \end{pmatrix} \text{ et } -\mathbf{N}^{-1}.\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \alpha_1^1 & \cdots & \alpha_1^{p-n} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_n^1 & \cdots & \alpha_n^{p-n} \end{pmatrix}$$

(par convention, on posera $\alpha_{i+n}^j = \begin{cases} 1 \text{ si } i=j \\ 0 \text{ si } i\neq j \end{cases}$ pour $1\leq i\leq p-n$ et $0\leq j\leq p-n$)

donc $V(\Lambda)$ est un polynôme à p-n variables $(\lambda_{n+1},\ldots,\lambda_p)$ et de degré n dont on cherche le maximum sur l'ensemble :

$$\overline{U_M} = \{ \overline{L} \in \mathbb{R}^{p-n} ; 0\leq\lambda_i\leq 1, \forall\, i \in \{n+1,\ldots,p\} ; 0\leq \alpha_i^0+\sum_{j=1}^{p-n} \alpha_i^j.\lambda_{n+j} \leq 1, \forall\, i \in \{1,\ldots,n\}\}$$

De la proposition I-2-3, nous en déduisons le corollaire suivant :

■ *Corollaire II-3-1* : La fonction de $\overline{U_M}$ dans $\mathbb{R}_+$ qui à Λ fait correspondre $\sqrt[n]{V(\Lambda)}$ est concave sur $\overline{U_M}$.

• *Cas p-n=1*

Dans le cas p-n=1, $\overline{U_M}$ est un intervalle fermé (éventuellement vide si M n'est pas faisable) inclus dans [0,1], la fonction volume sur $\overline{U_M}$ est un polynôme d'une seule variable (en λ_p) de degré inférieur ou égal à n :

$V(\Lambda)=F(\lambda_p)=a_0+a_1.\lambda_p+\ldots+a_n.\lambda_p^n$, avec $\lambda_i=\alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_p$ pour i=1 à p-1.

L'expression de $V(\Lambda)$ sous la forme (1) donne dans le cas p-n=1 :

$V(\lambda_p)=\sum_{i=1}^{p}\left[\prod_{j=1;\ j\neq i}^{p}(1-\alpha_j^0-\alpha_j^1.\lambda_p)\right].\Delta_i$, avec Δ_i valeur absolue du déterminant de la matrice formée des n vecteurs autres que N_i.

Dans ce cas, la résolution du problème (**Z**) devient

$$\text{Max } F(\lambda_p),\ \lambda_p \in [a,b] \qquad (\boldsymbol{Z1});$$

qui est en fait trouver le maximum d'un polynôme sur un intervalle donné.

Résolution du problème (***Z1***) :

1) Détermination de $\overline{U_M}=[a,b]$

- On calcule $\mathbf{N}^{-1}\cdot\mathbf{M}$ et $-\mathbf{N}^{-1}\cdot\mathbf{P}$ pour obtenir les expressions de $\lambda_1,\ldots,\lambda_n$ en fonction de λ_p.

$\lambda_i=\alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_p \Leftrightarrow \lambda_p=(\lambda_1-\alpha_i^0)/\alpha_i^1$

$\lambda_i \in [0,1] \Rightarrow \lambda_p \in [\beta_i, \gamma_i]$

si $\alpha_i^1<0$ $\beta_i=(1-\alpha_i^0)/\alpha_i^1$ et $\gamma_i=-\alpha_i^0/\alpha_i^1$

si $\alpha_i^1>0$ $\gamma_i=(1-\alpha_i^0)/\alpha_i^1$ et $\beta_i=-\alpha_i^0/\alpha_i^1$

en posant $[\beta_i, \gamma_i]=[0,1]$ on a :

$\overline{U_M}=\bigcap_{i=1}^{p}[\beta_i, \gamma_i]$, et soient a=Max β_i et b=Min γ_i

Si a>b, $\overline{U_M}=\emptyset$ et le mélange n'est pas faisable et le problème (*Z1*) n'a pas de solution.

2) Si $\overline{U_M}\neq\emptyset$, le problème (*Z1*) revient à maximiser une fonction sur un intervalle [a,b]. La fonction $\sqrt[n]{V}$ étant concave sur $\overline{U_M}$, la fonction F admet un maximum global sur [a,b] : le maximum de F sur [a,b] se détermine de manière exacte si l'équation $F(\lambda_p)=0$ le permet (par exemple pour n<5), sinon l'emploi d'une méthode approchée est nécessaire. La méthode de la Section Dorée est une méthode sûre et rapide et beaucoup plus simple à mettre en œuvre sur ce cas particulier.

Dans le cas de l'utilisation d'une méthode de Section Dorée, le calcul de $F(\lambda_p)$ se fait de la manière suivante :

- on aura au préalable calculé les p réels Δ_i, i=1 à p, ceux-ci ne dépendant pas de λ_p.
- soit λ_p, on calcule les valeurs $\mu_i = 1-\lambda_i = 1-\alpha_i^0-\alpha_i^1.\lambda_p$ et $\Pi=\prod_{i=1}^{p} \mu_i$

  i) si tous les μ_i sont différents de 0, alors $F(\lambda_p) = \frac{1}{\Pi} . \sum_{i=1}^{p} \mu_i.\Delta_i$.

  ii) s'il existe k tel que $\mu_k = 0$ alors $F(\lambda_p)=\Delta_k.\prod_{\substack{i=1\\ i\neq k}}^{p} \mu_i$.

dans les deux cas, pour une valeur de λ_p donnée, le calcul de $F(\lambda_p)$ se fait en $O(p.\log \frac{1}{\varepsilon})$ où ε est l'erreur tolérée dans la méthode de la Section Dorée.

Exemple :

n=3, p=4, $N_1=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$, $N_2=\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$, $N_3=\begin{pmatrix}3\\1\\0\end{pmatrix}$, $N_4=\begin{pmatrix}0\\1\\3\end{pmatrix}$, $M=\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$.

Les expressions de λ_1,λ_2 et λ_3 en fonction de λ_4 sont :

$\lambda_1=3.\lambda_4-\frac{1}{2}$, $\lambda_2=1-3.\lambda_4$ et $\lambda_3=\frac{1}{2}-\lambda_4$.

Les valeurs des Δ_k sont : $\Delta_1=6$, $\Delta_2=6$,$\Delta_3=2$,$\Delta_4=2$.

D'où l'expression du volume $V(\lambda_3) = 4.5 + 18.\lambda_3 - 36.\lambda_3^2$. On peut remarquer dans ce cas que le polynôme n'est pas de degré 3 mais de degré 2 seulement.

Les contraintes $\lambda_i \in [0,1]$ donne $\overline{U_M}=[\frac{1}{6},\frac{1}{3}]$.

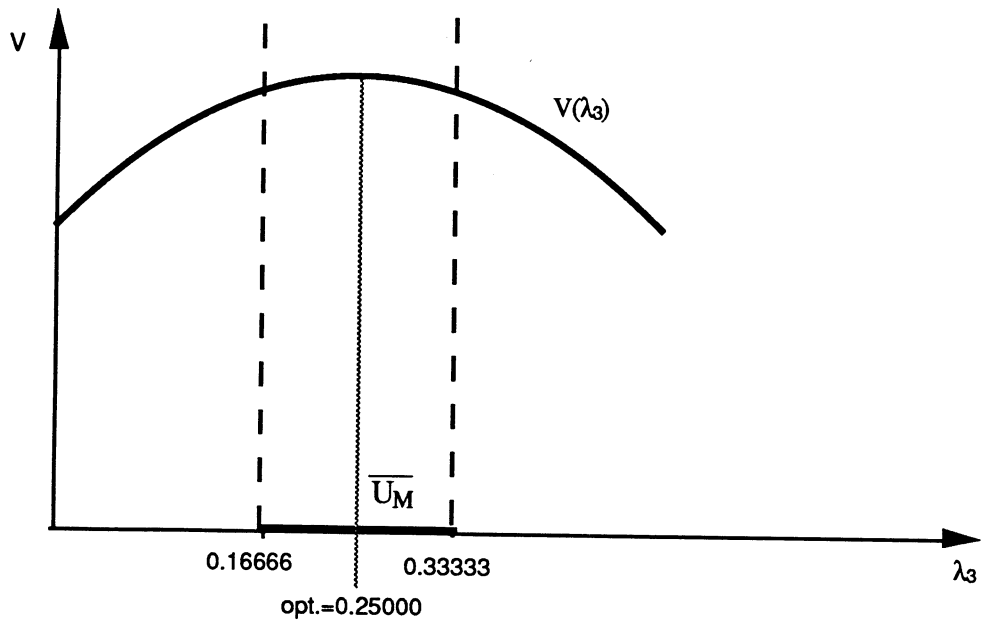


Figure I-6 - **Tracé de la fonction V sur le domaine de faisabilité $\overline{U_M}$**

On en déduit que V atteint son maximum sur $\overline{U_M}$ pour $\lambda_4 = \frac{1}{4}$.
D'où la décomposition optimale de M est : $\lambda_1=\lambda_2=\lambda_3=\lambda_4=\frac{1}{4}$.

• *Cas p-n=2*

Dans le cas p-n=2, $\overline{U_M}$ est un polygone fermé (éventuellement vide si M n'est pas faisable) inclus dans $[0,1]^2$, la fonction volume sur $\overline{U_M}$ est un polynôme de deux variables (en λ_{p-1} et λ_p) de degré inférieur ou égal à n :

$$V(\Lambda)=F(\lambda_{p-1},\lambda_p)= \sum_{\substack{0\le i,j\le n \\ i+j\le n}} a_{ij}.\lambda_{p-1}{}^i.\lambda_p{}^j \text{ , avec } \lambda_i = \alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_{p-1}+\alpha_i^2.\lambda_p \text{ pour i=1 à p-2.}$$

L'expression de $V(\Lambda)$ sous la forme (1) donne dans le cas p-n=2 :

$$V(\lambda_p) = \sum_{1\le i<j\le p} \Big[\prod_{\substack{1\le k\le p \\ k\ne i \text{ et } k\ne j}} (1-\alpha_k^0-\alpha_k^1.\lambda_{p-1}-\alpha_k^2.\lambda_p)\Big].\Delta_{ij}$$, avec Δ_{ij} valeur absolue du déterminant de la matrice formée des n vecteurs autres que N_i et N_j.

Dans ce cas, la résolution du problème (Z) devient

$$\text{Max } F(\lambda_{p-1},\lambda_p),\ (\lambda_{p-1},\lambda_p) \in \overline{U_M} \qquad (Z2)$$

qui est équivalent à trouver le maximum d'un polynôme à deux variables de degré n sur un polygone fermé borné.

Résolution du problème (Z2) :

1) Détermination de $\overline{U_M}$

- On calcule $\mathbf{N}^{-1}\cdot\mathbf{M}$ et $-\mathbf{N}^{-1}\cdot\mathbf{P}$ pour obtenir les expressions de $\lambda_1,\ldots,\lambda_n$ en fonction de λ_{p-1} et λ_p.

$\lambda_i = \alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_{p-1}+\alpha_i^2.\lambda_p \Rightarrow \overline{U_M} = \{(\lambda_{p-1},\lambda_p) \in [0,1]^2,\ 0\leq\alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_{p-1}+\alpha_i^2.\lambda_p\leq 1\} =$

$$\bigcap \begin{cases} [0,1]^2 \\ \bigcap_{i=1}^{p} \{(\lambda_p,\lambda_{p-1}),\alpha_i^0+\alpha_i^1.\lambda_{p-1}+\alpha_i^2.\lambda_p \geq 0\}\ . \\ \bigcap_{i=1}^{p} \{(\lambda_p,\lambda_{p-1}),1-\alpha_i^0-\alpha_i^1.\lambda_{p-1}-\alpha_i^2.\lambda_p \geq 0\} \end{cases}$$

A partir de cette dernière écriture, le polygone $\overline{U_M}$ est déterminé sous forme d'une liste ordonnée des sommets $S_1, S_2,\ldots, S_q$ se trouvant sur son contour :

on notera $\overline{U_M}$ #$(S_1, S_2,\ldots, S_q)$ (avec $q\leq 4+2.p$)

Quatre cas de figures peuvent se produire :

a) Si $\overline{U_M}$ est vide (pas de sommet), le mélange M n'est pas faisable.
b) Si $\overline{U_M}$ # (S_1), alors $\overline{U_M} = \{S_1\}$.
c) Si $\overline{U_M}$ # (S_1,S_2) alors $\overline{U_M} = [S_1,S_2]$.
d) Si $q\geq 3$, alors $\overline{U_M}$ est un polygone convexe dans le plan.

Dans le cas a), il n'y a pas de solution.
Dans le cas b), la solution est unique donc optimale.

Dans le cas c), $\overline{U_M}$ étant réduit à un segment de droite, le maximum de la fonction V peut être calculé par une méthode analogue au cas p-n=1 (par ex. Section Dorée).

Dans le cas d), il faut trouver le max d'une fonction définie sur un polygone fermé borné. La méthode utilisée pour calculer le maximum d'une fonction concave sur un domaine polygonal borné est une méthode de type Section Dorée.

Méthode Section Dorée dans $\mathbb{R}^2$:

On considère la fonction $G(y)=\text{Max } F(x,y)$, $(x,y) \in \overline{U_M}$.

Rechercher le maximum de F sur $\overline{U_M}$ équivaut à rechercher le maximum de G sur [a,b] où [a,b] est la projection de $\overline{U_M}$ sur l'axe Oy du plan. Le calcul de G pour un y donné se fait en calculant le maximum de la fonction $F_y(x)=F(x,y)$ pour $x \in [\alpha,\beta]$ où $[(\alpha,y),(\beta,y)]= \overline{U_M} \cap \{(x,y),\ x \in \mathbb{R}\}$.

Le calcul de $F(\lambda_{p-1},\lambda_p)$ se fait de la manière suivante :

- on aura au préalable calculé les p.(p-1)/2 réels Δ_{ij}, $1 \le i < j \le p$, ceux-ci ne dépendant pas de λ_{p-1} et λ_p.

- soit $(\lambda_{p-1},\lambda_p)$, on calcule les valeurs $\mu_i = 1-\lambda_i = 1-\alpha_i^0-\alpha_i^1.\lambda_{p-1}-\alpha_i^2.\lambda_p$ et $\Pi=\prod_{i=1}^{p} \mu_i$

i) si tous les μ_i sont différents de 0, alors $F(\lambda_{p-1},\lambda_p)=\frac{1}{\Pi} . \sum_{1 \le i < j \le n} \mu_i.\mu_j.\Delta_{ij}$.

ii) s'il existe k tel que $\mu_k = 0$ alors $F(\lambda_{p-1},\lambda_p)= \sum_{\substack{1 \le i \le p \\ i \ne k}} [\prod_{\substack{1 \le j \le p \\ j \ne i,\ j \ne k}} \mu_j].\Delta_{ik}$.

dans les deux cas, pour un couple $(\lambda_{p-1},\lambda_p)$ donné, le calcul de $F(\lambda_{p-1},\lambda_p)$ se fait en $O(p^2.\log \frac{1}{\varepsilon})$.

Exemple : n=3, p=5, $N_1=\begin{pmatrix}1\\1\\0\end{pmatrix}$, $N_2=\begin{pmatrix}0\\1\\1\end{pmatrix}$, $N_3=\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$, $N_4=\begin{pmatrix}0\\0\\1\end{pmatrix}$, $N_5=\begin{pmatrix}1\\0\\0\end{pmatrix}$, $M=\begin{pmatrix}2\\2\\2\end{pmatrix}$.

- les expressions de λ_1,λ_2 et λ_3 en fonction de λ_4 et λ_5 sont :

$$\lambda_1=\lambda_4,\ \lambda_2=\lambda_5,\ \lambda_3=2-\lambda_4-\lambda_5 ;$$

- les valeurs des Δ_{ij} sont :

$$\Delta_{12}=1, \Delta_{13}=1, \Delta_{14}=0, \Delta_{15}=1, \Delta_{23}=1, \Delta_{24}=1, \Delta_{25}=0, \Delta_{34}=1, \Delta_{35}=1, \Delta_{45}=1 ;$$

- l'expression de $V(\Lambda)$ comme polynôme en λ_4 et λ_5 est :

$$V(\Lambda)=F(\lambda_4,\lambda_5)=2.\lambda_4+2.\lambda_5-2.\lambda_4^2-4.\lambda_4.\lambda_5-2.\lambda_5^2+2.\lambda_4.\lambda_5^2+2.\lambda_4^2.\lambda_5 ;$$

- les contraintes $0\leq \lambda_i \leq 1$ donnent le domaine de faisabilité $\overline{U_M}$ sous la forme du polygone suivant :

$$\overline{U_M} \# \{(1,1),(1,0),(0,1)\}$$

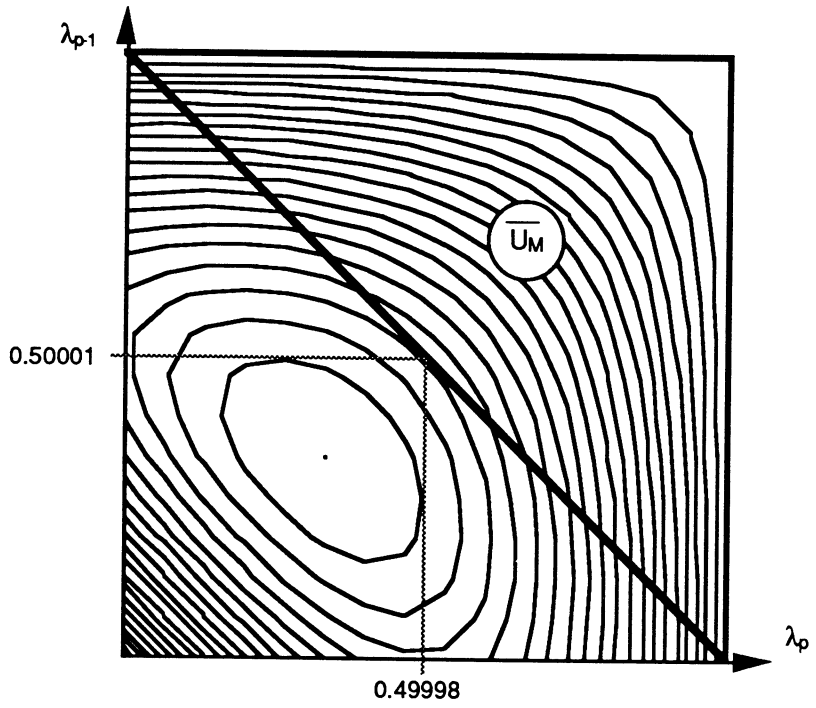


Figure II-7 - **Domaine de faisabilité et courbes de niveau de la fonction F**

Le calcul de l'optimum de F sur $\overline{U_M}$ donne $\overline{\Lambda}=(\frac{1}{2},\frac{1}{2},1,\frac{1}{2},\frac{1}{2})$.

On remarque sur cet exemple que la racine carrée de la fonction F est bien concave sur le domaine alors que la fonction F ne l'est pas.

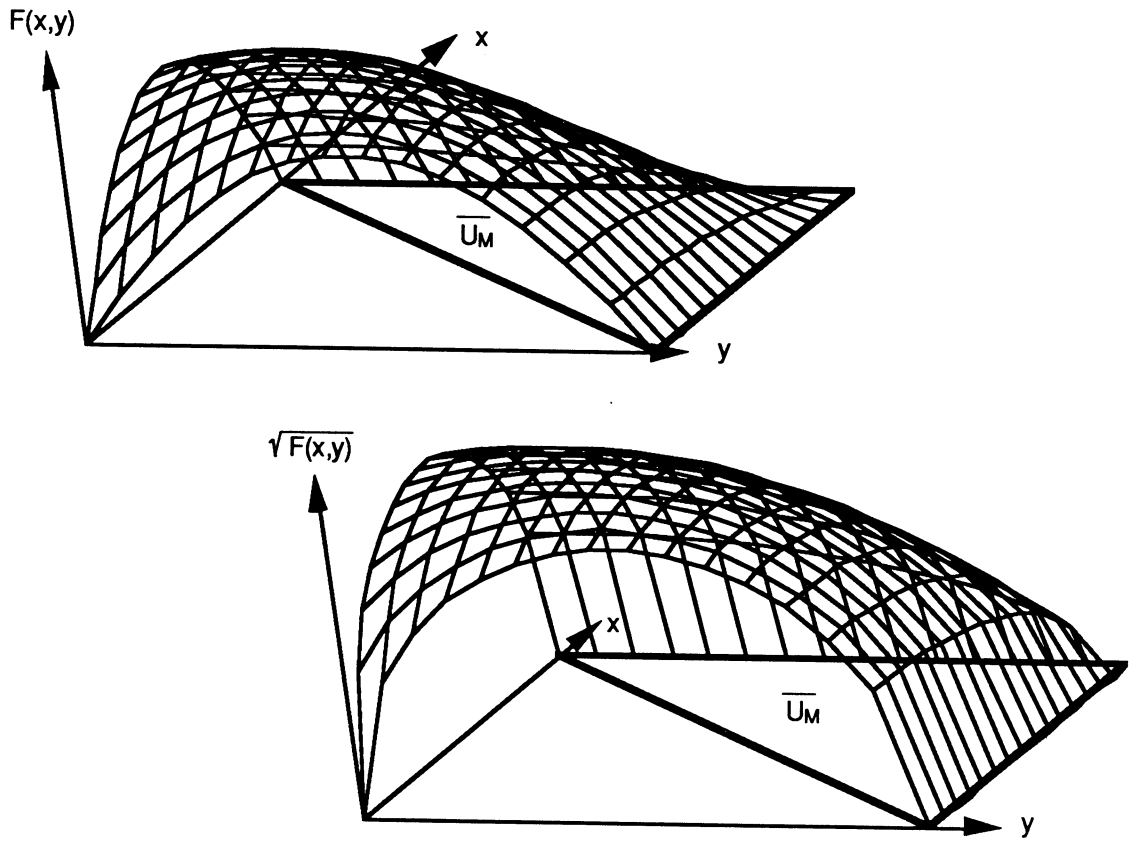


Figure II-8 - **Tracés des fonctions F et $\sqrt{F}$**

Remarque : dans ces deux cas, l'ensemble de faisabilité du mélange est construit explicitement. On peut alors envisager une méthode permettant de choisir un point dans $\overline{U_M}$ et calculer ainsi une décompostion du vecteur M. L'avantage de ceci serait de pouvoir choisir parmi une infinité de solutions, une autre solution que celle donnée par une méthode d'optimisation afin de prendre en compte d'autres contraintes.

II-4 Coupes et intersections

Comme nous le verrons par la suite, notamment dans la présentation du logiciel MBAC dans le chapitre III, nous aurons besoin d'outils rapides afin de pouvoir déterminer si un mélange est faisable et si oui, déterminer certaines décompositions, si possible le plus proche d'un critère optimal fixé.

Nous aurons aussi besoin par la suite de déterminer des ensembles de mélanges faisables.

Ces opérations du point de vue géométrique consiste à rechercher l'appartenance d'un point dans un zonoèdre ou à déterminer l'intersection d'une droite ou d'un plan avec un zonoèdre. Toutes ces opérations peuvent être réalisées à partir d'intersections de plans avec des polyèdres ou polygones convexes dans $\mathbb{R}^3$.

Nous montrerons dans ce paragraphe que certains algorithmes sont particulièrement bien adaptés à la structure particulière des zonoèdres et permettent d'obtenir des méthodes rapides.

Pour commencer, nous faisons quelques rappels sur des algorithmes de base concernant les polyèdres convexes.

• *Intersection plan / polyèdre convexe*

Dans un premier temps, nous faisons un rappel sur l'algorithme d'intersection entre un plan Π et polyèdre convexe C, basé sur une structure de représentation par bords. Ce type d'algorithme est basé sur le suivi d'intersection. La méthode consiste dans un premier temps à rechercher un point de $\partial C \cap \Pi$. Pour cela, on cherche, à partir d'un sommet quelconque de C et par un parcours sur des arêtes adjacentes de se rapprocher le plus possible de Π jusqu'à trouver une arête intersectée par le plan Π.

Une fois cette arête trouvée, par un suivi sur les faces intersectées, on détermine entièrement les arêtes formant le polygone intersection. La complexité de cet algorithme est, au pire, linéaire par rapport au nombre de sommets du polyèdre C.

L'algorithme correspondant est rappelé en annexe.

• *Intersection droite / polyèdre*

L'intersection d'un polyèdre convexe et d'une droite est une application de l'intersection plan / polyèdre convexe. Pour rappel, il suffit de définir la droite comme intersection de deux plans perpendiculaires Π_1 et Π_2, calculer C_1 le polygone intersection de C et Π_1 puis calculer C_2 segment intersection de C_1 et Π_2 (C_1 et C_2 peuvent être éventuellement vides).

L'algorithme correspondant est rappelé en annexe.

• *Appartenance d'un point dans un polyèdre convexe*

Deux méthodes sont couramment utilisées pour résoudre ce problème :

Méthode 1 : Supposons un polyèdre convexe connu comme intersection de demi-espaces fermés (ceci est le cas lorsque C est représenté par une structure de type Arête-Ailée). L'appartenance au polyèdre équivaut à l'appartenance à chaque demi-espace. L'algorithme permettant de déterminer l'appartenance à un polyèdre convexe est donc linéaire par rapport au nombre de faces d'un polyèdre convexe (ou au nombre de sommets car il y a équivalence entre nombre de faces, d'arêtes et de sommets d'un polyèdre convexe) .

Méthode 2 : Cette méthode est une application de l'algorithme d'intersection plan-polyèdre : un M point est l'intersection de trois plans Π_1, Π_2 et Π_3 perpendiculaires entre eux. On calcule C_1 polygone, intersection de C et Π_1 puis C_2 intersection de C_1 et Π_2 enfin C_3 intersection de C_2 et Π_3; si C_3 est non vide le point M appartient au polyèdre convexe.

• *Intersection plan / zonoèdre*

■ *Proposition II-4-1* : Si le plan Π contient le centre de symétrie du zonoèdre Z_p, alors l'intersection $Z_p \cap \Pi$ est un zonogone dans $\mathbb{R}^3$.

• preuve : toute intersection entre zonoèdre et plan est un polygone convexe. Si de plus, le plan passe par le centre de symétrie, le polygone intersection est à symétrie centrale donc est un zonogone. □

• *Appartenance d'un point à un zonoèdre*

La méthode correspondant aux polyèdres convexes peut être envisagée. Cependant la spécificité du zonoèdre nous amène à considérer une méthode plus rapide, basée sur l'intersection par une droite, cette méthode permettant, de surcroît, d'obtenir une décomposition du mélange sur la base de vecteurs.

Considérons le zonoèdre Z_p et la demi-droite Δ_M issue de l'origine O et passant par M. Alors suivant l'intersection I_M entre Z_p et Δ_M, nous pouvons déduire certains résultats sur M : soit l'intersection est réduite à O alors le mélange n'est pas faisable, soit l'intersection I_M est un segment [O M'].

■ *Définition II-4-2* : Si M appartient au segment [O,M'] le mélange M sera dit ***faisable*** (***en totalité***) sinon il sera dit ***partiellement faisable***.

Le point M' se trouvant sur ∂Z_p, une décomposition Λ peut être trouvée facilement (dans certains cas cette décomposition est unique) (cf. corollaire I-1-12). Si le point M est totalement faisable $M=\alpha.M'$ avec $\alpha \in]0,1]$ donc une décomposition possible pour M est donnée par $\alpha.\Lambda$.

• *Coupes parallèles*

Une application de l'algorithme d'intersection polyèdre-plan est la visualisation de zonoèdres par l'intermédiaire de coupes parallèles par une série de plans parallèles entre eux.

Afin de montrer la rapidité de l'algorithme utilisant une structure de type Arête-Ailée, nous allons faire un comparatif avec deux autres méthodes permettant la détermination de coupes parallèles d'un zonoèdre.

La première méthode, due à B. LACOLLE, repose sur le principe de dualité : l'intersection d'un polytope avec un plan de dimension deux est équivalent à l'enveloppe convexe de points de $\mathbb{R}^2$. L'algorithme est présenté en détail dans [LAC90 - pages 188 à 193].

La deuxième méthode, développée par N. ODEH, calcule l'intersection d'un zonoèdre et d'un plan par des résolutions successives d'un problème d'optimisation par Lagrangien. L'algorithme est présenté en détail dans [ODE90 - pages 132 à 158].

Le tableau ci-dessous propose un comparatif des trois méthodes, en considérant le temps d'exécution des algorithmes d'une part et, la place mémoire utilisée d'autre part.

La base de vecteurs utilisée est la base B_p^1 utilisée dans le paragraphe I-4, les plans de coupes étant $\Pi_\alpha = \{x=\alpha\}$

Les valeurs p et ni sont respectivement le nombre de vecteurs de base formant le zonoèdre et le nombre d'intersections calculées. Le temps t1 représente le temps de construction de la structure de données nécessaire à l'algorithme d'intersection. La place mémoire indiquée (m) est la place occupée par cette structure de données, elle n'inclut pas le stockage des différentes intersections calculées par la suite. Le temps t2 représente le temps de calcul des ni intersections.

Ce comparatif montre que la rapidité du calcul des intersections dépend de la structure de données utilisée.

Bien qu'il soit le plus coûteux en place mémoire, l'algorithme basé sur la structure de type

Arête-Ailée s'avère être beaucoup plus rapide dans le calcul d'intersection et plus robuste numériquement que les deux autres

		Algorithme Structure Arête-Ailée			Algorithme par dualité			Algorithme par optimisation		
p	ni	m	t1	t2	m	t1	t2	m	t1	t2
10	10	8900	0,18	0,35	5464	0,17	0,88	1304	0,03	4,43
	25			0,93			2,35			10,82
	50			1,92			4,77			22,75
	100			3,82			9,62			49,03
25	10	58300	1,27	0,98	26064	1,58	5,50	6104	0,13	49,18
	25			2,92			13,86			117,5
	50			5,28			28,52			240,7
	100			10,63			60,43			504,0
50	10	256500	5,13	2,08	147064	10,52	23,20	22104	0,53	303,5
	25			5,98			57,13			775,2
	50			11,70			118,7			1591
	100			23,70			241,0			3328

Figure II-9 - **Comparatif des trois méthodes d'intersection**

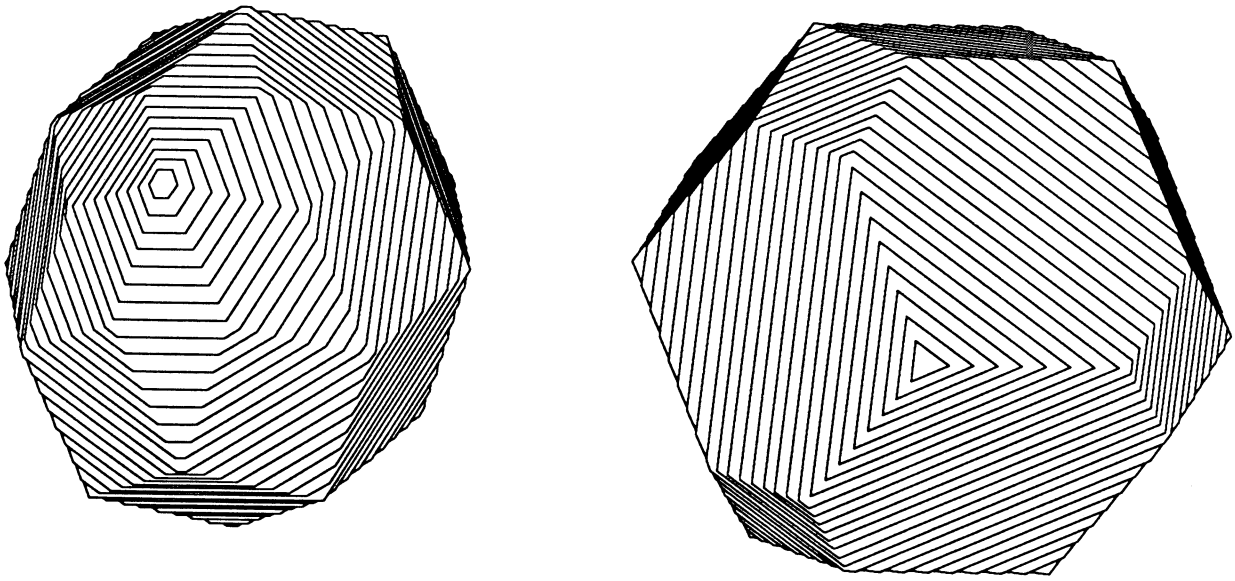


Figure II-10 - **Visualisation de zonoèdres par coupes parallèles**

II-5 Des mélanges binaires à la méthode de la corde pour les zonoèdres

Nous avons vu dans le paragraphe II-3 que le problème de détermination de la décomposition optimale d'un mélange sur une base de vecteurs revient à un problème classique d'optimisation convexe.

Cependant si cette méthode présente l'avantage d'être robuste et rapide pour des valeurs de n et p peu élevées, elle présente l'inconvénient suivant : dans la pratique (en raffinerie), on a souvent besoin d'avoir plusieurs solutions afin de prendre en compte des contraintes supplémentaires difficiles à inclure dans la méthode d'optimisation : les techniciens chargés de la fabrication tiennent compte de ces contraintes supplémentaires de manière heuristique grâce à leur expérience.

L'idée a été de développer une méthode géométrique qui puisse fournir plusieurs solutions en restant proche du critère d'optimalité.

• *Mélanges binaires*

■ *Définition II-5-1* : On appelle ***mélange binaire***, un mélange caractérisé par deux paramètres, i.e. l'espace des phases est représenté par $\mathbb{R}^2$ ou une partie de $\mathbb{R}^2$.

■ *Proposition II-5-2* : Soit le cas général n quelconque et soit M un mélange faisable. Alors tout convexe résiduel Z_p^Λ est inclus dans l'ensemble $Z_p \cap Z_p\text{-}M$.

• preuve :

a) Z_p^Λ est inclus dans Z_p par définition.

b) Soit R un point de Z_p^Λ ; R s'écrit $\sum_{i=1}^{p} \theta_i.(1-\lambda_i).N_i$ avec $\theta_i \in [0,1]$ pour i de 1 à p

$R+M = \sum_{i=1}^{p} (\theta_i.(1-\lambda_i)+\lambda_i).N_i$ or $0 \leq \theta_i.(1-\lambda_i)+\lambda_i \leq (1-\lambda_i)+\lambda_i=1$

donc $R+M \in Z_p \Leftrightarrow R \in Z_p\text{-}M$. □

■ *Proposition II-5-3* [SLA86] : Soient $N_1,\ldots,N_p$ p vecteurs de $\mathbb{R}^2$, Z_p le zonoèdre associé et M un vecteur . Alors le mélange M est faisable si et seulement si l'ensemble $Z_p \cap Z_p\text{-}M$ est non vide et contient l'origine. De plus, cet ensemble est le plus grand convexe résidu possible et

correspond donc à la décomposition optimale de M (solution du problème ***(P)***).

Nous verrons par un exemple plus loin que cette propriété n'est plus vraie en dimension supérieure.

■ *Corollaire II-5-4* [SLA86][LAC91]: La décomposition optimale d'un mélange binaire peut être trouvée en O(log p) si les vecteurs N_i sont préalablement triés. De manière géométrique, la décomposition optimale s'interprète ainsi :

si M est faisable, on peut placer un vecteur $\overrightarrow{M_1 M_2}$ équipollent à $\overrightarrow{OM}$ de manière à ce que M_1 et M_2 soient sur le bord du zonogone Z_p ($\overrightarrow{M_1 M_2}$ en dit en position de ***corde***). M_1 et M_2 s'écrivent alors :

$$M_1 = (1-\lambda_i).N_i + \sum_{k<i} N_k \text{ et } M_2 = \lambda_j.N_j + \sum_{k<j} N_k$$

d'où l'écriture optimale de M sous la forme :

$$M = \lambda_i.N_i + \sum_{i<k<j} N_k + \lambda_j.N_j.$$

Remarque : On peut aussi placer un vecteur $\overrightarrow{M_3 M_4}$ équipollent à $\overrightarrow{M_1 M_2}$ en position de corde avec :

$$M_3 = (1-\lambda_j).N_j + \sum_{k>j} N_k \text{ et } M_4 = \lambda_i.N_i + \sum_{k>i} N_k,$$

donnant la même décomposition optimale pour le mélange M.

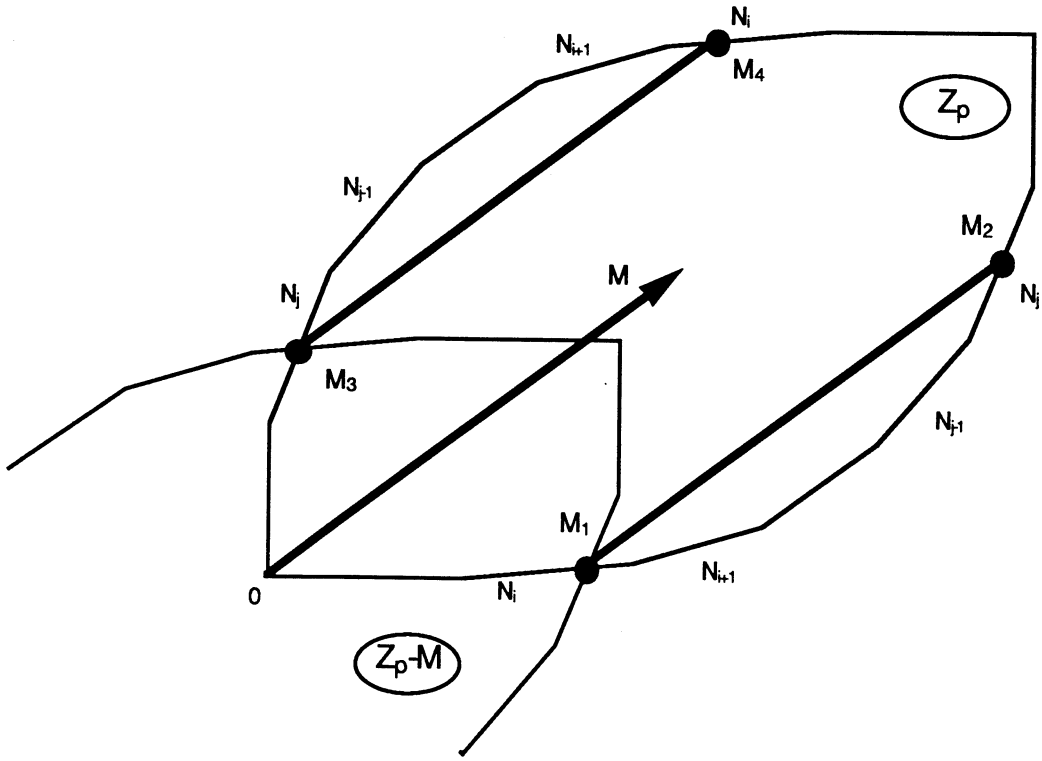


Figure II-11 - **Décomposition optimale d'un mélange binaire sur le bord du zonogone**

La figure ci-dessus montre les deux vecteurs équipollents à M en position de corde. Les points M_1 et M_3 correspondent à l'intersection entre ∂Z_p et ∂Z_p-M.

• *Méthode de la corde*

Préliminaire : Pour n=2, le fait que $Z_p \cap Z_p$-M soit le plus grand convexe de mélange résidu induit une décomposition optimale "géométrique" (décomposition obtenue en mettant en position de corde un vecteur équipollent au mélange M).

Or dès que l'on passe en dimension supérieure, la propriété sur $Z_p \cap Z_p$-M n'est plus vraie et ne permet plus de déterminer géométriquement la décomposition optimale (au sens du volume du convexe résidu). Il est en effet difficile, voire impossible, de donner une condition portant sur les vecteurs de base et le mélange M pour que $Z_p \cap Z_p$-M soit un convexe de mélange ou pour qu'il existe un plus grand convexe de mélange résidu inclus dans $Z_p \cap Z_p$-M

et contenant tous les autres convexes résidus.

L'exemple suivant montre que $Z_p \cap Z_p\text{-}M$ n'est pas un zonoèdre et qu'aucun convexe de mélange résidu n'est contenu dans aucun autre.

Exemple : $N_1=\begin{pmatrix}-1\\-1\\1\end{pmatrix}$, $N_2=\begin{pmatrix}-1\\1\\1\end{pmatrix}$, $N_3=\begin{pmatrix}1\\-1\\1\end{pmatrix}$, $N_4=\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$, $M=\begin{pmatrix}0\\0\\2\end{pmatrix}$

L'ensemble $Z_p \cap Z_p\text{-}M$ est un octaèdre qui n'est pas un zonoèdre (voir figure II-12).

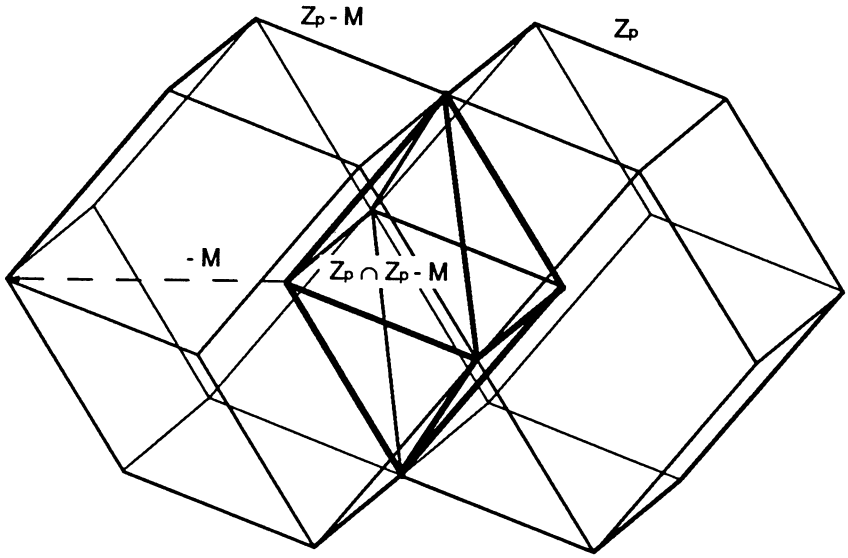


Figure II-12 - **Exemple de $Z_p \cap Z_p$-M non zonoèdre**

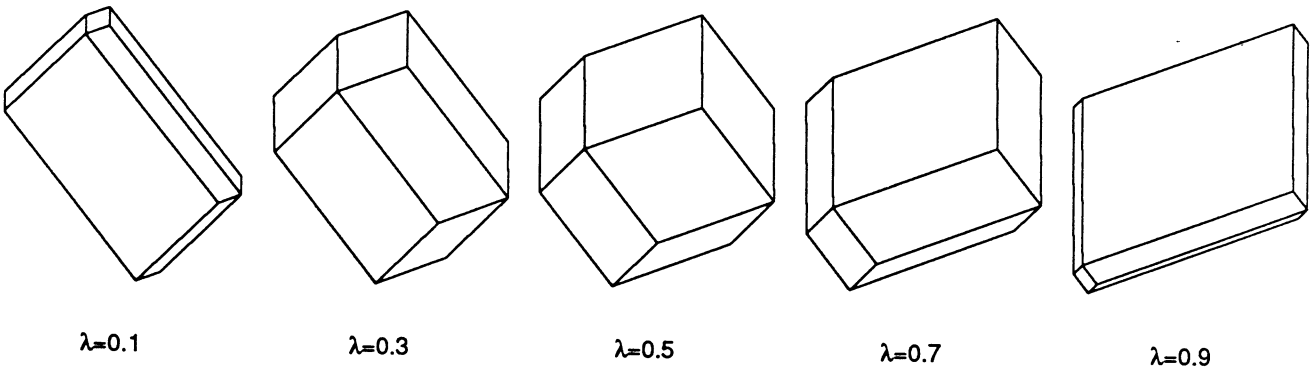


Figure II-13 - **Différents convexes résidus Z_p^Λ**

M se décompose sur les vecteurs de base uniquement sous la forme suivante :

$$M = \lambda.(N_1+N_4)+(1-\lambda).(N_2+N_3) \text{ avec } \lambda \in [0,1]$$

et il n'existe pas de relation d'inclusion entre deux convexes de mélange résidus Z_p^{Λ} et $Z_p^{\Lambda'}$.($\Lambda=(\lambda,1-\lambda,1-\lambda,\lambda)$ avec $\lambda \in [0,1]$) : la figure II-13 présente pour différentes valeurs de λ les convexes de mélange résidus correspondants.

De manière intuitive, il faut utiliser en priorité les vecteurs de base les plus proches (au sens vectoriel) du vecteur M pour avoir ensuite, avec la base de vecteurs résiduelle, la plus grande souplesse pour fabriquer les mélanges futurs (en théorie de la séparation, on dira que l'*état de séparation* du système formé par la base résiduelle doit être le plus grand possible). Ainsi, dans le cas des mélanges binaires, la méthode de la corde donnant la solution optimale en utilisant les vecteurs de base les plus proches du vecteur M, on peut espérer que la même méthode appliquée au cas n=3 donnera des décompositions utilisant des vecteurs de base *assez* proches de M et conservant ainsi une plus grande capacité pour faire des mélanges par la suite.

Nous supposons dans cette partie que le zonoèdre Z_p associé aux p vecteurs $\{N_1,N_2,\ldots,N_p\}$ a été construit sous la forme de la structure de données F.E.E.L. (cf. § I-3).

Le principe pour déterminer une décomposition d'un mélange faisable M est le même que pour le cas n=2 :

- un vecteur $\overrightarrow{M_1 M_2}$ équipollent à $\overrightarrow{OM}$ est placé en position de corde, i.e. de manière à ce que M_1 et M_2 soient sur le bord du zonoèdre Z_p.
- on cherche M_1 (resp. M_2) sous la forme $\sum_{i \in I_1} N_i + \sum_{j \in J_1} \lambda_j.N_j$ avec $\lambda_j \in [0,1]$ pour $j \in J_1$.(resp. $\sum_{i \in I_2} N_i + \sum_{j \in J_2} \lambda_j.N_j$ avec $\lambda_j \in [0,1]$ pour $j \in J_2$).
- une décomposition de M est obtenue par la décomposition de M_1 ôtée de celle de M_2.

Trois remarques doivent être cependant faites :

1) alors que le cas n=2 ne donne qu'une seule décomposition (optimale de plus), le cas n=3 peut donner une infinité de décomposition pour M puisque le vecteur $\overrightarrow{M_1 M_2}$ peut être positionné en position de corde d'une infinité de manière.

2) parmi les décompositions de M certaines peuvent être incohérentes, i.e. donner des valeurs de λ_i strictement négatives (cf. exemple 3 ci-dessous).

3) afin d'éviter les cas dégénérés, nous supposons qu'il n'existe pas trois vecteurs de base coplanaires et que le mélange M n'est pas la somme partielle de deux vecteurs de base,

c'est à dire que M ne peut pas s'écrire sous la forme $\lambda_i.N_i+\lambda_j.N_j$. Si cette hypothèse est restrictive, elle correspond cependant au cas réel.

Rappel : Soit F une face du zonoèdre Z_p. Soit η le vecteur normal à la face F et orienté vers l'extérieur de celle-ci. Alors F s'écrit sous la forme suivante :

$$F = \sum_{N_i.\eta=0} [0,N_i] + \sum_{N_i.\eta>0} N_i = Z_F + S_F,$$

i.e. F est un zonogone Z_F translaté d'un certain vecteur S_F.

Donc tout point S de la face F s'écrit sous la forme :

$$S = \sum_{N_i.\eta=0} \lambda_i.N_i + \sum_{N_i.\eta>0} N_i \ .$$

Nous pouvons remarquer que Z_F étant un zonogone, les valeurs λ_i peuvent être déterminées de manière optimale.

De plus s'il n'existe pas trois vecteurs coplanaires dans la base de vecteurs alors tout point S de ∂Z s'écrit :

$$S = \sum_{(N_i,\eta)>0} N_i + \lambda_k.N_k + \lambda_l.N_l \ . \text{ (cf. corollaire I-1.13).}$$

■ *Corollaire II-5-5* : Soit $M \in Z_p$, il existe S_1 et $S_2 \in \partial Z_p$ (frontière ou bord de Z_p) tels que $S_2=S_1+M$.

• la preuve de ce corollaire est évidente. □

Soient $S_1 \in F_1$ de normale η_1 : $S_1 = \sum_{N_i.\eta_1>0} N_i + \sum_{N_i.\eta_1=0} \lambda_i.N_i$ et

$S_2 \in F_2$ de normale η_2 : $S_2 = \sum_{N_j.\eta_2>0} N_j + \sum_{N_j.\eta_2=0} \lambda_j.N_j$.

Donc $M=S_2-S_1= \sum_{N_j.\eta_2>0} N_j + \sum_{N_j.\eta_2=0} \lambda_j.N_j - \sum_{N_i.\eta_1>0} N_i - \sum_{N_i.\eta_1=0} \lambda_i.N_i = \sum_{k=1}^{p} \lambda_k.N_k$.

Les valeurs de λ_k obtenues peuvent être négatives mais il existe toujours un point S_1 de ∂Z_p tel que $S_1+M=S_2 \in \partial Z_p$ donnant une décomposition de M sur les vecteurs de base appartenant à U_M.

■ *Proposition II-5-6* : L'ensemble **B** est à symétrie centrale, son centre de symétrie est le point $\frac{1}{2}(\sum_{i=1}^{n} N_i - M) = \frac{1}{2}(S_p - M)$.

• preuve : Soit $T \in \mathbf{B} . \Leftrightarrow T \in \partial Z_p$ (1) et $T \in \partial Z_p - M$ (2)
(1) $\Leftrightarrow S_p - T \in \partial Z_p$ par symétrie de $Z_p \Leftrightarrow S_p - M - T \in \partial Z_p - M$
(2) $\Leftrightarrow T + M \in \partial Z_p$ par définition de B $\Leftrightarrow S_p - M - T \in \partial Z_p$ par symétrie de Z_p
donc $S_p - M - T \in \mathbf{B}$. □

De cette proposition, nous en déduisons qu'il suffit de ne rechercher que la moitié de B, l'autre se déduisant par symétrie.

L'algorithme présenté ci-dessous détermine l'ensemble **B** des points S de ∂Z_p tels S+M appartienne aussi à ∂Z_p. Le principe est de rechercher un premier point de **B** puis par adjacences successives la moitié de l'ensemble **B**. Ensuite par symétrie, l'autre moitié est déterminée.

Nous supposons que O est l'origine de Z_p.

■ *Proposition II-5-7* : L'ensemble **B** des points $T \in \partial Z_p$ vérifiant $T+M \in \partial Z_p$ forment une suite de segments de droite $[T_i, T_{i+1}], 0 \leq i < 2q$ autour de Z_p.

• preuve : Soient M un mélange faisable et l'ensemble $\overline{Z} = Z_p \cap Z_p - M$. Cet ensemble est un polyèdre convexe non vide. Considérons les points de la frontière de $\overline{Z}$ qui appartiennent à ∂Z_p et $\partial Z_p - M$. Ces points sont dans le cas général un ensemble de faces et d'arêtes du bord de $\overline{Z}$. Mais l'hypothèse faite sur M et les vecteurs de base N_i implique qu'aucune face de Z_p ne contient un vecteur équipollent à M. Donc l'intersection entre ∂Z_p et $\partial Z_p - M$ ne peut se faire qu'entre faces non coplanaires entre elles et donc elle est uniquement composée d'arêtes. Ceci montre que **B** est une suite de segments de droite. Du fait de la symétrie centrale, le nombre de segments formant **B** est pair. □

Les figures II-14 et II-16,II-17 et II-18 représentent un zonoèdre sous forme *fil de fer* en trait fin (seules les arètes vues sont représentées), l'ensemble **B** et son translaté **B**+M en trait gras (les parties en pointillé représentent les parties cachées de ces deux ensembles) ainsi qu'un vecteur M' en position de corde et équipollent à M (trait fin pointillé).

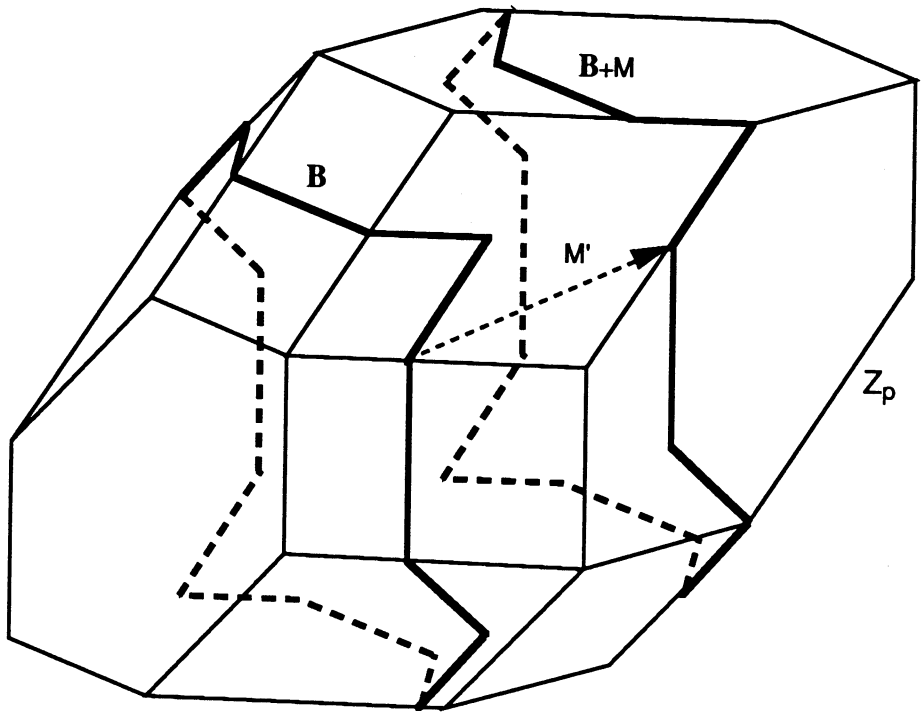


Figure II-14 - **Ensembles B et B+M**

De la proposition précédente, nous en déduisons le résultat suivant :

■ *Corollaire II-5-8* : Soit Λ_i et Λ_{i+1} les décompositions de M associées respectivement à T_i et T_{i+1}. Alors à tout point T de **B** appartenant au segment $[T_i,T_{i+1}]$, $T=\alpha.T_i+(1-\alpha).T_{i+1}$ et la décomposition Λ associée à T est égale à $\alpha.\Lambda_i+(1-\alpha).\Lambda_{i+1}$.

Les points T_i sont tels que T_i ou T_i+M appartiennent à une arête de Z_p.

La première étape de l'algorithme consiste à rechercher un point T_0 appartenant à une arête A0 de Z_p tel que T_0+M appartienne à une face F_2 de Z_p.

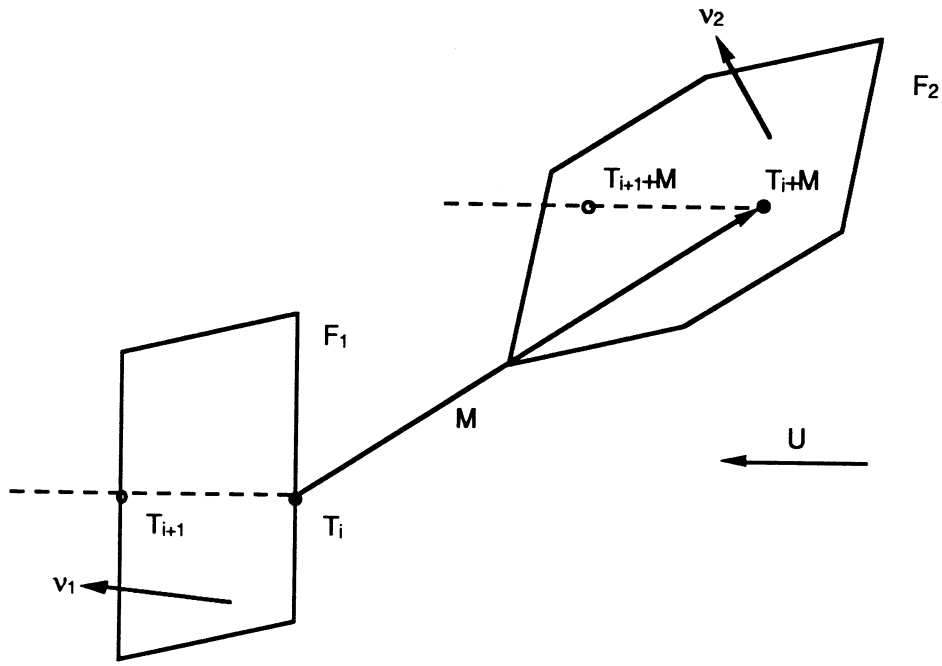


Figure II-15 - **Détermination de T_{i+1} à partir de T_i**

Considérons un plan Π comprenant le point M et les deux pôles O et S_p du zonoèdre Z_p. L'intersection de Z_p et du plan Π est un zonogone Z_M dans $\mathbb{R}^3$ (cf. proposition II-4-1). Nous sommes alors ramenés à un problème dans $\mathbb{R}^2$, i.e. trouver la décomposition d'un mélange sur une base de vecteurs coplanaires.

Soient les points S_1 et S_2 appartenant tous deux à la frontière de Z_M et tels que $S_1+M=S_2$.

Alors S_1 (resp. S_2) appartient à une face F_1 de normale extérieure ν_1 (resp. F_2 de normale extérieure ν_2) de Z_p.

On recherche alors T_0 sous la forme $S_1+a.U$ où U est un vecteur orthogonal à ν_1 et ν_2. (cf. figure II-15)

La seconde étape de l'algorithme consiste, par adjacences successives, à déterminer certains points T_i de **B**, avec T_i ou T_i+M ayant la propriété de se trouver sur une arête de Z_p :

Rechercher une arête A_0 contenant un point T_0 telle que $T_0+M \in \partial Z_p$.
Soit F_1 une face adjacente à A_0 et F_2 la face contenant T_0+M
Soit $T=T_0$
répéter
    soit ν_1 et ν_2 les vecteurs normaux respectivement à F_1 et F_2;

soit U le vecteur égal à $\frac{v_1 \wedge v_2}{\|v_1 \wedge v_2\|}$;

déterminer d_1 maximum (resp. d_2 maximum) tel que $T+d_1.U$ (resp. $T+M+d_2.U$) appartienne à F_1 (resp. à F_2).

si $d_1<d_2$ alors

soit A l'arête du contour de F_1 sur laquelle se trouve $T+d_1.U$;

remplacer F_1 par l'autre face de A;

remplacer T par $T+d_1.U$;

sinon

soit A l'arête du contour de F_2 sur laquelle se trouve $T+M+d_2.U$;

remplacer F_2 par l'autre face de A;

remplacer T par $T+d_2.U$;

jusqu'à ce que $T=S_p-M-T_0$

Remarque : lorsque le vecteur U est colinéaire à un vecteur de base, les décompositions associées aux points T_i et T_{i+1} sont les mêmes ainsi que pour tout point du segment $[T_i,T_{i+1}]$. Dans le premier exemple ci-dessous, tous les segments de **B** sont colinéaires à un vecteur de base. Ceci explique l'unicité de la décomposition pour cet exemple.

Les exemples suivants montrent que cet algorithme peut dans certains cas donner la décomposition optimale $\overline{\Lambda}$, dans d'autres cas ne pas la donner et aussi donner des décompositions avec des valeurs négatives. On notera $U_{\mathbf{B}}$ l'ensemble des décompositions données par la méthode de la corde.

Exemple 1 :

Soient les quatre vecteurs de base suivants :

$$N_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, N_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}, N_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 4 \end{pmatrix}, N_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Le point $M = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ appartient à Z_4 et on trouve par la résolution du problème ***(Z1)*** que l'optimum $\overline{\Lambda}$ est $(\frac{1}{5},\frac{1}{5},\frac{1}{5},1)$.

La détermination de **B** donne l'unique décomposition $\Lambda = \overline{\Lambda}$ $(U_{\mathbf{B}}=\{\overline{\Lambda}\})$.

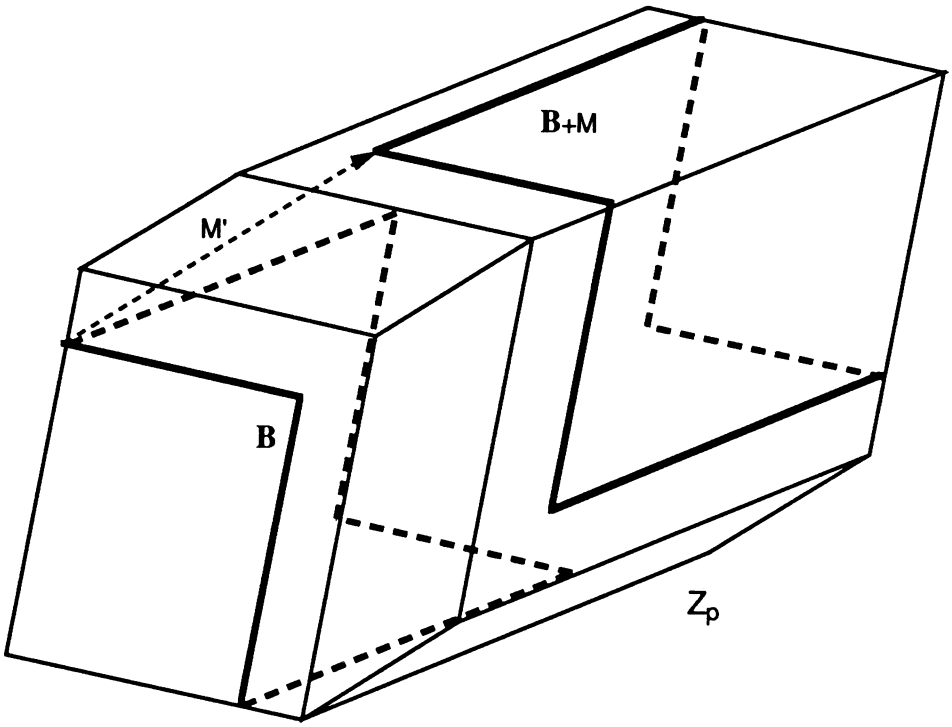


Figure II-16 - **Exemple 1**

Exemple 2 :

Soient les vecteurs de base suivants :

$N_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, $N_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, $N_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}$, $N_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$, $N_5 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Le point $M = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$ appartient à Z_5 et on trouve par résolution du problème *(Z2)* que $\overline{\Lambda} = (\frac{39}{71}, \frac{31}{71}, \frac{41}{71}, \frac{56}{71}, \frac{59}{71})$.

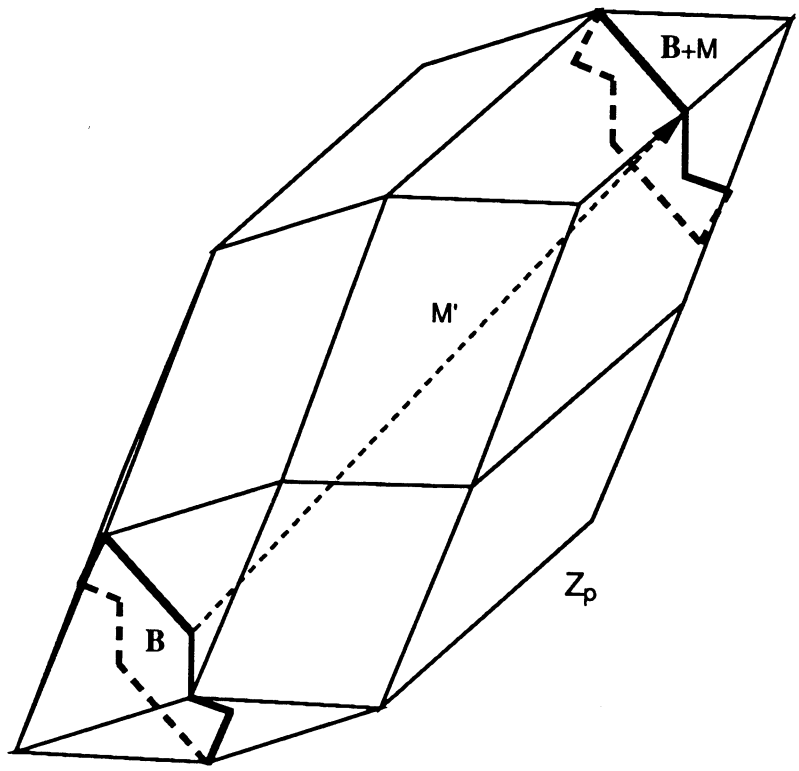


Figure II-17 - **Exemple 2**

L'ensemble correspondant des différentes décompositions de M est :

$U_B = \{ \theta.\Lambda_1+(1-\theta).\Lambda_2, \theta.\Lambda_2+(1-\theta).\Lambda_3, \theta.\Lambda_3+(1-\theta).\Lambda_4, \theta.\Lambda_4+(1-\theta).\Lambda_5 , \forall\theta \in [0,1]\}$

avec $\Lambda_1 = \Lambda_5 = (0,1,0,1,1)$, $\Lambda_2 = (1,\frac{1}{6},\frac{2}{3},1,\frac{1}{2})$, $\Lambda_3 = (1,0,1,\frac{2}{3},\frac{2}{3})$ et $\Lambda_4 = (\frac{3}{5},\frac{1}{5},1,\frac{2}{5},1)$.

Dans cet exemple, $\overline{\Lambda}$ n'appartient pas U_B.

Exemple 3 :

Soient les vecteurs de base suivants :

$N_1 = \begin{pmatrix} 20 \\ 10 \\ 0 \end{pmatrix}$, $N_2 = \begin{pmatrix} 20 \\ 20 \\ 10 \end{pmatrix}$, $N_3 = \begin{pmatrix} 10 \\ 20 \\ 0 \end{pmatrix}$, $N_4 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 5 \end{pmatrix}$, $N_5 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix}$.

Le point $M = \begin{pmatrix} 25 \\ 25 \\ 1 \end{pmatrix}$ appartient à Z_5 et on trouve par résolution du problème *(Z2)* que

$\overline{\Lambda} = (\frac{23}{30}, 1, \frac{23}{30}, 0, 0)$.

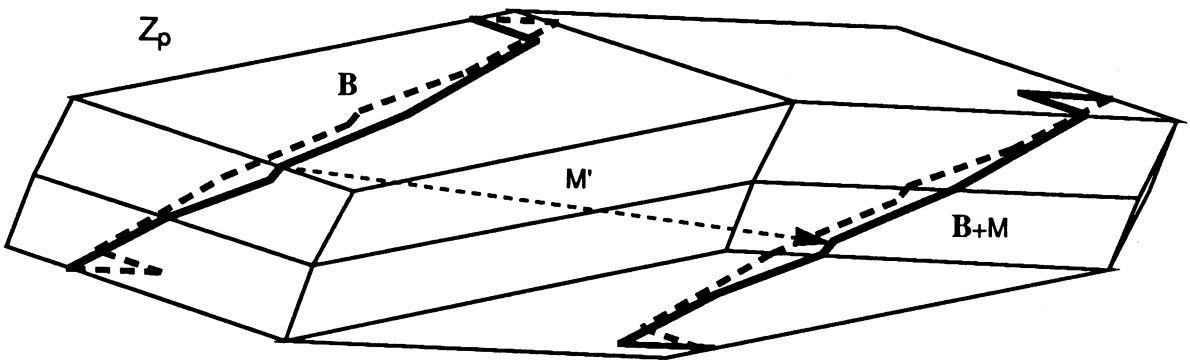


Figure II-18 - **Exemple 3**

L'ensemble des différentes décompositions est :

$U_B = \{\theta.\Lambda_i + (1-\theta).\Lambda_{i+1}, \forall\theta \in [0,1], \forall i=1 \text{ à } 5\}$ avec

$\Lambda_1 = \Lambda_6 = (\frac{23}{30}, 1, \frac{23}{30}, 0, 0) = \overline{\Lambda}$, $\Lambda_2 = (\frac{8}{15}, \frac{3}{5}, \frac{13}{30}, 0, -1)$, $\Lambda_3 = (\frac{4}{15}, 1, \frac{37}{150}, -\frac{4}{5}, -1)$,

$\Lambda_4 = (\frac{37}{150}, 1, \frac{4}{15}, -1, -\frac{4}{5})$ et $\Lambda_5 = (\frac{13}{30}, \frac{3}{5}, \frac{8}{15}, -1, 0)$.

Pour exemple, la position de M sur la figure ci-dessus correspond à la décomposition Λ_3.

Cet exemple montre que les valeurs de décomposition obtenues par cette méthode peuvent être négatives en donnant par ailleurs la décomposition optimale $\overline{\Lambda}$.

Conclusion

La méthode d'optimisation basée sur le volume du convexe résidu a été la première à être mise en œuvre. Cependant, lors d'une utilisation réelle, deux inconvénients sont apparus : une seule solution était donnée et souvent ne permettait pas de prendre en compte d'autres contraintes; le critère d'optimalité, impliquant que n'importe quel mélange peut être demandé par la suite, ne correspondait pas exactement à la réalité; en effet, souvent les mélanges ont des spécifications dont les valeurs restent dans une fourchette donnée.

Ceci nous à mener à étudier des outils géométriques en 3-D permettant de travailler directement sur le convexe initial de mélange.

Les outils basés sur l'algorithme d'intersection permettent différentes opérations de manipulation et de visualisation.

La méthode de la corde développée pour n=3 s'inspire de la propriété de la décomposition optimale dans le cas des mélanges binaires. C'est une méthode approchée visant à fournir de bonnes manières de réaliser un mélange donner. Les différents exemples traités montrent que tous les cas de figure sont possibles (solution optimale appartenant ou non à U_B, une seule ou une infinité de solutions, possibilité d'avoir des décompositions non faisables).

Si l'optimum n'est pas nécessairement atteint par cette méthode, il apparaît en pratique que cette méthode fournit un éventail assez large de solutions dont certaines sont compatibles avec d'autres contraintes que la méthode d'optimisation ne prend pas en compte.

CHAPITRE III

APPLICATION À UN LOGICIEL D'AIDE À LA FABRICATION DE MÉLANGES

Note préliminaire : ce chapitre présente le logiciel MBAC, logiciel géométrique et graphique d'aide à la fabrication de mélanges pétroliers. Une note technique de ce logiciel est diffusée au sein du groupe ELF, reprenant en détail les grandes lignes du travail exposé ci-dessous.

III-1 Présentation du logiciel MBAC

Parallèlement aux études théoriques entreprises il y a environ cinq ans avec le laboratoire L.M.C. de Grenoble, un logiciel a été développé, sur une idée de P. VALENTIN, au sein du C.R.E.S. (Centre de Recherches ELF - Solaize) afin d'apporter une aide dans la fabrication des mélanges pétroliers.

Les premiers prototypes ont été conçus autour d'une méthode classique d'optimisation sur le volume du convexe résidu (cf. § II-2), les aspects géométrique et graphique étant peu utilisés (seule une représentation des convexes de mélanges en dimension deux était possible).

En même temps que les travaux théoriques effectués pendant cette thèse et présentés dans les chapitres I,II et IV, j'ai développé un logiciel géométrique et graphique basé sur les zonoèdres : ceci permet d'une part d'apporter d'autres outils mathématiques dans la fabrication de mélanges (aspect géométrie algorithmiques) et d'offrir des outils de représentation en dimension trois (aspect graphique).

Ce logiciel est utilisé comme prototype dans les unités de fabrication des raffineries ELF en France. Il sera inséré par la suite dans un logiciel destiné à être utilisé en raffinerie en temps qu'aide à la fabrication de mélanges pétroliers (fuel, fuel domestique, essence, ...) et comprenant d'autres outils mathématiques.

Pour cela, il est nécessaire d'avoir des outils géométriques et graphiques rapides (interactivité avec l'utilisateur). En pratique, le nombre de produits de base n'excédant pas la dizaine ($n \leq 10$), la structure de données par bords (D.C.E.L. ou F.E.E.L.) a été adoptée. En effet, pour un faible nombre de vecteurs, la place mémoire utilisée est peu importante; de plus, celle-ci permet d'effectuer les algorithmes de manipulation et visualisation rapidement (en pratique, les temps d'exécution sont inférieurs à la seconde).

Il a été demandé de développer le logiciel sur Macintosh pour des raisons d'ergonomie en

particulier. Le programme source représente environ 10000 lignes de code dont 7000 lignes environ pour l'interface utilisateur.

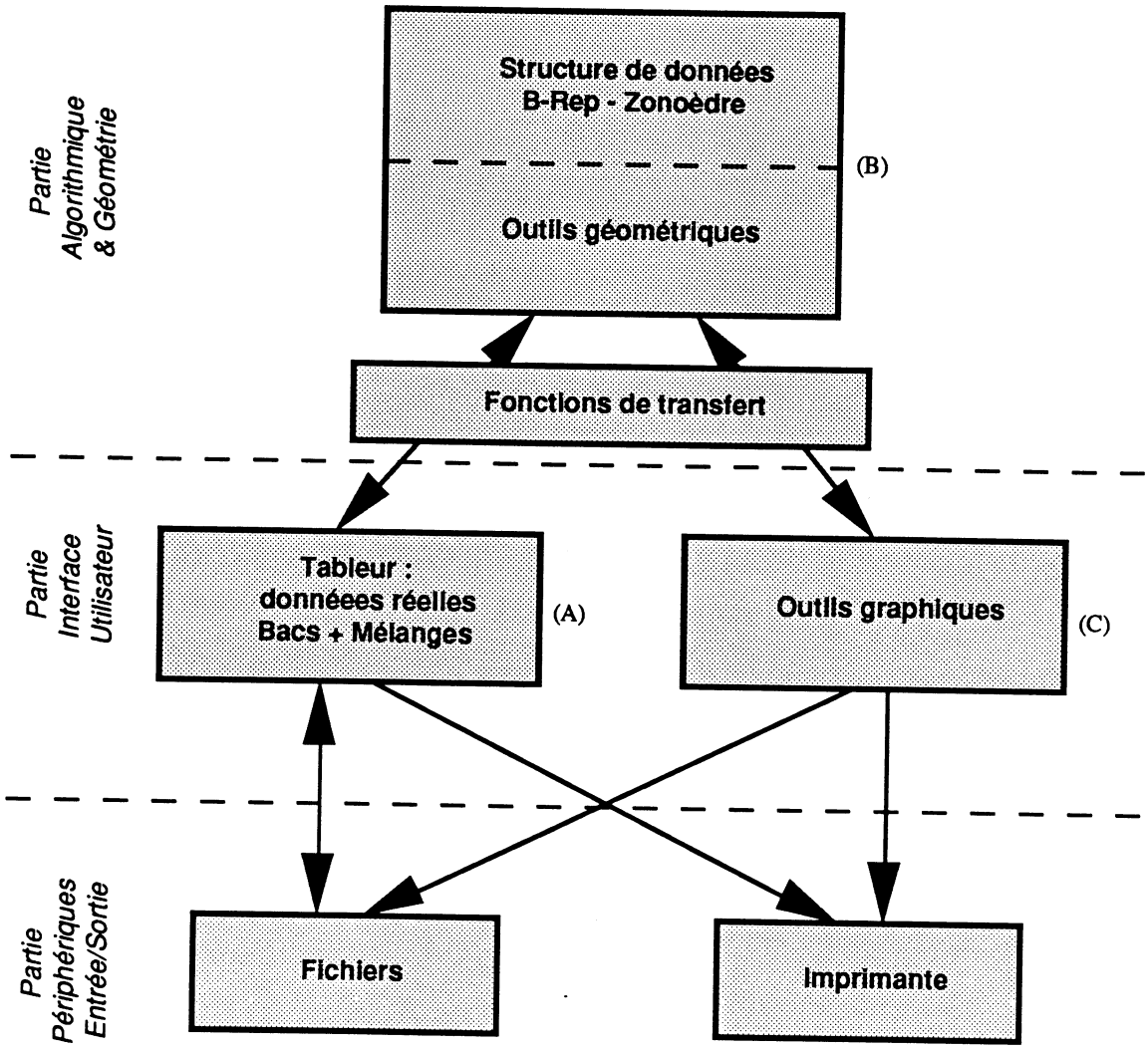


Figure III-1 -**Le logiciel MBAC**

La figure III-1 présente l'organigramme général de fonctionnement du logiciel avec les interactions entre les différentes parties :

• Le noyau, i.e. la partie Géométrie Algorithmique, est formé d'outils permettant la construction, manipulation et représentation des zonoèdres, ainsi que des fonctions de transfert (ou fonctions additives cf. définition II-1-3) permettant de transformer les données réelles en vecteurs de base et inversement; cette partie est indépendante de l'ordinateur utilisé.

• La partie Interface Utilisateur permet à celui-ci d'une part de manipuler les données

réelles et d'autre part d'intervenir sur le graphique afin d'en modifier les paramètres ou de manipuler directement les zonoèdres.

• La partie Périphériques permet les opérations usuelles d'entrée/sortie pour les données utilisées dans le logiciel.

Les flèches indiquent les liens entre les différents modules.

III-2 Les données numériques réelles (A)

L'entrée des données et leur manipulation se fait par l'intermédiaire d'un module donnant aux deux tableaux les fonctionnalités d'un mini-tableur. L'un présente les bacs de base à partir desquels sont fabriqués les mélanges pétroliers, dans l'autre se trouve le ou les mélanges à faire (dans le cas de plusieurs mélanges, on suppose qu'ils sont fabriqués les uns après les autres à partir des mêmes bacs de base). Les données présentes à l'écran sont les caractéristiques physiques des produits pétroliers.

L'utilisateur par un ensemble de menus peut rajouter, enlever des bacs ou/et spécifications, sauvegarder, charger ou imprimer ces différentes données.

Ensemble de bacs

	364	365	361	281	374	362	805	806	n°
MA	13218	12913	9477	10709	304	11700	24554	71234	
MV	0.8430	0.8440	0.8530	0.8886	0.7830	0.8110	0.8080	0.8420	
PT	4.0	1.0	1.0	5.0	0.0	-20.0	-23.0	1.0	
SO	0.100	0.140	0.640	1.620	0.300	0.170	0.180	0.300	
PE	78.0	75.0	94.0	147.0	0.0	49.0	49.0	62.0	
Spécif									

Suite de mélanges

	364	365	361	281	374	362	805	806	n°
1	1000	0	2345	1037	0	0	2618	0	
n° mél.									

Figure III-2 -**Les données réelles**

Les convexes de mélange étant des zonoèdres (n=3), l'utilisateur doit prendre en compte trois spécifications parmi lesquelles la masse doit être présente pour des raisons de cohérence (en effet les fonctions de transfert font toutes intervenir la masse du produit).

En général, dans la fabrication de produits pétroliers finis, mise à part la masse de

produits à fabriquer, seules deux spécifications sont réellement prises en compte : dans MBAC, les mélanges à fabriquer sont des gazoles dont les deux principales contraintes portent sur la température de point de trouble (température en dessous de laquelle le produit se fige) qui doit être la plus basse possible (surtout en hiver), et le pourcentage de soufre qui doit être inférieur à un taux maximal fixé par la norme : en général, les trois spécifications dans MBAC choisies sont la masse, le pourcentage de soufre et la température de point de trouble.

Avant de construire le convexe de mélange associé à la base de bacs, les cas d'incohérence de données ou de vecteurs colinéaires sont indiqués à l'utilisateur qui peut éventuellement modifier ses données.

III-3 Le noyau mathématique (B)

Il est composé de deux parties :

• *Les fonctions de transfert*

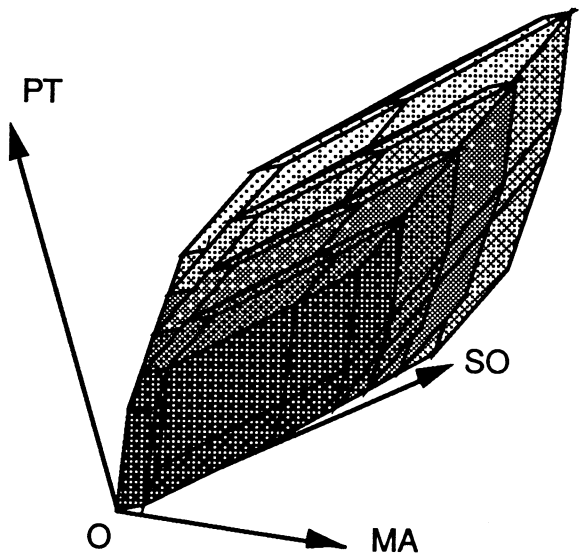
Elles permettent le lien entre données réelles et modèle vectoriel et définissent des fonctions additives qui peuvent varier d'une raffinerie à l'autre et même d'une saison à l'autre d'où l'intérêt de les traiter dans un module séparé. Dans le cas de gazoles, les vecteurs de base $\{N_i\}$, calculés par ces fonctions de transfert, ont la propriété d'être à composantes positives et non nuls. Ainsi le zonoèdre construit possède l'origine O comme pôle et se trouve dans le premier cadrant.

De plus ces vecteurs N_i vérifient la propriété $\langle N_i, \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \rangle > 0$ pour tout i de 1 à p.

• *La partie géométrique*

Une fois que la base de vecteurs est cohérente, le zonoèdre correspondant aux bacs de base est construit grâce à l'algorithme décrit dans le § I-3. Le nombre de bacs étant peut élevé (n inférieur à 10), le temps de construction du zonoèdre est quasi instantané (inférieur à la seconde).

Du fait de la propriété particulière des zonoèdres, la structure de données ainsi construire permet en fait de représenter tout zonoèdre correspondant à une base de vecteurs de la forme $\{(1-\lambda_i).N_i)\}$, i.e. une base de vecteurs correspondant à un ensemble de résidu de bacs après la fabrication d'un mélange M de la forme $\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i$.



Ainsi une suite de convexes résidus après fabrications successives de mélanges est visualisée en utilisant la même structure de données pour chaque convexe de mélange, seule la longueur des vecteurs de base varie.

Figure III-3 -**Convexe de mélange initial et convexes résidus**

Les outils géométriques permettent à l'utilisateur, à partir d'un convexe de mélange donné, de réaliser différentes opérations de manière interactive. Ces outils sont basés principalement sur des algorithmes d'intersections entre polyèdre et plan ou droite (décrits dans le paragraphe II-4) :

- faisabilité partielle ou totale d'un mélange : pour cela, on cherche dans un premier temps l'intersection du zonoèdre et de la droite passant par l'origine O et le point M de $\mathbb{R}^3$ correspondant aux trois spécifications du mélange.

Si cette intersection est réduite à un point, i.e. l'origine, le mélange n'est pas faisable même en partie. Par contre, si l'intersection est un segment de droite [O,M'], le mélange est faisable, soit en totalité si M appartient à ce segment, soit en partie seulement; dans ce dernier cas, la masse maximale de produit faisable est donnée par la coordonnée de M' correspondante à la masse.

- décomposition d'un mélange faisable : l'algorithme implanté est celui de la méthode de la

corde (décrite dans le paragraphe II-5) qui fournit en général plusieurs décompositions pour un même mélange.

L'algorithme détermine les m points Λ_i (i=1 à m) qui donne l'ensemble de décompositions pour le mélange M, $U_B = \{\theta.\Lambda_{i-1} + (1-\theta).\Lambda_i, i=1 \text{ à } m, \theta \in [0,1]\}$ sous la forme d'une liste chaînée avec $\Lambda_0=\Lambda_m$, seules les décompositions faisables (Λ_i à valeurs positives) étant retenues. L'utilisateur n'aura plus qu'à parcourir cette liste, pour chaque intervalle $[\Lambda_{i-1},\Lambda_i]$, différentes valeurs de θ lui seront proposées d'où une multitude de décompositions.

- ensemble des mélanges faisable en fixant une spécification : l'intersection du convexe de mélanges avec un plan particulier donne un ensemble de mélanges faisables : par exemple, un plan perpendiculaire à l'axe représentant la masse donne l'ensemble des mélanges avec une masse fixée, son intersection avec le convexe de mélange donne l'ensemble des mélanges faisables avec cette masse.

III-4 L'interface graphique

Cette partie permet à l'utilisateur de visualiser et manipuler les convexes de mélanges, pour éventuellement effectuer des opérations géométriques de manière interactive.

La partie visualisation intègre les outils classiques de visualisation en 3-D; cependant deux restrictions ont été choisies par commodité : le convexe de mélange initial est ramené dans un cube unité; la projection orthographique est utilisée (pas d'effet de perspective fuyante).

Ces outils sont les suivants

- représentation de l'objet en fil de fer, par ombrage ou par projection (silhouette) (cf figure III-4);

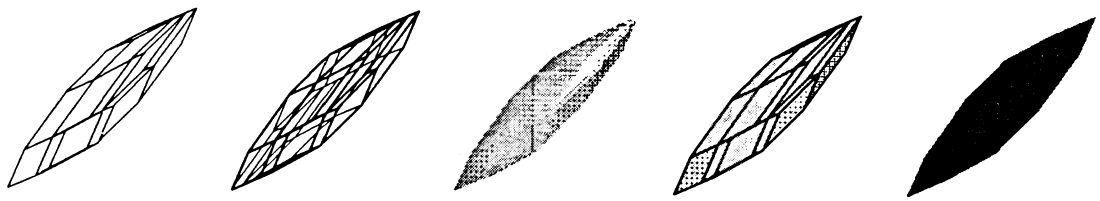


Figure III-4 - **Diverses représentations d'un même convexe de mélange**

- couleur ou noir & blanc;

- possibilité d'agrandissement et de réduction;

- représentation avec axes, cube englobant ou sans rien (cf figure III-5);

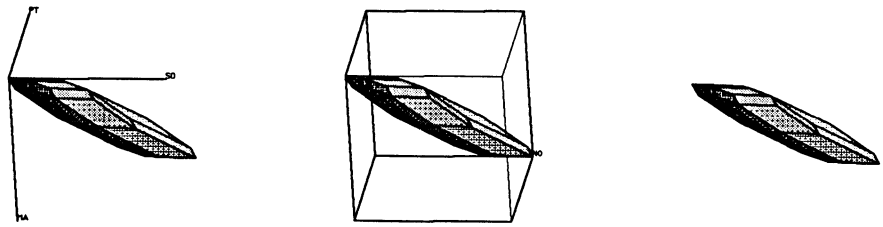


Figure III-5 -**Axes, cube englobant, sans rien**

- positionnement du zonoèdre dans l'espace via un dialogue ou rotation en temps réel (cf figure III-6);

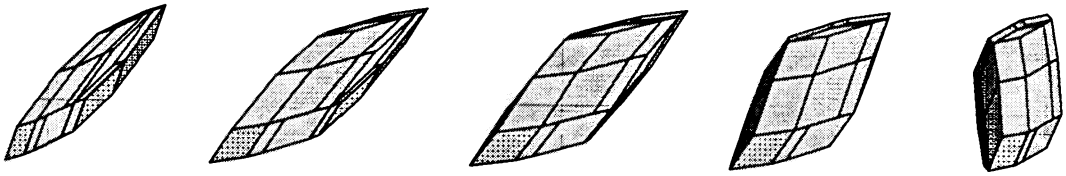


Figure III-6 -**Vue d'un même convexe par rotations successives**

- possibilité d'avoir sur une même vue les trois projections sur les trois plans de base (cf figure III-7);

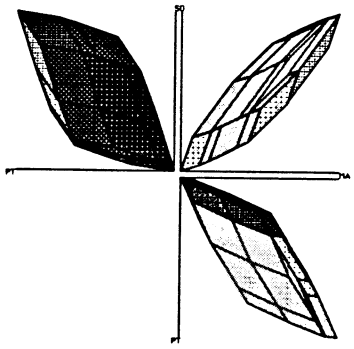


Figure III-7 -**Vue suivant les trois plans de base**

- possibilité d'avoir à l'écran plusieurs vues d'un même convexe (multi-fenêtrage);

- possibilité d'avoir sur une même vue un convexe de mélange avec certains convexes résidus (cf. figure III-3).

Les opérations de manipulation implantées à partir des outils géométriques sont :

• *Repérage d'un bac sur le zonoèdre*

Afin de mieux appréhender la structure du zonoèdre, l'agencement des faces par rapport aux vecteurs de base, il est possible de repérer le bac correspondant à une arête du zonoèdre. Pour cela, il suffit à l'utilisateur de cliquer sur une arête du zonoèdre, le numéro de bac apparaissant alors en haut à gauche (cf figure III-8).

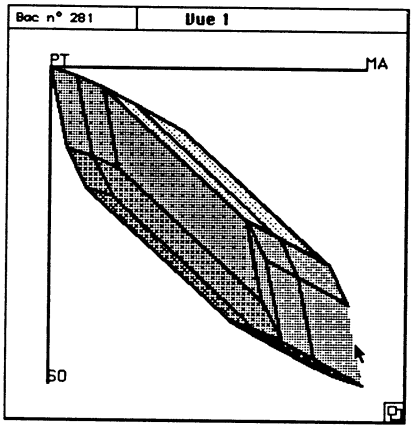


Figure III-8 - **Repérage d'un bac sur le convexe de mélange**

• *Ensemble de produits de même espèce*

Avant de s'intéresser un produit particulier, l'utilisateur peut visualiser un ensemble de produits ayant une même spécification. Cette opération utilise l'algorithme d'intersection polyèdre-plan décrit dans la partie géométrique. Dans le cas des gazoles où sont pris en compte la masse, le pourcentage de soufre et la température du point de trouble, l'utilisateur aura le choix d'une de ces trois espèces.

Une fois l'espèce choisie, l'utilisateur peut utiliser l'une des deux méthodes suivantes :

a) il fixe une ou plusieurs valeurs pour l'espèce considérée, le module géométrique calcule les plans correspondants ainsi que les différentes intersections avec le zonoèdre, le tout étant affiché sur la même vue.

b) de manière directe, l'utilisateur fait varier la position du plan correspondant à une valeur fixée de l'espèce choisie, l'intersection éventuelle avec le convexe de mélange apparaissant en même temps sur celui-ci.

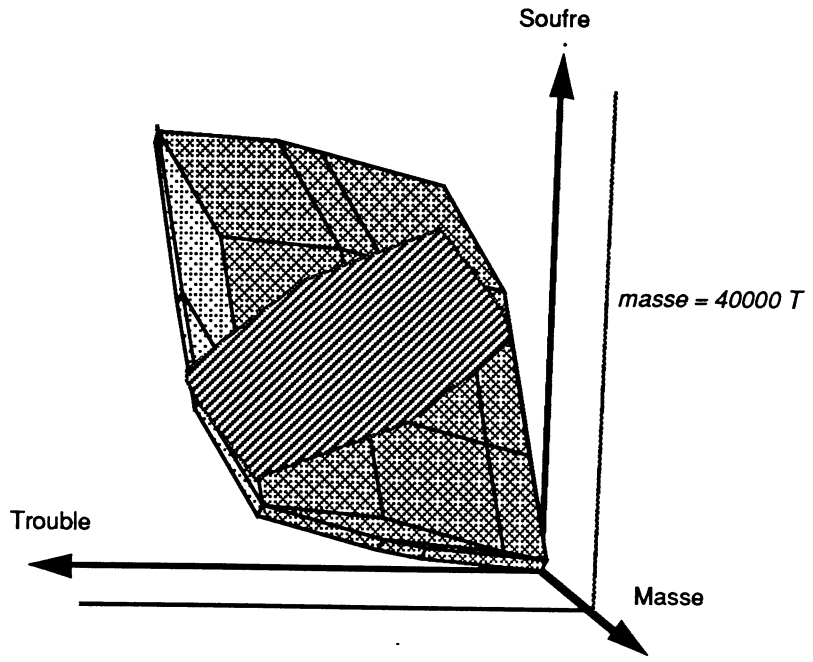


Figure III-9 -**Ensemble des mélanges faisables (hachuré) avec une masse fixée à 40000 tonnes**

• *Faisabilité d'un mélange*

Une fois le convexe de mélange déterminé, plusieurs méthodes, basées sur le même algorithme d'intersection polyèdre - droite, sont proposées à l'utilisateur pour déterminer la faisabilité d'un mélange :

a) en utilisant les trois projections, l'utilisateur a la possibilité de positionner un point dans l'espace (cf. figure III-10).

b) l'utilisateur entre les valeurs du mélange désiré, le module géométrique détermine alors le point M de $\mathbb{R}^3$ correspondant et calcule l'intersection [O,M'] du zonoèdre avec la demi-droite issue de l'origine et passant par M. Cette demi-droite représente tous les produits ayant même composition que le mélange demandé. Le résultat est donné graphiquement d'où une interprétation immédiate (faisabilité totale ou partielle, non faisabilité); en cas de faisabilité, la masse maximale faisable peut être déterminée (cf. figure III-11).

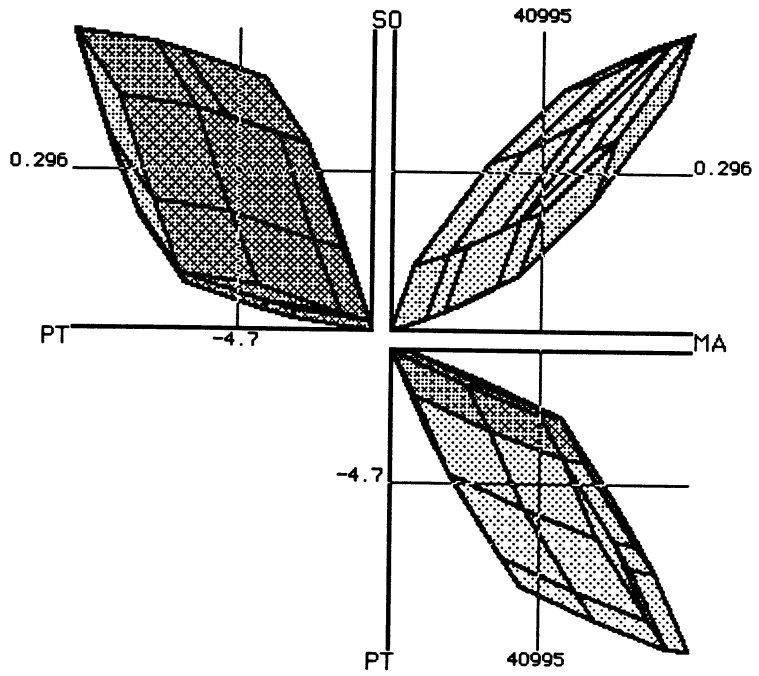


Figure III-10 -**Mélange faisable avec les spécifications suivantes : % soufre : 0.296, température de trouble : -4.7 °C, masse : 40995 Tonnes**

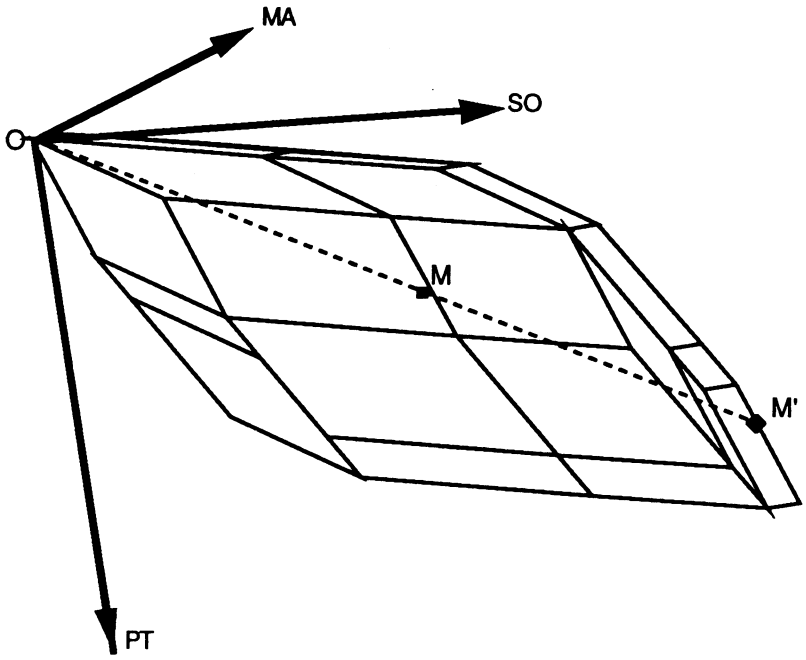


Figure III-11 -**Demi-droite des mélanges de mêmes espèces**

c) l'utilisateur peut directement par l'utilisation de la souris sur la vue en trois dimensions du zonoèdre faire varier la position d'un point dans l'espace, le module géométrique déterminant à chaque changement de position, le mélange correspondant ainsi que le segment des produits faisables de même composition.

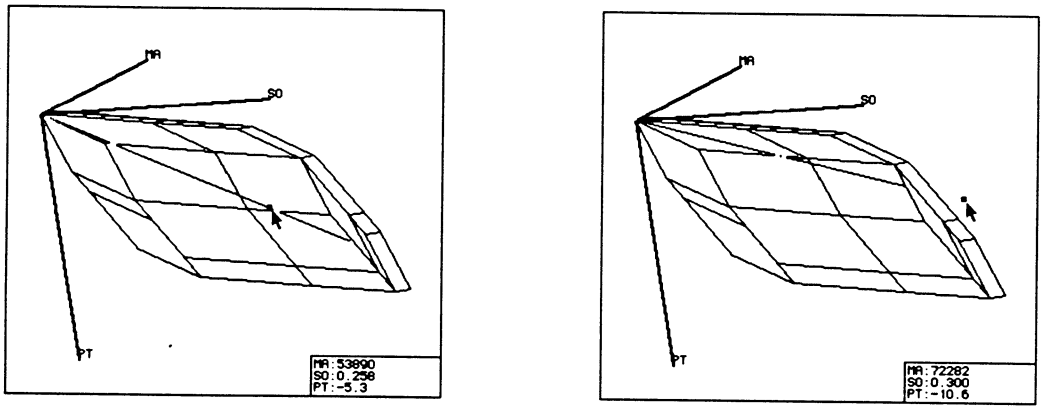


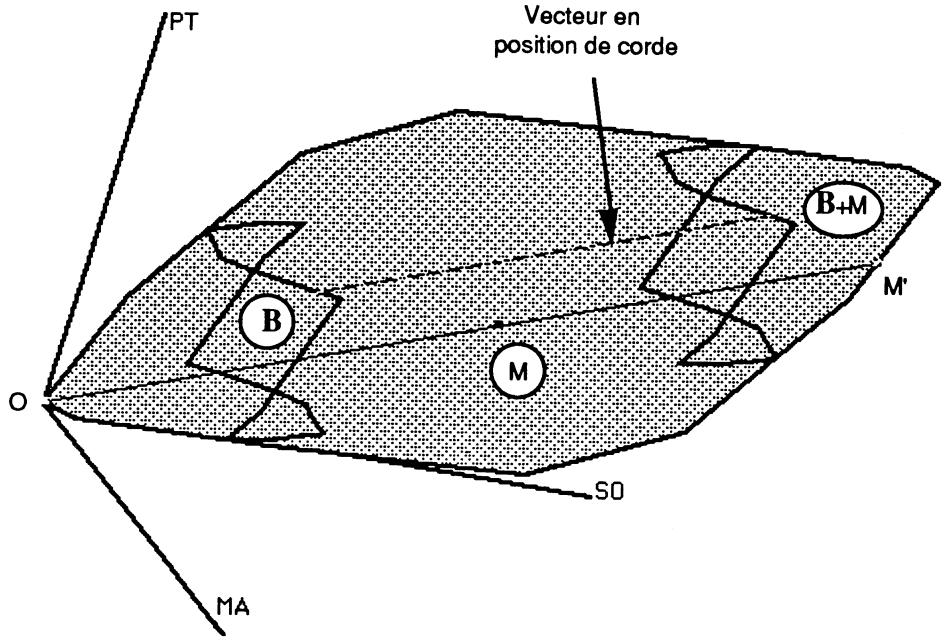
Figure III-12 -**Mélanges faisables**
(totalement à gauche ou en partie à droite)

• *Méthode de la corde*

Une fois déterminée la faisabilité d'un mélange, l'utilisateur peut utiliser la méthode de la corde lui fournissant généralement une multitude de décomposition pour un même mélange.

Dans un premier temps, le logiciel détermine l'ensemble **B** (cf. algorithme § II-5) sous forme d'une liste de segments, seules les décompositions faisables (λ_i positifs) sont retenues.

Les ensembles **B** et **B**+M sont ensuite affichés sur le convexe de mélange ainsi qu'un vecteur en position de corde. L'utilisateur peut interactivement modifier la position de ce vecteur le long des deux ensembles **B** et **B**+M. A chaque nouvelle position, la décomposition correspondante est affichée à l'écran.



Méthode de la corde

Bac	% Bac	% Vol Mel
27	17.25 %	2.39 %
113	0.00 %	0.00 %
63	62.68 %	30.93 %
66	0.39 %	0.13 %
79	85.29 %	43.73 %
26	100.00 %	22.81 %
75	0.00 %	0.00 %

Figure III-13 - **Méthode de la corde**

Dans l'exemple ci-dessus, la décomposition indique qu'il faut, pour fabriquer le mélange demandé, utiliser 17,25% du bac 27 (soit 2,39% en volume dans le mélange), 62,68% du bac 63, 0,39% du bac 66, 85,29% du bac 79 et la totalité du bac 26, les deux autres bacs (113 et 75) n'étant pas utilisés.

• *Compléments*

Ces différentes fonctionnalités peuvent être combinées afin d'obtenir des informations complémentaires.

L'exemple suivant montre comment, par différentes opérations géométriques sur le convexe des mélanges, on peut obtenir des fourchettes sur les spécifications des mélanges faisables.

La figure suivante montre l'ensemble des produits faisables avec une masse de 40000 tonnes. Ainsi le pourcentage de soufre de mélanges faisables avec une masse de 40000 tonnes se situe entre 0,145 et 0,417 et la température de point de trouble entre -22,7 °C et 6,9 °C.

Cet exemple a été obtenu en combinant les méthodes représentées par les figures III-9 et III-10.

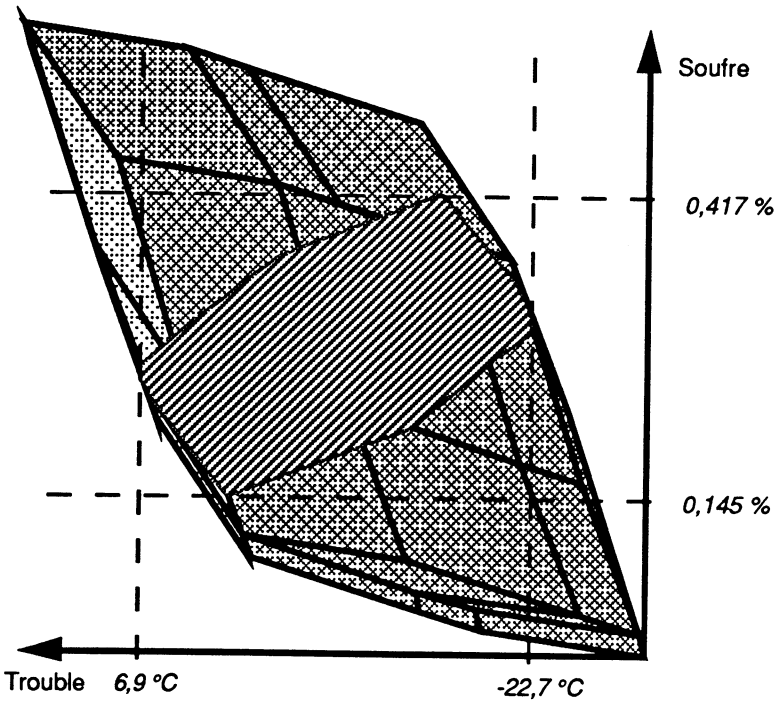


Figure III-14 - **Bornes de faisabilité pour le soufre et le trouble**

Sur une même vue, peuvent se trouver plusieurs intersections calculées grâce aux opérations précédentes. Des outils pour la manipulation de ces différents objets (segments de droites et polygones) ont été développés afin d'apport un confort supplémentaire à l'utilisateur :

- sélection d'un objet avec renseignement sur ses paramètres;

- modification de la disposition des objets les uns par rapport aux autres;

- suppression d'un objet.

Conclusion

Le logiciel présenté ci-dessus représente un travail non négligeable. Ce produit reste cependant un prototype en temps que module graphique d'un logiciel plus important d'aide à la fabrication. Il possède des outils graphique puissants et perfomants grâce une interface conviviale et ergonomique. Un tel produit étant sans équivalent dans le monde (en temps que logiciel commercial), un utilisateur néophyte devra acquérir une certaine pratique afin de pouvoir pleinement tirer parti des outils déjà présents dans le logiciel. Ainsi, d'autres fonctionnalités ont été envisagées par la suite afin d'exploiter au mieux les outils algorithmiques développés et de le rendre plus facile d'utilisation. Pour finir, bien que développé au départ dans le cadre de la fabrication des mélanges pétroliers, ce logiciel peut être transposé à d'autres problèmes de mélanges (chimie ou autre) caractérisés par trois espèces et obéissant à des lois de mélanges linéaires.

CHAPITRE IV

ZONOÏDES ET ZONOÈDRES

IV-1 Rappels sur les zonoïdes

Dans ce paragraphe, nous allons faire un rappel sur les différentes définitions des zonoïdes ainsi que sur certaines propriétés utilisées par la suite.

Soient $E=\mathbb{R}^n$ l'espace euclidien de dimension n muni du produit scalaire habituel $<.,.>$ associé à la norme euclidienne $\|.\| = \|.\|_2$, $\mathcal{K}$ l'ensemble des convexes de E, $\mathcal{Y}$ l'ensemble de ces convexes qui sont à symétrie centrale. Soient B^n la boule unité (associée à la norme $\|.\|_2$) de E et $S^{n-1} = \partial B^n$ la sphère unité.

■ *Définition IV-1-1* : Soient K et L deux éléments de $\mathcal{K}$; la ***métrique de Haussdorf*** d est définie par :

$$d(K,L)=\min\ (\varepsilon>0\ /\ K\subseteq L+\varepsilon.B^n \text{ et } L\subseteq K+\varepsilon.B^n\ ).$$

La topologie sur $\mathcal{K}$ est induite par la métrique de Haussdorf.

■ *Définition IV-1-2* : La fermeture (au sens de la métrique de Haussdorf) de l'ensemble des zonotopes de E est un ensemble de convexes de E appelés ***zonoïdes***.

■ *Définition IV-1-3* : Soit $K \subset E$, on définit H_K, la fonction support de K, comme suit :

$$H_K(u)=\max\ (<x,u>\ ,\ \forall x\in K),\ u \in E$$

■ *Proposition IV-1-4* [WEI76] : Soit Z un zonotope, somme de Minkowski de p segments de droite $S_i = [-x_i,x_i]$. La fonction support du zonotope Z est la somme des fonctions supports des intervalles S_i et est donné par :

$$H_Z(u)=\sum_{i=1}^{p} |<x_i,u>| = \sum_{i=1}^{p} |<y_i,u>|.\rho_i \text{ avec } y_i \in S^{n-1} \text{ et } \rho_i \geq 0.$$

• preuve : elle est immédiate.

■ *Proposition IV-1-5* : Soit K un zonoïde, alors il existe une mesure de Borel positive ρ sur S^{n-1} telle que la fonction support de K est définie par :

$$H_K(u)=\int_{S^{n-1}} |<x,u>|.\rho(dx),\ \forall u \in E.$$

D'autres définitions des zonoïdes sont données. On peut noter par exemple [WEI76a] qui montre la correspondance entre zonoïdes et distributions ou encore [GOO77] qui définit les zonoïdes à partir de certaines propriétés sur les volumes mixtes.

■ *Définition IV-1-6* : On dira que deux zonoïdes Z_1 et Z_2 sont ***semblables*** s'il existe une fonction affine φ de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}^n$ telle que $Z_2 = \varphi(Z_1)$.

Remarque : On peut montrer qu'il existe des convexes compacts symétriques qui ne sont pas des zonoïdes (par exemple l'ensemble $\{x \in E / \sum_{i=1}^{n} |x_i| \leq 1\}$ avec $n \geq 3$ n'est pas un zonoïde) [BOL69].

• *Approximation par des zonotopes*

Différentes publications ont été faites sur l'approximation de zonoïdes par des zonoèdres, notamment concernant les calculs de volumes et l'approximation des boules unités de $\mathbb{R}^n$ par des zonotopes .

J. BOURGAIN - J. LINDENSTRAUSS - V. MILMAN [BLM89] donnent différents résultats ainsi que leurs démonstrations sur le nombre minimal de vecteurs de base formant le zonotope pour que celui-ci approxime (au sens de la métrique de Haussdorf) ces boules unités à un ε près. Le principal résultat est le suivant :

■ *Proposition IV-1-7* [BLM89] : Soit B^n la boule unité de $\mathbb{R}^n$ associée à la norme euclidienne classique. Alors le nombre $N(B^n,\varepsilon)$ de vecteurs de base minimal nécessaire pour créer un zonotope Z tel que $B^n \subseteq Z \subseteq (1+\varepsilon).B^n$ vérifie :

$$N(B^n,\varepsilon) \leq c(n).\varepsilon^{-2}.n \quad \text{pour } n \geq 2 \text{ et } \varepsilon < 1/2$$

Cependant ce résultat n'est pas optimal : par exemple pour n = 2, il est facile de montrer que $N(B^2,\varepsilon) \approx \varepsilon^{-1/2}$ quand ε tend vers l'infini .

■ *Proposition IV-1-8* [LIN75] : Soit K un zonoïde défini par la mesure positive ρ sur S^{n-1} ($H_K(u)=\int_{S^{n-1}} |<x,u>|.\rho(dx)$, $\forall u \in E$). Soit $\varepsilon>0$ donné et $\delta=\varepsilon/\rho(S^{n-1})$. Soit $\omega_1,\ldots,\omega_r$ une partition de la sphère unité S^{n-1} tel que $\underset{i=1}{\overset{r}{\mathrm{Max}}} (\underset{v,w \in \omega_i}{\mathrm{Max}} |v-w|) \leq \delta$ (avec $|v-w|$ distance euclidienne entre v et w).

Alors le zonoèdre $C_r = \{ \sum_{i=1}^{r} \theta_i.y_i.\rho(\omega_i), \forall\theta_i \in [-1,1] \}$ avec $y_i \in \omega_i$ approxime K à ε près (au sens de la métrique de Haussdorf). Ceci montre que tout zonoïde est limite d'une suite de zonotopes.

IV-2 Zonoïdes définis par une famille différentielle

• *Problématique de la fabrication des mélanges dans le cas d'un processus continu*

Après avoir introduit le concept de convexe de mélange pour un processus discret (p bacs distincts), l'extension à un processus représenté par une mesure continue (ou diffuse) a été développé par P. VALENTIN dans le cas de la séparation. On parlera par la suite de processus continu (ou diffus).

■ *Définition IV-2-1* : Soit $[0,\Delta t]$ un intervalle de $\mathbb{R}_+$. On appelle système ***continu*** ou ***diffus*** à n composantes un dispositif fabriquant un produit P dont les n caractéristiques varient au cours du temps.

En chimie, le principe de séparation peut être vu comme un processus diffus. La séparation par distillation consiste à placer une quantité d'un certain produit dans le bouilleur d'une colonne à distiller au temps t=0. Cette charge va évoluer au cours du temps, le principe de la distillation est de récupérer en haut de cette colonne et pendant un laps de temps donné, le produit de la distillation que nous appelons P.

A ces n spécifications sont associées une fonction additive f, i.e. le mélange M_t obtenu en prenant la totalité du produit P entre les instants 0 et t est représenté par le vecteur N(t) de $\mathbb{R}^n$, image par la fonction f des n quantités caractérisant le mélange M (cf. définition II-1-3).

Alors le mélange infinitésimal produit par P entre les instants t et t+dt est représenté par la forme différentielle vectorielle $dN(t) = F(t).dt$.

La fonction F(t) représente le débit ou flux des espèces du produit P à l'instant t.

Remarque : t peut aussi être une variable d'espace. Dans ce cas, la fonction F représente une concentration d'espèce.

Soient $0=t_0<t_1<\ldots<t_{p-1}<t_p=\Delta t$ une partition de l'intervalle $[0,\Delta t]$. Considérons un dispositif qui ne prend qu'une fraction constante λ_i du produit P entre les instants t_{i-1} et t_i. Le mélange ainsi produit en ajoutant les p fractions successives est représenté par le vecteur M suivant :

$$M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.(N(t_i)-N(t_{i-1})) = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i$$

Le convexe des mélanges associé à la partition $(t_0, t_1, \ldots, t_{p-1}, t_p)$ est le zonotope $Z_p(F) = Z(N_1,\ldots,N_p) = Z(N(t_1)-N(t_0),\ldots,N(t_p)-N(t_{p-1}))$.

Faisons tendre p vers l'infini de telle manière que la valeur $\underset{i=1}{\overset{p}{\mathrm{Max}}}\,(t_i-t_{i-1})$ tende vers 0. La suite des zonotopes $Z_p(F)$ va alors tendre vers le zonoïde suivant :

$Z = \{M=\int_I \lambda(t).dN(t),\ \forall\ \lambda$ fonction intégrable à valeurs dans $[0,1]\}$

■ *Définition IV-2-2* : Par analogie au processus discret (zonotopes), la fonction λ associée au mélange M est appelée ***décomposition diffuse*** du mélange M.

Ce modèle utilisé dans la théorie de la séparation nous amène à considérer une classe particulière de zonoïdes.

• *Famille différentielle*

Soient $E=\mathbb{R}^n$, $I=[0,\Delta t]$ intervalle de $\mathbb{R}$, F fonction de $C^0(I,E)$, fonction continue de I dans E, $\Lambda = L^1(I,[0,1])$, ensemble des fonctions intégrables de I à valeurs dans [0,1]

■ *Définition IV-2-3* : A une fonction F est associé l'ensemble suivant :

$$Z(F) = Z\{F(t).dt\}_{t\in I} = \{M=\int_I \lambda(t).F(t).dt,\ \lambda \in \Lambda\}.$$

Alors Z(F) est un zonoïde associé à la ***famille différentielle*** $\{F(t).dt\}_{t\in I}$.

■ *Corollaire IV-2-4* : Soit F une fonction intégrable de I dans $\mathbb{R}$, alors le zonoïde Z(F) est la limite d'une suite de zonotopes $Z_p(F)$ définis par :

$$Z_p(F) = Z\{\int_{t_{i-1}}^{t_i} F(t)dt, 1 \leq i \leq p\} \text{ avec } 0=t_0<t_1<\ldots<t_{p-1}<t_p=\Delta t.$$

avec $\lim_{p \to +\infty} \operatorname{Max}_{i=1}^{p} (t_i - t_{i-1}) = 0$

• preuve : elle se déduit immédiatement de la proposition IV-1-8. □

• *Zonoïdes et équations aux dérivées partielles*

Les processus (discrets ou continus) de mélange conservant des grandeurs additives, P. VALENTIN a montré que, plus généralement, les zonoïdes peuvent être utilisés comme outil géométrique dans l'étude des solutions d'équations aux dérivées partielles de la physique faisant intervenir des grandeurs conservatives : l'état de séparation d'un système physico-chimique isolé et soumis à un loi d'évolution au cours du temps peut être représenté par un zonoïde [VAL90].

Ainsi, différents résultats sur l'évolution d'un tel système peuvent s'interpréter de manière géométrique à l'aide de zonoïdes associés [VAL91b].

Pour illustrer brièvement ceci, considérons le cas de l'équation de diffusion de la chaleur dans une barre isolée de longueur L :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial u}{\partial t} - \dfrac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0 \\[2ex] u(x,0) = u_0(x) \geq 0 \qquad\qquad u : I \times \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+ \quad (I=[0,L]) \\[2ex] \dfrac{\partial u}{\partial x}(0,t) = \dfrac{\partial u}{\partial x}(L,t) = 0 \end{cases}$$

Dans ce cas précis, les grandeurs conservatives prises en compte sont la *masse* et la *quantité de chaleur* ou *énergie*.

Considérons maintenant la famille différentielle $\{F_t(x).dx\}_{t \in I} = \{dx, u(x,t)dx\}_{t \in I}$. Alors le zonoïde $Z(F_t)$ représente l'état de séparation (entre l'énergie et la masse) du système à l'instant t et correspond à la distribution de température dans la barre à l'instant t.

On peut montrer que tous les zonoïdes $Z(F_t)$ ont mêmes pôles à savoir l'origine O et le sommet $S = \int_I F_t(x).dx$, que l'état de séparation du système décroît au cours du temps, i.e. que le zonoïde $Z(F_{t2})$ est inclus dans $Z(F_{t1})$ si et seulement si t2 est supérieur à t1 et que le zonoïde asymptotique $Z(F_\infty)$ est réduit au segment [O,S] et correspond à une distribution de température uniforme sur la barre.

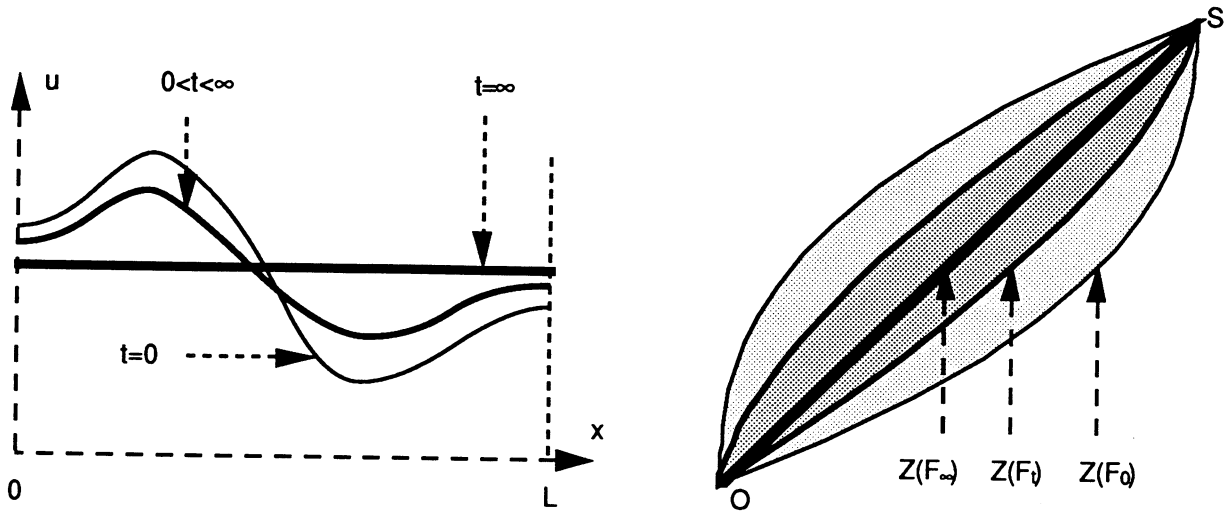


Figure IV-17- **Solution u à différents instants et zonoïdes associés**

Dans le cas de zonoïdes en dimension deux, on peut aussi noter le lien avec le ré-arrangement de fonctions (cf [BAN80]).

• *Plans tangents à un zonoïde et zone*

Soit $\nu \in S^{n-1}$, nous notons F_ν la fonction réelle définie par $F_\nu(t)=\langle F(t),\nu\rangle$.

Soient les ensembles $A_\nu=\{t \in I, F_\nu(t) \geq 0\}$ et $B_\nu=I \setminus A_\nu$ et soit le point $S_\nu=\int_A F(t).dt$.

■ *Proposition II-2-5* : Le demi-espace $H_\nu= \{X \in \mathbb{R}^n, \langle X-S_\nu,\nu\rangle \leq 0\}$ contient Z(F) et le plan $\Pi_\nu=\{X \in \mathbb{R}^n, \langle X-S_\nu,\nu\rangle = 0\}$ est tangent à Z(F) en S_ν.
Le point S_ν est un point de $\partial Z(F)$.

• preuve :

Soit $M \in Z(F)$. $\langle M-S_\nu,\nu\rangle = \langle \int \Lambda(t).F(t).dt - \int_A F(t).dt,\nu \rangle =$

$$\int \Lambda(t).F_v(t).dt - \int_A F_v(t).dt = \int_B (1-\Lambda)(t).F_v(t).dt - \int_A F_v(t).dt \leq 0.$$

Nous avons donc : $Z(F) \subseteq \bigcap_{v\in\Omega} H_v$, $\partial Z=\{S_v, v \in S^{n-1}\}$ □

■ *Définition IV-2-6* : Soit $t \in I$, par analogie au zonotopes, nous appelons ***t-zone*** ou ***zone associée à t***, l'ensemble des points S_v de $\partial Z(F)$ avec v vérifiant $\langle F(t),v\rangle=0$.

■ *Proposition IV-2-7* : Soit Z(F) le zonoïde défini par la famille différentielle $\{F(t).dt\}_{t \in [0,\Delta t]}$. D'après le corollaire IV-2-4, on a $\lim_{p\to\infty} Z_p(F) = Z(F)$, limite (au sens de la métrique de Haussdorf) de zonoèdres $\{Z_p(F)\}_{p \in \mathbb{N}}$. Le volume d'un zonoèdre Z_p etant donné par :

$$V(Z_p) = \frac{1}{n!} \sum_{1\leq i_1,i_2,\ldots,i_n\leq p} \left| N_{i_1}\wedge N_{i_1}\wedge\ldots\wedge N_{i_n} \right|,$$

en faisant tendre p vers l'infini, on obtient la relation suivante :

$$V(Z(F)) = \frac{1}{n!}.\int_I\int_I\ldots\int_I |F(t_1)\wedge \ldots\wedge F(t_n)|\, dt_1\ldots dt_n .$$

• *Intersection zonoïde - plan*

Comme nous l'avons vu dans le paragraphe II-4, l'intersection d'un zonoèdre et d'un plan peut être déterminée de différentes manières. Il n'en est plus de même si on cherche à exprimer par une relation explicite l'intersection d'un zonoïde (même définie par une famille différentielle) et d'un plan Π défini par $\{x \in \mathbb{R}^3 / \langle x,\eta\rangle = \alpha\}$.

On peut cependant dans certains cas expliciter l'intersection entre la surface d'un zonoïde et un plan.

Exemple : Considérons le zonoïde Z(F) avec $F(t)=\begin{pmatrix} 1 \\ \cos t \\ \sin t \end{pmatrix}$ et le plan :

$$\Pi_\alpha = \{\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, x=\alpha\} \text{ avec } \alpha \text{ compris entre } 0 \text{ et } 2\pi.$$

L'intersection du zonoïde Z(F) avec le plan Π_α est le cercle C_α d'équation :

$$\begin{cases} x=\alpha \\ y^2+z^2=2-2.\cos\alpha \end{cases}$$

L'approximation d'un zonoïde par un zonoèdre va permettre de résoudre ce problème de manière approchée dans le cas général.

• *Appartenance d'un point dans un zonoïde*

Soit $M \in \mathbb{R}^n$; nous cherchons à savoir si $M \in Z(F)$, i.e. s'il existe λ défini sur I et à valeurs dans [0,1] tel que $M=\int_I \Lambda(t).F(t).dt$.

Etant donné $p \in \mathbb{N}$, on peut chercher λ sous la forme $\lambda = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.\mathbb{1}_{[t_{i-1},t_i]}$ avec $\lambda_i \in [0,1]$ pour i de 1 à p, où $\mathbb{1}_A$ est la fonction indicatrice de l'ensemble A.

On est alors ramené à savoir si M appartient au zonoèdre $Z_p(F)$ défini précédemment, les inconnues étant les λ_i.

Dans le cas n=3, l'appartenance de $M \in Z_p(F)$ est le problème de l'appartenance d'un point dans un zonoèdre; les méthodes présentées dans le chapitre II peuvent être appliquées.

IV-3 Zonoïdes dans $\mathbb{R}^3$

Nous nous intéressons aux cas des zonoïdes dans $\mathbb{R}^3$ définis par une famille différentielle $\{F(t).dt\}_{t \in [0,\Delta t]}$ telle que F est continue par morceaux et admet une primitive C_1 par morceaux que l'on notera N (i.e. $\forall u,v \in I$, $N(v)-N(u)=\int_u^v F(t).dt$) et telle que N(0)=0.

■ *Définition IV-3-1* : Par analogie au premier diagramme projectif associé à un ensemble de p vecteurs $\{N_i\}$, nous définissons ***le diagramme projectif continu (D.P.C.)*** associé à un zonoïde Z(F) définie par une famille différentielle $\{F(t).dt\}_{t \in [0,\Delta t]}$.

Comme dans le cas des zonoèdres, nous supposons qu'il existe un vecteur $\mu \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle F(t),\mu\rangle > 0$ pour tout t de $[0,\Delta t]$. Considérons le plan Π défini par :

$\Pi = \{x \in \mathbb{R}^3, <x,\mu> = 1\}$.

Alors le diagramme projectif continu associé à la fonction F est l'ensemble des points $M(t)=F(t) / <F(t),\mu>$

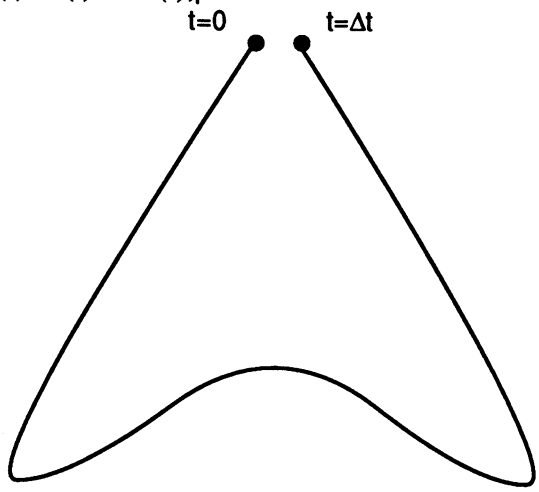


Figure IV-2- **Exemple de diagramme projectif continu**

• *Approximation par un zonoèdre*

Tout zonoïde peut être approché de différentes manières par une suite de zonotopes. cependant le concept de processus continu implique une manière "intuitive" parmi d'autres d'approcher Z(F).

Soient les p vecteurs N_i définis par $N_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} F(t)dt$ avec $a=t_0<t_1<\ldots<t_{p-1}<t_p=b$ et soit $Z_p(F)$ le zonoèdre défini par la base des p vecteurs $\{N_i\}$: $Z_p(F) =\{M = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i;\ 0\leq \lambda_i \leq 1\ \}$

■ *Proposition IV-3-2* : Tout zonoèdre $Z_p(F)$ est inclus dans le zonoïde Z(F)

• preuve : $M=\int_I \Lambda(t).F(t).dt$ avec $\lambda = \sum_{i=1}^{p} \lambda_i.1_{[t_{i-1},t_i]}$ qui appartient à Λ. □

■ *Proposition IV-3-3* : Si F vérifie la propriété de *sélectivité totalement régulière* (cf. définition IV-3-4) alors tout sommet de $Z_p(F)$ est un point de $\partial Z(F)$.

• preuve : Soit $v_{ij} \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle F(t), v_{ij} \rangle > 0$ si et seulement si $t \in]t_i,t_j[$ (par ex. $v_{ij} = F(t_i) \wedge F(t_j)$)

Donc le point $S_{ij} = \int_{t_i}^{t_j} F(t).dt \in \partial Z$. Or $S_{ij} = \sum_{k=i+1}^{j} \int_{t_{k-1}}^{t_k} F(t).dt = \sum_{k=i+1}^{j} N_k = \sum_{\langle N_k,v_{ij}\rangle > 0} N_k$ donc S_{ij} est un sommet du zonoèdre $Z_p(F)$ (cf. proposition I-1-9). Les p^2 doublets $(i,j) \in [\![1,p]\!]^2$ donnent p.(p-1) points différents S_{ij} qui sont en fait tous les sommets de $Z_p(F)$ (car un zonoèdre construit à partir de p vecteurs de base a au plus p(p-1) sommets). □

• *Calcul de volume approché*

Le volume d'un zonoïde peut être impossible à déterminer dans le cas général. Calculer le volume d'un zonoèdre approximant le zonoïde peut être utile dans certains cas.

Deux méthodes peuvent être envisagées pour calculer le volume d'un zonoèdre Z_p:

a) utiliser la formule générale concernant les zonotopes [LIN75] :

$$V(Z_p) = \frac{1}{6} \sum_{1 \le i,j,k \le p} |N_i \wedge N_j \wedge N_k| .$$

Cette méthode n'est cependant pas optimale en temps puisqu'elle est en $O(p^3)$.

b) calculer le volume du polyèdre convexe Z_p par la méthode de tétraèdrisation, application de la formule de Green-Riemann aux polyèdres :

- Soit P un polyèdre borné par un ensemble de faces F_k, $k \in \mathbf{K}$. Pour chaque face F_k, on connaît son aire A_k, sa normale extérieure n_k et un sommet S_k sur son contour. Alors le volume du polyèdre P est donné par la formule suivante :

$$V(P) = \frac{1}{3} \sum_{k \in \mathbf{K}} A_k.\langle n_k, S_k \rangle .$$

La détermination des différentes faces peut se faire au moyen d'une structure de représentation par bord (cf. Chapitre I) et de complexité optimale en temps , i.e. en $0(p^2)$.

Le tableau suivant donne un comparatif des deux méthodes :

- la fonction choisie est $F(t)=\begin{pmatrix} 5 \\ 6t \\ 6t^2 \end{pmatrix}$ pour $t \in [0,1]$ et $N_i = \int_{t_{i-1}}^{t_i} F(t)dt$ avec $t_i = \frac{i}{p}$. Les différents temps de calcul sont donnés par tc et les volumes trouvés sont donnés par V. Le volume exact du zonoïde Z(F) est 1 .

	Méthode (a)		Méthode (b)	
p	tc	V	tc	V
10	0,02	0,9504000	0,43	0,9504000
20	0,23	0,9875250	1,86	0,9875250
50	3,60	0,9960052	14,15	0,9960057
100	33,13	0,9995001	74,07	0,9994984
200	262,52	0,9998750	328,42	0,9998729

Figure IV-3- **Comparatif des méthodes de calcul de volume**

Voyons maintenant de manière expérimentale la relation entre le nombre de vecteurs du zonoèdre approximant et l'erreur relative faite sur le calcul du volume.

Pour chacun des cinq cas suivants, on détermine pour différentes valeurs de p, la valeur e_p qui mesure l'écart de volume relatif entre le zonoïde Z(F) et son zonoèdre approximant $Z_p(F)$:

$$e_p = \frac{V(Z(F)) - V(Z_p(F))}{V(Z(F))}$$

(1) $F(t) = (5,6.t,6.t^2)$, $t \in [0,1]$, $t_i = i/p$, $V(Z(F)) = 1$

(2) $F(t) = (1, \cos t, \sin t)$, $t \in [0,2\pi]$, $t_i = 2i\pi/p$, $V(Z(F)) = 4\pi^2$

(3) $F(t) = (\exp(-t),\exp(-2t)/\sqrt{2},\exp(-3t)/3)$,

$t \in [0,\infty[$, $t_i = -\mathrm{Log}(\sqrt{4 - \frac{3i}{p}} - 1)$, $V(Z(F)) = \frac{\sqrt{2}}{1080}$

(4) $F(t) = (1,t,t^3)$, $t \in [-1,1]$, $t_i = 2i/p - 1$, $\qquad V(Z(F)) = \frac{313}{3360}$

(5) $F(t) = (5,6.t,6.t^2)$, $t \in [0,1]$, $t_i = \sqrt{\frac{i}{p}}$, $\qquad V(Z(F)) = 1$

Considérons l'expression $\zeta_p = \max_{i=1}^{p} (s_i - s_{i-1})$ avec $s_i = \int_{t_0}^{t_i} \| F'(t) \|.dt$, abscisse curviligne du graphe de F en t_i. Nous allons montrer que e_p est lié à ζ_p. Pour cela les intervalles $[t_{i-1},t_i]$ ont été choisis de manière à ce que l'expression ζ_p soit de l'ordre de $\frac{1}{p}$ pour les exemples (1),(2),(3) et (4) et de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{p}}$ pour l'exemple (5).

	e_p (exprimé en %)				
p	(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
20	1,25	1,64	1,47	2,21	8,57
40	0,31	0,41	0,37	0,55	3,43
60	0,14	0,18	0,16	0,25	1,98
80	0,078	0,10	0,092	0,14	1,33
100	0,050	0,066	0,059	0,089	0,973
120	0,035	0,046	0,041	0,062	0,754
140	0,025	0,034	0,030	0,045	0,607
160	0,020	0,026	0,023	0,035	0,503
180	0,015	0,020	0,018	0,027	0,425
200	0,0125	0,0164	0,0147	0,022	0,362

Figure IV-4- **Erreur relative sur le calcul de volume**

Pour les quatre premiers exemples, l'erreur e_p est de l'ordre de p^{-2} soit ζ_p^2, alors que pour le dernier e_p est de l'ordre de $p^{-1.38}$. Ceci montre bien l'importance de la valeur de ζ_p dans le choix des t_i afin d'approximer au mieux par un zonoèdre un zonoïde défini par une famille différentielle.

Il faut donc que ζ_p soit de l'ordre de 1/p (ce qui est le mieux que l'on puisse obtenir) pour approximer un zonoïde Z(F) par un zonoèdre $Z_p(F)$ avec le volume le plus proche.

Comparons maintenant ce résultat (e_p en $O(p^{-2})$) avec celui de la proposition IV-1-7; cette dernière dit qu'il existe p (p de l'ordre de ε^{-2}) vecteurs de $\mathbb{R}^3$ tels que le zonoèdre Z_p associé

vérifie :

$$B^3 \subset Z_p \subset (1+\varepsilon).B^3 \Rightarrow \left| \frac{V(B^3)-V(Z_p)}{V(B^3)} \right| \leq (1+\varepsilon)^3 - 1 \approx 0(\varepsilon) \approx 0(p^{-0.5})$$

Ce résultat est évidemment plus faible que celui trouvé expérimentalement, car les zonoïdes définis par une famille différentielle forment un sous-ensemble particulier parmi l'ensemble des zonoïdes.

Nous pouvons ensuite poser le problème suivant : pour un p donné, existe-t-il une partition optimale de $[0,\Delta t]$ en p intervalles $[t_{i-1},t_i]$ tel que le volume de $Z_p(F)$ soit maximal (et donc le plus proche de celui de Z(F)) ?

• *Sélectivité totalement régulière*

■ *Définition IV-3-4* : La fonction F présente la condition de ***sélectivité totalement régulière*** lorsque la fonction F vérifie la condition suivante :

$$\forall t1,t2,\ 0 \leq t1 < t2 \leq \Delta t \text{ alors } \begin{cases} F(t1) \wedge F(t3) \wedge F(t2) > 0 \text{ pour } t3 \in\ ]t1,t2[\\ F(t1) \wedge F(t3) \wedge F(t2) < 0 \text{ pour } t3 \notin [t1,t2] \end{cases}.$$

On dira aussi que F est ***S.T.R.***.

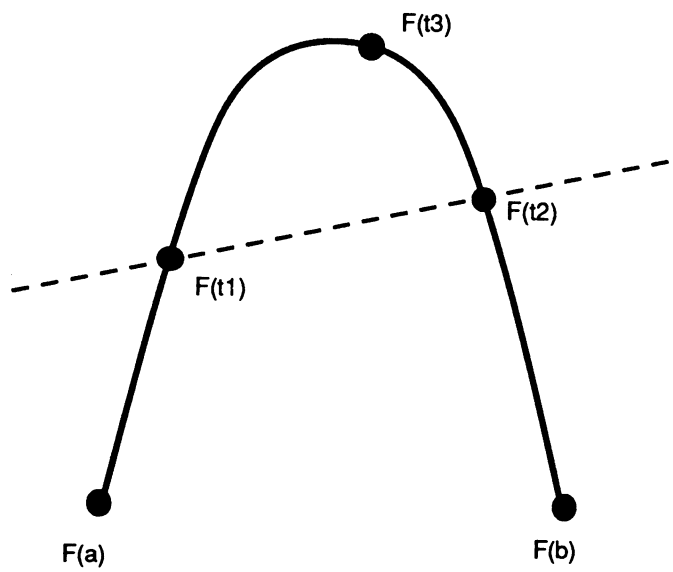


Figure IV-5 - **Diagramme projectif continu d'une fonction F S.T.R.**

■ *Proposition IV-3-5* : si $\forall t1,t2,\ a \le t1 < t2 \le b$ vérifiant :

$$\begin{cases} F(t1) \wedge F(t3) \wedge F(t2) > 0 \text{ pour } t3 \in\ ]t1,t2[\\ F(t1) \wedge F(t3) \wedge F(t2) < 0 \text{ pour } t3 \notin [t1,t2] \end{cases}$$

alors l'équation de la surface S du zonoïde peut être donnée sous la forme paramétrique suivante :

$$S = \{\ N(u_2)-N(u_1),\ a \le u_1 < u_2 \le b\ \} \cup \{\ S_F-N(u_2)+N(u_1),\ a \le u_1 < u_2 \le b\ \}$$

• preuve : Soit t1,t2 tel que $a \le t1 < t2 \le b$. Soient $\nu = F(t1) \wedge F(t2)$ et $F_\nu = \langle F,\nu \rangle$. Alors l'ensemble $A_\nu = [t1,t2]$ et $S_\nu = \int_{t1}^{t2} F(t).dt = N(t2)-N(t1)$ est un point de la surface (cf. proposition II-3-5).

En prenant $\mu = -\nu$ on trouve comme autre point de la surface $S_\mu = S_F - N(t_2) + N(t_1) = S_F - S_\nu$.

□

■ *Corollaire IV-3-6* [KAR68]: si F est de classe C_2 alors la proposition IV-3-5 s'exprime ainsi :

$$F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) > 0\ ,\ \forall t \in I$$

Le terme $F \wedge F' \wedge F''$ est appelé ***Wronskien*** ou ***déterminant Wronskien*** de F.

Dans ce cas, le graphe du diagramme projectif continu qui lui est associé ne présente pas de changement de courbure (cf. figure IV-5).

Exemple : considérons deux fonctions réelles u et s respectivement C_1 et C_2 avec u' et s'' de signe constant sur I. Alors la fonction $F(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ u(t) \\ s(u(t)) \end{pmatrix}$ vérifie la condition de S.T.R. .

En effet, $F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) = s''(t).[u'(t)]^3$ qui est de signe constant sur I.

Pour un zonoïde défini par une fonction S.T.R., l'expression du volume se simplifie :

■ *Corollaire IV-3-7* [VAL91]: Soit F une fonction S.T.R., de primitive N vérifiant N(0)=0, et Z(F) le zonoïde associé à la famille différentielle $\{F(t).dt)\}_{t \in [0,\Delta t]}$. Alors le volume du zonoèdre Z(F) est donné par la formule suivante :

$$V(Z(F)) = N(\Delta t) \wedge \int_0^{\Delta t} F(t) \wedge N(t)\, dt$$

Exemple : Soit $F(t)=\begin{pmatrix} 1 \\ \cos t \\ \sin t \end{pmatrix}$, $I=[0,2\pi]$; F(t) est S.T.R. :
en effet $F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) = 1$ quelque soit t ;

La fonction F admet une primitive $N(t)=\begin{pmatrix} t \\ \sin t \\ 1-\cos t \end{pmatrix}$; les pôles du zonoïdes Z(F) sont l'origine O et le point $S_F = \int_I F(t).dt = \begin{pmatrix} 2\pi \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

L'ensemble $\{N(t2)-N(t1), a \le t1 < t2 \le b\} \cup \{S_F-N(t2)+N(t1), a \le t1 < t2 \le b\}$ est la surface frontière de Z(F). Du fait de la périodicité des fonctions sin et cos, on peut réécrire l'équation de la surface sous la forme :

$$\begin{pmatrix} v \\ \cos u - \cos(u+v) \\ \sin(u+v) - \sin u \end{pmatrix} \text{avec } 0 \le u,v \le 2\pi.$$

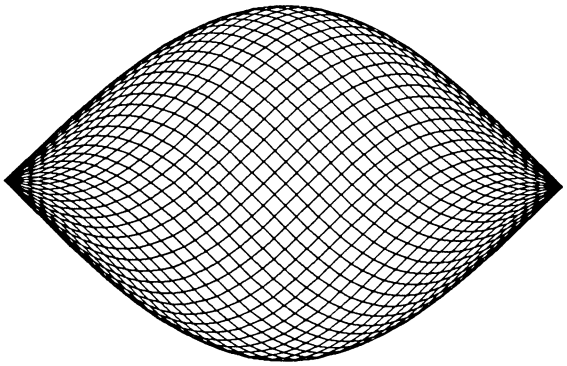


Figure IV-6 - **Représentation du zonoïde par facettisation**

• *Etudes de fonctions de base*

Dans ce paragraphe, nous étudions quelques fonctions de base, en particulier pour montrer l'utilisation des zonoèdres pour visualiser des zonoïdes.

Fonction 1 : $H(u)=\begin{pmatrix} \alpha_x.u^2+\beta_x.u+\gamma_x \\ \alpha_y.u^2+\beta_y.u+\gamma_y \\ \alpha_z.u^2+\beta_z.u+\gamma_z \end{pmatrix}$, $u \in [a,b]$. En prenant $t = \frac{u-a}{b-a}$ on obtient :

$$H(u) = F_A(t) = \begin{pmatrix} a_x.t^2+b_x.t+c_x \\ a_y.t^2+b_y.t+c_y \\ a_z.t^2+b_z.t+c_z \end{pmatrix} = A.F(t) \text{ avec}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_x & b_x & c_x \\ a_y & b_y & c_y \\ a_z & b_z & c_z \end{pmatrix} \text{ et } F(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ t \\ t^2 \end{pmatrix} \text{pour } t \in [0,1]$$

Nous supposerons par la suite que A est de rang 3, i.e. inversible (si A est de rang 2, le zonoïde obtenu se trouve dans un plan, et si A est de rang 1 le zonoïde obtenu se trouve sur une droite c'est à dire qu'il est égal à un segment de droite).

Ainsi par l'opérateur linéaire A, l'étude de Z(H) revient à étudier le cas particulier Z(F) car Z(H) et Z(F) sont semblables.

F vérifie $F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) = 2$. La fonction vérifie la condition de sélectivité totalement régulière.

Soit Z(F) le zonoïde défini par F. On a les relations suivantes :

$$V(Z(F)) = \frac{1}{180} \quad \text{et} \quad N(t)=\begin{pmatrix} t \\ \frac{t^2}{2} \\ \frac{t^3}{3} \end{pmatrix}$$

L'expression paramétrique de la frontière de Z(F) est donnée par

$\partial Z(F) = \partial Z_+ \cup \partial Z_-$, $\partial Z_- = S_F - \partial Z_+$

avec $\partial Z_+ = \{ \begin{pmatrix} u-t \\ \frac{u^2}{2} - \frac{t^2}{2} \\ \frac{u^3}{3} - \frac{t^3}{3} \end{pmatrix}, 0 \leq t \leq u \leq 1 \}$ et $S_F = N(1)-N(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{3} \end{pmatrix}$

Remarque : le changement de variable (t,u)=(v.w,v) donne

$$\partial Z_+ = \{ \begin{pmatrix} v-v.w \\ \frac{1}{2}(v^2 - v^2w^2) \\ \frac{1}{3}(v^3 - v^3w^3) \end{pmatrix}, (v,w) \in [0,1]^2 \}.$$

On remarque que ∂Z_+ est une partie de surface algébrique (paramétrique polynomiale).

■ *Corollaire IV-3-8* : Si F est une fonction polynomiale de degré n dans $\mathbb{R}^3$ vérifiant la condition de sélectivité totalement régulière, de primitive N, t décrivant l'intervalle [0,1], alors la frontière du zonoïde Z(F) est formé de deux parties de surfaces algébriques ∂Z_+ et ∂Z_- symétriques l'un par rapport à l'autre. ∂Z_+ s'écrit sous la forme suivante :

$\partial Z_+ = \{ N(v)-N(v.w) , (v,w) \in [0,1]^2 \}$ et $\partial Z_- = N(1)-N(0) - \partial Z_+$

Dans le cas général du zonoïde Z(H), les résultats suivants :

$V(Z(H))=|\det(A)|.V(Z(F))$ et $\partial Z(H)=A.\partial Z(F)$

Les deux figures suivantes représentent les zonoïdes Z(F) et Z(H) pour :

$H(t)=\begin{pmatrix} 1 \\ 2.t \\ 3.t^2 \end{pmatrix}$ pour $t \in [-1,1]$

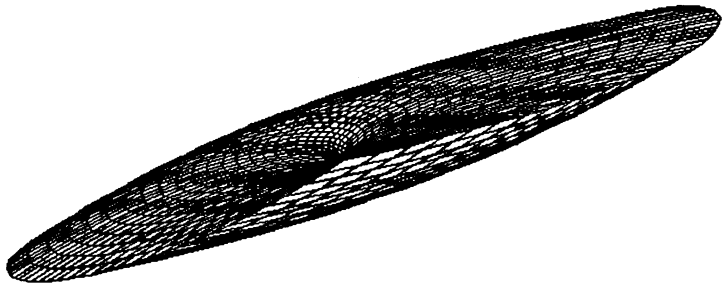


Figure IV-7 - **Représentation du zonoïde Z(F)**

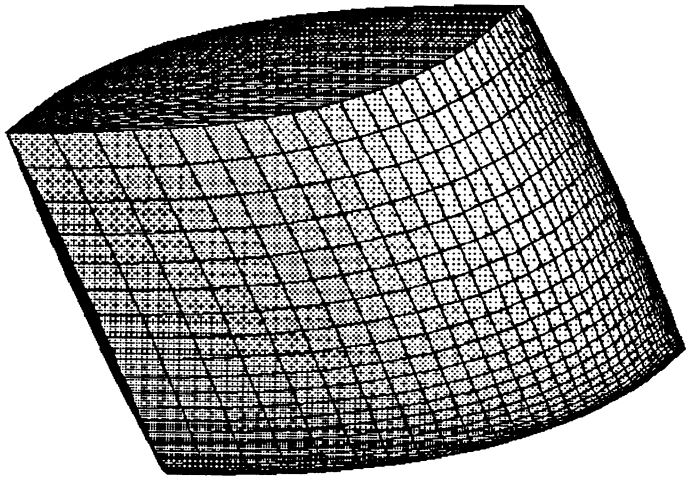


Figure IV-8 - **Représentation du zonoïde Z(H)**

Fonction 2 : $F(t) = \begin{pmatrix} \exp(-\alpha.t) \\ \exp(-\beta.t) \\ \exp(-\gamma.t) \end{pmatrix}$ avec $\alpha,\beta,\gamma > 0$ et $t \in \mathbb{R}_+$.

Cette fonction est un des modèles mathématiques utilisés dans les processus de distillation (équation de FENSKE).

F est de classe C^∞ et admet comme primitive $N(t) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}[1-\exp(-\alpha.t)] \\ \frac{1}{\beta}[1-\exp(-\beta.t)] \\ \frac{1}{\gamma}[1-\exp(-\gamma.t)] \end{pmatrix}$

$$F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) = \begin{vmatrix} \exp(-\alpha.t) & -\alpha.\exp(-\alpha.t) & \alpha^2.\exp(-\alpha.t) \\ \exp(-\beta.t) & -\beta.\exp(-\beta.t) & \beta^2.\exp(-\beta.t) \\ \exp(-\gamma.t) & -\gamma.\exp(-\gamma.t) & \gamma^2.\exp(-\gamma.t) \end{vmatrix}$$

$$= \exp[(-\alpha-\beta-\gamma).t].\begin{vmatrix} 1 & -\alpha & \alpha^2 \\ 1 & -\beta & \beta^2 \\ 1 & -\gamma & \gamma^2 \end{vmatrix}$$

Cette expression ne change donc pas de signe sur $\mathbb{R}_+$. La frontière de Z(F) est donc donnée par l'expression suivante :

$$\partial Z(F) = \partial Z_+ \cup \partial Z_- = \{N(t2)-N(t1), 0 \leq t1 < t2\} \cup \{S_F - N(t2) + N(t1), 0 \leq t1 < t2\} \text{ avec}$$

$$S_F = \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha} \\ \frac{1}{\beta} \\ \frac{1}{\gamma} \end{pmatrix}$$

En faisant le changement de variable exp(-t1) = 1-u.v et exp(-t2) = 1-u, on obtient comme expression de ∂Z_+ l'ensemble suivant :

$$\left\{ \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha}[(1-u.v)^{\alpha}-(1-u)^{\alpha}] \\ \frac{1}{\beta}[(1-u.v)^{\beta}-(1-u)^{\beta}] \\ \frac{1}{\gamma}[(1-u.v)^{\gamma}-(1-u)^{\gamma}] \end{pmatrix}, (u,v) \in [0,1]^2 \right\}$$

Remarque : pour des valeurs de α,β et γ positives entières, le zonoïde peut aussi être défini par une fonction polynomiale S.T.R..

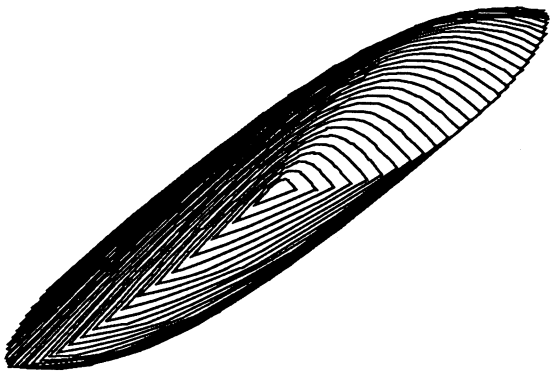


Figure IV-9 - **Représentation par coupes parallèles du zonoïde pour α=0.2, β=1 et γ= 5**

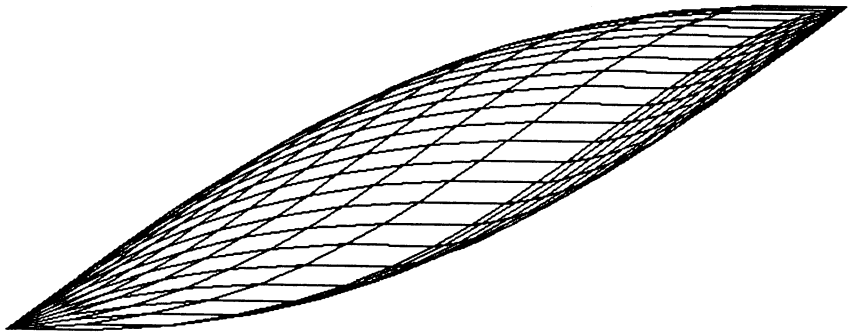


Figure IV-10 -**Représentation du zonoïde facettisée pour α=0.2, β=1 et γ=5.**

Fonction 3 : $F(t) = \begin{pmatrix} 1 \\ 2t \\ 4t^3 \end{pmatrix}$ pour $t \in [-1,1]$. F est de classe C^∞ et admet comme primitive $N(t)=\begin{pmatrix} t \\ t^2 \\ t^4 \end{pmatrix}$. Le volume de Z(F) est égal à $\frac{313}{210}$.

$$F(t) \wedge F'(t) \wedge F''(t) = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2t & 2 & 0 \\ 4t^3 & 12t^2 & 24t \end{vmatrix} = 48\,t.$$

Cette expression change de signe lorsque t change de signe. Nous ne sommes plus dans le cas de la sélectivité totalement régulière. L'expression de ∂Z ne peut plus être donnée comme pour les cas précédents comme l'union de deux surfaces régulières.

Soit $\nu \in S^{n-1}$. Considérons le diagramme projectif obtenu pour $\Pi=\{x=1\}$. L'intersection du plan $\nu^{\perp}$ avec le diagramme projectif nous donne les valeurs de t pour lesquelles $F_\nu(t)$ est positif.

Soit $M = \int_A F(t).dt$ avec $A_\nu=\{t \in I, F_\nu(t) \geq 0\}$ ($M \in \partial Z(F)$).

Le diagramme projectif dans le plan $\{x=1\}$ a pour équation $z=y^3/2$.

L'intersection de cette courbe et d'un plan $\nu^{\perp} = \{a.z+b.y+c.x=0\}$ donne l'équation suivante : $\frac{a}{2}.t^3+b.t+c=0$

les trois racines t1,t2,t3 vérifient donc t1+t2+t3=0 (coefficient en t^2). Les valeurs de t1 et t2 étant prises entre -1 et 1, l'expression de M dépend donc de -t1-t2.

M s'écrit sous l'une des formes suivantes :

- $M=N(t2)-N(t1)$ pour $-1 \leq t1 \leq t2 \leq 1 \leq -t2-t1$
- $M=N(t2)-N(t1)$ pour $-t2-t1 \leq -1 \leq t1 \leq t2 \leq 1$
- $M=N(t2)-N(t1)+N(1)-N(-t2-t1)$ pour $-1 \leq t1 \leq t2 \leq -t2-t1 \leq 1$ et $-1 \leq t1+t2 \leq 1$

En prenant les points symétriques, on obtient les expressions suivantes :

- $M=S-[N(t2)-N(t1)]$ pour $-1 \leq t1 \leq t2 \leq 1 \leq -t2-t1$
- $M=S-[N(t2)-N(t1)]$ pour $-t2-t1 \leq -1 \leq t1 \leq t2 \leq 1$
- $M=S-[N(t2)-N(t1)+N(1)-N(-t2-t1)]$ pour $-1 \leq t1 \leq t2 \leq -t2-t1 \leq 1$ et $-1 \leq t1+t2 \leq 1$

Sur la figure suivante, on retrouve le découpage de la surface de Z(F) en six parties correspondant aux différentes écritures des points M énoncées précédemment.

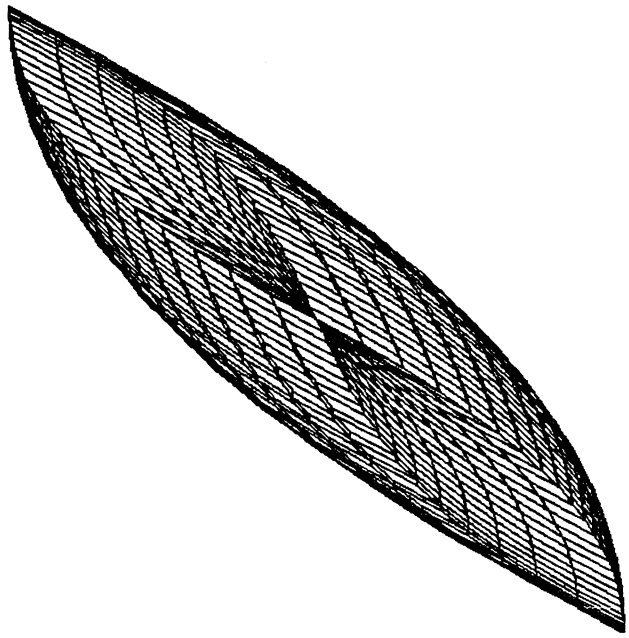


Figure IV-11 - **Représentation facettisée du zonoïde Z(F)**

Fonction 4 [VAL91a]: Le modèle présenté ci-dessous est un des modèles linéaires utilisés en chromatographie. La chromatographie consiste à injecter au bas d'une colonne à l'instant t=0 une quantité donnée d'un produit contenant deux composés différents. Puis à différentes hauteurs de la colonne, on étudie les concentrations des deux produits en fonction du temps.

Les courbes décrivant les concentrations des deux composés en fonction du temps et de la hauteur de la colonne où ont été faites les mesures s'appelle un *chromatogramme*.

Un des modèles linéaires pour représenter le produit P à un temps t et une hauteur z (proportionnelle à un entier N) de la colonne est le modèle gaussien. La fonction $F(N,t) = (F^1(N,t),F^2(N,t),F^3(N,t))$ où F^1 et F^2 représentent les concentrations (à l'instant t et à la hauteur N) des deux composés dans le produit P et F^3 la concentration totale du produit P :

$$F^1(N,t) = C_1.\frac{\sqrt{N}}{t\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}N.\left(\frac{\overline{t_1}-t}{\bar{t}}\right)^2\right),\ F^2(N,t) = C_2.\frac{\sqrt{N}}{t\sqrt{2\pi}}\exp\left(-\frac{1}{2}N.\left(\frac{\overline{t_2}-t}{\bar{t}}\right)^2\right),\ F^3(N,t) = C_3$$

où $\overline{t_1}$ (resp. $\overline{t_2}$) est un temps dépendant du premier (resp. second) composé, et $\bar{t}=(\overline{t_1}+\overline{t_2})/2$.

A chaque valeur de N, on associe le zonoïde correspondant à la famille différentielle $\{F(N,t)\}_{t\in I} = \{F_N(t)\}_{t\in I}$ où I est un intervalle centré en $\bar{t}$.

On peut alors remarquer que la fonction F_N vérifie la condition de sélectivité totalement régulière si et seulement si $N \leq N_c = \left(\frac{\overline{t_2}-\overline{t_1}}{\overline{t_2}+\overline{t_1}}\right)^2$. Ceci vient du fait que plus la hauteur est élevée, plus les courbes représentatives des deux composés sont écartées l'une de l'autre.

La figure ci-dessous montre pour deux valeurs de N, l'une supérieure et l'autre inférieure

à N_c, les courbes de concentration en fonction du temps, les diagrammes projectifs continus et les zonoïdes associés. On remarque que pour le zonoïde correspondant au cas N=400 présente une surface plus régulière que celui correspondant à N=1000. Cela est dû à la perte de la condition de sélectivité totalement régulière lorsque N est supérieure à N_c.

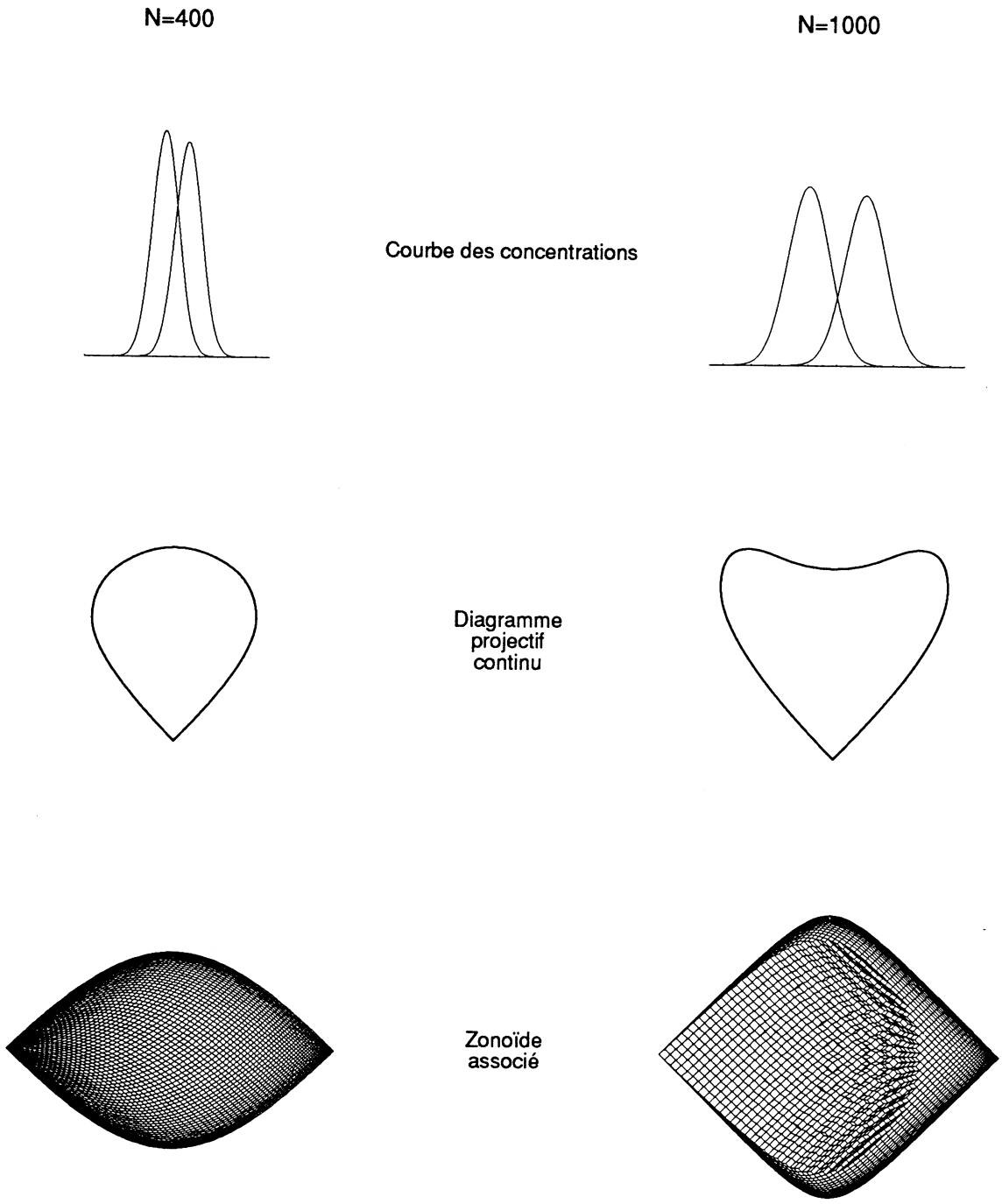


Figure IV-12 - **Comparatif entre une fonction S.T.R. et une fonction non S.T.R.**

IV-4 Faisabilité approchée d'un mélange dans le cas de la sélectivité totalement régulière

Dans ce paragraphe, nous nous intéressons au problème suivant : soit un processus continu défini par une famille différentielle $\{F(t).dt\}$ avec F fonction de $[0,\Delta t]$ à valeurs dans $\mathbb{R}^3$ vérifiant la condition de sélectivité totalement régulière et soit M un mélange. Ce mélange est-il faisable et si oui donner une décomposition du mélange, i.e. trouver une fonction λ de $[0,\Delta t]$ à valeurs dans $[0,1]$ tel que :

$$M = \int_0^{\Delta t} \lambda(t).F(t).dt$$

Résoudre directement le problème précédent dans le cas général est souvent impossible. La méthode présentée ci-dessous consiste à considérer non pas le zonoïde lui-même mais un zonoèdre l'approximant. La disposition particulière des vecteurs de base formant ce zonoèdre permet d'élaborer un algorithme de faisabilité d'un mélange avec une complexité en temps et en place mémoire utile linéaire par rapport au nombre de vecteurs de base du zonoèdre. En particulier, cette méthode ne nécessite aucune structure de données particulière, le zonoèdre n'étant pas explicitement construit.

• *Du zonoïde au zonoèdre approximant*

Hypothèses : Afin de rester dans un cadre concret, nous supposons pour la suite que F est une fonction continue sur $[0,\Delta t]$ de primitive N et qu'il existe $\mu \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle F(t),\mu \rangle > 0$ pour tout t.

Soit $p \in \mathbb{N}$; considérons $0=t_0 < t_1 < \ldots < t_{p-1} < t_p = \Delta t$ et soient les p vecteurs $N_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} F(t)dt$. et $Z_p(F)$ le zonoèdre associé à ces p vecteurs.

Nous savons que $Z_p(F)$ est inclus dans Z(F) ainsi si le mélange est faisable dans $Z_p(F)$, il le sera aussi dans Z(F). De plus, lorsque $\underset{i=1}{\overset{p}{\mathrm{Max}}} (t_i.t_{i-1})$ est équivalent à 1/p alors nous avons montré expérimentalement que $[V(Z(F)) - V(Zp(F))] / V(Z(F))$, c'est à dire l'erreur relative sur les volumes, est de l'ordre de $O(p^{-2})$. Ainsi la probabilité de déterminer la non-faisabilité de M sur les vecteurs de base de $Z_p(F)$ alors que ce mélange appartient à Z(F) sera très faible pour des valeurs de p assez grandes.

La méthode décrite ci-dessous consiste à travailler sur $Z_p(F)$ approximation de $Z(F)$ à p^{-2} près (au sens du volume) pour déterminer d'une part l'appartenance (faisabilité) de M à $Z_p(F)$ et si cela est le cas, chercher M sous la forme $\sum_{i=1}^{p} \lambda_i.N_i$.

■ *Définition IV-4-1* : Nous dirons qu'un zonoèdre Z_p est ***régulier*** si ces p vecteurs de base N_i vérifient les hypothèses suivantes :

- il existe $\mu \in \mathbb{R}^3$ tel que $\langle N_i,\mu \rangle > 0$
- quelque soit le triplet (i,j,k) tel que $1 \leq i < j < k \leq p$, $N_i \wedge N_j \wedge N_k > 0$

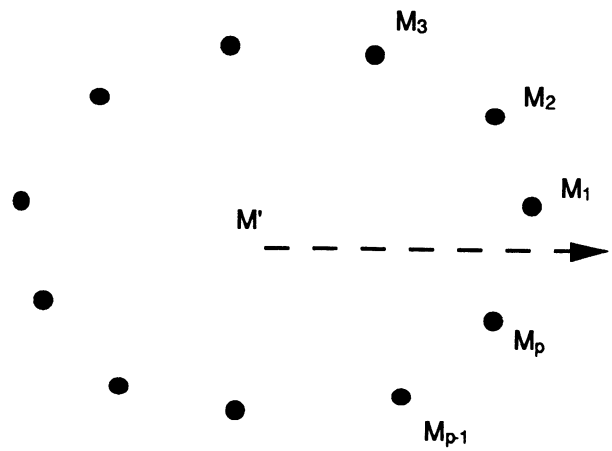


Figure IV-13 -
Premier diagramme projectif

De manière géométrique, ces conditions s'interprètent de la manière suivante : dans le premier diagramme projectif, tous les M_i sont sommets de leur enveloppe convexe et sont ordonnés autour d'un point M' intérieur à cette enveloppe convexe.

• *Méthode de décomposition d'un mélange sur un zonoèdre régulier*

De la proposition II-4-1, nous en déduisons le corollaire suivant :

■ *Corollaire IV-4-2* : Soient O l'origine et $S = \sum_{i=1}^{p} N_i$ et soit Π un plan contenant O, S et M Alors l'ensemble $Z_p \cap \Pi$ est un zonogone dans $\mathbb{R}^3$ (que nous noterons par la suite $\overline{Z}_q = Z\{\overline{N}_1, \overline{N}_2, \ldots, \overline{N}_q\}$) .

■ *Proposition IV-4-3* : Si Z_p est un zonoèdre régulier alors la détermination du zonogone

$\overline{Z}_q = Z_p \cap \Pi$ peut être faite en un temps de l'ordre de *O(p)*.

■ *Corollaire IV-4-4* : La faisabilité d'un mélange M ainsi qu'une éventuelle décomposition sur les vecteurs de base peuvent être faites en un temps de l'ordre de *O(p)*.

• preuve du corollaire IV-4-4 : Dans un premier temps, nous calculons le zonogone $\overline{Z}_q = Z_p \cap \Pi$ avec Π contenant les trois points O, S et M.

Connaissant alors un zonogone avec ses vecteurs de base ordonnés, l'appartenance et la décomposition d'un mélange sur les vecteurs de base peuvent être trouvées en *O(p)* (la décomposition seule (en supposant connue l'appartenance) peut être déterminée en *O(log p)* (cf. corollaire II-5-4). □

Algorithme : La méthode de calcul des différents vecteurs formant le zonogone $\overline{Z}_q$ est une méthode de suivi d'intersection classique. Mais du fait de la répartition particulière des vecteurs de base, cette méthode :

- évite de construire explicitement une structure de données représentant le zonoèdre Z_p;
- permet de trouver aisément les faces adjacentes à une face F du zonoèdre.

La répartition des vecteurs de base fait qu'il n'existe pas trois vecteurs de base coplanaires. Donc toutes les faces du zonoèdre sont des parallélogrammes dont les expressions sont les suivantes :

pour tout couple de vecteurs de base N_i, N_j, $i<j$, correspondent deux faces

$$F_{ij} = \sum_{i<k<j} N_k + [0,N_i] + [0,N_j] \quad \text{et} \quad \overline{F}_{ij} = S - F_{ij} = \sum_{k<i} N_k + \sum_{k>j} N_k + [0,N_i] + [0,N_j].$$

Convention :

- si $i>j$ alors $F_{ij} = \overline{F}_{ji}$.
- soit i un indice : si i vaut p alors i+1 vaudra 1, de même si i vaut 1, alors i-1 vaudra p.

De plus, nous pouvons montrer facilement que les faces adjacentes à F_{ij} sont les quatre faces :

- $F_{i+1\ j}$, $F_{i-1\ j}$, $F_{i\ j+1}$ et $F_{i\ j-1}$ si $i<j-1$;
- $F_{i+1\ i+2}$, $F_{i-1\ i}$, $F_{i\ i+2}$ et $F_{i-1\ i+1}$ si $i=j-1$;

Dans un premier temps, la méthode recherche une première face intersectée par Π en l'occurrence une face $F_{1\ 1+1}$ issue de l'origine O.

Ensuite connaissant une face F_{ij} intersectée par le plan Π, la face suivante intersectée est $F_{i-1\ j}$ ou $F_{i\ j+1}$.

Détermination de la première face intersectée :

Soit μ une normale au plan Π.

La première face $F_{l\ l+1}$ vérifiera $\langle N_l,\mu\rangle < 0$ et $\langle N_{l+1},\mu\rangle \geq 0$.

On pose B=O, S=O, m=l, n=l+1, q=0

Détermination de la face suivant F_{mn} :

Chercher le point S' vérifiant $\langle S,\mu\rangle = 0$ sous l'une des formes suivantes :

1) $S' = B + N_m + \lambda.N_n$;

2) $S' = B + \lambda.N_m + N_n$.

avec $\lambda \in [0,1]$.

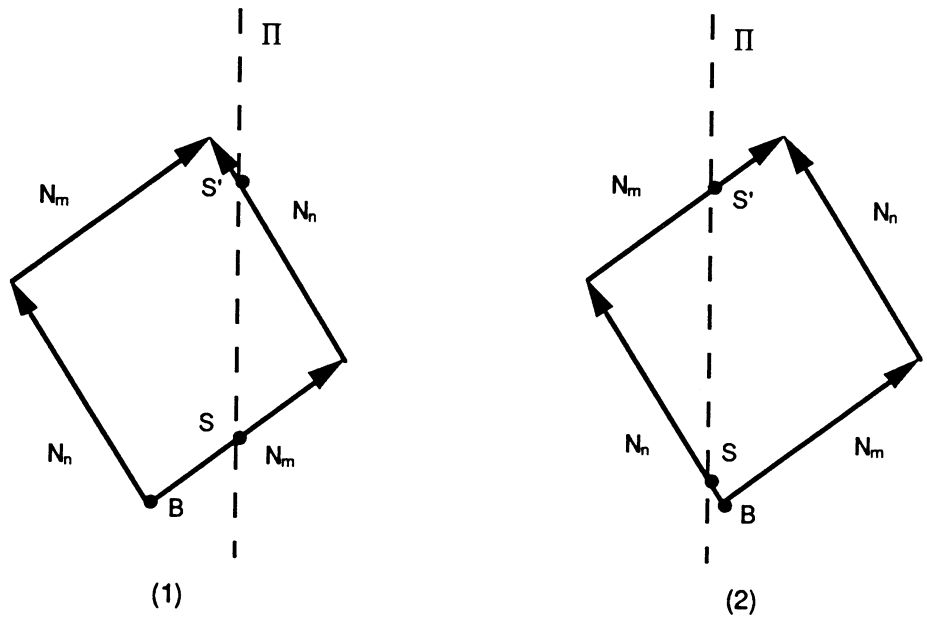


Figure IV-14 - **Détermination de la face suivante intersectée par Π**

Dans le cas (1) : B prend la valeur $B+N_m$ et m prend la valeur m-1

Dans le cas (2) : B prend la valeur $B+N_n$ et n prend la valeur n+1

Si S' différent de S alors q prend la valeur de q+1 et $\overline{N}_q = S'-S$
S prend la valeur de S'

Afin de déterminer une décomposition de M sur les p vecteurs de base N_i, il faut conserver pour chaque vecteur $\overline{N}_i$ les deux valeurs λ^i_m et λ^i_n ainsi que les deux indices mi et ni tels que $\overline{N}_i = \lambda^i_m.N_{mi} + \lambda^i_n.N_{ni}$.

La recherche de la première face intersectée par Π se fait en temps linéaire à p, de même le nombre de vecteurs $\overline{N}_i$ (non nuls) ainsi calculés est au plus de p-1; le calcul d'un vecteur $\overline{N}_i$ se faisant en temps constant, la détermination de $\overline{Z}_q$ comme intersection de Z_p et Π se fait en temps et en place mémoire proportionnellement à p.

Remarque : en reliant sur le premier diagramme projectif les points M_{mi} et M_{ni}, on obtient la figure suivante :

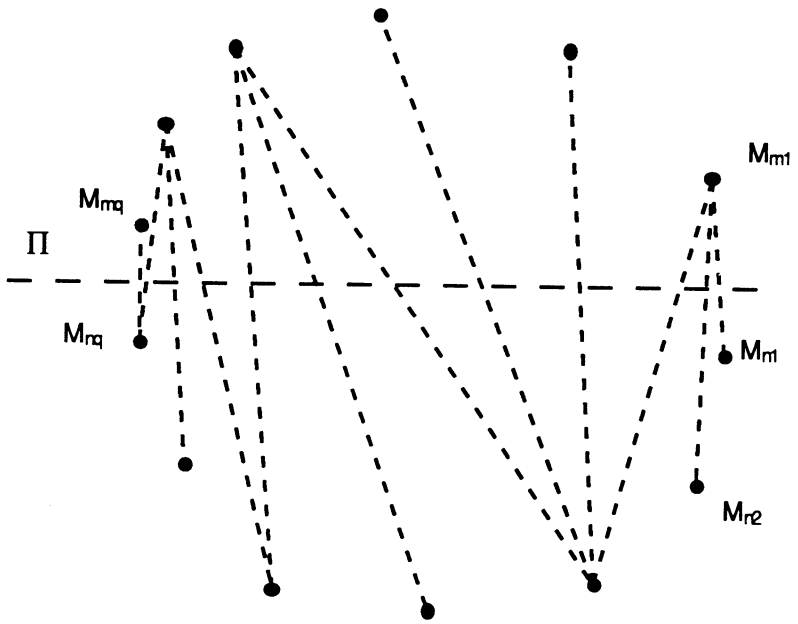


Figure IV-15 - **Cheminement de l'algorithme de détermination de $\overline{Z}_q$**

Une fois calculés les q vecteurs $\overline{N}_i$, le problème revient à déterminer d'une part l'appartenance d'un point M dans un zonogone (associé à la base $\{\overline{N}_i\}$ de vecteurs coplanaires) puis éventuellement une décomposition de M.

Déterminer si un point M appartient à un zonogone associé à q vecteurs de base ordonnées peut être fait en O(q), de même trouver une décomposition de M sur ces mêmes vecteurs de base peut aussi être fait en O(q) (et même en O(log q) cf. corollaire II-5-4)

Tout vecteur $\overline{N}_j$ étant associé à deux vecteurs N_i, une décomposition de M sur les p vecteurs N_i peut être faite en temps proportionnel à p. Ceci prouve la proposition IV-4-3. □

Remarque : si $m_{i-1}+1=m_i=m_j=m_{j+1}-1$ (resp. $n_{i-1}+1=n_i=n_j=n_{j+1}-1$) alors :
$\lambda_n^i+\ldots+\lambda_n^j=1$ (resp. $\lambda_m^i+\ldots+\lambda_m^j=1$)

De cette remarque, nous pouvons en déduire l'expression de M, donnée par la méthode décrite précédemment, en fonction des p vecteurs N_i lors celui-ci est faisable :

a)
$$M = N_1+N_2+\ldots+N_{i-1}+\lambda_i.N_i + \lambda_j.N_j+N_{j+1}+\ldots+N_{k-1}+\lambda_k.N_k + \lambda_l.N_l+N_{l+1}+\ldots+N_{p-1}+N_p$$

b)
$$M = \lambda_i.N_i+N_{i+1}+\ldots+N_{j-1}+\lambda_j.N_j + \lambda_k.N_k+N_{k+1}+\ldots+N_{l-1}+\lambda_l.N_l$$

Des deux expressions précédentes, nous en déduisons le corollaire suivant en faisant tendre p vers l'infini et la suite de zonoèdres $Z_p(F)$ vers $Z(F)$:

■ *Corollaire IV-6-5* : Soit M un point appartenant à un zonoïde défini par une famille différentielle vérifiant la propriété de sélectivité totalement régulière. Alors il existe t1, t2, t3 et t4 avec $0 \le t1 \le t2 \le t3 \le t4 \le \Delta t$ tels que M s'écrive sous l'une des deux formes suivantes :

a)
$$M = \int_0^{t_1} F(t).dt + \int_{t_2}^{t_3} F(t).dt + \int_{t_4}^{\Delta t} F(t).dt$$

b)
$$M = \int_{t_1}^{t_2} F(t).dt + \int_{t_3}^{t_4} F(t).dt$$

Remarque : Dans ce cas particulier, la structure du bord du zonoèdre, notamment la disposition des faces, est implicitement connue; connaissant, par l'algorithme précédent, une décomposition d'un mélange M, on pourrait envisager un algorithme rapide basé sur la méthode de la corde fournissant plusieurs décompositions pour un même mélange.

• *Résultats expérimentaux*

Afin de corroborer le résultat théorique sur la complexité en 0(p) et de montrer la rapidité de cette méthode, un comparatif est fait en prenant un même cas de figure et en le traitant :

(1) d'une part en considérant le zonoèdre comme quelconque, i.e. en construisant d'abord la structure de bord du zonoèdre (structure F.E.E.L.) puis en déterminant une décomposition par la méthode la corde,

(2) d'autre part en tenant compte de la sélectivité totalement régulière, i.e. en utilisant l'algorithme décrit précédement .

Méthode (1)		Méthode (2)	
p	Temps	p	Temps
10	0,45	200	0,29
20	1,98	400	0,56
30	4,63	600	0,84
40	8,15	800	1,12
50	13,32	1000	1,40
60	19,38	1200	1,68
70	26,63	1400	1,97
80	35,13	1600	2,25
90	44,92	1800	2,53
100	55,75	2000	2,80

Figure IV-16 - **Comparatif entre la méthode générale et la méthode adaptée aux zonoèdres réguliers**

Un ajustement linéaire du graphe de Log Temps en fonction de Log p montre pour la méthode (1) que le temps est de l'ordre de $p^{2.09}$ alors que pour la méthode (2) il est de l'ordre de $p^{0.99}$ ce qui confirme les résultats théoriques.

De même, les expériences faites montrent que la place mémoire (en octets) utilisée par la méthode (1) est de l'ordre de $100.p^2$ alors qu'elle n'est que de 75.p pour la méthode (2).

Conclusion

Dans le cas de zonoïde défini par une famille différentielle, leur approximation par un zonoèdre est intéressant du point du vue géométrique. L'expérience montre que le nombre de vecteurs nécessaire afin d'avoir une bonne "approximation" visuelle de zonoïdes définie par une famille différentielle est de l'ordre de 50. Un logiciel de visualisation de zonoèdres et d'approximation de zonoïdes a été développé et permet de traiter jusqu'à 200 vecteurs de base. Les représentations graphiques contenues dans l'annexe ont été réalisées grâce à ce logiciel.

BIBLIOGRAPHIE

S. ANSALDI - L. DE FLORIANI - B. FALCIDIENO **[ANS85]**
« Geometric modeling of solid objects by using a Face Adjacency Graph representation »
A.C.M. Volume 19, n° 3 (1985) p 131-139

C. BANDLE **[BAN80]**
« Isoparametric inequalities applications »
Pitman, London (1980).

M. BERGER **[BER78]**
« Géométrie 3/ convexes et polytopes, polyèdres réguliers, aires et volumes »
Cedic/Fernand Nathan, (1978).

U. BETKE - P. Mc MULLEN **[BET83]**
« Estimating the sizes of convex bodies from projections »
Jour. London Math. Soc. (2) 27 (1983) p. 525-538.

E.D. BOLKER **[BOL69]**
« A class of convex bodies »
Trans. Amer. Math. Soc. 145 (1969) p. 323-346

T. BONNESEN - W. FENCHEL **[BON34]**
« Theorie der konvexen Körper »
Ergebnisse der Mathematik, vol. 3 Springer Verlag (1934).

K.Q. BROWN **[BRO58]**
« Convex surfaces »
(New York 1958).

J. BOURGAIN - J. LINDENSTRAUSS - V. MILMAN **[BOU89]**
« Approximation of zonoids by zonotopes »
Acta Math., 162 (1989) - p. 73-141.

H. BUSEMANN **[BUS79]**
« Geometric transformations for fast geometric algorithms »
Ph.D. Thesis, Dept. of Computer Science, Carnegie Mellon Univ., 1979.

T. CARLIER - N. SZAFRAN **[CAR89]**
« Structures de données pour la représentation et la manipulation des polyèdres »
Rapport de recherche RR-772-M- I.M.A.G. - (Mar. 1989)

B. CHAZELLE - L.J. GUIBAS - D.T. LEE **[CHA83]**
« The power of geometric duality»
24th Annual Symposium on Foundations of Computer Science - IEEE (1983), p217-225

B.L. CHILTON - H.S.M. COXETER **[CHI63]**
« Polar zonohedra »
(1963)

G. CHOQUET **[CHO68a]**
« Mesures coniques, affines et cylindriques : structures et opérations »
C.R. Acad. Sc. Paris 266 (1968) p. 567-569

G. CHOQUET **[CHO68b]**
« Mesures coniques, affines invariantes par isométries. Zonoformes, zonoèdres et fonctions de type négatif »
C.R. Acad. Sc. Paris 266 (1968) p. 619-621

H.S.M. COXETER **[COX35]**
« Withoff's construction for uniform polytopes »
Proc. London Math. Soc. (2) tome 38 (1935) p. 327-339

H.S.M. COXETER **[COX62]**
« The classification of zonohedra by means of projective diagrams »
J. Math. Pures Appl. (9) 41 (1962) p. 137-156

H.S.M. COXETER **[COX63]**
« Regular Polytopes »
2nd Edition, MacMillan, New York (1963)

M. DUC JACQUET - A. EBERHARD - B. LACOLLE **[DUC89]**
« Représentation et manipulation de polygones convexes dans $\mathbb{R}^2$ par dualité »
Rapport de recherche IMAG, - RR 771-M- mar. 1989.

H. EDELSBRUNNER - J. O'ROURKE - R. SEIDEL **[EDE86]**
« Constructing arrangements of lines and hyperplanes with applications »
SIAM J. Comput. 15 (1986) p. 341-363.

H. EDELSBRUNNER **[EDE87]**
« Algorithms in Combinatorial Geometry »
EATCS Monographs on Theoretical Computer Science, Vol. 10, Spinger-Verlag (1987).

E.S. FEDOROV **[FED53]**
« Nachala Ucheniya o Figurah»
Leningrad (1953)

L. FEJES-TOTH **[FEJ64]**
« Regular Figures»
Macmillan, Naw York (1964), p. 114-123.

D. GALE **[GAL56]**
« Neighboring on a convex polyhedron (in Linear inequalities ans related systems) »
ed. par H.W. KUHN & A.W. TUCKER - Princeton (1956)

D. GIRARD **[GIR86]**
« Convexes résidu et gestion de mélanges sur une plateforme »
Rapport de Recherche ELF-Aquitaine n° 6/577 (Juin 1986), p. 193-198

D. GIRARD - P. VALENTIN **[GIR89]**
« Zonotopes and mixtures management »
International Series of Numerical Mathematics, vol. 87, Birkhaüser Verlag (1989)

P.R. GOODEY **[GOO77]**
« Centrally symmetric convex sets and mixed volumes »
Mathematika 24 (1977), p. 193-198

H. HERMES - J.P. LASALLE **[HER69]**
« Functional analysis & Time Optimal Control»
Academic Press, New York (1969), p. 20-32

W. HILDENBRAND **[HIL81]**
« Short-Run Productions based on Microdata »
Econometrica, vol. 49, n°5 (1981), p. 1095-1125

B. GRÜNBAUM **[GRU67]**
« Convex polytopes »
Pure and Appl. Math., vol. 16, Interscience, New York (1967)

S. KARLIN **[KAR68]**
« Total positivity »
Stanford University Press (1968)

L. M. KELLY - W.O.J. MOSER **[KEL58]**
« On the number of ordinary lines determined by n points »
Canada J. Math. t. 10 (1958) p. 210-219

B. LACOLLE - N. SZAFRAN **[LAC90]**
«Application de la dualité en géométrie algorithmique »
BIGRE n°67 - p. 183-194 (Janv. 1990)

B. LACOLLE - N. SZAFRAN - P. VALENTIN **[LAC91]**
«Les mélanges binaires : modélisation géométrique et algorithmes»
Rapport de Recherches IMAG - RR 841-M- (Fév. 1991)

N.F. LINQUIST **[LIN75]**
«Approximation of convex bodies by sum of line segments »
Portugaliae Math. 34 (1975), p. 233-240

M. MANTYLA **[MAN84]**
« A note on the modeling space of Euler operators »
Computer Vision, Graphics and Image Processing 26 (1984) p. 45-60

P. Mc MULLEN - G.C. SHEPHARD **[McM68]**
« Diagrams for centrally symmetric polytopes »
Mathematika 15 (1968) p. 139-148

P. Mc MULLEN **[McM71a]**
« On zonotopes »
Trans. Amer. Math. Soc. - Vol. 159 (Sept 1971) p. 91-109

P. Mc MULLEN - G.C. SHEPHARD **[McM71b]**
« Convex Polytopes & the Upper Bound Conjecture »
Cambridge University Press - 1971.

P. Mc MULLEN **[McM73]**
« Representations of polytopes and polyhedral sets »
Geometriae Dedicata 2 (1973) p. 83-99

P. Mc MULLEN - R. SCHNEIDER - G.C. SHEPHARD **[McM74]**
« Monotopic polytopes and their intersection properties »
Geometriae Dedicata - 3 (1974) p. 99-129

P. Mc MULLEN **[McM75]**
« Space Tiling Zonotopes »
Mathematika 22 (1975) p. 202-211

T. MOTZKIN **[MOT51]**
« The lines and planes connecting the points of a finite set »
Trans. Amer. Math. Soc. 70 (1951) p. 451-464

N. ODEH **[ODE90]**
« Modélisation mathématique des propriétés de mélange : B-Splines et optimisation avec conditions de forme»
Thèse Université J. Fourier - Grenoble (1990)

F.P. PREPARATA - M.I. SHAMOS **[PRE85]**
« Computational Geometry - An introduction»
Texts & Monographs in Computer Science - Springer Verlag (1985)

R. SCHNEIDER **[SCH67]**
« Zu einem Problem von Shephard über die Projektionen konvexer Körper »
Math. Zeit., 101 (1967), p. 71-82

R. SCHNEIDER **[SCH69]**
« Characterization of certain polytopes by intersection properties of their translates »
Mathematika 16 (1969) p. 276-282

R. SCHNEIDER **[SCH70]**
« Über eine Integralgleichung in der Theorie der konvexen Körper »
Math. Nachr., 44 (1970), p. 55-75

R. SCHNEIDER - W. WEIL **[SCH83]**
« Zonoïds and related topics in convexity and its applications»
Birkhauser Verlag Basel (1983)

M.I. SHAMOS **[SHA78]**
« Computational Geometry »
Ph.D. Thesis, Dept. of Comput. Science, Yale Univ.(1978)

G.C. SHEPHARD **[SHE71a]**
« Decomposable convex polyhedra »
J. London Soc. (2), 4 (1971) p. 165-175

G.C. SHEPHARD **[SHE71b]**
« Diagrams for positive bases »
J. London Soc. (2), 4 (1971) p. 165-175

G.C. SHEPHARD **[SHE71c]**
« Polyhedral diagrams for sections of non-negative orthant »
Mathematika 18 (1971) p. 255-263

G.C. SHEPHARD **[SHE74a]**
« Combinatorial properties of associated zonotopes »
Can. Jour. Math., 26-2 (1974), p. 302-321

G.C. SHEPHARD **[SHE74b]**
« Space-Filling Zonotopes »
Mathematika 21 (1974) p. 261-269

K.H. SLAOUI **[SLA86]**
«Application des techniques à la gestion des mélanges : histosplines et optimisation»
Thèse I.N.P.G. - Grenoble (1986)

N. SZAFRAN **[SZA90]**
«Zonoèdres : Structures de données et algorithmes»
Rapport de recherches TIM3-IMAG RR-800-M- (Janv. 90)

P. VALENTIN **[VAL86]**
«Convex set of mixtures : a geometric approach to separation engineering»
Rapport Centre Recherches ELF-Solaise- (1986)

P. VALENTIN **[VAL87]**
«A geometric foundation to separation engineering»
ICIAM 87, Paris, 29 juin - 3 juillet (1987)

P. VALENTIN **[VAL90]**
«Le principe de non-croissance de la séparation : application aux modèles d'équations aux dérivées partielles de transport et de diffusion de la chaleur et de la matière»
Rapport Interne Centre Recherches ELF-Solaise- (Aôut 90)

P. VALENTIN **[VAL91a]**
«Is chromatography a separation process ? The zonoid answer»
Journal of Chromatography, Sciences Publisher BV (Sept. 1991)

P. VALENTIN **[VAL91b]**
«Theory of zonoids : application to the chromatography»
in Advances in Theory of Chromatography (18/30 aôut 91) - à paraître dans Advances Studies Institut (1991)

W. WEIL **[WEI76]**
«Centrally symmetric convex bodies and distributions»
Israel Jour. Math., 24 (1976), p. 352-367

K. WEILER **[WEL85]**
«Edge-based Data Structures for Solid Modeling in Curved-Surface Environments»
IEEE (Jan. 1985) p. 21-40

P.R. WILSON **[WIL85]**
«Euler Formula & Geometric Modeling»
IEEE (Aug. 1985) p. 25-36

T.C. WOO **[WOO85]**
«A combinatorial Analysis of Boundary Data Structure Schemata»
IEEE (Mar. 1985) p.19-27

ANNEXE

A-1 Parallèle entre construction d'un zonoèdre et arrangement de droites dans le plan.

Ce paragraphe présente le lien dual qu'il existe entre l'algorithme de construction d'un zonoèdre à partir de p vecteurs (non deux à deux colinéaires) et l'arrangement de p droites (non deux à deux parallèles) dans le plan. Nous montrons en particulier, grace au *théorème de la zone* que la construction de Z_{i+1} à partir de Z_i se calcule en temps linéaire par rapport à i.

Soit Z_i un zonoèdre construit à partir de i vecteurs de base et soit N_{i+1} un vecteur supplémentaire.

Soit un partitionnement Γ_i du plan par i droites non deux à deux parallèles et soit Δ_{i+1} une droite supplémentaire.

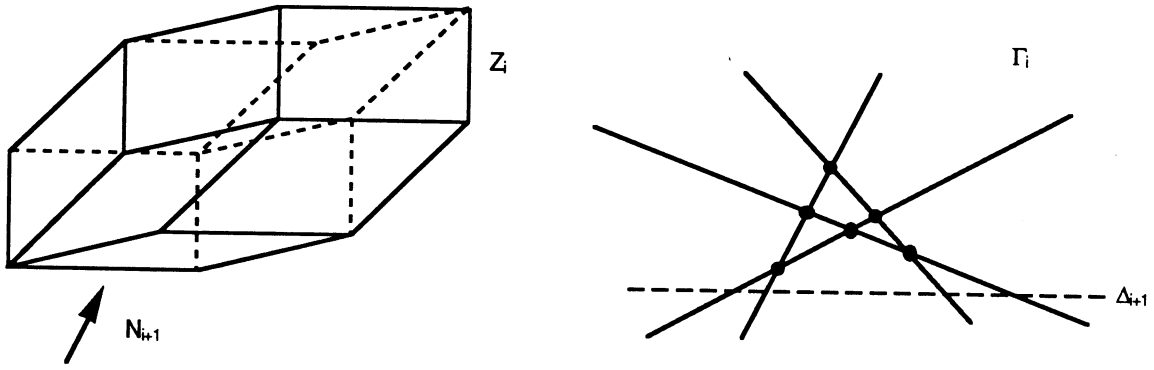


Figure A-1 - **Les deux problèmes duaux**

Etape 1

Rechercher le premier élément de la prézone en parcourant une zone de Z_i

Rechercher l'élément d'une droite de Γ_i intersectée par Δ_{i+1}

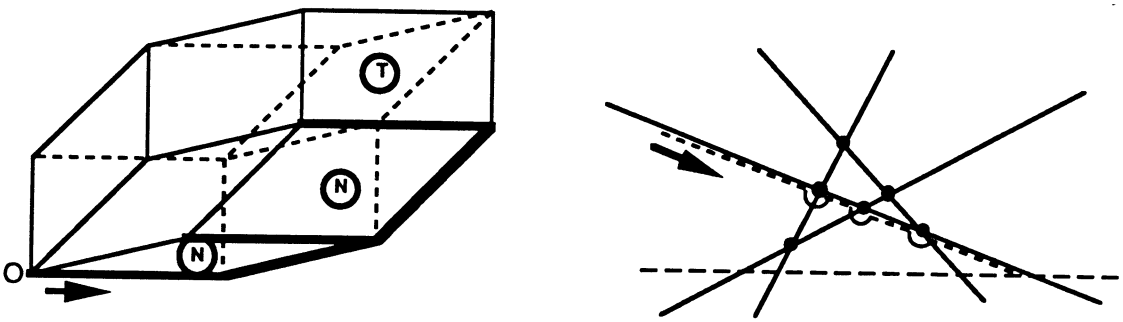


Figure A-2 - **Etape 1**

Le nombre maximum d'arêtes parcourues sur la zone est au plus 4.i (immédiat d'après la proposition I-3.6, au plus la moitié de la zone étant parcourue). Cette étape s'effectue donc en O(i).

Etape 2

Rechercher les éléments (faces et arêtes) de la prézone de Z_i par rapport à N_{i+1}

Rechercher les éléments (sommets et arêtes) de Γ_i intersectée par Δ_{i+1}

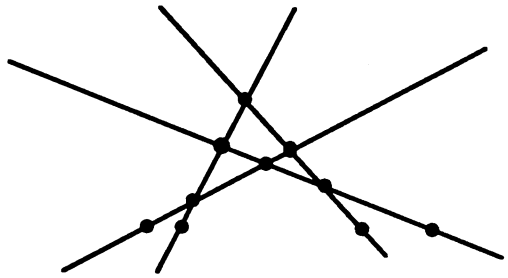
La proposition I-3.2 implique que cette opération est aussi linéaire par rapport à i.

Etape 3 - Phase 1

Dupliquer chaque arête de la prézone en créant des pseudo-faces à deux cotés

Diviser chaque arête intersectée par Δ_{i+1} en deux.

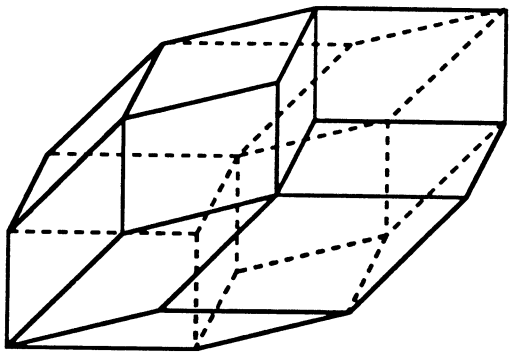
Figure A-3 - **Etape 3 - Phase 1**



Etape 3 - Phase 2

Créer une arête en scindant chaque sommet de la prézone en deux

Relier les sommets existants et appartenant à Δ_{i+1}



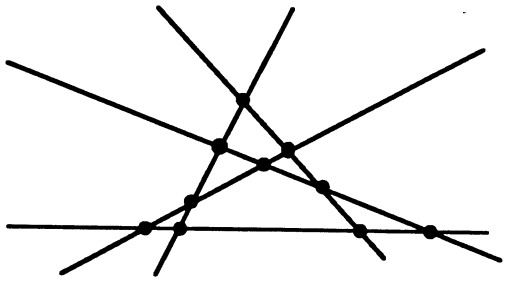


Figure A-4 - **Etape 3 - Phase 2**

Le nombre d'éléments de la prézone étant linéaire en i et pour chacun de ces éléments le nombre d'opérations (mise à jour de la structure de données) étant indépendante du nombre d'éléments et bornée, cette troisième étape est aussi linéaire en i.

Donc globalement le passage de Z_i à Z_{i+1} se fait en O(i), d'où un algorithme de construction de Z_p à partir de p vecteurs de base en $O(p^2)$.

A-2 Algorithmes d'intersection

Dans ce paragraphe sont présentés les deux algorithmes d'intersection entre polyèdre / plan et polyèdre / droite.

• *Intersection d'un polyèdre et d'un plan*

Soient P un polyèdre et le plan $\Pi = \{x \in \mathbb{R}^3 \,/\, f(x)=\langle x-x_0,n\rangle = 0\}$. L'intersection $P \cap \Pi$ est un polygone de $\mathbb{R}^3$ représenté sous la forme d'une liste chaînée de points de $\mathbb{R}^3$.

L'algorithme d'intersection présenté ci-dessous se déroule en deux étapes :

Etape 1 : On recherche un premier point du polygone intersection en partant d'un sommet de P et en se rapprochant par adjacences successives le plus possible du plan Π.

Soit S un sommet de P, soient $A_i=(S,S_i)$ les arêtes adjacentes à S. On note d=f(S) et di=f(Si) :

si d=0, le sommet S appartient à Π, et si tous les di sont du même signe et non nuls alors $P \cap \Pi = \{S\}$;

sinon, si tous les di ont le même signe que d et lui sont supérieurs en valeur absolue, alors S est le point de P le plus proche de Π, c'est à dire, on ne peut plus se rapprocher de Π à partir de S et donc l'intersection recherchée est vide.

Si l'intersection est vide ou réduite à un seul point, l'étape suivante n'est pas faite puisque l'intersection est trouvée.

Etape 2 : La méthode utilisée pour déterminer la succession des points formant le polygone intersection est un suivi d'intersection en partant du point trouvé dans l'étape 1 et en tournant autour du polyèdre. On considérera les trois cas de figures suivants :

1 - soit on se trouve sur une arête A1 dont les deux sommets se trouvent de part et d'autre du plan Π et on connaît F1 l'une de ses deux faces adjacentes;

2 - soit on se trouve sur un sommet S appartenant au plan Π et on connaît un de ses arêtes adjacentes que l'on nommera A1;

3 - on se trouve sur une arête A1 dont les deux sommets S et S2 sont dans le plan Π.

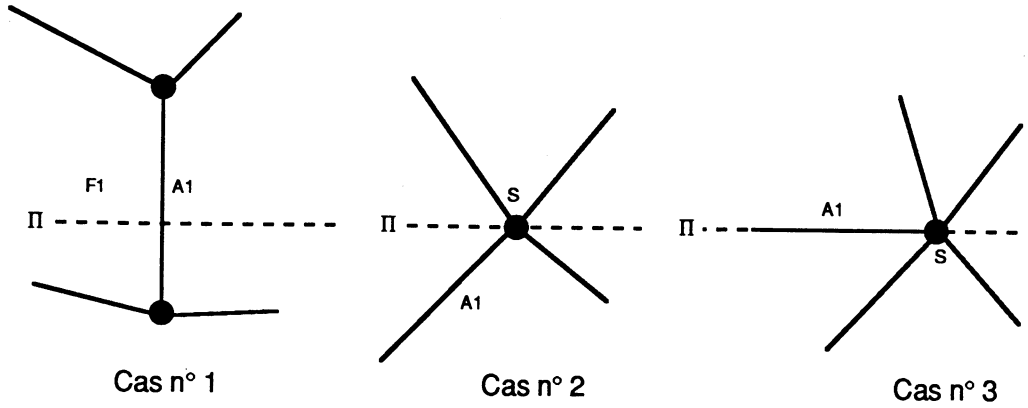


Figure A-5 - **Les trois cas de figures possibles**

Cas n° 1 : soit F2 l'autre face de A1, on tourne autour de F2 jusqu'à trouver :

- soit une arête A2 du contour de F2 traversant le plan Π : on reste dans le cas n° 1 en prenant F1=F2 et A1=A2;

- soit un sommet S du contour de F2 appartenant au plan Π : on passe au cas n° 2 en prenant comme arête A1 l'arête suivant S dans le contour de F2.

Cas n° 2 : on tourne autour de S à partir de A1 jusqu'à trouver :

- soit une arête A1 adjacente à S et dont l'autre sommet S1 appartient aussi au plan Π, on passe au cas n° 3 en prenant S=S1;

- soit deux arêtes successives A2 et A3, A2 se trouvant du même côté du plan que A1 : on considère F2 la face commune à A2 et A3, F1 l'autre face de A3 : on se repositionne sur le cas n° 1 en prenant A1=A3.

Cas n° 3 : ayant un sommet S appartenant au plan Π et une arête appartenant au contour d'une face intersectée par ce plan, on retourne au cas n° 2.

```
INTERSECTION_PLAN_POLYEDRE(P:polyedre; Π:plan; var inter:polygone)

F1,F2:face
S,S1,S2:point
A,A0,A1,A2:arete
fin_inter,trouve,arret:booleen
premier_elt,premier_cas,cas:entier;
minA,ps,ps0,ps1,pA,w,w0:reel
```

```
{ ETAPE1 }

debut
inter ← Ø
soit S un sommet de P
arret ← faux : trouve ← faux
repeter
      ps ← f(S)
      si |ps|<ε alors debut trouve ← vrai : premier_elt ← SOM fin
      sinon
           debut
           A0 ← s.ptr_aretel : A1 ← A0 : A ← A0
           soit s2 l'autre sommet de A0
           minA ← f(S2)
           pour_toute arête A adjacente à S faire
                debut
                soit S2 l'autre sommet de A1
                pA ← f(S2)
                si pS*pA<pS*minA alors debut minA ← pA : A1 ← A fin
                fin
           si (minA*ps<0) et (|minA|≥ε) alors
           { l'arête A1 est coupée par le plan Π }
                debut trouve ← vrai : premier_elt ← RAE fin
           sinon si (minA*ps>0) et (|minA|≥|ps|) alors
           { on ne peut plus se rapprocher du plan Π : l'intersection est vide }
                arret ← vrai
           sinon
                debut
                soit S2 l'autre sommet de A1 : S ← S2
                fin
           fin
jusqu'à arret ou trouve
si arret alors Sortir(INTERSECTION_PLAN_POLYEDRE)     { intersection vide }
si premier_elt=ARE alors
      debut cas ← 1 : F1 ← A1.ptr_fg fin
sinon
      debut
      trouve ← faux
      A0 ← S.ptr_aretel
      soit S2 l'autre sommet de A0
      w0 ← f(S2) : w ← w0
      pour_toute arête A adjacente à S et non(trouve) faire
           debut
           si |w|<ε alors     { l'arête est dans le plan Π }
                debut cas ← 3 : A1 ← A : trouve ← vrai fin
           sinon si w*w0 < 0 alors
           { on a deux arêtes successives séparées par le plan Π }
                debut trouve ← vrai : A1 ← A : cas ← 2 fin
           fin
      si non(trouve) alors
           debut { intersection réduite à un point }
           Ajouter(S.coord,inter)
           Sortir(INTERSECTION_PLAN_POLYEDRE)
           fin
      fin

{ ETAPE2 }
```

```
premier_cas ← cas : premier_S ← S : premier_F ← F1 : premier__A ← A1
repeter
      cas 1:
      debut
      soit SI = A1 ∩Π
      si SI n'est pas sommet de A1 alors Ajouter(SI,inter)
      soit F2 l'autre face de A1 et S le sommet suivant A1 sur le contour de F2
      pS0 ← f(S)
      arret ← faux
      repeter
           soient S et A2 le sommet etl'arête suivant A1 sur le contour de F2
           pS ← f(S)
           si |ps|<e alors
                debut arret ← vrai : cas ← 2 : A1 ← A2 fin
           sinon si ps*ps0<0 alors
                debut arret ← vrai : cas ← 1  fin
           sinon A1 ← A2
      jusqu'à arret
      fin (cas 1)
      cas 2 :
      debut
      Ajouter(S,inter)
      soit S2 l'autre sommet de A1
      ps0 ← f(S2) : arret ← faux
      repeter
           soient A2 et D2 l'arête et la face adjacentes à S et A1
           soit S2 l'autre sommet de A2
           ps ← f(S2)
           si |ps|<ε alors
                debut arret ← vrai : cas ← 3 : S ← S2 : A1 ← A2 fin
           sinon si ps*ps0<0 alors
                debut arret ← vrai : F1 l'autre face de A2 : A1 ← A2 fin
           sinon A1 ← A2
      jusqu'à arret
      fin (cas 2)
      cas 3 :
      debut
      soit A2 l'arête suivant A1 autour de S
      soit S2 l'autre sommet de A2
      ps0 ← f(S2)
      si |ps0| alors
           debut Ajouter(S,inter) : A1 ← A2 : S ← S2 : cas ← 3 fin
      sinon
           debut A1 ← A2 : cas ← 2 fin
      fin (cas 3)
      si cas=premier_cas alors
           debut
           cas =1 : fin_inter ← (premier_A=A1) et (premier_F=F1)
           cas =2 : fin_inter ← (premier_A=A1) et (premier_S=S)
           fin
      sinon fin_inter ← faux
jusqu'à fin_inter
fin
```

La procédure Ajouter (S,P) ajoute le point S dans la liste des sommets du polygone P.

• *Intersection d'un polyèdre et d'une droite*

Soit P un polyèdre et soit une droite Δ, on désire calculer $P \cap \Delta$. La droite Δ est donnée par deux de ses points D1 et D2. On utilise l'algorithme précédent en définissant la droite comme intersection de deux plans orthogonaux Π_1 et Π_2 : $P \cap \Delta = (P \cap \Pi_1) \cap \Pi_2$. L'intersection d'un plan et d'un polygone est donnée par l'algorithme suivant :

```
INTERSECTION_PLAN_POLYGONE (P:polygone; Π:plan; var inter : polygone)

premier_point : booleen
S,S1,S2 : point
ps1,ps2 : reel

debut
Soit S0 un point du polygone P
S ← S0 : inter ← Ø
premier_point ← vrai
repeter
      si premier_point alors
           debut premier_point ← faux : S1 ← S : ps1 ← f(S1) fin
      sinon
           debut S1 ← S2 : ps1 ← ps2 fin
      S2 ← PointSuivant(S,P)
      ps2 ← f(S2)
      si |ps2|<e alors { le point S2 est dant le plan Π }
           Ajouter(S2,inter)
      sinon si ps1*ps2<0 alors    { l'arête S1-S2 traverse le plan Π }
           debut
           soit S l'intersection de l'arête (S1-S2) et Π
           Ajouter(S,inter)
           fin
      S ← PointSuivant(S,P)
jusqu'à S=S0
fin
```

La procédure PointSuivant(S,P) recherche le point suivant S dans la liste de points du polygone P.

L'algorithme d'intersection d'une droite et d'un polyèdre se présente de la manière suivante :

```
INTERSECTION_DROITE_POLYEDRE (P:polyedre; Δ :droite; var inter)

inter1 : polygone
V,n1,n2:point
Π1,Π2 : plan

debut
V ← D1-D2
soit n1 vecteur orthogonal à V
```

```
soit Π1 = { <x-D1,n1> = 0 }
INTERSECTION_PLAN_POLYEDRE(P,Π1,inter1)
si inter1 = Ø alors
      inter = Ø
sinon
      debut
      n2 ← n1 ∧ V
      Π2 = { <x-D1,n2> = 0 }
      INTERSECTION_PLAN_POLYGONE(inter1,Π2,inter)
      fin
fin
```

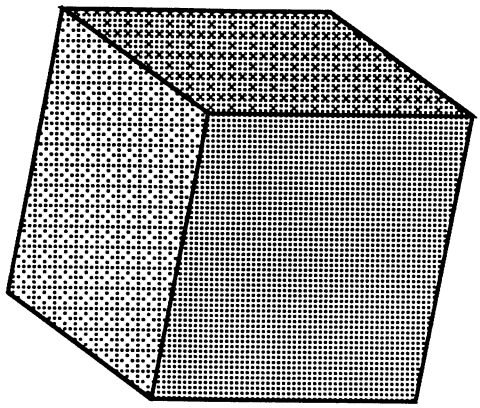
A-3 Les zonoèdres qui pavent l'espace

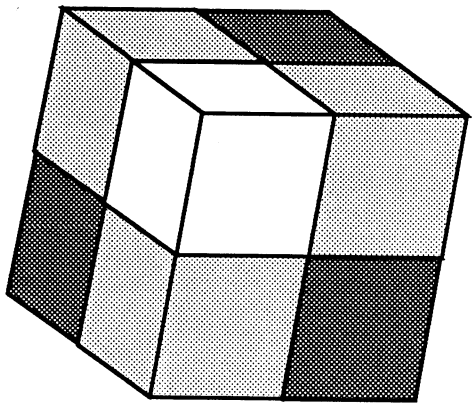
Les cinq figures suivantes présentent les formes différentes que peut prendre un zonoèdre afin de paver l'espace tout entier sans recouvrement par translations successives du même objet. Chaque figure représente le zonoèdre avec les deux diagrammes projectifs correspondants, ainsi qu'un assemblage de plusieurs zonoèdres afin d'illustrer cette propriété de pavage.

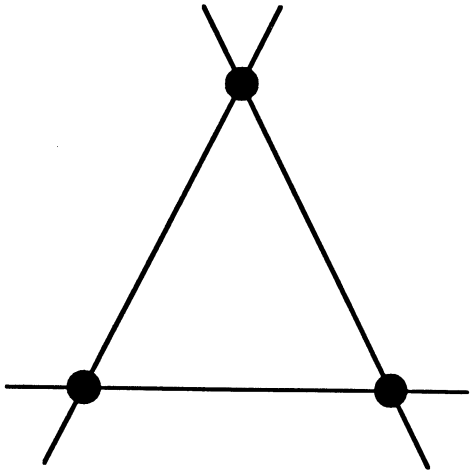
On remarque que les faces de ces zonoèdres ont quatre ou six côtés et que chaque zone est composée de quatre ou six faces.

Cela correspond au fait que chaque point M_i du P.D.P. se trouve à l'intersection de deux ou trois lignes L_j et que chaque ligne L_j du P.D.P. contient seulement deux ou trois points M_i.

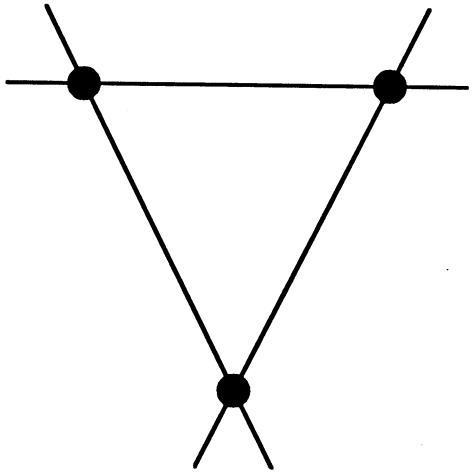
De même, chaque ligne $L_i^{'}$ du D.D.P. contient seulement deux ou trois points $M_j^{'}$ et chaque point $M_j^{'}$ du D.D.P. se trouve à l'intersection de deux ou trois lignes.





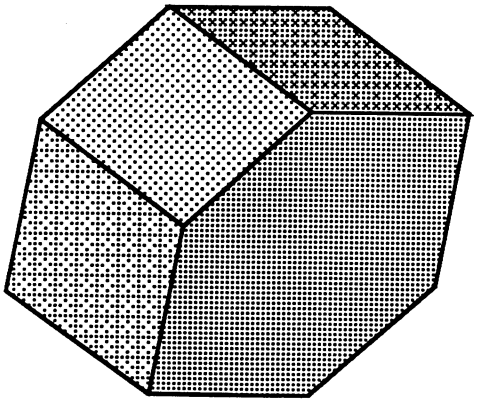


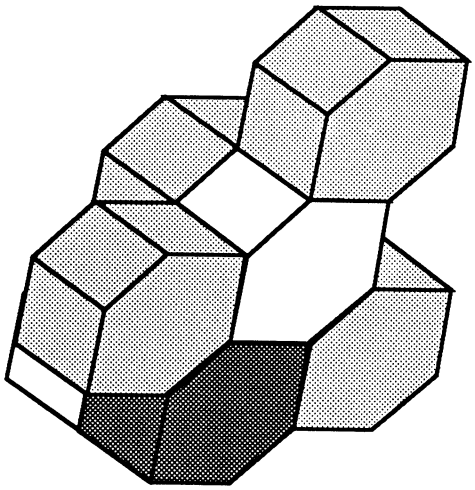
P. D. P.

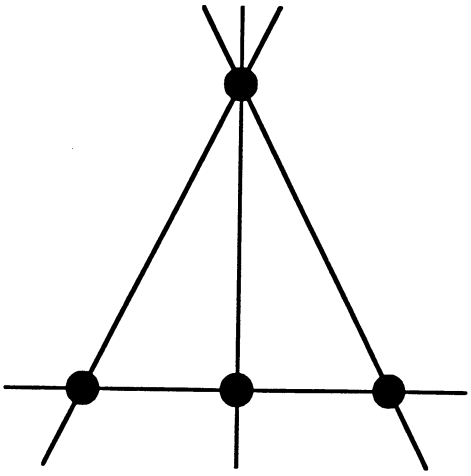


D. D. P.

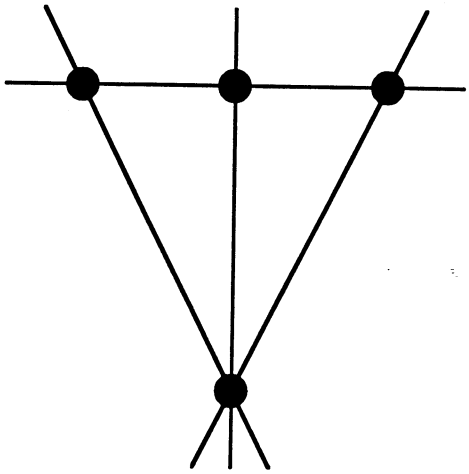
Figure A-6 - **Parallélépipède**





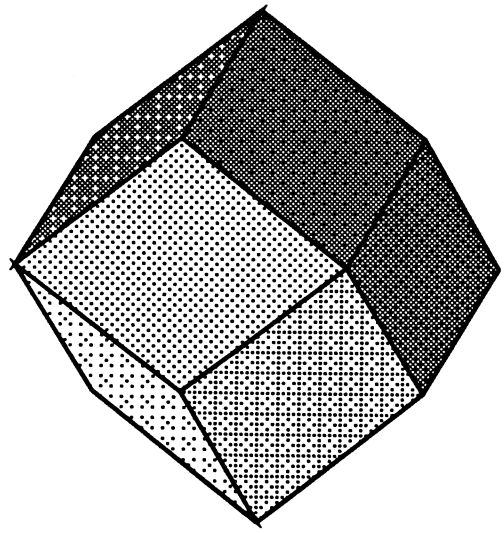


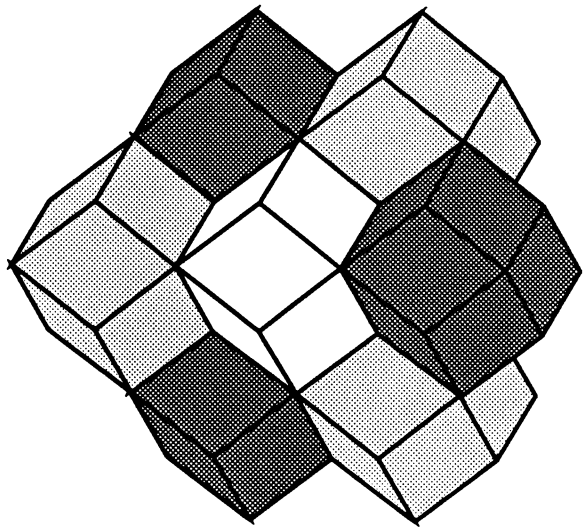
P. D. P.

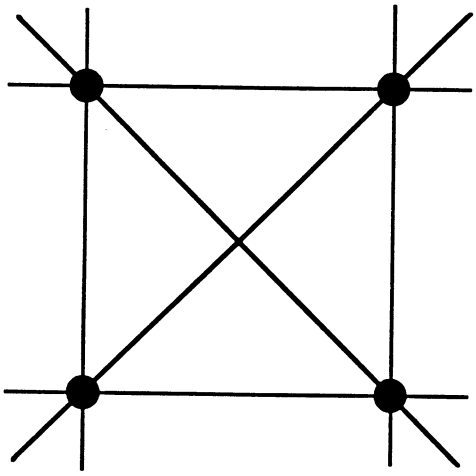


D. D. P.

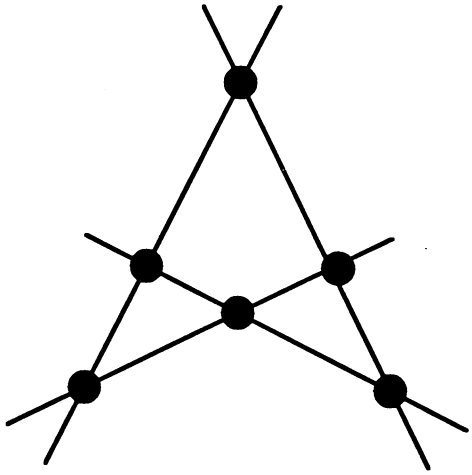
Figure A-7 - **Prisme hexagonal**







P. D. P.



D. D. P.

Figure A-8 - **Rhombo-dodécaèdre**

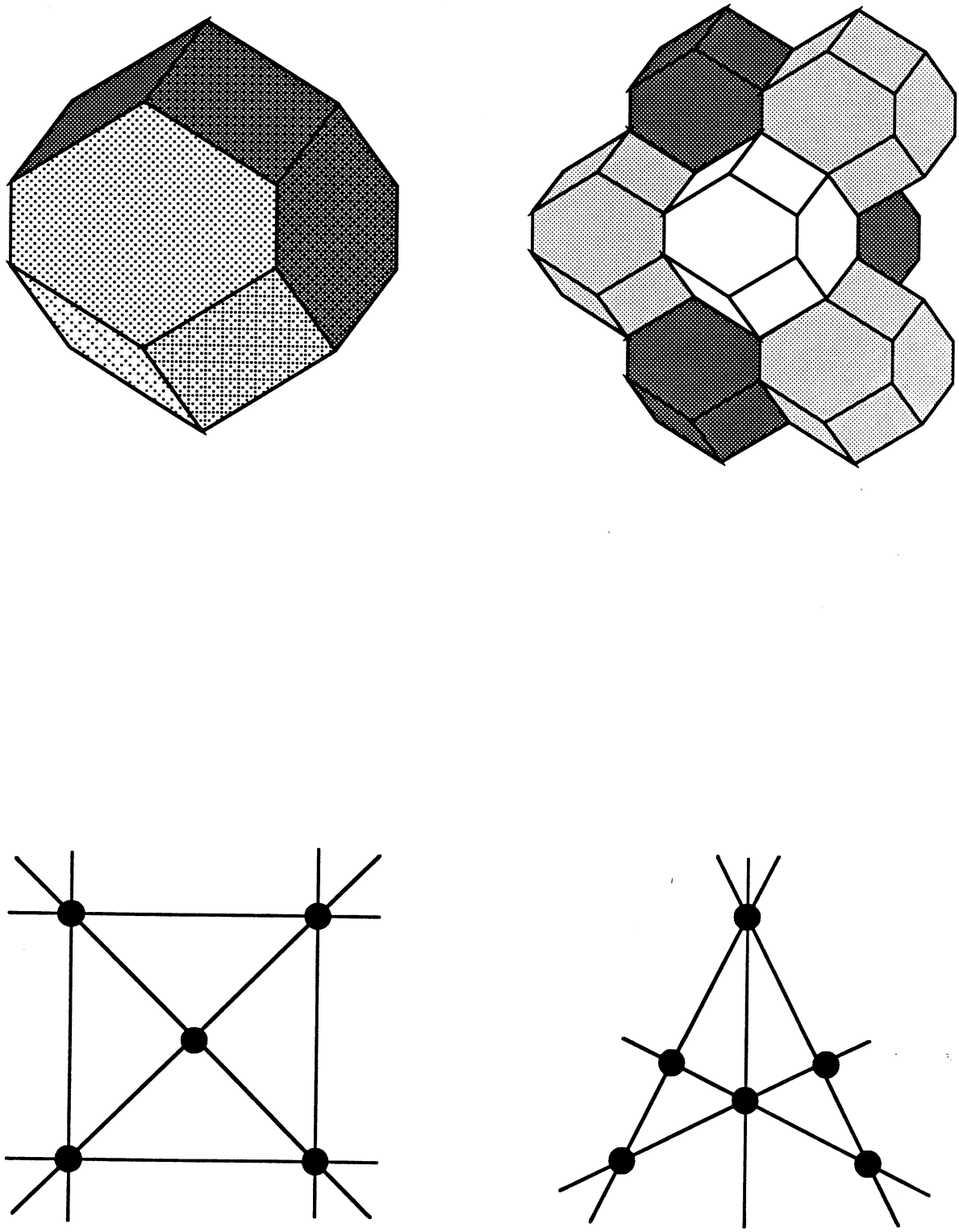


Figure A-9 - **Dodécaèdre allongé**

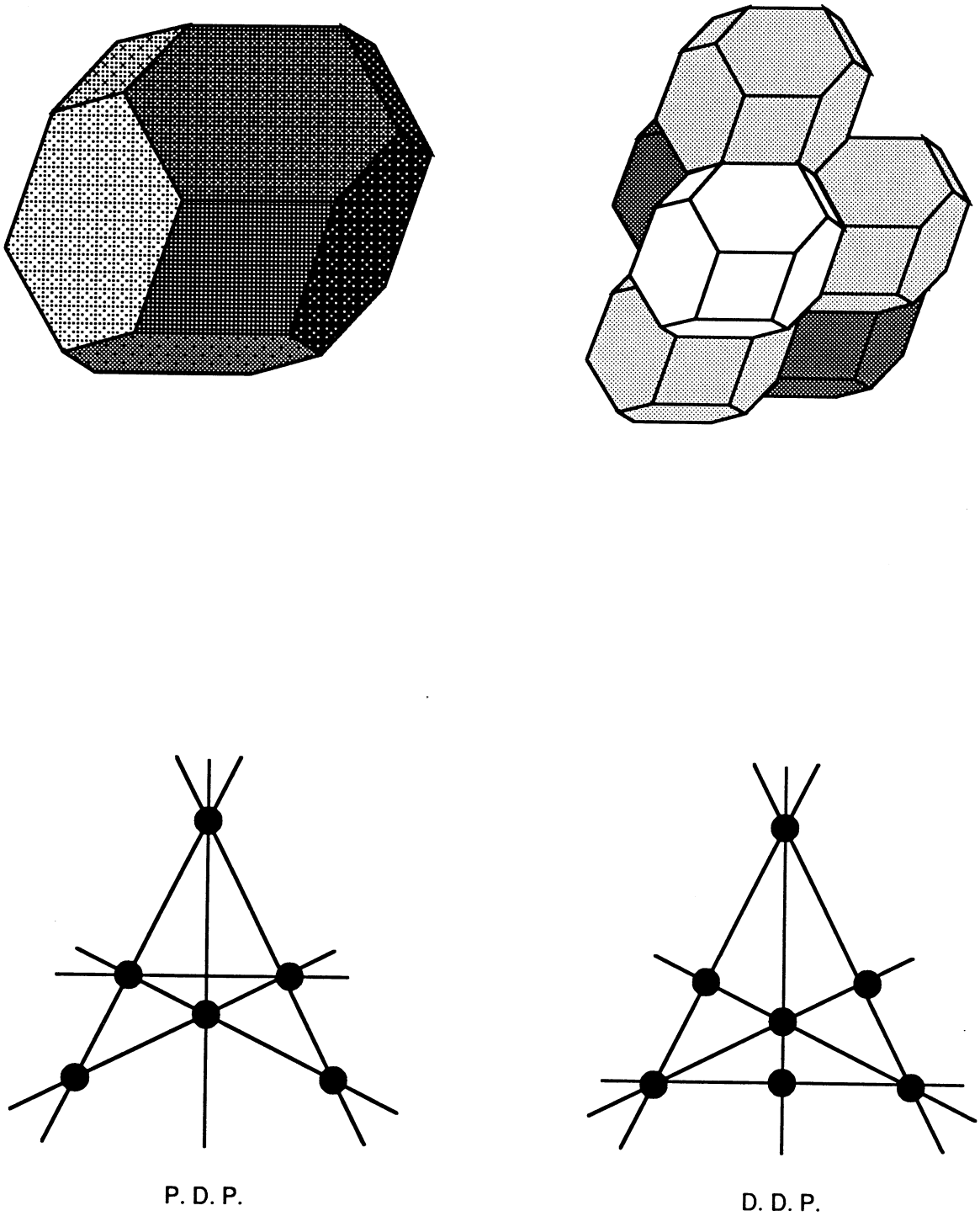


Figure A-10 - **Octaèdre tronqué**

A-4 La beauté des zonoèdres

Les figures noir et blanc suivantes (figure A-11 à A-18) présentent des zonoèdres construits à partir de bases de vecteurs particulières. Chaque figure représente un même zonoèdre vu sous différents angles ainsi que la base de vecteurs correspondante. La configuration particulière des vecteurs de base permet d'obtenir des agencements remarquables entre les faces. Les deux premiers exemples représentent les zonoèdres décrits dans le paragraphe I-4.

Les deux planches couleur présentent différents zonoèdres et approximations de zonoïdes à partir de zonoèdres.

La figure C-1 montre différentes approximations $Z_p(F)$ du zonoïde $Z(F)$ avec $F(t) = (1,\cos t,\sin t)$ et $t \in [0,2\pi]$, les valeurs de p étant 6, 12, 25 et 50.

La figure C-2 représente $Z_p(F)$ avec $F(t)=(1,2t,4t3)$, $t \in [-1,1]$ et $p=60$.

Les figures C-3 et C-4 représentent une même approximation $Z_p(F)$ vue sous deux angles différents, F étant le modèle de diffusion décrit pages 106 à 108 (équation de FENSKE).

Les figures C-5 à C-8, C-11 et C-12 sont des représentations de zonoèdres décrits dans l'annexe A-7 :

C-5 : zonoèdre construit à partir de la base de vecteurs B^2_{64}

C-6 : zonoèdre construit à partir de la base de vecteurs B^1_{100}

C-7 : zonoèdre associé à la base décrite en figure A-15

C-8 : zonoèdre associé à la base décrite en figure A-18

C-11 et C-12 : zonoèdre associé à la base décrite en figure A-17

Les figures C-9 et C-10 illustrent la particularité des zonoïdes définis par une famille différentielle, c'est-à-dire pour une même valeur de p, il est plus facile d'approximer par un zonoèdre Z_p un zonoïde $Z(F)$ qu'un zonoïde défini par une mesure quelconque sur la sphère S^2. En effet, la figure C-9 est une approximation du zonoïde $Z(F)$ avec $F=(1,\cos t,\sin t)$ et $t \in [0,2\pi]$ et présente une surface lisse alors que la figure C-10 est une approximation d'une boule - zonoïde défini par une mesure uniforme sur la sphère S2 - et présente une surface plus chaotique; dans les deux cas, le nombre de vecteurs de base est égal à 150.

Cependant, le second modèle est le mieux adapté afin de présenter la Terre qui peut être vue comme un zonoïde...

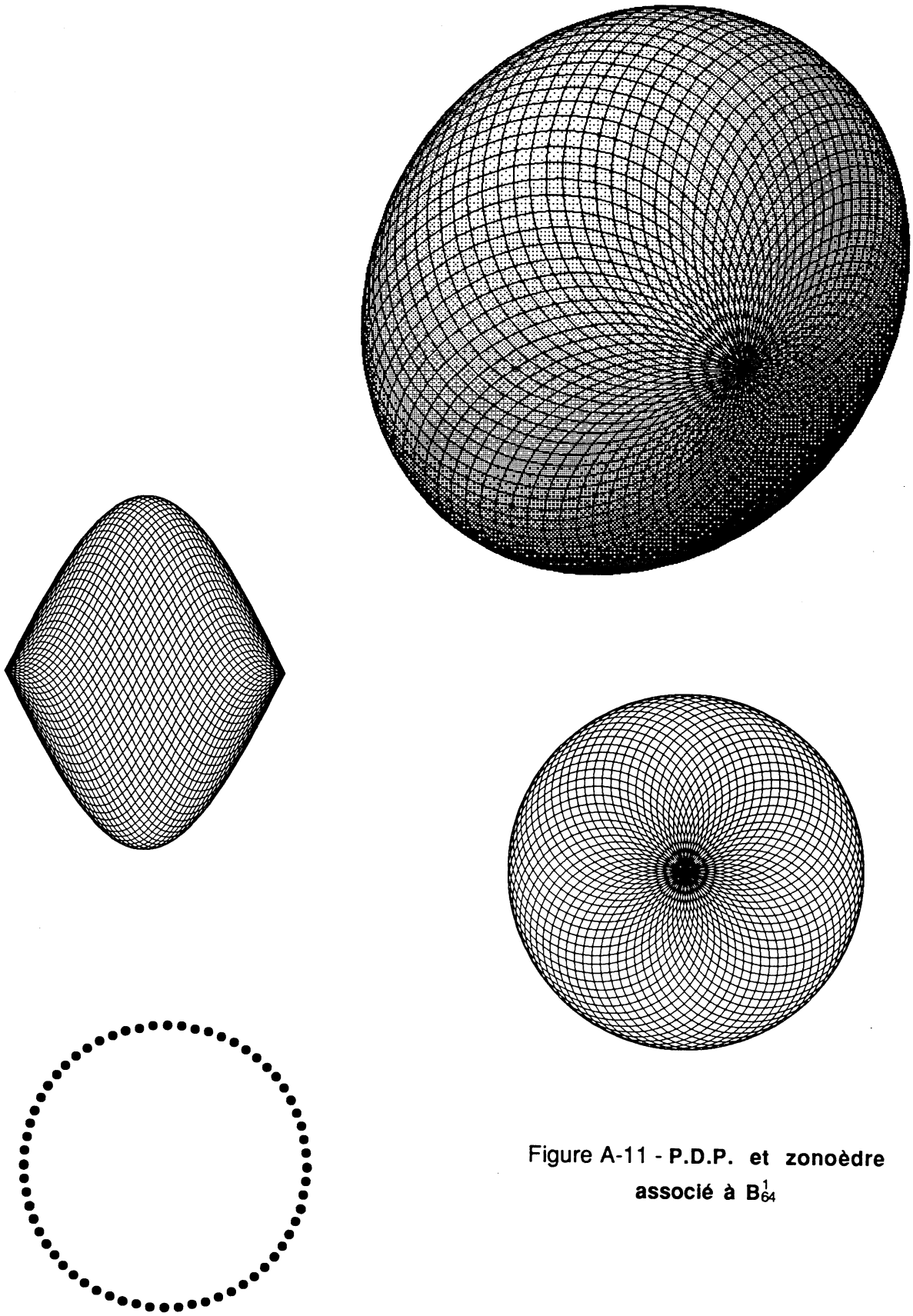
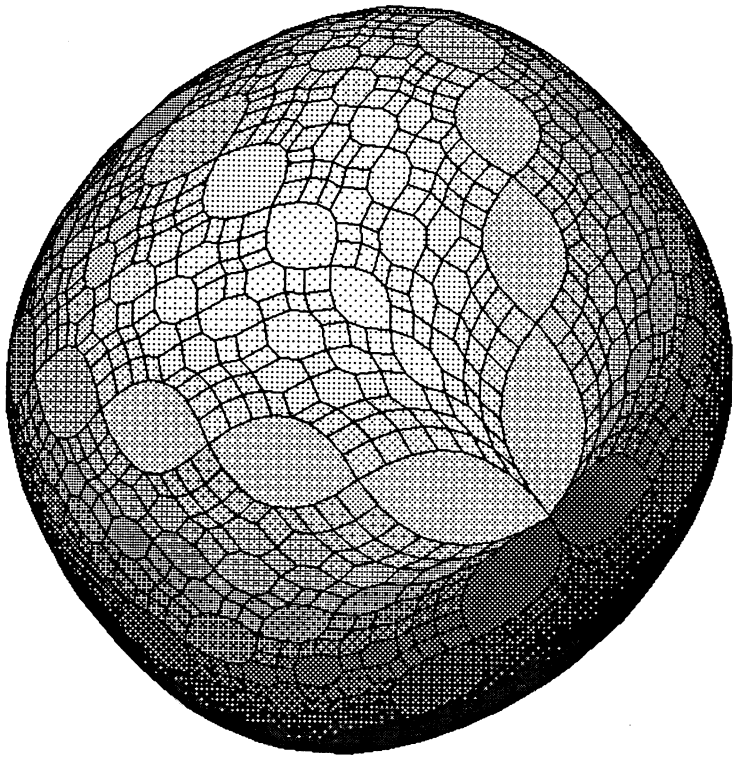
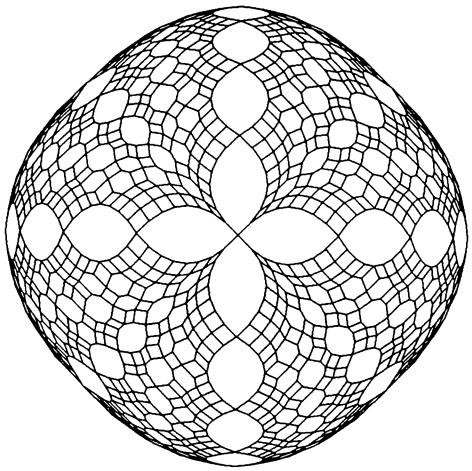
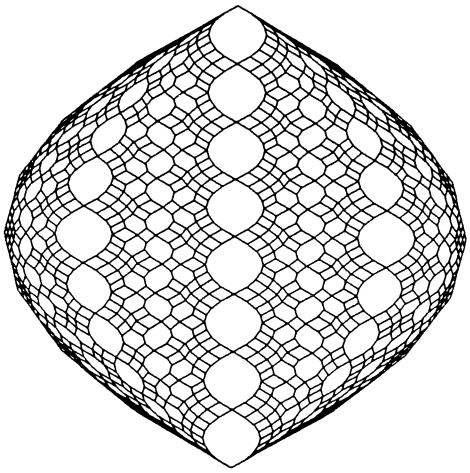


Figure A-11 - **P.D.P. et zonoèdre associé à B_{64}^{1}**







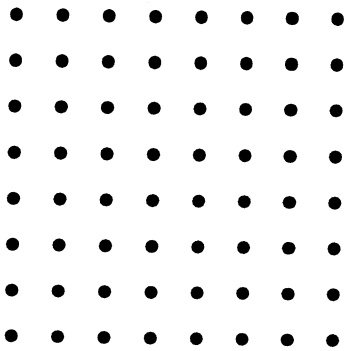


Figure A-12 - **P.D.P. et zonoèdre associé à B_{64}^2**

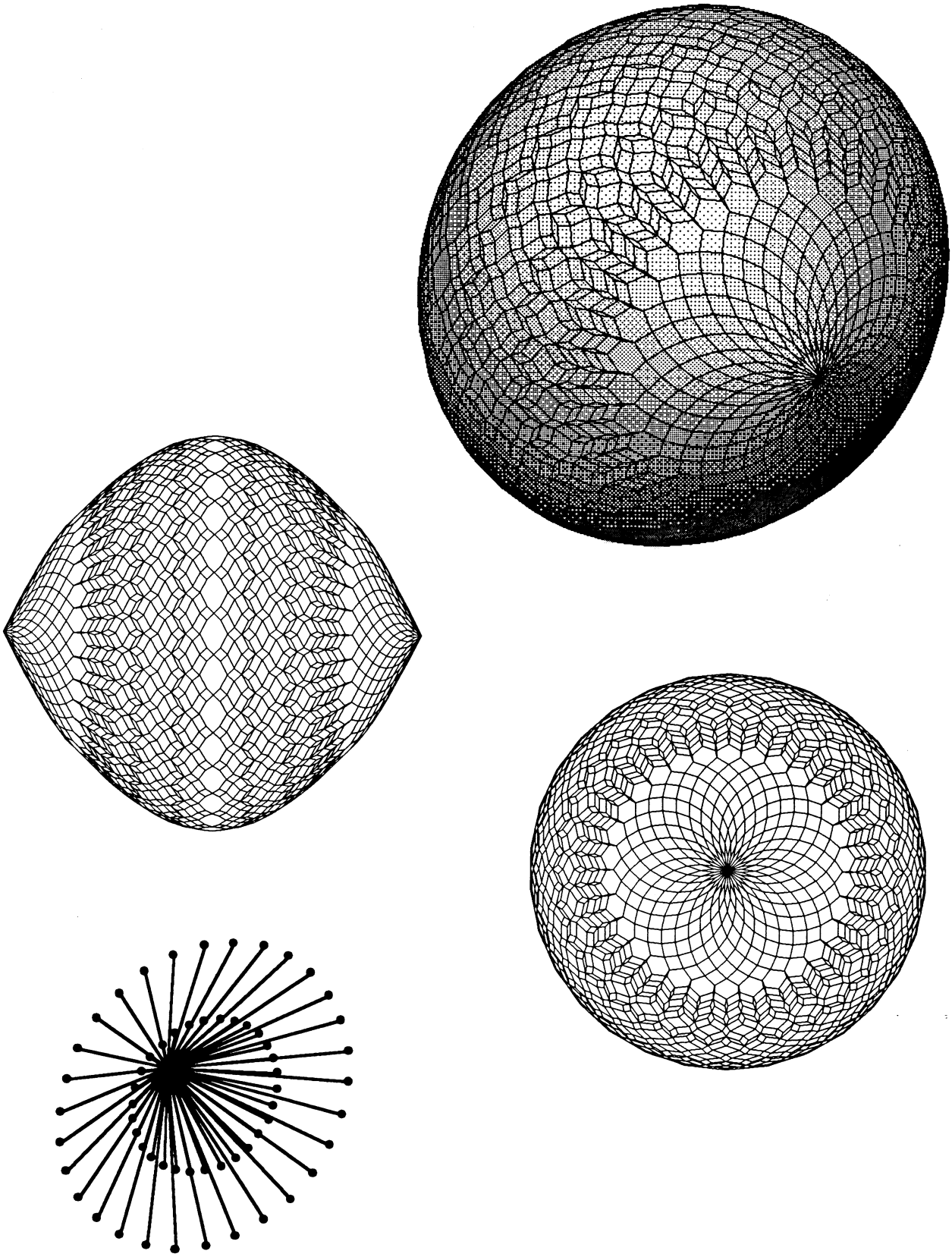


Figure A-13

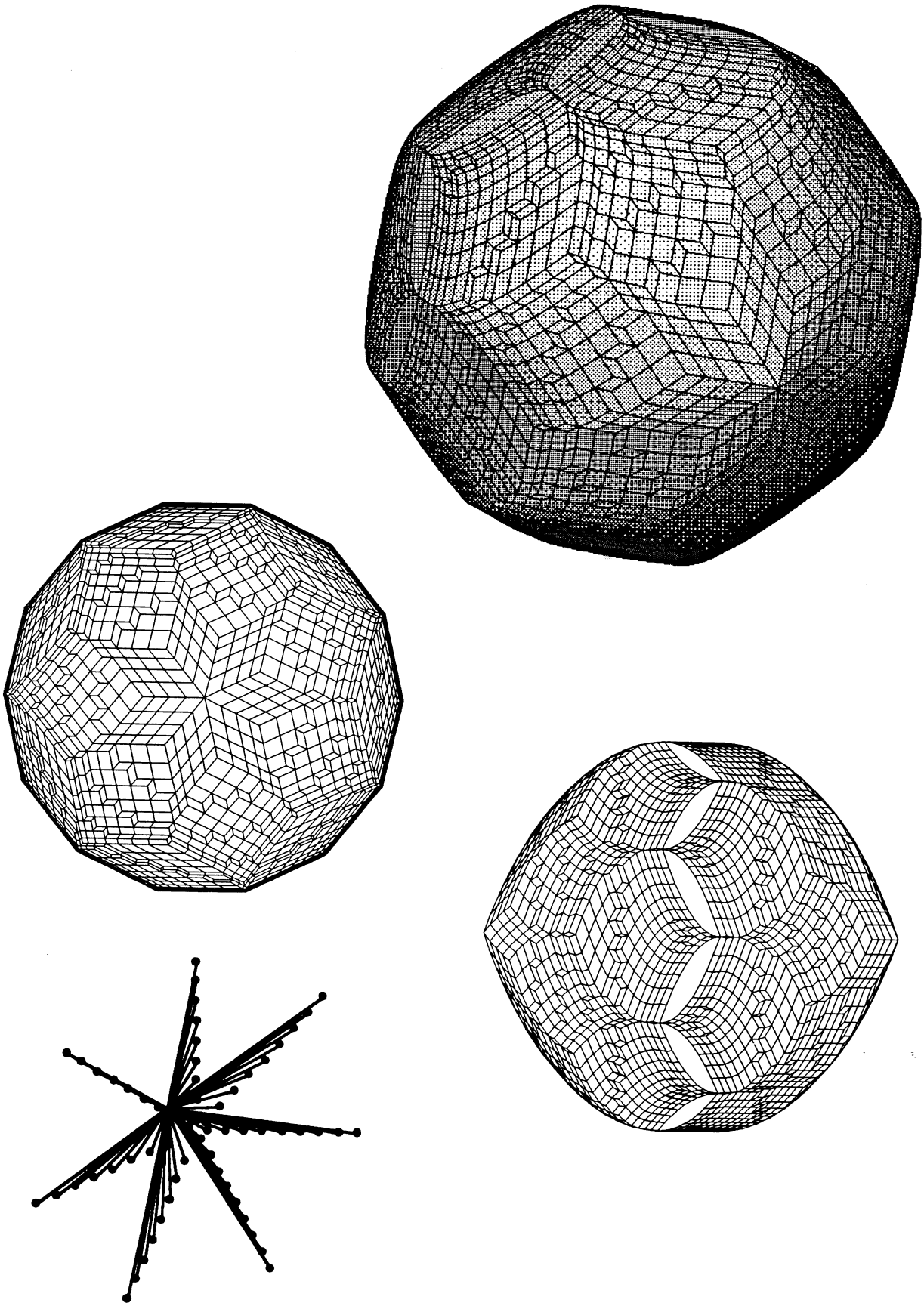
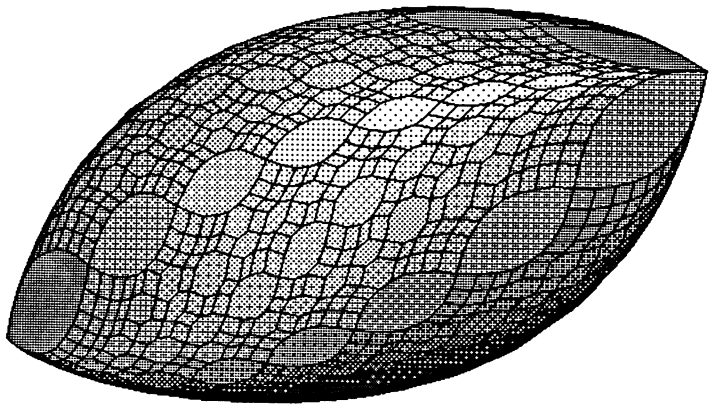
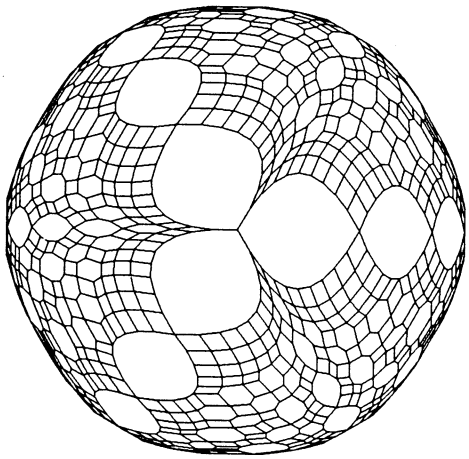


Figure A-14





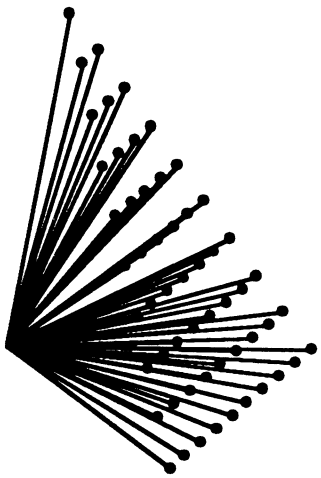
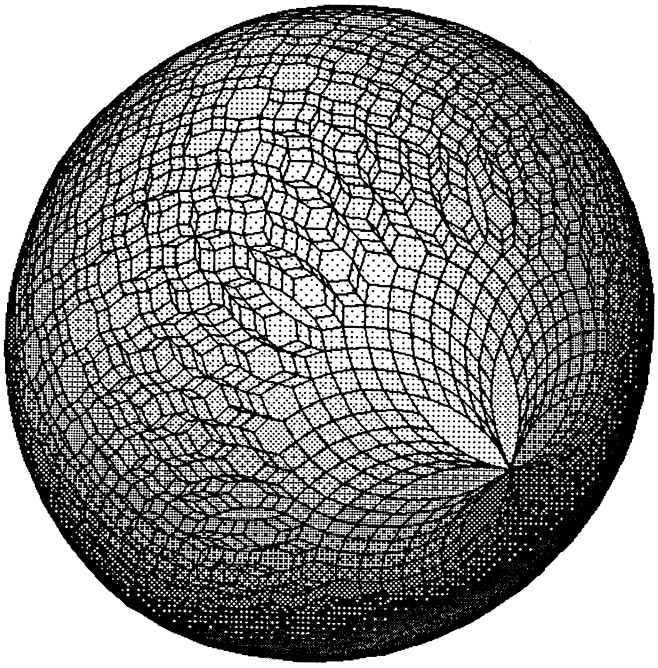
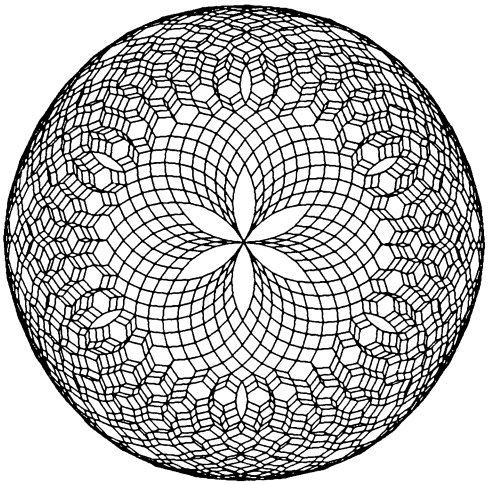


Figure A-15





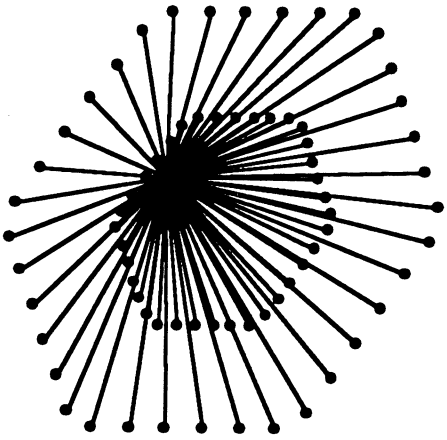


Figure A-16

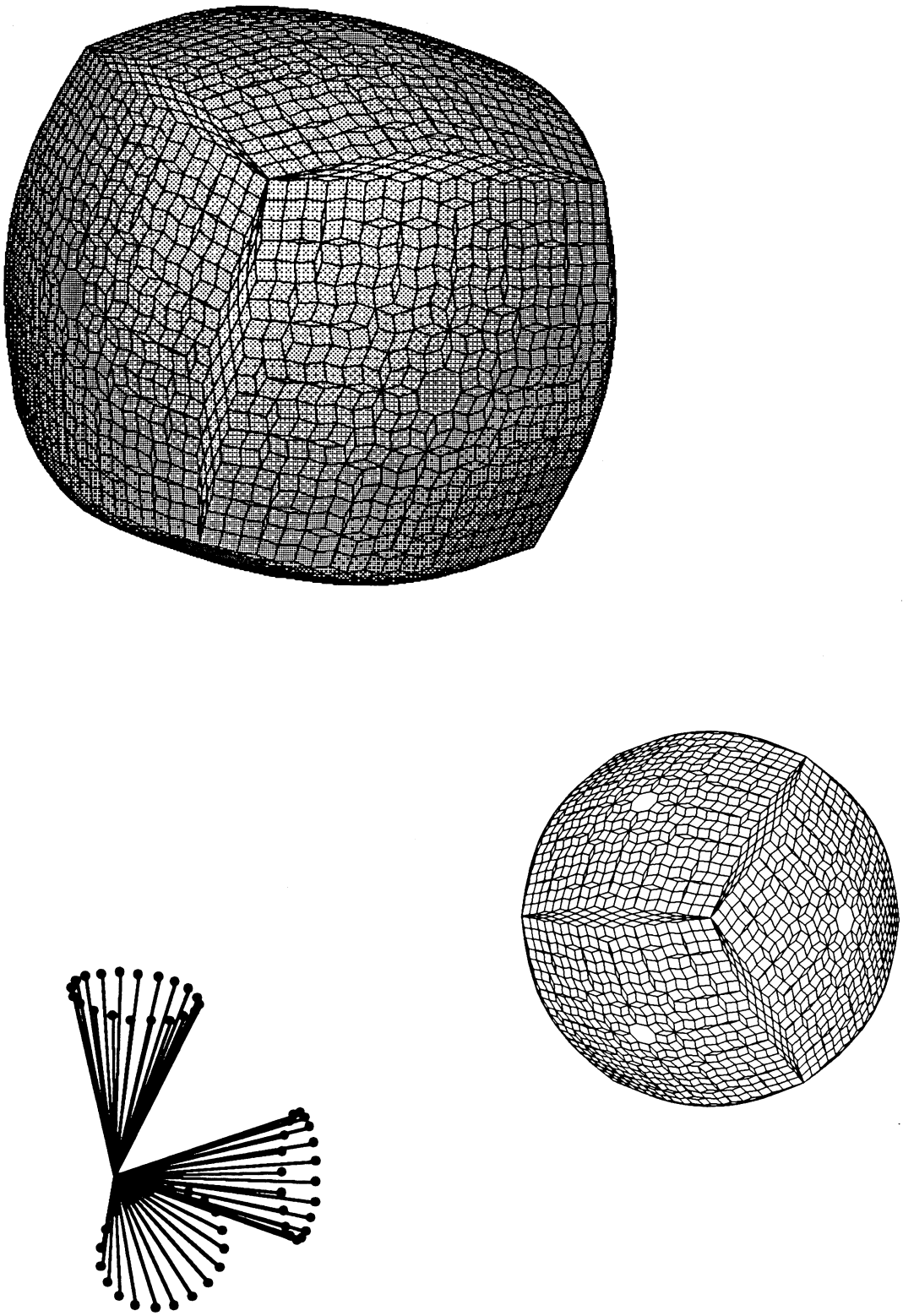


Figure A-17

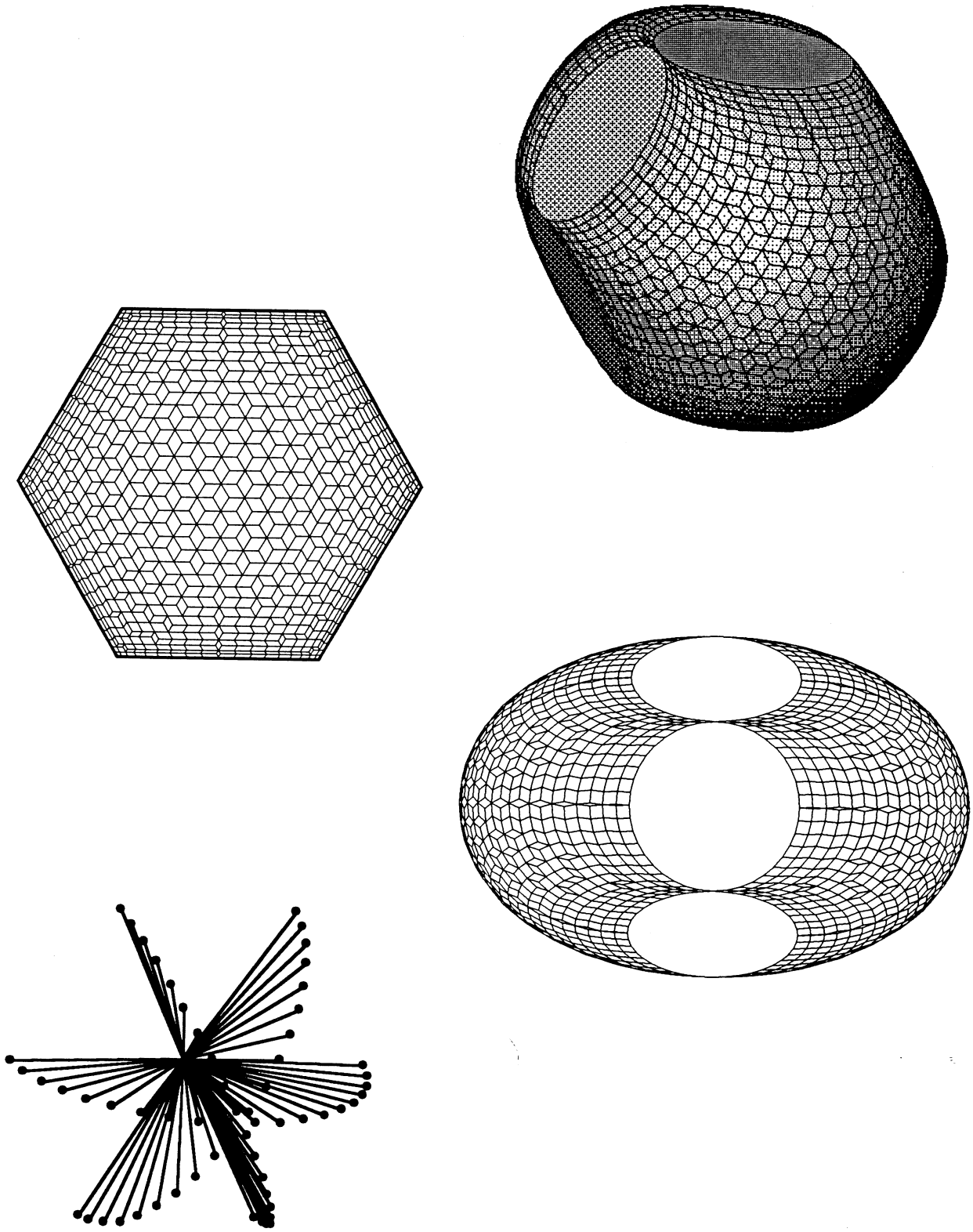


Figure A-18

***

PLANCHES

COULEUR

***

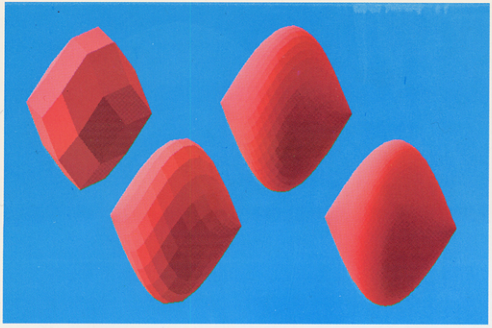


Figure C-1

Figure C-2

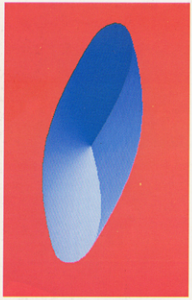


Figure C-3

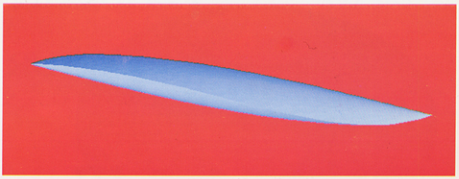


Figure C-4

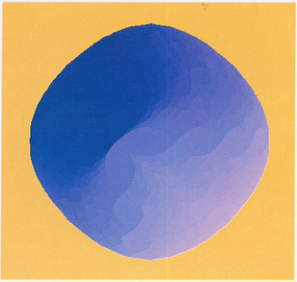


Figure C-5

Figure C-6

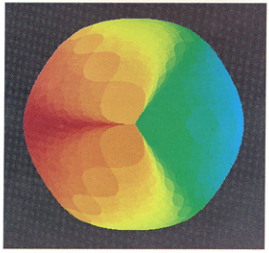


Figure C-7

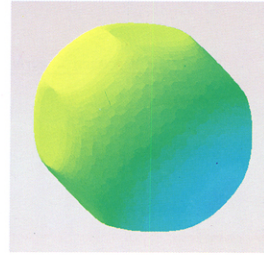


Figure C-8

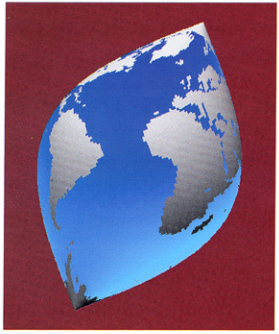


Figure C-9

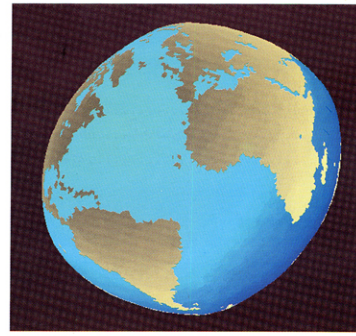


Figure C-10

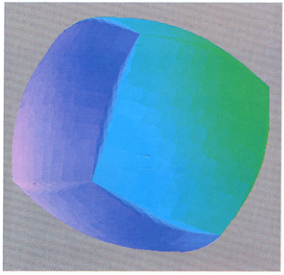


Figure C-11

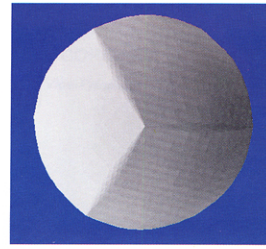


Figure C-12

Résumé

Dans la fabrication de produits pétroliers en raffinerie, les lois linéaires de mélanges permettent de représenter les ensembles de mélanges faisables par des zonotopes. La faisabilité d'un mélange est un problème important qui est résolu par des méthodes d'optimisation convexe. Le but du travail présenté est de montrer que, dans le cas de la dimension trois, la Géométrie Algorithmique apporte d'autres solutions (de nature différente - aspect visuel) à ce problème.

La spécificité des zonoèdres et l'utilisation d'une structure de données de type Arête-Ailée permettent la mise en œuvre d'algorithmes de géométrie optimaux pour les représenter, puis des algorithmes de manipulation et visualisation rapides et robustes destinés à être utilisés de manière concrète. Le logiciel développé à partir de ces outils apporte une aide efficace dans la mise en œuvre de la fabrication des gazoles.

Dans le cadre plus vaste de la séparation, l'état de séparation d'un système physico-chimique est représenté par un zonoïde. Les zonoèdres fournissent une approche géométrique pour l'étude de tels objets.

Abstract

In oil refining, in particular in the fabrication of finished products, the linear models of mixture lead to represent the sets of feasible mixture by zonotops. The feasibility of mixture is an important problem which is solved by methods of convex optimization. Our aim is to show that Computational Geometry provides other solutions for this problem in the case of 3-D.

The specifity of zonohedra and the use of a Winged-Edge Data Structure allow the implementation of optimal geometrical algorithms of representation, then quick and efficient algorithms of handling and display, designed for a concrete use. The software, which is developed from these algorithmic tools for the gasoil production, provides a efficient assistance in the decision of fabrication.

In the more general frame of separation engineering, zonoids allow to represent the separation state of physico-chemical system. Using zonohedra is a geometrical approach for the study of zonoids.

Mots-clés : zonoèdres, structures de données Arête-Ailée, géométrie algorithmique, optimisation, mélanges, séparation, zonoïdes .

AUTORISATION DE SOUTENANCE

DOCTORAT DE L'UNIVERSITE JOSEPH FOURIER - GRENOBLE 1

Vu les dispositions de l'Arrêté du **5 juillet 1984**,

Vu les rapports de Mr BOISSONNAT Jean-Daniel

Mr VALENTIN Patrick

Mr SZAFRAN Nicolas est autorisé(e)
à présenter une thèse en vue de l'obtention du Doctorat
de l'Université J. Fourier

Grenoble, le .....

Le Président de l'Université
Joseph Fourier - Grenoble 1

P/ A. NEMOZ

UNIVERSITE JOSEPH FOURIER GRENOBLE

D. CORDARY
Vice-Président