Optimisation stochastique - 2

Le recuit simulé

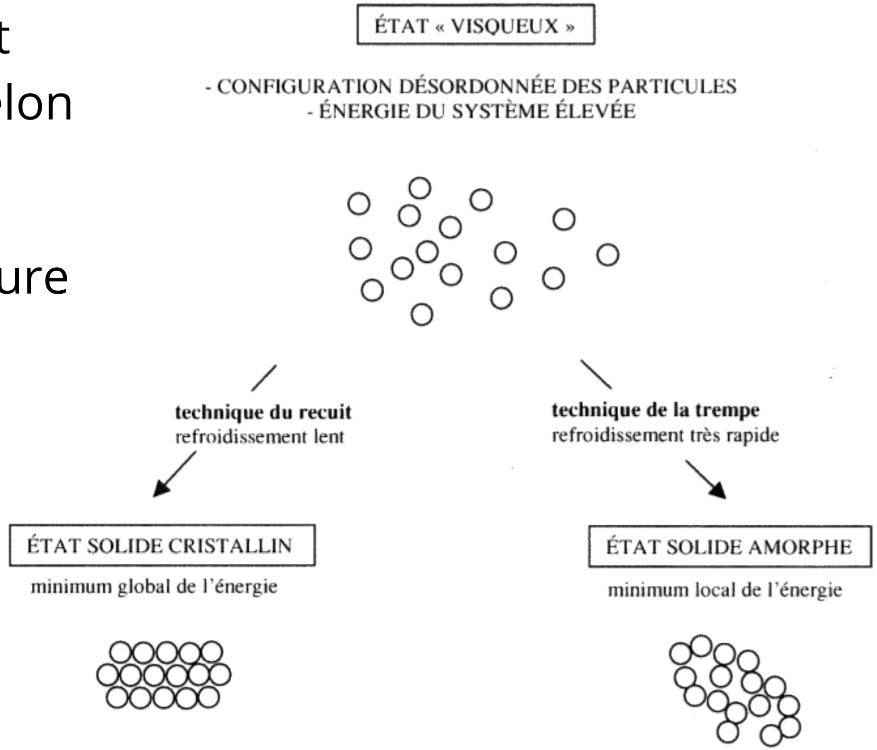
EISTI
Cergy - Pau

Le recuit simulé

Pour l'histoire… un peu de physique !

Le recuit est une technique qui permet d'améliorer la qualité d'un matériau selon la méthode suivante :

- On le porte à très haute température pour le liquéfier
- On abaisse progressivement la température pour stabiliser la structure du matériau



[Métaheuristiques pour l'optimisation difficile, P. Siarry et al.]

Le recuit simulé (simulated annealing)

- Métaheuristique variante de l’algorithme de Metropolis-Hastings (voir exemple ici) ;
- Proposée en 83 par Kirkpatrick, Gelatt et Vecchi et en 85 par Cerny ;
- Première métaheuristique proposée ;
- Adaptée aux problèmes discrets (originellement au placement de composants électroniques sur un circuit imprimé).

Le recuit simulé - l’analogie

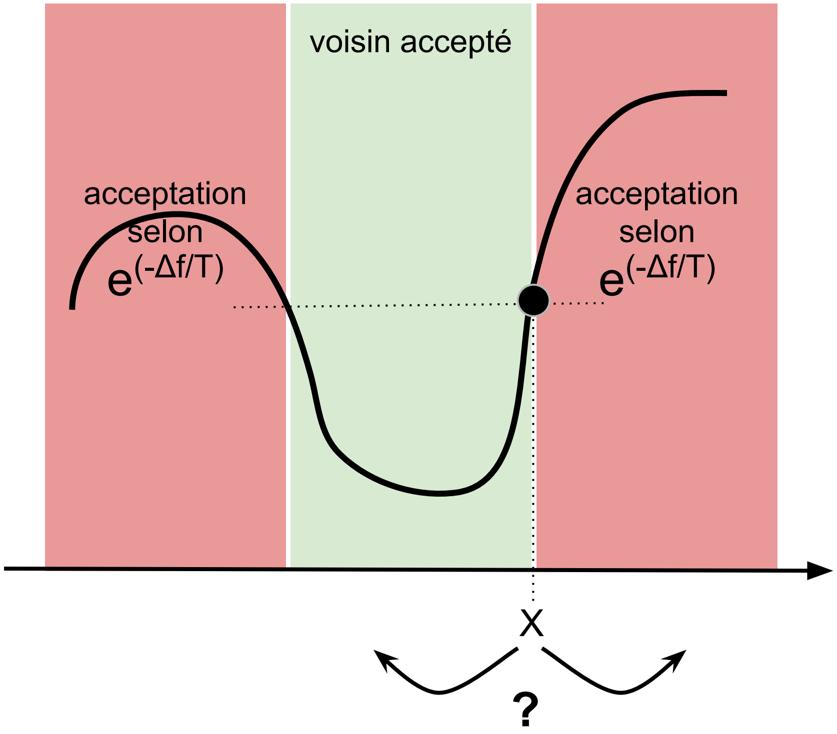
- La fonction *f* à minimiser est l’énergie du système ;
- Un candidat faisable *X* représente un état du matériau ;
- L’équilibre thermodynamique est atteint lors d’un palier de température ;
- À température *T*, une perturbation du candidat courant est acceptée avec probabilité basée sur le critère de Metropolis.

Critère de ....

```
critereMetropolis(Δf,T) :
//minimisation
    Si Δf ≤ 0 alors
        retourner VRAI
    sinon
        retourner aléa(0,1) < e^(-Δf/T)
```

- $\Delta f \leq 0$, le voisin est accepté ;
- Une petite variation vers un voisin moins bon a plus de chance d'être acceptée qu'une importante ;
- Cette fonction est **stochastique**.

Critère de ....



voisin accepté
acceptation selon $e^{(-\Delta f/T)}$
acceptation selon $e^{(-\Delta f/T)}$
X
?

METROPOLIS

Algorithme du recuit simulé (minimisation)

```
X, un candidat qcq, f_X <- f(X) énergie du système, T Température initiale
X_min <- X, f_min <- f(X)
Tant que T > T_min et non critèreDArrêt()
    Tant que non équilibreThermodynamique()      // palier de température
        X_vois <- perturbation(X)
        fX_vois  <- f(X_vois)
        Δf = fX_vois - f_X
        Si critèreMetropolis(Δf,T)  alors
            X <- X_vois
            f_X <- fX_vois
            Si fX_vois < f_min alors
                f_min <- fX_vois
                X_min <- X_vois
            Fin si
        Fin si
    Fin tant que
    T <- refroidissement(T)
Fin tant que
```

Recuit simulé : critères d’arrêt

Permet de terminer l’algorithme selon plusieurs conditions :

- La température atteint une valeur minimale ;
- Le nombre d’évaluations atteint une limite ;
- Le temps d’exécution atteint une limite ;
- Il n’y a pas eu d’amélioration depuis un certain nombre d’itérations.

Recuit simulé : équilibre thermodynamique

Permet de “fouiller” autour d’un bon candidat en cours :

- Le nombre d’évaluations atteint une limite ;
- Il n’y a pas eu d’amélioration depuis un certain nombre d’itérations.

Recuit simulé : refroidissement

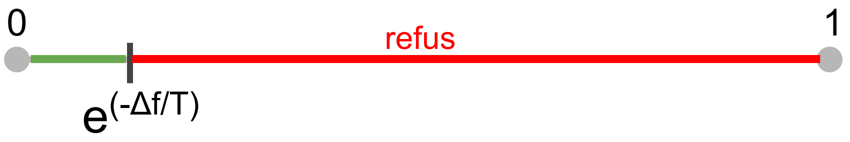
Permet de diminuer la probabilité d'acceptation d'un candidat non améliorant selon le critère de Metropolis :

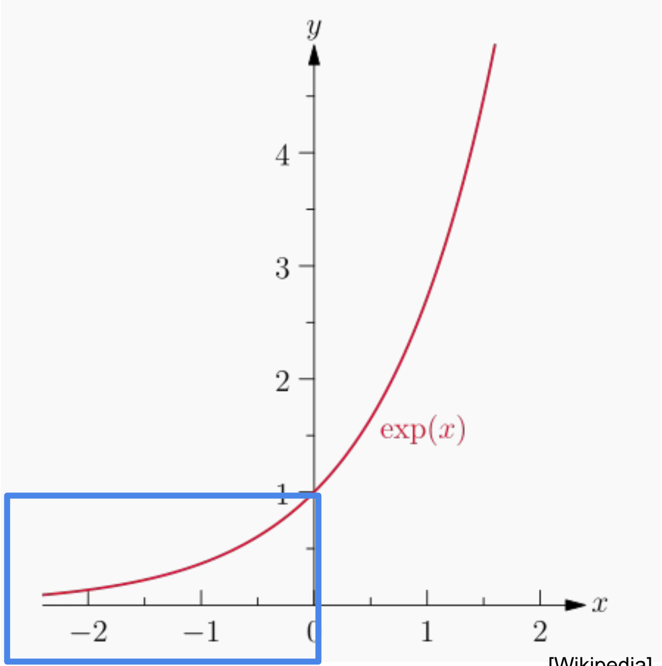
- Une forte décroissance empêche une exploration convenable, l'algorithme converge rapidement vers un minimum local ;
- Une faible décroissance permet une forte exploration lors des premières itérations de l'algorithme et rend peu probable la sélection d'un candidat dégradant ;
- À $T=\infty$, tout candidat dégradant est accepté ; à $T=0$, aucun candidat dégradant n'est accepté.

Recuit simulé : refroidissement

- À haute température, la valeur du critère de Metropolis est proche de 1, la plupart des candidats dégradants sont acceptés :

- À faible température, la valeur du critère de Metropolis tend vers 0, la plupart des candidats dégradants sont rejetés :





[Wikipedia]

Espace de variation du critère de Metropolis

Recuit simulé : refroidissement

Différents schémas de réduction de la température :

- Géométrique (si l'on ne considère pas les paliers...) : $T_{k+1} = \alpha.T_k$, le plus couramment utilisé ;
- Logarithmique : $T_k = \mu / log(1+k)$, où k : nb de paliers et μ une constante. Très coûteux en temps de calcul, peu utilisée ;
- Exponentiel : $T_k = T_0.exp(-k/\tau)$, où k : nb de paliers et τ une constante ;
- Ésotérique : on peut remonter la température selon un critère particulier.

Recuit simulé : perturbation

- Génère un nouveau candidat au **voisinage** de celui en cours ;
- Influence de la distance entre ces deux candidats (hypervolume du voisinage) ;
- Spécifique au problème à résoudre (discret/continu).

Richard Buckland : simulated annealing

part 1:

part 2 :

That’s all folks !