Optimisation TD 4 - Partie 1
La recuit simulé

Carole Frindel

7 Novembre 2018

Le recuit simulé est une méthode d'optimisation empirique. Comme son nom l'indique, elle fait l'analogie entre la manière dont on manipule les métaux par différentes cuissons pour obtenir une structure cristalline d'énergie minimum et la recherche d'un minimum d'une fonction de coût.
Dans une version simple, on peut considérer l'algorithme de la manière suivante lorsqu'on cherche le minimum d'une fonction f :

1. **Initialisation** On part d'un point x_0 et d'une température T_0.
2. **Déplacement** On effectue un déplacement élémentaire aléatoire de la solution courante $x_{t+1} = x_t + D$. D est une variable aléatoire (de loi normale) de moyenne nulle et de variance $\kappa e^{-1/(1000*T)}$ où κ est un paramètre.
3. **Évaluation** On évalue x_{t+1}. Si la solution est meilleure on la garde SINON on la garde avec une probabilité $\kappa' e^{-1/(1000*T)}$
4. **Diminution de la température** On diminue T
5. **Critère d'arrêt** La solution est-elle acceptable ? Le nombre d'itérations dépassé ?

1 Fonction de $\mathbb{R}$ dans $\mathbb{R}$

On se propose d'appliquer les principes précédents pour la recherche d'un minimum de la fonction $f(x) = x^4 - x^3 - 20x^2 + x + 1$.

1. Tracer avec `matplotlib` la fonction et repérer le minimum global et (éventuellement) les minima locaux.
2. Implémenter le recuit simulé pour cette fonction. Faire varier les paramètres pour obtenir des résultats robustes. Indication : commencer par prendre $\kappa = 10$, $\kappa' = 0.5$ et $T = 1/t$ pour t variant de $t_0 = 1$ à $t_{max} = 10000$ par pas de 1. Jouer avec les paramètres $t_{\max}$, κ et κ' pour bien comprendre l'incidence de ces paramètres.
3. Tracer avec `matplotlib` la trajectoire x_t sur la surface de la fonction de coût. Que constatez-vous ?

2 Fonction de $\mathbb{R}^2$ dans $\mathbb{R}$

Refaire le même exercice avec la fonction $g(x, y) = f(x) + f(y)$. Note: commencer avec les mêmes paramètres qu'à l'exercice précédent.

3 Compréhension de l'algorithme

1. Contrairement aux méthodes de descente de gradient (ordres 1 et 2), le recuit simulé inclut une part d'aléatoire. Quelle est d'après vous son utilité (notamment en comparaison avec les méthodes préalablement testées) ?

2. Tout comme en métallurgie, la température évolue au cours de l'algorithme. Dans quels termes celle-ci intervient-elle ? Sauriez-vous expliquer son utilité ? Que se passerait-il si la température chutait trop vite ?

3. Donner maintenant votre interprétation des paramètres κ et κ'.

4 Modification de l'algorithme

1. Maintenant que la température a été étudiée et que nous comprenons son influence dans la démarche exploratoire, on aimerait pouvoir guider d'avantage l'algorithme. On aimerait notamment lui indiquer s'il existe des régions énergétiques plus faible que celle où il se trouve.

2. Pour répondre à cette question, on introduit un nouvel élément, ΔE, dans le calcul de la probabilité de choisir un pas qui augmente la fonction de coût tel que : $P = \kappa' e^{-\Delta \mathrm{E}/(1000*T)}$. ΔE va en quelque sorte analyser l'environnement énergétique de l'itération courante x_t.

3. Pour ce faire, nous allons faire un palier pour chaque pas de température T (i.e. à chaque itération). Ce palier consiste à tester m déplacements aléatoires à partir de l'itération courante : $x_i = x_t + D_i$, afin d'évaluer $\Delta \mathrm{E} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^{m} (f(x_i) - f(x_t))$ et de calculer la probabilité correspondante P.
   Attention durant le palier aucun changement n'est appliqué. C'est seulement à la fin du palier (une fois ΔE estimé) que l'on procède à la "vraie" itération en utilisant la probabilité P calculée.

4. Faites ces changements. Qu'observez-vous ? Quelle est l'influence de ΔE ? On prendra $m = 5$.