

Le Recuit Simulé

Sommaire

- L'algorithme de recuit simulé : historique
- Schéma d'algorithme de recuit simulé
- Le critère de Metropolis
- Paramètre de température
- Schéma de refroidissement
- Réglage des paramètres du recuit simulé
- Algorithmes d'acceptation avec seuil

L'algorithme de recuit simulé : historique

- Le recuit physique
 - Ce processus est utilisé en métallurgie pour améliorer la qualité d'un solide.
 - On cherche à atteindre un état d'énergie minimale qui correspond à une structure stable du métal.
 - En partant d'une haute température à laquelle la matière est devenue liquide, la phase de refroidissement conduit la matière à retrouver sa forme solide par une diminution progressive de la température.

L'algorithme de recuit simulé : historique

- Le recuit simulé (Simulated Annealing)
 - Expériences réalisées par Metropolis et al. dans les années 50 pour simuler l'évolution de ce processus de recuit physique (Metropolis53).
 - L'utilisation pour la résolution des problèmes d'optimisation combinatoire est beaucoup plus récente et date des années 80 (Kirkpatrick83,Cerny85).
 - Le recuit simulé est la première métaheuristique qui a été proposée.

Principes généraux

- L'idée est d'effectuer un mouvement selon une distribution de probabilité qui dépend de la qualité des différents voisins :
 - Les meilleurs voisins ont une probabilité plus élevée ;
 - Les moins bons ont une probabilité plus faible.
- On utilise un paramètre, appelé la température (notée T) :
 - T élevée : tous les voisins ont à peu près la même probabilité d'être acceptés.
 - T faible : un mouvement qui dégrade la fonction de coût a une faible probabilité d'être choisi.
 - $T=0$: aucune dégradation de la fonction de coût n'est acceptée.
- La température varie au cours de la recherche : T est élevée au début, puis diminue et finit par tendre vers 0.

Schéma d'algorithme de recuit simulé

- Engendrer une configuration initiale S_0 de S ; $S := S_0$
- Initialiser T en fonction du schéma de refroidissement
- Répéter
 - Engendrer un voisin aléatoire S' de S
 - Calculer $\Delta = f(S') - f(S)$
 - Si CritMetropolis(Δ, T), alors $S := S'$
 - Mettre T à jour en fonction du schéma de refroidissement
- Jusqu'à <condition fin>
- Retourner la meilleure configuration trouvée

Le critère de Metropolis

- fonction CritMetropolis (Δ , T)
 - Si $\Delta \leq 0$ renvoyer VRAI
 - Sinon
 - avec une probabilité de $\exp(-\Delta / T)$ renvoyer VRAI
 - Sinon renvoyer FAUX
- Un voisin qui améliore ($\Delta < 0$) ou à coût égal ($\Delta = 0$) est toujours accepté.
- Une dégradation faible est acceptée avec une probabilité plus grande qu'une dégradation plus importante.
- La fonction CritMetropolis(Δ , T) est une fonction **stochastique** : appelée deux fois avec les mêmes arguments, elle peut renvoyer tantôt «vrai» et tantôt «faux».

Paramètre de température

- Dans la fonction $\text{CritMetropolis}(\Delta, T)$, le paramètre T (température) est un réel positif.
- La température permet de contrôler l'acceptation des dégradations :
 - Si T est grand, les dégradations sont acceptées avec une probabilité plus grande.
 - A la limite, quand T tend vers l'infini, tout voisin est systématiquement accepté.
 - Inversement, pour $T=0$, une dégradation n'est jamais acceptée.
- La fonction qui spécifie l'évolution de la température est appelé le schéma de refroidissement.

Schéma de refroidissement

- La fonction qui spécifie l'évolution de la température est appelé le schéma de refroidissement (cooling schedule).
- Dans le recuit simulé standard la température décroît par paliers.
- Par exemple, on pourrait avoir trois paramètres : la température initiale, la longueur d'un palier (nombre d'itérations avant de changer la température) et le coefficient de décroissance (si décroissance géométrique).
- On peut aussi utiliser d'autres schémas de refroidissement :
 - On peut faire décroître la température à chaque itération.
 - On utilise parfois une température constante (algorithme de Metropolis).
 - On peut utiliser des schémas plus complexes, dans lesquels la température peut parfois remonter.

Algorithme de recuit simulé (avec paliers et refroidissement géométrique)

- Engendrer une configuration initiale S_0 ; $S := S_0$
- $T := T_0$
- Répéter
 - $\text{nb_moves} := 0$
 - Pour $i := 1$ à iter_palier
 - Engendrer un voisin S' de S
 - Calculer $\Delta = f(S') - f(S)$
 - Si $\text{CritMetropolis}(\Delta, T)$, alors
 - $S := S'$; $\text{nb_moves} := \text{nb_moves} + 1$
 - $\text{acceptance_rate} := i / \text{nb_moves}$
 - $T := T * \text{coeff}$
- Jusqu'à <condition fin>
- Retourner la meilleure configuration trouvée

Réglage des paramètres du recuit simulé

- Dans le cas du recuit simulé classique (avec refroidissement), le réglage des paramètres n'est pas évident.
- Pour régler les paramètres, il peut être utile d'observer le **pourcentage d'acceptation** (acceptance rate) au cours de la recherche = nombre de mouvements réellement exécutés / nombre d'itérations
- **Température initiale** : Si la température initiale est trop élevée, le début de la recherche ne sert à rien.
- **Critère d'arrêt** : Il est inutile de poursuivre si
 - le pourcentage d'acceptation devient très faible,
 - la fonction d'évaluation cesse d'évoluer

Réglage des paramètres du recuit simulé : implantation de Johnson et al.

- Température initiale
 - Un paramètre fixe le pourcentage d'acceptation initial.
- Longueur d'un palier
 - Un paramètre borne le nombre d'essais (itérations) par palier
 - Un autre paramètre borne le nombre changements (mouvements) pour le début de la recherche
- Critère d'arrêt
 - Un compteur sert à déterminer si l'algorithme stagne. Le compteur est fixé à zéro au début La recherche s'arrête quand le compteur atteint un certain seuil.
 - A la fin d'un palier, le compteur est
 - incrémenté si le pourcentage d'acceptation est inférieur à un seuil.
 - remis à zéro si la qualité de la meilleure solution a évolué au cours du palier

Implémentation du recuit simulé

- Quand on utilise le recuit simulé avec des paliers et que la fonction de coût prend des valeurs entières, on peut utiliser un tableau qui mémorise la probabilité d'acceptation associée à chaque valeur de Δ .
- L'implémentation naturelle du recuit simulé consiste à engendrer un mouvement, puis à appliquer le critère de Metropolis. Une implémentation équivalente (en termes de configurations engendrées) est le recuit sans rejet (Rejectless Annealing). Il consiste à calculer la probabilité de chaque mouvement, puis à appliquer la roulette biaisée.

Le recuit simulé : conclusions

- Méthode importante historiquement
- Facile à implémenter
- Possède des propriétés de convergence intéressantes (mais de peu d'utilité en pratique)