Département d'Informatique Fondamentale et ses Applications DIFA
Dr .Esma BENDIAB
Maître de conférences

CHAPITRE 06

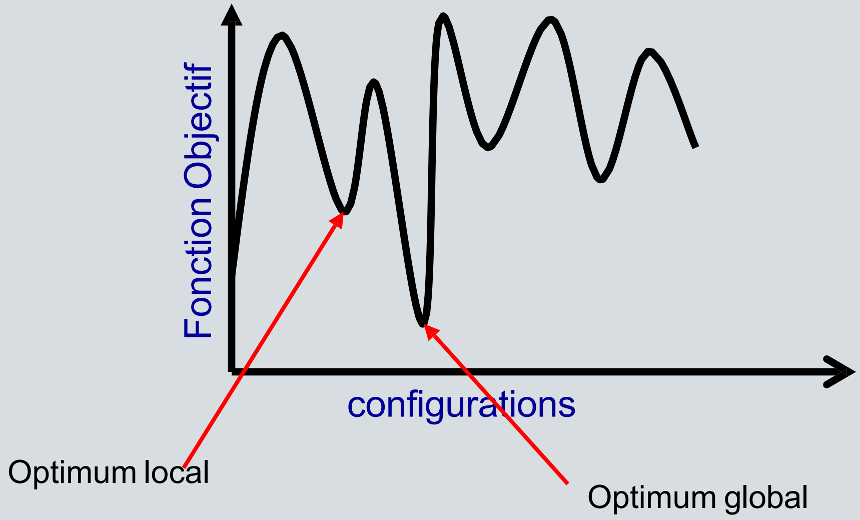
LE RECUIT SIMULÉ

(Simulated Annealing)

Présentation générale

Le recuit Simulé *« Simulated Annealing »* est une meta-heuristique destinée à résoudre au mieux les problèmes dits d'optimisation difficile

Evite le piégeage dans les minima locaux de la fonction objectif



Inspirée par la technique expérimentale du recuit dans la métallurgie (sciences des matériaux)

Origine: Recuit thermique

Chauffer le matériau et le porter à l'état liquide (énergie élevée)

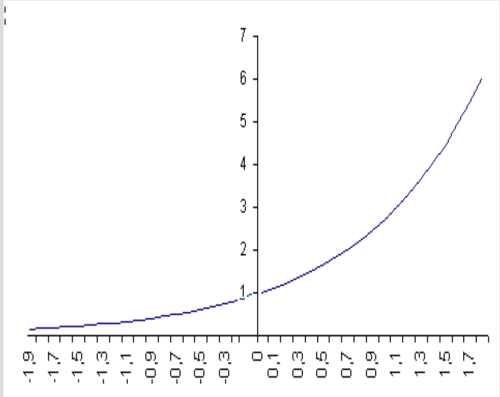
Refroidissement lent de la température en marquant des paliers de température de durée suffisante		**Refroidissement rapide de la température Technique de la trempe**
Etat solide cristalisé, état stable.	⟷	Apparition de défauts dans le matériau, structure amorphe, état meta-stable
Minimum absolu de l'énergie	⟷	Minimum local d'énergie
Transformation désordre ordre	⟷	Figer un état désordonné, non cristalisé

Recuit thermique et recuit simulé

L'algorithme s'appuie sur 2 résultats de la physique statistique

1er résultat de la physique statistique

Lorsque l'équilibre thermodynamique est atteint à une température T, la possibilité pour un système physique de posséder une énergie E est:



$$P(E) = \mathbf{e}^{[-E/(KB*T)]}$$

KB: constante de bolzman

À Température élevée, P(E) tend vers 1 pour tous les états d'énergie

DEM

T élevée
$\Rightarrow KB * T \rightarrow +\infty$
$\Rightarrow -E/(KB\ T) \rightarrow 0$
$\Rightarrow \mathbf{e}^{[-E/(KB*T)]} \rightarrow 1$

La probabilité d'accepter un état à énergie élevée est faible a faible Température

DEM

E élevée, **T** faible
$-E \rightarrow -\infty$
$\Rightarrow -E/(KB\ T) \rightarrow -\infty$
$\Rightarrow \mathbf{e}^{[-E/(KB*T)]} \rightarrow 0$

Conclusion

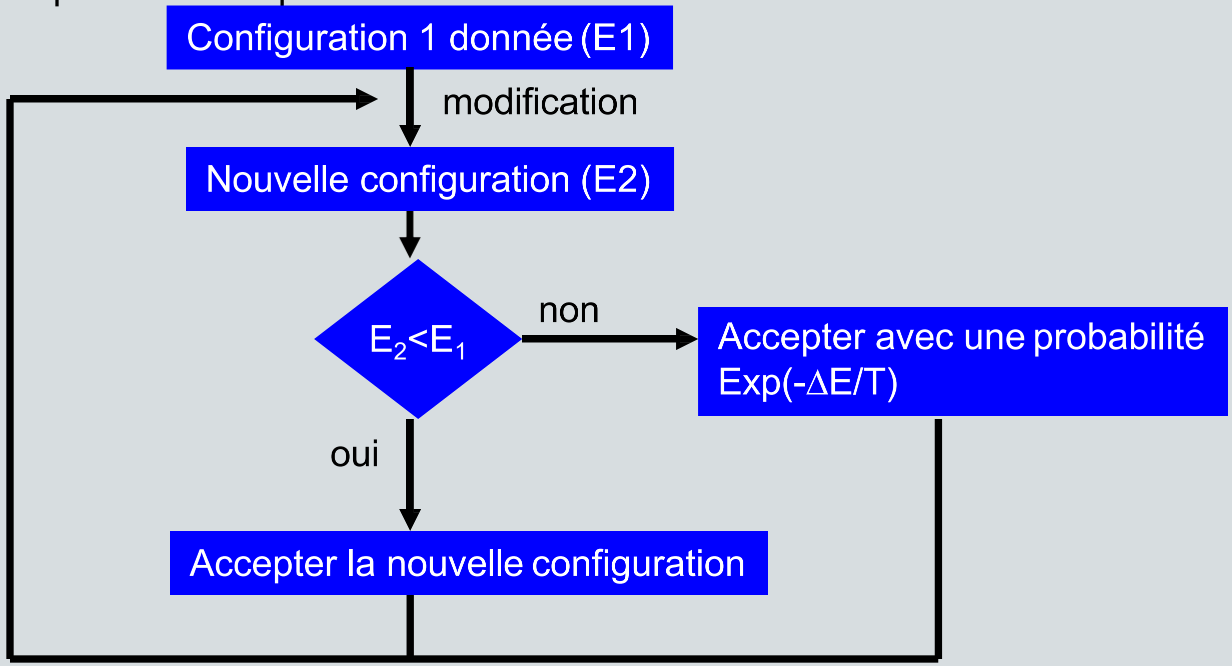
Même si la probabilité d'accepter un état à énergie élevée est faible, elle n'est pas nulle.
⇒La distribution de bolzman permet au système d'échapper au minimum local d'énergie en donnant une chance même faible de passer à un état à énergie plus élevée

Recuit thermique et recuit simulé

L’algorithme s’appuie sur 2 résultats de la physique statistique

2ième résultat de la physique statistique

Metropolis[1953] a établit un algorithme qui simule l’évolution du système physique vers son équilibre thermodynamique à une température donnée T



Si le nombre d’itérations est suffisamment long, le système aboutit à l’équilibre thermodynamique pour la température T:

Plus simplement ...

Analogie avec un processus thermique en physique de la matière : le recuit

* faire fondre un solide
* le refroidir lentement

Algorithme de Métropolis : simulation du recuit

- Soit un état x_k de niveau d'énergie E_k
- Perturbation aléatoire $\Rightarrow x_{k+1}$ avec niveau E_{k+1}
- si $E_{k+1} \leq E_k \Rightarrow x_{k+1}$ est le nouvel état

  si $E_{k+1} > E_k \Rightarrow x_{k+1}$ est le nouvel état

  avec probabilité $e^{-\frac{(E_{k+1}-E_k)}{k_B T}}$

k_B = constante de Boltzmann

T = température (Kelvin)

Recuit thermique et recuit simulé

KirkPatrick et al 1983 proposent un algorithme qui est basé sur une analogie entre le recuit thermique et la résolution de problèmes d'optimisation combinatoire

Recuit thermique		Recuit simulé
Les états du solide	⟷	Les solutions réalisables
Les énergies des états	⟷	Les valeurs de la fonction objectif calculées sur ces solutions
L'état à énergie minimale	⟷	Solution optimale du problème
Le refroidissement rapide	⟷	Recherche locale

Recuit thermique et recuit simulé

Analogie en optimisation

* $f(x) = E$ niveau d'énergie
* x = état du système
* Paramètre de contrôle = température

$$\Rightarrow P\left(x_{k+1} \text{ soit accepté}\right) = \begin{cases} 1 & \text{si} \quad f(x_{k+1}) \leq f(x_k) \\ e^{-\frac{(f(x_{k+1}) - f(x_k))}{c_k}} & \text{sinon} \end{cases}$$

c_k paramètre de contrôle

Algorithme du recuit simulé :

Algorithme du recuit simulé

Initialisation : $x_0 \quad c_0 \quad L_0 \quad k = 0$

Itérations : * pour $i = 1 \rightarrow L_k$

générer aléatoirement x_{k_i} dans un voisinage x_k

si $f(x_{k_i}) \leq f(x_k)$ alors $x_k = x_{k_i}$

sinon si $e^{-\frac{(f(x_{ki}) - f(x_k))}{c_k}} > v.a.$ uniforme sur $[0,1]$

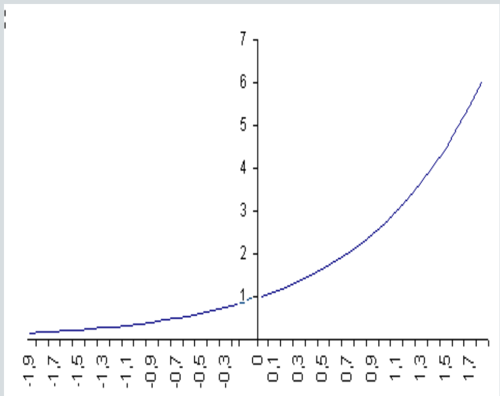
alors $x_k = x_{k_i}$

* $k = k + 1 \quad x_{k+1} = x_k$
* modifier L_k
* modifier c_k

Algorithme du recuit simulé :


```
Commencer avec une solution initiale : solution courante

Température := T0 (*Température initiale*)

Tant que la condition d'arret n'est pas remplie faire

        Pour i de 1 à N faire

            Calculer nouvelle solution (perturber la solution)
            Δ = coût (nouvelle solution) - coût (solution courante)
            si Δ < 0 alors
                    conserver nouvelle solution
            sinon
                    si random[0,1] < e^[- Δ/Température] alors
                            conserver nouvelle solution
                    fin si
            fin si

        fin pour

        Température = α * Température (*nouveau palier de température*)
fin Tant que
```

Algorithme du recuit simulé :



Température ↗

Δ/Température → 0

P = e$^{[-\Delta/\text{Température}]}$ → 1

0 **P** 1

Il est plus probable qu'une valeur aléatoire entre 0 et 1 soit inférieure à P

A température élevée la plupart des mouvements sont acceptés

L'algorithme équivaut à une simple marche dans l'espace des configurations

Température ↘

-Δ/Température → **-** ∝

P = e$^{[-\Delta/\text{Température}]}$ → 0

0 **P** 1

Il est plus probable qu'une valeur aléatoire entre 0 et 1 soit supérieure à P

A température faible la plupart des mouvements augmentant la température sont refusés

L'algorithme se ramène à une amélioration itérative classique

Température intermédiaire

L'algorithme autorise de temps en temps des transformations qui dégradent la fonction objectif

L'algorithme laisse une chance au système pour s'extraire d'un minimum local

Avantages : * possibilité d'échapper d'un minimum local
* agitation ajustable avec la température

Procédure de refroidissement

1° Initialisation du paramètre de contrôle

c_0 grand $\Rightarrow$ taux d'acceptation $\tau \approx 1$

2° Décroissance du paramètre de contrôle

Changement lent $c_{k+1} = \alpha \; c_k$ avec $0{,}9 < \alpha < 1$

3° Valeur finale du paramètre de contrôle

x_k constant durant une séquence L_k

4° Nombre de transitions testées: L_k

Si on souhaite un nombre fixe de transitions acceptées
=> $\lim_{k\to\infty} L_k = \infty$ => limite supérieure L_{max}

Algorithme du recuit simulé :

Abaissement de la température

Une fois l'équilibre est atteint à une température donnée (optimum local) on abaisse légèrement la température et on effectue une nouvelle série d'itérations

Condition d'arret

- La température a atteint une valeur presque nulle
- ou bien plus aucun mouvement améliorant la fonction objectif n'a été accepté au cours du palier

Examen des différents composants de l'algorithme

Programme du recuit

La vitesse de convergence dépend de:
- l'espace des configurations
- Le programme du recuit

Il s'agit de contrôler au mieux la température du système pour atteindre, le plus vite possible, une bonne solution

Le programme du recuit doit préciser les valeurs des paramètres du recuit suivants
- La température initiale t_0
- Le nombre de configurations visitées dans un palier de température
- La loi de décroissance de la température
- Le critère d'arrêt du programme

Absence de résultats théoriques réellement exploitables

$\Rightarrow$Réglage empirique de ces paramètres

Un bon réglage?

Examen des différents composants de l'algorithme

Réglage des paramètres du recuit simulé

1. Définition de la fonction objectif :
- Intégerer certaines contraintes dans la fonction objectif
- d'autres constituent une limitation des perturbations du problème

2. Choix des mécanismes de perturbation d'une "configuration courante" :
le calcul de la variation correspondante ΔE de la fonction objectif doit être direct et rapide

3. Détermination de la température initiale T0

Faire 100 perturbations au hazard

Évaluer la moyenne $<\Delta E>$ des variations ΔE correspondantes

Choisir un taux initial d'acceptation θ_0 des « perturbations dégradantes », selon la qualité supposée de la configuration initiale

- Qualité médiocre $\theta_0 = 50\%$ (démarrage à haute température)
- Qualité bonne $\theta_0 = 20\%$ (démarrage à basse température)

Déduire T0 de la relation $e^{[- <\Delta E> / T0]} = \theta_0$

$\Leftrightarrow \log\left(e^{[- <\Delta E> / T0]}\right) = \log(\theta_0)$

$\Leftrightarrow [- <\Delta E> / T0] = \log(\theta_0)$

$\Leftrightarrow T0 = - <\Delta E> / \log(\theta_0)$

Examen des différents composants de l'algorithme

Réglage des paramètres du recuit simulé

4. Règle d'acceptation de Métropolis:
Si $\Delta E > 0$ tirer un nombre r au hazard dans [0 1] et accepter la perturbation si $r < \mathbf{e}^{[-\Delta/\text{Température}]}$

5. Changement du palier de température
12 N perturbations acceptées
100 N perturbations tentées
N désignant la taille du problème

6. Décroissance de la température
Loi géométrique $T_{k+1} = 0.9\, T_k$

7. Arrêt du programme :
3 paliers de température successifs sans aucune acceptation

8. Vérifications indispensables lors des premières exécutions du programme
- Le générateur de nombres réels aléatoires doit être bien uniforme
- La qualité du résultat doit varier peu lorsque le programme est lancé plusieurs fois
  - Avec des générateurs de nombres aléatoires différents
  - Avec des configurations initiales différentes

9. Variante du programme pour essayer de gagner du temps:
Interrompre prématurément le RS et lancer un algorithme d'optimisation locale spécifique au problème pour affiner l'optimum

Application aux problèmes d'optimisation

Pour le problème du voyageur de commerce, comparé aux techniques classiques, Le RS est moins rapide pour N< 100 plus performant pour N> 800

Autres problèmes "Partitionnement logique", "Couplage Minimal de points", "Affectation quadratique" la comparaison aboutit à des résultats variables selon le problème et les auteurs.

Généralement, les résultats sont à l'avantage du RS pour les exemples de grande taille (quelques centaines de variables).
Inconvénients : temps de calculs élevé.

Même conclusion faite lors de l'application du RS aux problèmes industriels
- Placement et routage des circuits électriques.
-Alignements du laser et du fibre optique.
-Problème d'allocation et de séquencement des stations d'inspection dans le domaine du contrôle de qualité

Conclusions

Avantages et faiblesses

Avantages

RS procure généralement une solution de bonne qualité.

C'est une méthode générale, facile à programmer, applicable à la majorité des problèmes d'optimisation, à condition que l'on puisse calculer ΔE rapidement (éviter de recalculer complètement la fonction objectif après chaque transformation)

Faiblesses

Nombre important de paramètres *(température initiale, taux de décroissance de la température, durée des paliers de la température, critère d'arrêt du programme)*

Réglage souvent empirique des paramètres.

Temps de calculs excessif dans certaines applications

Des efforts pour gommer ces inconvénients sont faits dans la direction de parallélisation de l'algorithme et la prise en considération des progrès effectués par la physique statistique dans l'étude des milieux désordonnés.