

Chapitre 4

Le recuit simulé

4.1 Introduction :

Le recuit simulé [9,10] est une métaheuristique inspirée d'une technique utilisée depuis longtemps par les métallurgistes. Ils font alterner des cycles de réchauffage et de refroidissement lent des métaux afin d'obtenir un alliage sans défaut. En effet, lorsqu'on chauffe un métal solide à une certaine température, il devient liquide et les atomes qui le composent voient leur degré de liberté augmenter. Inversement, lorsqu'on baisse la température, le degré de liberté diminue et les atomes s'organisent en structure atomique parfaite proche de l'état d'énergie minimale afin d'obtenir un solide. Cependant, lorsque la baisse progressive de la température est trop rapide, le solide présente alors des défauts et on tombe dans un minimum local d'énergie [11]. Pour remédier à ce problème, la technique du recuit redonne de la liberté aux atomes pour tenter d'atteindre un nouvel état dynamique permettant d'explorer d'autres régions plus pertinentes dans l'espace des configurations.

En vue de traiter un problème d'optimisation, l'idée d'utiliser la technique du recuit a donné naissance à la méthode du recuit simulé.

4.2 Principe de base du recuit simulé

Afin de transposer la technique du recuit utilisée en métallurgie aux problèmes d'optimisation, les spécialistes du domaine ont établi l'analogie présentée dans le tableau 4.1.

<i>Problème d'optimisation</i>	<i>Système physique</i>
fonction objectif	énergie libre
paramètres du problème	coordonnées des particules
trouver une bonne configuration	Trouver des états de basse énergie

Tab.4.1 : analogie entre un problème d'optimisation et un système physique

En optimisation combinatoire, le recuit est simulé par un traitement itératif où la fonction objectif du problème traité est minimisée moyennant l'introduction d'une température fictive qui joue le rôle du paramètre de contrôle. Pour imiter l'évolution d'un système physique vers son équilibre thermodynamique à une température donnée T , le critère de Metropolis [12] fixe la probabilité d'accepter ou de refuser les configurations défavorables à la minimisation. Ce critère permet au système de sortir des minima locaux. Ainsi, On part avec une solution notée S_0 initialement générée de manière aléatoire dont correspond une énergie initiale E_0 , et une température initiale T_0 généralement élevée. A chaque itération un changement élémentaire est effectué sur la solution actuelle. Cette modification fait varier l'énergie du système d'une quantité ΔE .

- Si cette variation est négative, alors la nouvelle solution améliore la fonction objectif et permet de diminuer l'énergie du système. Le changement est directement accepté.
- Si la solution trouvée est moins bonne que la précédente, alors elle sera acceptée avec une probabilité donnée par :

$$P(E, T) = \exp^{\frac{-\Delta E}{T}} \quad (4.1)$$

Ce processus se poursuit tant que l'énergie du système se dégrade. Lorsqu'elle sera stationnaire, un refroidissement graduel est effectué avant de reprendre la même technique de nouveau. La recherche s'arrête une fois que les diminutions de température deviennent inefficaces. Généralement, quand sa valeur tend vers zéro.

4.3 Algorithme du recuit simulé

L'implémentation du recuit simulé est donné dans la figure Fig.4.1. La température courante T permet de contrôler l'acceptation des dégradations. A chaque itération, s'il y a une augmentation de l'énergie, on tire au hasard un réel $p \in [0, 1]$. Dans le cas où $p < \exp^{\frac{-\Delta E}{T}}$, on garde la solution courante. Sinon, on la jette en conservant toujours la meilleure solution.

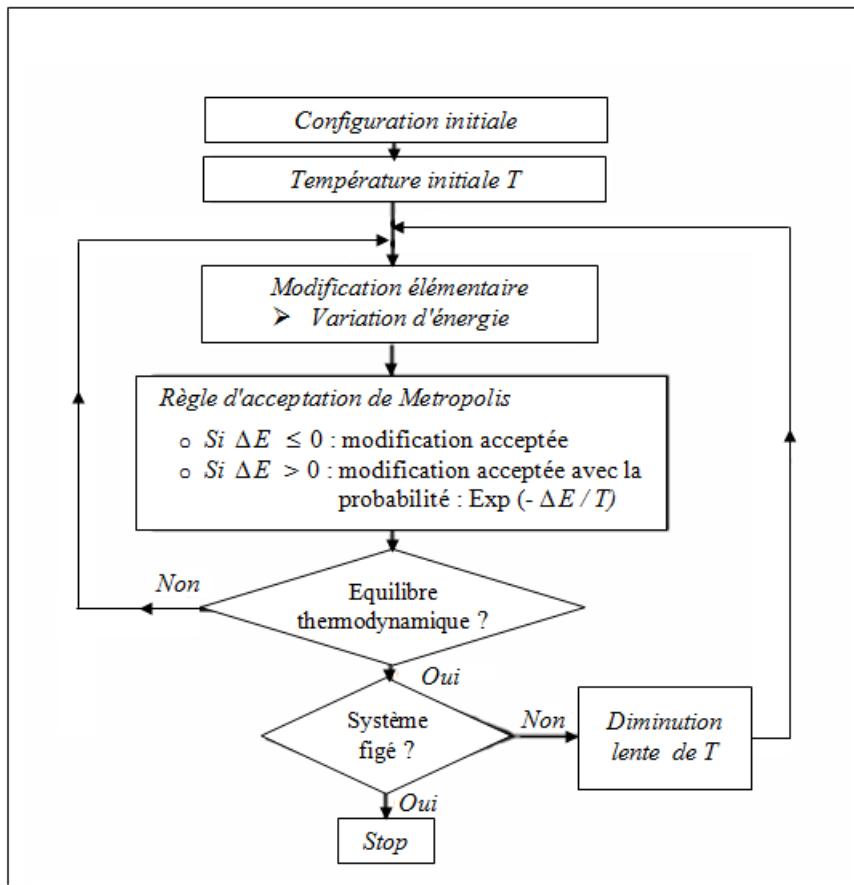


Figure 4.1 : Organigramme de l'algorithme du recuit simulé

En analysant le rôle confié à la température courante par la règle de Metropolis, on remarque que :

- A haute température, $\exp^{-\frac{\Delta E}{T}}$ est de l'ordre de 1. Donc, la plupart des mouvements sont acceptés même s'ils sont défavorables et l'algorithme est équivalent à une simple marche aléatoire dans l'espace des configurations.
- A basse température, $\exp^{-\frac{\Delta E}{T}}$ est de l'ordre de 0. Donc, les mouvements augmentant l'énergie sont généralement refusés et l'algorithme se ramène à une amélioration itérative classique.
- A température intermédiaire, l'algorithme autorise de temps en temps des transformations qui dégradent la fonction objectif. Ainsi, il laisse au système une chance d'éviter les minimums locaux.

4.4 Ajustement des paramètres du recuit simulé

L'efficacité du recuit simulé dépend fortement du choix de ses paramètres de contrôle, dont le réglage reste très empirique. Les plus importants sont :

- La valeur initiale de la température : Pour le calcul de la température de départ, la technique la plus utilisée est basée sur l'observation de la variation moyenne de la fonction objectif f . À partir d'une solution initiale S_0 on génère, par transformations élémentaires aléatoires, un certain nombre de solutions S'_0 (environ 50 à 100) telles que $f((x'_0) > f(x_0)$, et on calcule la variation moyenne $|<\Delta f>|_{init}$. La température initiale T_{init} est fixée de façon à accepter au départ une certaine proportion P_{init} de mouvements dégradant la fonction f . Sa valeur est déduite de la formule suivante :

$$P_{init} = \exp^{\frac{-|<\Delta f>|_{init}}{T_{init}}} \quad (4.2)$$

- La fonction de décroissance de la température : Au cours du processus du recuit simulé, la température T joue le rôle de la pièce maîtresse. Une forte décroissance de ce paramètre risque de piéger l'algorithme dans un minimum local, alors qu'une faible décroissance entraîne une convergence très lente de l'algorithme. En pratique, on adopte souvent une décroissance géométrique :

$$T_{k+1} = \alpha T_k \text{ avec : } \alpha \in [0, 1] \quad (4.3)$$

Pour adapter la décroissance de la température à l'évolution du processus, un compromis entre ces deux concepts doit être assuré en utilisant une variation logarithmique. En plus, cette décroissance peut également être réalisée par paliers. En d'autres termes, elle ne change qu'après un certain nombre d'itérations. Théoriquement, la loi logarithmique de décroissance de la température qui assure la convergence du recuit simulé est la suivante :

$$T_k = \frac{\mu}{\log(k + 1)} \quad (4.4)$$

où k est le nombre de paliers de température effectués et μ une constante positive. Certains préconisent même l'utilisation de stratégies non monotones. On peut ainsi rehausser la température lorsque la recherche semble bloquée dans une région de l'espace de recherche. Ainsi, on considère l'augmentation de la température comme un processus de diversification alors que sa décroissance correspond à un processus d'intensification.

De nombreux mathématiciens se sont intéressés à la convergence du recuit simulé. Les résultats théoriques obtenus affirment que cet algorithme converge vers un optimum global avec une probabilité acceptable sous certaines contraintes. Particulièrement, ils ont montré que la convergence est assurée à condition que l'on respecte :

- D'une part la réversibilité : le changement inverse de tout changement permis doit être également permis.
- D'autre part la connexité : tout état du système peut être atteint à partir de n'importe quel autre état de l'espace des configurations moyennant un nombre fini de changements élémentaires.