

Optimisation à finalité statistique

Salim Lardjane

Université de Bretagne-Sud

Cours 10 - Recuit Simulé

Recuit simulé

L'algorithme de recuit simulé a été proposé par Metropolis & col. en 1953 pour minimiser une fonction définie sur un ensemble *fini* mais il s'applique également à l'optimisation sur un ensemble *continu*.

Dans le contexte du recuit simulé, la fonction h à minimiser est appelée *énergie* et elle est souvent notée E . L'*idée fondamentale* du recuit simulé est qu'un changement d'échelle (dans ce contexte, on parle de *changement de température*) permet un déplacement plus rapide sur la surface de la fonction à minimiser qu'un déplacement à pas constant.

Plus précisément, l'algorithme de simulation proposé par Metropolis & col. est le suivant :

Recuit simulé

Partant d'un point initial θ^0 arbitrairement choisi, on génère une suite de valeurs $\{\theta^n\}$ obtenues récursivement selon les règles ci-dessous.

1. Simuler ζ^n selon une loi de densité g_n conditionnellement à θ^n ; cette loi est généralement centrée sur θ^n
2. Poser $\theta^{n+1} = \zeta^n$ si $h(\zeta^n) \leq h(\theta^n)$
3. Si $h(\zeta^n) > h(\theta^n)$, choisir θ^{n+1} aléatoirement de façon à avoir

$$\mathbb{P}(\theta^{n+1} = \zeta^n | \theta^n, \zeta^n) = e^{-\Delta h_n / T_n}$$

$$\mathbb{P}(\theta^{n+1} = \theta^n | \theta^n, \zeta^n) = 1 - e^{-\Delta h_n / T_n}$$

où $\Delta h_n = h(\zeta^n) - h(\theta^n)$ et où $\{T_n\}$ est la suite des *températures*, supposée décroissante et de limite nulle.

Recuit simulé

A mesure que T_n décroît vers zéro, on peut *s'attendre* à ce que les valeurs $\{\theta^n\}$ obtenues par simulation soient situées dans un voisinage de plus en plus étroit des *minima globaux* de la fonction h , l'étape 3) permettant d'échapper à l'attraction des *minima locaux* de celle-ci.

On dispose en fait de résultats de convergence précis dans la cas d'espaces *finis* mais la méthode est également très utilisée dans le cas d'espaces continus.

Recuit simulé

Les résultats théoriques dont on dispose recommandent une décroissance de la température de la forme $T_n \propto 1/\log n$ mais d'autres règles de choix des T_n sont parfois utilisées avec de bons résultats pratiques.

Enfin, mentionnons que le recuit simulé doit son nom est la terminologie qui lui est propre (énergie, température) à ses liens avec la Mécanique Statistique et la Métallurgie : le procédé de *recuit* consiste à réchauffer un métal puis à le refroidir lentement dans l'espoir d'atteindre un état d'énergie potentielle inférieur, correspondant à un surcroît de solidité.

Le recuit simulé est implémenté sous R (optim) et SAS (nlp) sous le nom de méthode SANN (Simulated Annealing).

Recuit simulé

Exercice 12. Appliquer la méthode de recuit simulé à la fonction de Rosenbrock sous R et comparer ses propriétés de convergence à celles des méthodes précédentes.

Programmer l'algorithme de recuit simulé sous Python et l'appliquer à la fonction de Rosenbrock.