
Recuit simulé

Le problème du voyageur de commerce est un exemple typique de problème de minimisation complexe. Un voyageur de commerce doit visiter N clients habitant N villes différentes, puis revenir à son point de départ. Afin de diminuer son coût de transport, il lui faut trouver le trajet le plus court joignant les N villes. Une idée consiste à calculer la longueur de chaque trajet et à choisir ainsi celui de longueur minimale. On peut identifier un trajet avec une permutation sur l'ensemble des N villes. La permutation $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ correspond au trajet $\sigma_1 \rightarrow \dots \rightarrow \sigma_N \rightarrow \sigma_1$, ayant σ_1 comme point de départ. Le nombre de permutations est $N!$, soit environ $\sqrt{2\pi} N^{N+\frac{1}{2}} e^{-N}$, d'après la formule de Stirling. Pour $N = 10$ il existe 3 628 800 permutations différentes, et pour $N = 30$, on obtient environ 2.10^{32} permutations différentes. On estime l'âge de l'univers à environ 2.10^{10} années, soit environ 6.10^{17} secondes. Il est donc absolument impossible d'énumérer toutes les permutations, même pour N de l'ordre de quelques dizaines, afin de trouver le trajet le plus court !

De nombreux travaux sont consacrés à la recherche d'un ou de plusieurs points qui réalisent le minimum d'une fonction quelconque. Certains algorithmes de recherche utilisent des méthodes stochastiques, comme par exemple le recuit simulé ou les algorithmes génétiques. En ce qui concerne ces deux familles d'algorithmes stochastiques, nous recommandons la lecture des ouvrages de Bartoli et Del Moral [1], Duflo [4] et Ycart [11].

En fait, pour le problème du voyageur de commerce, des algorithmes déterministes très spécifiques, voir [7 ou 9], sont plus efficaces que l'algorithme du recuit simulé que nous allons présenter. Ce dernier a toutefois l'avantage de reposer sur des principes généraux. Et on peut aisément l'adapter à d'autres problèmes complexes d'optimisation, où la fonctionnelle que l'on cherche à minimiser possède de nombreux minima locaux.

Dans le paragraphe 2.1, nous démontrons que si la chaîne de Markov $X = (X_n, n \geq 0)$ vérifie la condition de Doeblin, voir la définition 2.1.1, alors elle converge pour la norme en variation vers une probabilité qui est son unique probabilité invariante. Le paragraphe 2.2 présente l'algorithme de Metropolis développé en 1953, voir [8], et généralisé par Hastings [6], qui permet de

simuler de manière approchée une variable aléatoire de loi μ . Pour atteindre cet objectif, on simule une chaîne de Markov, $X = (X_n, n \geq 0)$ qui satisfait la condition de Doeblin et dont μ est l'unique probabilité invariante. Pour n suffisamment grand, la loi de X_n est une bonne approximation de μ . Le paragraphe 2.3 est consacré à la présentation du recuit simulé. Soit H une fonction définie sur un espace discret. On veut trouver un ou plusieurs points où H atteint son minimum. Dans le cas du voyageur de commerce, H est la fonction qui à un trajet associe sa longueur. Dans le paragraphe 2.3.1, on introduit les mesures de Gibbs ($\mu_T, T > 0$) associées à H qui se concentrent sur les points qui réalisent le minimum de H quand T tend vers 0, voir le lemme 2.3.2. Par analogie avec la physique statistique, la fonction H est appelée énergie ou fonction d'énergie et le paramètre T est appelé température.

L'algorithme du recuit simulé (« simulated annealing » en anglais) décrit dans le paragraphe 2.3.2 a pour but de simuler des variables aléatoires qui se concentrent sur l'ensemble des points où H atteint son minimum. L'idée est d'utiliser l'algorithme de Metropolis pour simuler une chaîne de Markov qui converge vers μ_T , avec T proche de 0. Pour T proche de 0, si la loi initiale de la chaîne de Markov utilisée dans l'algorithme de Metropolis est éloignée (au sens de la norme en variation) de μ_T , alors l'algorithme converge très lentement. Il est plus judicieux de choisir une loi initiale proche de μ_T . Le lemme 2.3.3 assure que les mesures de Gibbs sont proches pour la norme en variation si les températures sont proches. On choisit donc une température élevée, T'_1 , une loi initiale quelconque, puis on utilise l'algorithme de Metropolis pour construire une chaîne de Markov dont la loi au temps n_1 est proche de $\mu_{T'_1}$. Ceci fournit alors une loi initiale raisonnable pour construire, à l'aide de l'algorithme de Metropolis, une chaîne de Markov dont la loi au temps n_2 est proche de $\mu_{T'_2}$, avec $T'_2 < T'_1$. Cette procédure est ensuite itérée. Le schéma de température associé à cette construction est constitué de la suite $(T_k, k \geq 1)$ dont les n_1 premiers termes sont égaux à T'_1 , les n_2 suivants à T'_2 , et ainsi de suite. L'objectif est alors d'exhiber un schéma de température $(T_k, k \geq 1)$ qui assure que les variables aléatoires simulées se concentrent sur les points où H atteint son minimum. Dans le paragraphe 2.3.2, nous démontrons ce résultat pour des schémas de températures de la forme $T_k = \gamma / \log(k)$, $k \geq 1$. Nous présentons au paragraphe 2.3.3 quelques résultats théoriques sur le comportement asymptotique du recuit simulé. La terminologie de *recuit* (« annealing » en anglais) provient de la métallurgie, où le métal en fusion est refroidi lentement, afin de lui assurer une meilleure résistance. Un refroidissement brutal peut en revanche le figer dans un état plus fragile que l'état d'énergie minimum.

Enfin, nous revenons sur le problème du voyageur de commerce au paragraphe 2.4 avec des comparaisons empiriques sur les vitesses de décroissance des températures et les choix des algorithmes de Metropolis.

2.1 Condition de Doeblin et convergence des chaînes de Markov

Soit P la matrice de transition d'une chaîne de Markov $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$ sur un espace discret, E .

Définition 2.1.1. *On dit que X vérifie la condition de Doeblin si et seulement s'il existe $l \in \mathbb{N}^*$, $\alpha > 0$ et c une probabilité sur E tels que pour tous $x, y \in E$,*

$$P^l(x, y) \geq \alpha c(y). \quad (2.1)$$

La notion de convergence en variation qui intervient dans le théorème qui suit est définie en appendice, voir la définition D.1.

Théorème 2.1.2. *Supposons que X vérifie la condition de Doeblin. Alors pour toute loi ν de X_0 , la loi de X_n converge en variation vers une probabilité π . De plus cette probabilité π est l'unique probabilité invariante de X .*

Remarque 2.1.3.

- Il est clair qu'une chaîne de Markov périodique de période $d > 1$ ne vérifie pas la condition de Doeblin.
- Si E est fini, les théorèmes 1.4.3 et 1.4.4 impliquent que la chaîne est irréductible et apériodique si et seulement si elle vérifie la condition de Doeblin avec une probabilité c telle que $c(y) > 0$ pour tout $y \in E$. Cette équivalence n'est plus vraie en général si E n'est pas fini.

◇

Démonstration du théorème 2.1.2. On suppose dans un premier temps que $l = 1$. Si μ, μ' sont deux probabilités sur E , alors on a

$$\begin{aligned} \|\mu P - \mu' P\| &= \frac{1}{2} \sum_{y \in E} |\mu P(y) - \mu' P(y)| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{y \in E} \left| \sum_{x \in E} [\mu(x) - \mu'(x)] P(x, y) \right| \\ &= \frac{1}{2} \sum_{y \in E} \left| \sum_{x \in E} [\mu(x) - \mu'(x)] [P(x, y) - \alpha c(y)] \right| \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{x \in E} |\mu(x) - \mu'(x)| \sum_{y \in E} [P(x, y) - \alpha c(y)] \\ &= \frac{1}{2} \sum_{x \in E} |\mu(x) - \mu'(x)| (1 - \alpha) \\ &= (1 - \alpha) \|\mu - \mu'\|, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé $\sum_{x \in E} \mu(x) = \sum_{x \in E} \mu'(x) = 1$ pour la troisième égalité, $P(x, y) - \alpha c(y) \geq 0$ pour la première inégalité, et $\sum_{y \in E} [P(x, y) - \alpha c(y)] = 1 - \alpha$ pour la quatrième égalité. On a ainsi obtenu

$$\|\mu P - \mu' P\| \leq (1 - \alpha) \|\mu - \mu'\|. \quad (2.2)$$

Rappelons que l'on peut voir l'ensemble des mesures sur E comme l'ensemble des vecteurs de \mathbb{R}^E . Une probabilité est alors un vecteur $p = (p_x; x \in E)$ tel que $p_x \in [0, 1]$ pour tout $x \in E$ et $\sum_{x \in E} p_x = 1$. L'ensemble des probabilités, \mathcal{P} , est un fermé de \mathbb{R}^E . La norme en variation sur \mathbb{R}^E correspond, à un facteur $1/2$ près, à la norme L^1 . En particulier, \mathbb{R}^E muni de la norme en variation est complet. Donc l'espace \mathcal{P} est également complet pour la norme en variation. Ainsi, l'application qui à la probabilité μ associe la probabilité μP est une application de \mathcal{P} dans \mathcal{P} , contractante de rapport $1 - \alpha < 1$ pour la norme en variation. Comme l'espace \mathcal{P} est complet, elle admet un unique point fixe $\pi \in \mathcal{P}$. La probabilité π est donc l'unique probabilité telle que $\pi = \pi P$. On démontre par récurrence, en utilisant (2.2), que

$$\|\nu P^n - \pi\| = \|\nu P^n - \pi P^n\| \leq (1 - \alpha)^n \|\nu - \pi\| \leq (1 - \alpha)^n.$$

En particulier, si ν est la loi de X_0 , alors on en déduit que la loi de X_n , νP^n , converge en variation vers π quand n tend vers l'infini.

Si $l > 1$, remarquons que $(X_{kl}, k \geq 0)$ est une chaîne de Markov de matrice de transition P^l . On déduit de ce qui précède que pour toute loi ν de X_0 , la loi de X_{kl} , νP^{kl} , converge en variation vers l'unique probabilité π telle que $\pi = \pi P^l$, quand k tend vers l'infini. De plus si $n = kl + p$ avec $0 \leq p < l$, on a

$$\|\nu P^n - \pi\| = \|\nu P^{kl+p} - \pi P^{kl+p}\| \leq (1 - \alpha)^k \|\nu P^p - \pi\| \leq (1 - \alpha)^k.$$

On en déduit que la loi de X_n , νP^n , converge en variation vers π , quand n tend vers l'infini. Enfin remarquons que $\pi P = \pi P^{l+1}$ car π est une probabilité invariante pour P^l . Donc la probabilité πP est une probabilité invariante de P^l . On en déduit $\pi P = \pi$. La probabilité π est donc invariante pour P . Soit μ une autre probabilité invariante pour P . Elle est également invariante pour P^l , et donc $\mu = \pi$. Ainsi la probabilité π est l'unique probabilité invariante. \square

Remarque 2.1.4. Soit P une matrice stochastique. Pour $\nu, \nu' \in \mathcal{P}$, on a

$$\begin{aligned} \|\nu P - \nu' P\| &= \frac{1}{2} \sum_{y \in E} \left| \sum_{x \in E} [\nu(x) - \nu'(x)] P(x, y) \right| \\ &\leq \frac{1}{2} \sum_{x \in E} |\nu(x) - \nu'(x)| \sum_{y \in E} P(x, y) = \|\nu - \nu'\|. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Si la condition de Doeblin est satisfaite avec $l = 1$, alors la première partie de la démonstration du théorème 2.1.2, voir (2.2), assure que l'application $\nu \rightarrow \nu P$ est en fait contractante sur \mathcal{P} . \diamond

2.2 Algorithme de Metropolis

Une méthode pour simuler de manière approchée une loi de probabilité μ sur E consiste à construire une chaîne de Markov, $X = (X_n, n \in \mathbb{N})$, vérifiant (2.1) et dont la probabilité invariante est μ . Dans ce cas, la loi de X_n pour n grand est proche de μ pour la norme en variation. Il existe plusieurs choix possibles pour la loi de X , voir par exemple l'exercice 2.2.4. La méthode présentée ci-dessous est appelée algorithme de Metropolis.

On se donne une matrice stochastique, P , sur E telle que, pour tous $x, y \in E$,

$$P(x, y) > 0 \iff P(y, x) > 0. \quad (2.4)$$

Cette matrice stochastique, appelée matrice de sélection, décrit la manière de visiter l'espace E . On dit que x et y sont voisins si $P(x, y) > 0$. On définit la fonction ρ par

$$\rho(x, y) = \min \left(1, \frac{\mu(y)P(y, x)}{\mu(x)P(x, y)} \right), \quad x, y \in E,$$

avec la convention que $\rho(x, y) = 1$ si $\mu(x)P(x, y) = 0$.

Décrivons intuitivement l'algorithme de Metropolis. Notons $x_n = x$ la valeur observée à l'étape n . On choisit un voisin, y , de x avec probabilité $P(x, y)$ donnée par la matrice de sélection. Avec probabilité $\rho(x, y)$, on accepte la transition, et on pose $x_{n+1} = y$. Avec probabilité $1 - \rho(x, y)$, on rejette la transition, et on pose $x_{n+1} = x$. En particulier, on accepte toujours la transition si $\mu(y)P(y, x) \geq \mu(x)P(x, y)$.

Plus précisément, soit $Y = (Y_{n,x}, n \geq 1, x \in E)$ et $V = (V_n, n \geq 1)$ deux suites indépendantes de variables aléatoires indépendantes telles que $\mathbb{P}(Y_{n,x} = y) = P(x, y)$ pour tous $x, y \in E$ et V_n suit la loi uniforme sur $[0, 1]$. Soit X_0 une variable aléatoire à valeurs dans E , indépendante de Y et V . On définit par récurrence la suite X_n : pour $n \geq 0$,

$$X_{n+1} = Y_{n+1, X_n} \mathbf{1}_{\{V_{n+1} \leq \rho(X_n, Y_{n+1, X_n})\}} + X_n \mathbf{1}_{\{V_{n+1} > \rho(X_n, Y_{n+1, X_n})\}}. \quad (2.5)$$

Proposition 2.2.1. *Le processus $X = (X_n, n \geq 0)$ décrit par (2.5), est une chaîne de Markov de matrice de transition Q définie par*

$$Q(x, y) = \begin{cases} P(x, y)\rho(x, y) & \text{si } x \neq y, \\ 1 - \sum_{z \neq x} Q(x, z) & \text{sinon.} \end{cases} \quad (2.6)$$

La chaîne de Markov X est réversible par rapport à la probabilité μ . En particulier, μ est une probabilité invariante pour X .

Démonstration. La première partie de la proposition est une conséquence directe de la remarque 1.1.6 avec $U_n = ((Y_{n,x}, x \in E), V_n)$. Pour démontrer la deuxième partie, remarquons que pour $x \neq y$, on a

$$\mu(x)Q(x, y) = \mu(x)P(x, y)\rho(x, y) = \min(\mu(x)P(x, y), \mu(y)P(y, x)).$$

Par symétrie, on en déduit donc que $\mu(x)Q(x, y) = \mu(y)Q(y, x)$. Ainsi la chaîne de Markov X est réversible par rapport à la probabilité μ . D'après le lemme 1.3.3 la probabilité μ est une probabilité invariante. \square

Proposition 2.2.2. *On suppose E fini et $\mu(x) > 0$ pour tout $x \in E$. Si P vérifie la condition (2.1), alors Q vérifie (2.1). En particulier X converge en variation vers μ , son unique probabilité invariante.*

Il est crucial, pour l'application au recuit simulé, de remarquer que pour mettre en œuvre l'algorithme de Metropolis il n'est pas besoin de connaître explicitement μ , mais seulement les rapports $\mu(y)/\mu(x)$. Il est donc suffisant de connaître μ à une constante multiplicative près.

Démonstration. On pose $a = \min \left\{ \frac{\mu(y)P(y, x)}{\mu(x)P(x, y)}; x, y \in E, \text{ tels que } P(x, y) > 0 \right\}$. Comme E est fini, on a, d'après (2.4), $0 < a \leq 1$. Ainsi pour $x \neq y$, il vient $Q(x, y) \geq aP(x, y)$. De plus comme $Q(x, y) \leq P(x, y)$ si $x \neq y$, on en déduit que

$$Q(x, x) = 1 - \sum_{y \neq x} Q(x, y) \geq 1 - \sum_{y \neq x} P(x, y) = P(x, x) \geq aP(x, x).$$

Cela implique que pour tous $x, y \in E$, on a $Q(x, y) \geq aP(x, y)$ et aussi

$$Q^2(x, y) = \sum_{z \in E} Q(x, z)Q(z, y) \geq a^2 \sum_{z \in E} P(x, z)P(z, y) = a^2 P(x, y).$$

Par récurrence, on montre que pour tout $n \geq 1$, $Q^n(x, y) \geq a^n P^n(x, y)$. En particulier si P vérifie la condition (2.1), alors Q vérifie (2.1) avec le même entier l , la même probabilité c et α remplacé par αa^l . On déduit alors du théorème 2.1.2 que X converge en variation vers μ , et que μ est l'unique probabilité invariante de X . \square

La remarque suivante nous servira pour résoudre le problème du voyageur de commerce.

Remarque 2.2.3. On suppose E fini, $\mu(x) > 0$ pour tout $x \in E$, P irréductible tel qu'il existe $x, y \in E$ avec $P(x, y) > 0$ et $\rho(x, y) < 1$. Soit Q la matrice définie par (2.6). Alors on a $Q(x, x) > 0$, et la chaîne de Markov associée à Q est apériodique. On observe que si $P(x, y) > 0$, alors $Q(x, y) > 0$. En particulier P étant irréductible, il en est de même pour Q . On déduit de la remarque 2.1.3, que Q vérifie la condition de Doeblin (2.1). Ainsi, bien que la chaîne de Markov associée à P

puisse être périodique, et donc ne pas satisfaire la condition de Doeblin, la conclusion de la proposition 2.2.2 reste encore vraie : la chaîne de Markov X associée à Q converge en variation vers μ , son unique probabilité invariante. \diamond

Exercice 2.2.4. Soit h une fonction définie sur \mathbb{R}_+ à valeurs dans $[0, 1[$ telle que $h(0) = 0$ et $h(u) = uh\left(\frac{1}{u}\right)$, pour $u > 0$.

1. Vérifier que les fonctions $u \rightarrow \min(1, u)$ et $u \rightarrow \frac{u}{1+u}$ satisfont les égalités ci-dessus.
2. Démontrer que la chaîne de Markov de matrice de transition définie par (2.6) avec $\rho(x, y) = h\left(\frac{\mu(y)P(y, x)}{\mu(x)P(x, y)}\right)$ si $\mu(x)P(x, y) > 0$, et $\rho(x, y) = 1$ sinon, est réversible par rapport à la probabilité μ .

◆

2.3 Le recuit simulé

On suppose E fini, et on se donne H une fonction définie sur E à valeurs dans \mathbb{R} . On cherche à déterminer un point où H atteint son minimum, c'est-à-dire un point de $\operatorname{argmin}(H) = \{x \in E; H(x) = \mathcal{H}\}$ avec $\mathcal{H} = \min_{y \in E} H(y)$. La fonction H est souvent appelée énergie ou fonction d'énergie par analogie avec la physique statistique.

2.3.1 Mesures de Gibbs

En physique statistique les mesures de Gibbs décrivent la probabilité d'un état x du système considéré, en fonction de son énergie et de la température du système, voir l'exercice à la fin de ce paragraphe.

Définition 2.3.1. La mesure de Gibbs associée à la fonction d'énergie H et à la température $T > 0$ est la probabilité $(\mu_T(x), x \in E)$ définie par

$$\mu_T(x) = \frac{1}{Z_T} e^{-H(x)/T},$$

où $Z_T = \sum_{x \in E} e^{-H(x)/T}$, appelée fonction de partition, est la constante de normalisation.

Lorsque la température décroît vers 0, les mesures de Gibbs se concentrent sur $\operatorname{argmin}(H)$. Plus précisément, on a le lemme suivant.

Lemme 2.3.2. On a $\lim_{T \rightarrow 0^+} \mu_T(\{x \in E; H(x) > \mathcal{H}\}) = 0$.

Démonstration. Comme E est fini, il existe $\varepsilon > 0$ tel que $\{x \in E; H(x) > \mathcal{H}\} = \{x \in E; H(x) \geq \mathcal{H} + \varepsilon\}$. On a $Z_T \geq e^{-\mathcal{H}/T} \text{Card}(\text{argmin}(H))$. Il vient

$$\begin{aligned} \mu_T(\{x; H(x) \geq \mathcal{H} + \varepsilon\}) &= \sum_{x \in E; H(x) \geq \mathcal{H} + \varepsilon} \frac{1}{Z_T} e^{-H(x)/T} \\ &\leq \sum_{x \in E} \frac{1}{e^{-\mathcal{H}/T} \text{Card}(\text{argmin}(H))} e^{-(\mathcal{H} + \varepsilon)/T} \\ &= e^{-\varepsilon/T} \frac{\text{Card}(E)}{\text{Card}(\text{argmin}(H))}. \end{aligned}$$

On en déduit donc que $\lim_{T \rightarrow 0+} \mu_T(\{x; H(x) \geq \mathcal{H} + \varepsilon\}) = 0$. \square

Enfin, on utilisera par la suite la majoration suivante de la distance, pour la norme en variation, entre deux mesures de Gibbs associées à la même fonction d'énergie.

Lemme 2.3.3. *Soit $\Delta(H) = \max_{x \in E} H(x) - \mathcal{H}$. On a*

$$\|\mu_T - \mu_{T'}\| \leq \left| \frac{1}{T} - \frac{1}{T'} \right| \Delta(H).$$

Démonstration. La mesure de Gibbs reste inchangée si on remplace H par $H - a$. Quitte à choisir $a = \min_{x \in E} H(x)$, on peut donc supposer que $H \geq 0$ et $\mathcal{H} = 0$.

Supposons que $T \geq T'$. Rappelons que $0 \leq 1 - e^{-z} \leq z$ pour tout $z \geq 0$. Comme $(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T})H(x) \geq 0$, on a

$$\begin{aligned} \left| e^{-H(x)/T} - e^{-H(x)/T'} \right| &= e^{-H(x)/T} \left| 1 - e^{-(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T})H(x)} \right| \\ &\leq \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T} \right) \max_{y \in E} (H(y)) e^{-H(x)/T}. \end{aligned}$$

Il vient

$$\left| e^{-H(x)/T} - e^{-H(x)/T'} \right| \leq \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T} \right) \Delta(H) e^{-H(x)/T}. \quad (2.7)$$

On obtient $|Z_T - Z_{T'}| \leq \sum_{x \in E} \left| e^{-H(x)/T} - e^{-H(x)/T'} \right| \leq \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T} \right) \Delta(H) Z_T$, puis en divisant par $Z_T Z_{T'}$,

$$\left| \frac{1}{Z_T} - \frac{1}{Z_{T'}} \right| \leq \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T} \right) \Delta(H) \frac{1}{Z_{T'}}. \quad (2.8)$$

Enfin on remarque que

$$\begin{aligned} 2 \|\mu_T - \mu_{T'}\| &= \sum_{x \in E} \left| \frac{1}{Z_T} e^{-H(x)/T} - \frac{1}{Z_{T'}} e^{-H(x)/T'} \right| \\ &\leq \sum_{x \in E} \left| e^{-H(x)/T} - e^{-H(x)/T'} \right| \frac{1}{Z_T} + \left| \frac{1}{Z_T} - \frac{1}{Z_{T'}} \right| \sum_{x \in E} e^{-H(x)/T'} \\ &\leq 2 \left(\frac{1}{T'} - \frac{1}{T} \right) \Delta(H), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé (2.7), (2.8) et le fait que μ_T et $\mu_{T'}$ sont des probabilités pour la dernière inégalité. \square

Les mesures de Gibbs et les lois de Boltzmann apparaissent naturellement lorsque l'on désire affecter des probabilités aux états quantifiés d'un système dont on connaît l'énergie moyenne. L'exercice suivant a pour but de présenter ces modélisations.

Exercice 2.3.4. Soit E l'ensemble fini des états d'un système. On note $H(x)$ l'énergie correspondant à l'état x . On suppose que l'énergie moyenne $\langle H \rangle$ est connue. On a

$$\langle H \rangle = \sum_{x \in E} H(x)p(x), \quad (2.9)$$

où $p(x)$ est la probabilité pour que le système soit dans l'état x . On recherche la probabilité qui satisfait (2.9) et qui contient le moins d'information. On peut, voir les travaux de Shannon (1948) sur l'information, quantifier l'information contenue dans p par son entropie : $S(p) = -\sum_{x \in E} p(x) \log(p(x))$ (avec la convention $0 \log(0) = 0$). L'information totale correspond au cas où l'on sait avec certitude que l'on est dans l'état x_0 : la loi de probabilité est alors $p(x) = \mathbf{1}_{\{x=x_0\}}$ et $S(p) = 0$. L'entropie est alors minimale. On peut vérifier que l'entropie est maximale pour la loi uniforme qui modélise l'absence d'information.

Nous retiendrons le principe général suivant : pour déterminer un modèle, on recherche une loi de probabilité sur E qui maximise l'entropie en tenant compte des contraintes qui traduisent les informations a priori sur le modèle.

On considère les lois de Boltzmann, ν_β , définies par $\nu_\beta(x) = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H(x)}$, $x \in E$, avec $Z_\beta = \sum_{x \in E} e^{-\beta H(x)}$, et $\beta \in \mathbb{R}$. L'objectif de cet exercice est de démontrer qu'il existe une unique valeur, $\beta_0 \in \mathbb{R}$, telle que la probabilité ν_{β_0} vérifie l'équation (2.9), et que ν_{β_0} est l'unique probabilité qui maximise l'entropie sous la contrainte (2.9).

On suppose que l'énergie de tout état est finie et qu'il existe $y, y' \in E$ tels que

$$H(y') < \langle H \rangle < H(y).$$

1. En utilisant par exemple le théorème des multiplicateurs de Lagrange, montrer que si $p \in]0, 1]^E$ maximise $S(p)$ sous les contraintes $\sum_{x \in E} p(x) = 1$ et (2.9), alors p est une loi de Boltzmann.

2. Vérifier que la contrainte (2.9) pour ν_β se réécrit $\varphi(\beta) = 0$ avec $\varphi(b) = \sum_{x \in E} (H(x) - \langle H \rangle) e^{-b(H(x) - \langle H \rangle)}$. Montrer que la fonction φ est strictement décroissante sur \mathbb{R} et admet un seul zéro. En déduire qu'il existe une unique valeur, $\beta_0 \in \mathbb{R}$, telle que ν_{β_0} satisfasse (2.9).
3. Soit q une probabilité vérifiant (2.9) et telle que $q_z = 0$ pour un certain $z \in E$. Quitte à changer H par $-H$, on peut supposer que $H(z) \leq \langle H \rangle$. Vérifier qu'il existe $a \in]0, 1]$ tel que $aH_z + (1 - a)H_y = \langle H \rangle$. On définit la probabilité q^ε par $q_z^\varepsilon = \varepsilon a$, $q_y^\varepsilon = (1 - \varepsilon)q_y + \varepsilon(1 - a)$ et $q_x^\varepsilon = (1 - \varepsilon)q_x$ pour $x \notin \{z, y\}$. Montrer que la probabilité q^ε satisfait (2.9) et que $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\partial S(q^\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = +\infty$.
4. En déduire que ν_{β_0} est l'unique probabilité qui vérifie (2.9) et qui maximise l'entropie.
5. Montrer que $S(\nu_{\beta_0}) = \beta_0 \langle H \rangle + \log(Z'_{\beta_0})$.

Quitte à changer le signe de la fonction d'énergie, on remarque que, si $\beta \neq 0$, la loi de Boltzmann est une mesure de Gibbs. \blacklozenge

2.3.2 Un résultat partiel

Soit P une matrice stochastique irréductible symétrique, i.e. $P(x, y) = P(y, x)$ pour tous $x, y \in E$. Cette dernière condition assure que (2.4) est vérifiée. Un schéma de température est une suite $(T_n, n \in \mathbb{N}^*)$ à valeurs dans \mathbb{R}_+^* . Pour alléger les notations, on note μ_n , pour μ_{T_n} , la mesure de Gibbs associée à la fonction d'énergie H et à la température T_n .

On considère $X = (X_n, n \geq 0)$ une chaîne de Markov non-homogène de matrice de transition $(Q_n, n \geq 1)$, où Q_n est définie par (2.6) avec μ remplacé par μ_n . Comme P est symétrique, on remarque que

$$Q_n(x, y) = \begin{cases} P(x, y) e^{-[H(y) - H(x)]^+ / T_n} & \text{si } x \neq y, \\ 1 - \sum_{z \neq x} Q_n(x, z) & \text{sinon,} \end{cases} \quad (2.10)$$

où $a^+ = \max(a, 0)$ désigne la partie positive de a . On s'attend à ce que la loi de X_n soit proche de la mesure de Gibbs μ_n , et donc au vu du lemme 2.3.2 que $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(H(X_n) > \mathcal{H}) = 0$ si $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = 0$. Nous précisons les conditions sous lesquelles ce résultat intuitif est vrai.

Proposition 2.3.5. *On suppose que P est symétrique irréductible et satisfait la condition de Doeblin (2.1). Il existe H_0 tel que pour tout $h > H_0$, si l'on considère le schéma de température $(T_n, n \geq 1)$ défini par $T_n = h / \log(n)$, alors pour toute loi ν_0 de X_0 , on a*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nu_n - \mu_n\| = 0,$$

où ν_n est la loi de X_n . En particulier, on a $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(H(X_n) > \mathcal{H}) = 0$.

La constante H_0 que nous calculerons n'est pas optimale a priori, nous reviendrons sur cette question au paragraphe 2.3.3. Avant de démontrer la proposition 2.3.5, nous énonçons un lemme préliminaire. Soit

$$\kappa = \max_{x,y \in E} (H(y) - H(x)) \mathbf{1}_{\{P(x,y) > 0\}}.$$

Comme P est symétrique, on a $\kappa \geq 0$. La quantité κ représente le saut maximal d'énergie que la chaîne de Markov de matrice de transition P peut franchir en une étape.

Lemme 2.3.6. *On suppose que P satisfait la condition de Doeblin (2.1) avec $\alpha > 0$, $l \in \mathbb{N}^*$. On considère le schéma de température défini par $T_n = h/\log(n)$, pour $n \geq 1$. Pour toutes probabilités μ et μ' sur E , $n \geq 1$, on a*

$$\|(\mu - \mu')Q_{n+1} \cdots Q_{n+l}\| \leq \left(1 - \alpha e^{-\kappa l \log(n+l)/h}\right) \|\mu - \mu'\|.$$

Démonstration. Soit $p \in \mathbb{N}^*$. On a la minoration de Q_p suivante si $x \neq y$:

$$Q_p(x, y) = e^{-[H(y) - H(x)]^+ / T_p} P(x, y) \geq e^{-\kappa / T_p} P(x, y).$$

On a également la majoration $Q_p(x, y) \leq P(x, y)$ si $x \neq y$. On en déduit

$$Q_p(x, x) = 1 - \sum_{y \neq x} Q_p(x, y) \geq 1 - \sum_{y \neq x} P(x, y) = P(x, x) \geq e^{-\kappa / T_p} P(x, x).$$

On a donc pour tous $x, y \in E$, $Q_p(x, y) \geq e^{-\kappa / T_p} P(x, y)$. Comme P satisfait (2.1), on en déduit que pour tous $x, y \in E$,

$$Q_{n+1} \cdots Q_{n+l}(x, y) \geq e^{-\kappa(\frac{1}{T_{n+1}} + \cdots + \frac{1}{T_{n+l}})} P^l(x, y) \geq e^{-\kappa l \log(n+l)/h} \alpha c(y),$$

où la probabilité c est celle qui apparaît dans (2.1). En introduisant la matrice stochastique $P' = Q_{n+1} \cdots Q_{n+l}$ et $\alpha' = e^{-\kappa l \log(n+l)/h} \alpha$, on a pour tous $x, y \in E$, $P'(x, y) \geq \alpha' c(y)$. Le même raisonnement que celui de la démonstration de l'inégalité (2.2) assure alors que

$$\|(\mu - \mu')P'\| \leq (1 - \alpha') \|\mu - \mu'\|.$$

□

Démonstration de la proposition 2.3.5. Soit $h > 0$. On considère le schéma de température $(T_n = h/\log(n), n \geq 1)$. Soit $n \in \mathbb{N}^*$. Rappelons que $\mu_n Q_n = \mu_n$. Il est facile de vérifier par récurrence que la loi de X_n est $\nu_n = \nu_0 Q_1 \cdots Q_n$. Soit $n, m \in \mathbb{N}^*$. Il vient $\nu_{n+m} = \nu_n Q_{n+1} \cdots Q_{n+m}$. On en déduit donc que

$$\begin{aligned} \nu_{n+m} - \mu_{n+m} &= (\nu_n - \mu_n)Q_{n+1} \cdots Q_{n+m} + \mu_n Q_{n+1} \cdots Q_{n+m} - \mu_{n+m} \\ &= (\nu_n - \mu_n)Q_{n+1} \cdots Q_{n+m} + \sum_{k=1}^m (\mu_{n+k-1} - \mu_{n+k})Q_{n+k} \cdots Q_{n+m}. \end{aligned}$$

On déduit de (2.3) avec P remplacé par $Q_{n+k} \cdots Q_{n+m}$, que pour $k \in \{1, \dots, m\}$,

$$\|(\mu_{n+k-1} - \mu_{n+k})Q_{n+k} \cdots Q_{n+m}\| \leq \|\mu_{n+k-1} - \mu_{n+k}\|.$$

On en déduit donc que pour $n, m \in \mathbb{N}^*$,

$$\|\nu_{n+m} - \mu_{n+m}\| \leq \|(\nu_n - \mu_n)Q_{n+1} \cdots Q_{n+m}\| + \sum_{k=1}^m \|\mu_{n+k-1} - \mu_{n+k}\|. \quad (2.11)$$

En reprenant l'inégalité ci-dessus avec $n = jl$ et $m = l$, on déduit des lemmes 2.3.6 et 2.3.3 que pour $j \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} \|\nu_{(j+1)l} - \mu_{(j+1)l}\| &\leq \|(\nu_{jl} - \mu_{jl})Q_{jl+1} \cdots Q_{(j+1)l}\| + \sum_{k=1}^l \|\mu_{jl+k-1} - \mu_{jl+k}\| \\ &\leq (1 - \alpha_j) \|\nu_{jl} - \mu_{jl}\| + b_j, \end{aligned}$$

avec $\alpha_j = \alpha e^{-\kappa l \log(jl+l)/h}$ et $b_j = \sum_{k=1}^l \frac{\log(jl+k) - \log(jl+k-1)}{h} \Delta(H) = \frac{\Delta(H)}{h} \log\left(\frac{j+1}{j}\right)$. Si on pose $z_j = \|\nu_{jl} - \mu_{jl}\|$, il vient pour $j \in \mathbb{N}^*$, $z_{j+1} \leq (1 - \alpha_j)z_j + b_j$. Le lemme déterministe qui suit, et dont la démonstration est reportée à la fin de ce paragraphe, permet de conclure que la suite $(z_j, j \geq 1)$ converge vers 0 quand j tend vers l'infini.

Lemme 2.3.7. *Soit $(\alpha_n, n \geq 1)$ et $(b_n, n \geq 1)$ deux suites positives telles que $\alpha_n \in]0, 1[$ pour tout $n \geq 1$. Soit $(z_n, n \geq 1)$ une suite telle que $z_1 \geq 0$ et vérifiant pour tout $n \geq 1$*

$$z_{n+1} \leq (1 - \alpha_n)z_n + b_n. \quad (2.12)$$

Si $\sum_{n \geq 1} \alpha_n = +\infty$ et $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{b_n}{\alpha_n} = 0$, alors on a $\lim_{n \rightarrow \infty} z_n = 0$.

Par définition de α_j et b_j , on a les équivalents suivants quand j tend vers l'infini : $\alpha_j \sim a j^{-\kappa l/h}$, avec $a > 0$, et $\frac{b_j}{\alpha_j} \sim a' j^{-1+\frac{\kappa l}{h}}$ avec $a' > 0$. En particulier, si $h > H_0$ avec $H_0 = \kappa l$, les conditions du lemme 2.3.7 sont satisfaites. On obtient alors que $\lim_{j \rightarrow \infty} \|\nu_{jl} - \mu_{jl}\| = 0$.

Enfin pour tout $p \in \{1, \dots, l-1\}$, on déduit de (2.11) avec $n = jl$ et $m = p$, de (2.3) avec $P = Q_{jl+1} \cdots Q_{jl+p}$ et du lemme 2.3.3 que

$$\|\nu_{jl+p} - \mu_{jl+p}\| \leq \|\nu_{jl} - \mu_{jl}\| + \Delta(H) \log\left(\frac{jl+p}{jl}\right).$$

En particulier, cela implique que si $h > H_0$, $\lim_{n \rightarrow \infty} \|\nu_n - \mu_n\| = 0$.

On a pour $n \in \mathbb{N}^*$,

$$\begin{aligned} |\mathbb{P}(H(X_n) > \mathcal{H}) - \mu_n(\{x; H(x) > \mathcal{H}\})| &= \left| \sum_{x; H(x) > \mathcal{H}} (\nu_n(x) - \mu_n(x)) \right| \\ &\leq 2 \|\nu_n - \mu_n\|. \end{aligned}$$

Comme, d'après le lemme 2.3.2, $\lim_{n \rightarrow \infty} \mu_n(\{x; H(x) > \mathcal{H}\}) = 0$, on déduit de ce qui précède que, si $h > H_0$, alors $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(H(X_n) > \mathcal{H}) = 0$. \square

Démonstration du lemme 2.3.7. On pose $A_1 = 1$ et pour $n \geq 2$, $A_n = \prod_{i=1}^{n-1} \frac{1}{1 - \alpha_i}$. On a en multipliant (2.12) par A_{n+1} que $A_{n+1}z_{n+1} \leq A_n z_n + A_{n+1}b_n$. On en déduit par récurrence que pour $n \geq 2$,

$$A_n z_n \leq A_1 z_1 + \sum_{i=1}^{n-1} A_{i+1} b_i.$$

Il suffit alors de remarquer que $A_1 = 1$ et $A_{i+1} = \frac{1}{\alpha_i}(A_{i+1} - A_i)$ pour obtenir la majoration

$$z_n \leq \frac{z_1}{A_n} + \frac{1}{A_n} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i). \quad (2.13)$$

La suite $(A_n, n \geq 1)$ est une suite croissante. On a $\log(A_n) = -\sum_{i=1}^{n-1} \log(1 - \alpha_i) \geq \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i$. Comme la série $\sum_{i \geq 1} \alpha_i$ diverge, la suite $(A_n, n \geq 0)$ diverge. Ainsi le premier terme du membre de gauche de (2.13) converge vers 0 quand n tend vers l'infini.

Montrons que le second terme du membre de gauche de (2.13) converge également vers 0 quand n tend vers l'infini. Soit $\varepsilon > 0$. Comme $\lim_{i \rightarrow \infty} \frac{b_i}{\alpha_i} = 0$, la suite $(b_i/\alpha_i, i \geq 1)$ est majorée par une constante que nous notons M et il existe $i_0 \geq 2$ tel que pour tout $i \geq i_0$, on $b_i/\alpha_i \leq \varepsilon/2$. Comme la suite $(A_n, n \geq 1)$ diverge, il existe $n_0 \geq i_0$ tel que pour tout $n \geq n_0$, on a $A_n^{-1} \leq \varepsilon/(2MA_{i_0})$. On en déduit que pour tout $n \geq n_0$, on a

$$\frac{1}{A_n} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i) \leq \frac{1}{A_n} M(A_{i_0} - A_1) + \frac{\varepsilon}{2} \frac{A_n - A_{i_0}}{A_n} \leq \varepsilon.$$

Cela implique $\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{A_n} \sum_{i=1}^{n-1} \frac{b_i}{\alpha_i} (A_{i+1} - A_i) = 0$. On en déduit alors que $\lim_{n \rightarrow \infty} z_n = 0$. \square

2.3.3 Résultats théoriques

Nous énonçons sans démonstration des résultats précis sur le comportement asymptotique du recuit simulé.

Soit $x \in E$, tel que $H(x) > \mathcal{H}$. On dit que $\gamma = (x_0, \dots, x_n)$ est un chemin possible de x à $\operatorname{argmin}(H)$ si $x_0 = x$, $x_n \in \operatorname{argmin}(H)$ et si $P(x_k, x_{k+1}) > 0$ pour $0 \leq k < n$. La barrière d'énergie franchie par ce chemin est $H(\gamma) = \max_{0 \leq k \leq n-1} H(x_k) - \mathcal{H}$. Soit Γ_x l'ensemble des chemins possibles de x à $\operatorname{argmin}(H)$. On note

$$H_x^* = \min_{\gamma \in \Gamma_x} H(\gamma),$$

le minimum des barrières d'énergie franchies sur tous les chemins possibles de x à $\operatorname{argmin}(H)$. On note $H^* = \max_{x; H(x) > \mathcal{H}} H_x^*$ la plus haute de ces barrières d'énergie. Pour tout x , tel que $H(x) > \mathcal{H}$, il existe un chemin possible de x à $\operatorname{argmin}(H)$ dont la barrière d'énergie est inférieure ou égale à H^* . Remarquons que la quantité H^* dépend de la fonction d'énergie H , mais aussi de la matrice de sélection.

Le résultat suivant est dû à Hajek [5].

Théorème 2.3.8. *On a $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(H(X_n) > \mathcal{H}) = 0$ si et seulement si $\lim_{n \rightarrow \infty} T_n = 0$ et $\sum_{n=1}^{\infty} e^{-H^*/T_n} = +\infty$.*

En particulier, si on considère des schémas de température de la forme $T_n = h/\log(n)$, ou constants par morceaux avec $T_n = 1/k$ pour $e^{(k-1)h} \leq n < e^{kh}$, alors le théorème précédent assure que $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(X_n > \mathcal{H}) = 0$ si et seulement si $h \geq H^*$. De plus, des résultats difficiles permettent de démontrer que pour tout schéma de température décroissant, pour tout $\varepsilon > 0$, on a

$$\min_{x \in E} \limsup_{n \rightarrow \infty} -\frac{1}{\log(n)} \log(\mathbb{P}(H(X_n) \geq \mathcal{H} + \varepsilon | X_0 = x)) \leq \frac{\varepsilon}{H^*}.$$

Ceci donne une minoration de la vitesse de convergence du recuit simulé. En fait, la convergence est d'autant plus rapide que h est proche de H^* .

Toutefois, en pratique on utilise l'algorithme du recuit simulé avec un horizon, i.e. un nombre d'étapes, fini N . Les schémas les plus efficaces théoriquement sont les schémas de température en puissance qui dépendent de N , voir les travaux de Catoni [3], paragraphe 7.8, et Trounev [10]. Plus précisément, si on introduit la difficulté associée à H :

$$D = \max_{x; H(x) > \mathcal{H}} \frac{H_x^* - (H(x) - \mathcal{H})}{H(x) - \mathcal{H}},$$

on a le résultat suivant (voir [2] théorèmes 5, 6 et 7)

Théorème 2.3.9. *Il existe deux constantes $K_2 \geq K_1 > 0$ telles que pour tout $N \geq 1$,*

$$\frac{K_1}{N^{1/D}} \leq \max_{x \in E} \inf_{T_0 \geq \dots \geq T_N} \mathbb{P}(H(X_N) > \mathcal{H}|X_0 = x) \leq \frac{K_2}{N^{1/D}}.$$

Et pour tout $A > 0$, il existe $d > 0$ tel que pour tout N , le schéma de température $(T_0^{(N)}, \dots, T_N^{(N)})$ défini par $\frac{1}{T_n^{(N)}} = A \left(\frac{\log(N)^2}{A} \right)^{n/N}$, satisfait

$$\max_{x \in E} \mathbb{P}(H(X_N) > \mathcal{H}|X_0 = x) \leq d \left(\frac{\log(N) \log(\log(N))}{N} \right)^{1/D}.$$

2.4 Le problème du voyageur de commerce

Reprenons l'exemple du voyageur de commerce. On considère N villes. Une permutation, σ , de $\{1, \dots, N\}$ est identifiée au trajet ayant la ville σ_1 pour point de départ et d'arrivée, et joignant les villes σ_i à σ_{i+1} pour $1 \leq i \leq N-1$. L'espace d'état est l'ensemble des permutations de $\{1, \dots, N\}$, $E = \mathcal{S}_N$, et la fonction d'énergie, H , évaluée en σ correspond à la longueur du trajet associé à σ .

On définit la matrice de sélection, P_1 , de la manière suivante : partant d'une permutation $\sigma = (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$, on choisit uniformément et indépendamment deux villes i et j parmi les N villes, et on les échange. Ainsi, si $i < j$, le nouveau trajet est $\sigma' = (\sigma_1, \dots, \sigma_j, \dots, \sigma_i, \dots, \sigma_N)$. Bien sûr si $i = j$, alors $\sigma' = \sigma$. La figure 2.1 donne un exemple de deux trajets voisins distincts pour $N = 6$.

En tenant compte du fait que σ est voisin de lui-même, on obtient que la permutation σ a exactement $\frac{N(N-1)}{2} + 1$ voisins. La matrice de sélection est donnée par

$$\begin{cases} P_1(x, y) = \frac{2}{N^2} & \text{si } x \text{ et } y \text{ sont voisins et } x \neq y, \\ P_1(x, x) = \frac{1}{N}, \\ P_1(x, y) = 0 & \text{si } x \text{ et } y \text{ ne sont pas voisins.} \end{cases}$$

La matrice P_1 est symétrique.

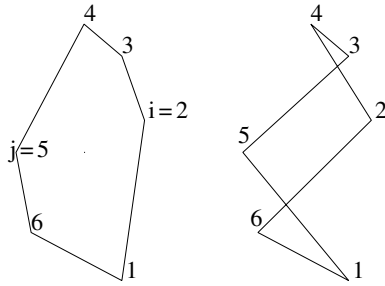


Fig. 2.1. Deux trajets voisins pour la matrice de sélection P_1

Vérifions maintenant qu'elle satisfait la condition de Doeblin (2.1). On dit que $\tau \in \mathcal{S}_N$ est une transposition si $\text{Card}(\{i \in \{1, \dots, N\}; \tau_i \neq i\}) = 2$. Pour $x = (x_1, \dots, x_N), y = (y_1, \dots, y_N) \in \mathcal{S}_N$, on note $y \circ x$ la permutation $(y_{x_1}, \dots, y_{x_N})$. Remarquons que x et y sont voisins si et seulement si $y = x$ ou bien il existe une transposition τ telle que $y = \tau \circ x$. Toute permutation y peut s'écrire comme la composée d'une permutation x quelconque et d'au plus $N-1$ transpositions. Pour tous $x, y \in E$, il existe $\tau_1, \dots, \tau_{N-1}$, où τ_i est soit une transposition soit l'identité, tels que $y = \tau_{N-1} \circ \dots \circ \tau_1 \circ x$. Remarquons enfin que comme x et $\tau \circ x$ sont voisins, on a $P_1(x, \tau \circ x) \geq \frac{2}{N^2}$. On en déduit que $P_1^{N-1}(x, y) \geq \left(\frac{2}{N^2}\right)^{N-1}$. La condition (2.1) est donc satisfaite avec $l = N-1$, $\alpha = N!2^{N-1}N^{-2N+2}$ et pour c la probabilité uniforme sur E .

Dans l'algorithme du recuit simulé, il est important de visiter de nouveaux voisins afin d'explorer plusieurs valeurs de H . La probabilité $P_1(x, x)$ est ici élevée, et elle ralentit l'algorithme du recuit simulé. L'exercice suivant propose une solution pour remédier à ce problème.

Exercice 2.4.1. On dit que x et y sont voisins si et seulement s'il existe une transposition τ telle que $y = \tau \circ x$. On considère la matrice de sélection P_2 définie par

$$\begin{cases} P_2(x, y) = \frac{2}{N(N-1)} & \text{si } x \text{ et } y \text{ sont voisins,} \\ P_2(x, y) = 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

1. Montrer que la chaîne de Markov de matrice de transition P_2 est périodique de période $d = 2$. On pourra regarder l'évolution de la signature de la permutation X_n . On rappelle que la signature est l'unique application de \mathcal{S}_N dans $\{-1, 1\}$ telle que la signature d'une transposition est égale à -1 , la signature de la permutation identité est égale à 1 , et la signature de la permutation de $x \circ y$ est le produit de la signature de x par celle de y .
2. En déduire que P_2 ne vérifie pas la condition de Doeblin (2.1).
3. Vérifier que P_2 est irréductible.
4. Pour quelles valeurs de N la fonction H n'est-elle pas constante? Dans ces cas, déduire de la remarque 2.2.3 que la conclusion de la proposition 2.3.5 reste vraie avec P remplacée par P_2 .

◆

Le choix de la matrice de sélection est crucial pour la vitesse de convergence du recuit simulé. Sur le problème du voyageur de commerce, on constate empiriquement que la convergence est plus rapide si l'on choisit la matrice de sélection P_3 correspondant au mécanisme suivant qui généralise celui associé à P_1 . Partant d'une permutation x , on choisit k villes distinctes au hasard, et on effectue une permutation aléatoire sur les k villes choisies. Les valeurs $k = 3$ ou $k = 4$ donnent des résultats acceptables.

Nous mentionnons la variante P_4 , qui donne en général de meilleurs résultats. Partant d'une permutation $x = (x_1, \dots, x_N)$, on choisit 2 villes distinctes au hasard que l'on permute en changeant le sens de parcours des

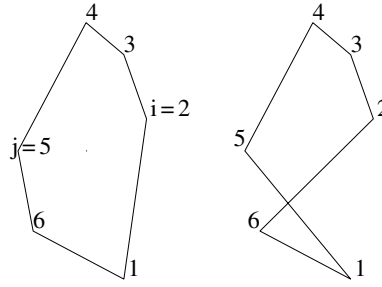


Fig. 2.2. Deux trajets voisins pour P_4

villes entre i et j . Par exemple si $3 \leq i < j \leq N - 2$, la nouvelle permutation est $(x_1, \dots, x_{i-1}, x_j, x_{j-1}, \dots, x_{i+1}, x_i, x_{j+1}, \dots, x_N)$. La figure 2.2 donne un exemple de deux trajets voisins distincts pour $N = 6$ (comparer avec la Fig. 2.1).

Enfin, la matrice de sélection P_0 , définie par $P_0(x, y) = 1/N!$, pour laquelle tous les trajets sont voisins les uns des autres donne de très mauvais résultats. Cette variante revient à énumérer les chemins au hasard. La notion de voisinage a pour but d'explorer plus rapidement les points qui minimisent H . Pour être pertinent dans le choix de la matrice de sélection, il faut tenir compte des spécificités du problème considéré. Dans le cas du voyageur de commerce, un trajet qui se croise, comme par exemple les trajets de droite des Figs. 2.1 et 2.2, n'est pas optimal. On peut éliminer un croisement en une étape du recuit simulé avec la matrice de sélection P_4 , ce n'est pas le cas en général avec les matrices de sélection P_1 , P_2 ou P_3 .

Par exemple pour 50 villes, on a obtenu les résultats suivants pour des simulations avec les différentes matrices de sélection et différents schémas de température. On remarque que les meilleurs résultats sont obtenus pour la matrice de sélection P_4 qui, nous l'avons vu, est bien adaptée au problème considéré, et pour des schémas de température qui décroissent plus vite vers 0 qu'en $\gamma/\log(n)$.

La figure 2.3 présente le trajet initial, le trajet obtenu après 25 000 et $N_0 = 50\,000$ itérations ainsi que le trajet optimal pour un schéma de température en γ/n . Dans la figure 2.5 nous représentons l'évolution de la longueur des trajets pour 50 000 itérations du recuit simulé avec divers schémas de température. Pour les schémas de la forme $\gamma/\log(n)$ on observe une convergence pour γ faible vers un minimum local, et un comportement encore chaotique pour γ élevé. Le résultat obtenu pour le schéma de température donné dans la deuxième partie du théorème 2.3.9 au facteur multiplicatif près, voir la Fig. 2.4, est sur cette simulation moins bon que celui obtenu pour un schéma de température de la forme γ/n . Enfin, dans la figure 2.6, on observe l'évolution de la longueur des trajets pour les matrices de sélection P_0 , P_1 , P_3 et P_4 et des vitesses de la forme γ/n . On constate que la matrice de sélection P_0 , correspondant à un choix uniforme sur tous les trajets, donne de mauvais

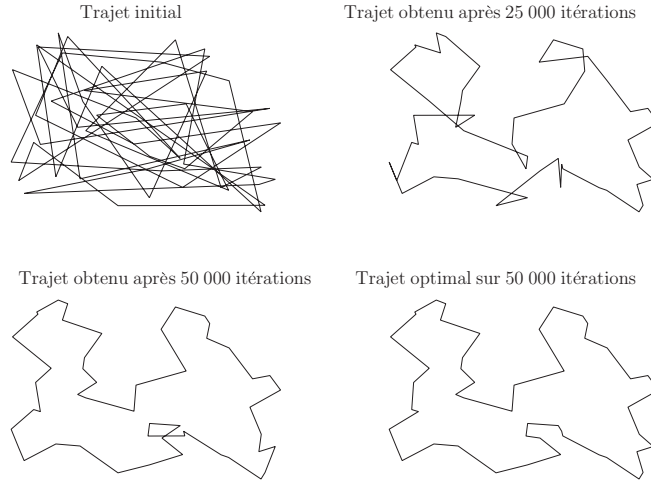


Fig. 2.3. Évolution des trajets au cours d'une simulation du recuit simulé avec matrice de sélection P_4 et schéma de température $T_n = \gamma/n$

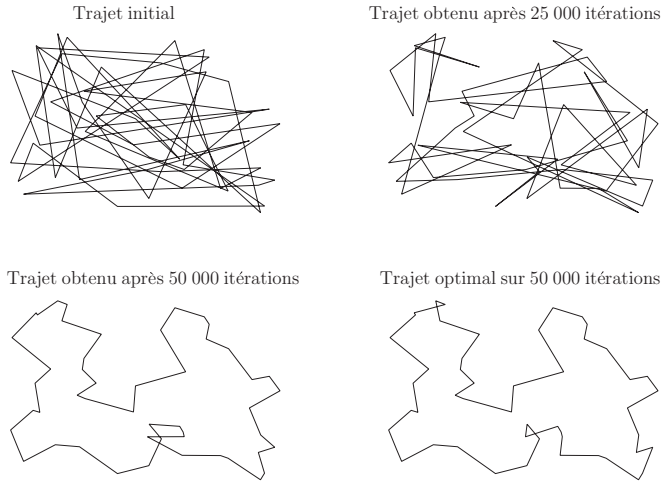


Fig. 2.4. Évolution des trajets au cours d'une simulation du recuit simulé avec matrice de sélection P_4 et schéma de température $T_n = 2 \log(N_0)^{-2n/N_0}$, avec $N_0 = 50\,000$

résultats et que la matrice de sélection P_4 semble la plus adaptée au problème du voyageur de commerce.

En conclusion, l'algorithme du recuit simulé est un algorithme stochastique qui permet de trouver un ou plusieurs points qui réalisent le minimum de H , en fait un minimum local, pour une fonction quelconque. Il est simple d'utilisation, mais le choix de la matrice de sélection est crucial. Enfin le réglage

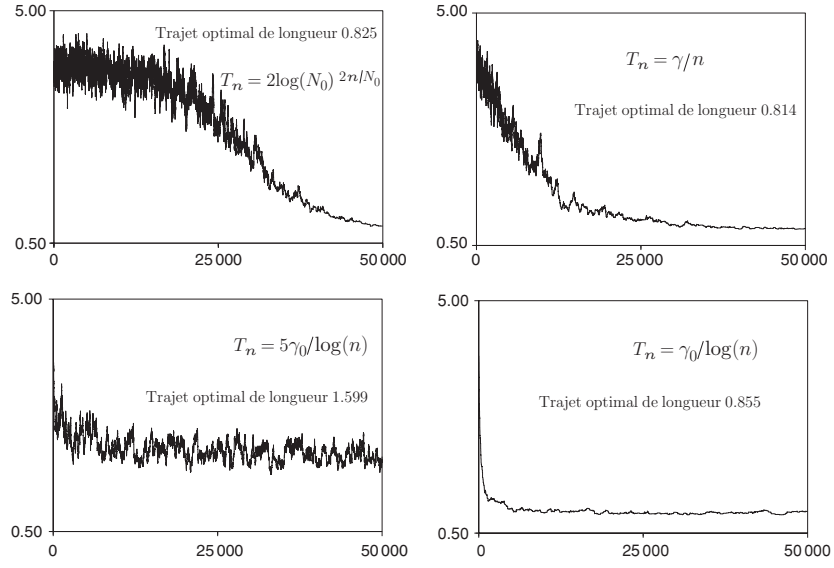


Fig. 2.5. Évolution de la longueur des trajets au cours de $N = 50\,000$ itérations du recuit simulé avec la matrice de sélection P_4 et divers schémas de température

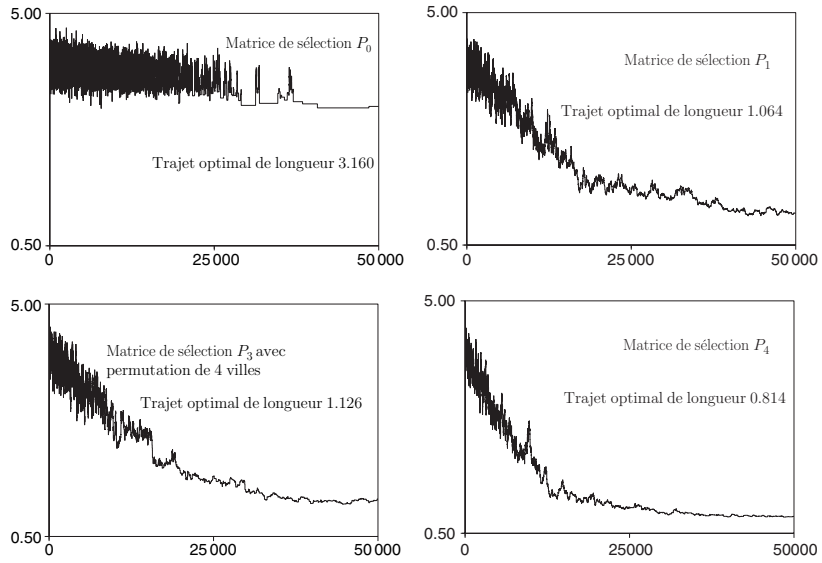


Fig. 2.6. Évolution de la longueur des trajets au cours de $N = 50\,000$ itérations du recuit simulé avec un schéma de température en γ/n et différentes matrices de sélection. La constante γ n'est pas la même suivant les matrices de sélection

des schémas de température se fait de manière empirique en considérant l'évolution de l'énergie. Par exemple, on désire éviter les résultats observés sur les deux diagrammes du bas de la Fig. 2.5 : pas de convergence (diagramme de gauche) et convergence trop brutale (diagramme de droite) vers un minimum local. On recherche plutôt des comportements similaires à ceux observés dans les deux diagrammes du haut de la Fig. 2.5, où une longue séquence d'exploration (évolution chaotique de l'énergie) est suivie par une séquence de décroissance de l'énergie.

Références

1. N. Bartoli et P. Del Moral. *Simulation et algorithmes stochastiques*. Cépaduès, 2001.
2. O. Catoni. Metropolis, simulated annealing, and iterated energy transformation algorithms : theory and experiments. *J. Complexity*, 12(4) : 595–623, 1996. Special issue for the Foundations of Computational Mathematics Conference (Rio de Janeiro, 1997).
3. O. Catoni. Simulated annealing algorithms and Markov chains with rare transitions. In *Séminaire de probabilités XXXIII*, volume 1709 de *Lect. Notes Math.*, pages 69–119. Springer, 1999.
4. M. Duflo. *Algorithmes stochastiques*, volume 23 de *Mathématiques & Applications*. Springer, Berlin, 1996.
5. B. Hajek. Cooling schedules for optimal annealing. *Math. Oper. Res.*, 13(2) : 311–329, 1988.
6. W. Hastings. Monte carlo sampling methods using markov chains and their applications. *Biometrika*, 57 : 97–109, 1970.
7. E. Lawler, J. Lensra, A.R. Kan et D. Shmoys. *The traveling salesman problem*. Wiley, New-York, 1987.
8. N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, E. Teller et A.H. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 90 : 233–241, 1953.
9. G. Reinelt. *The traveling salesman. Computational solutions for TSP applications*, volume 840 de *Lecture Notes in Computer Science*. Springer-Verlag, Berlin, 1994.
10. A. Trouvé. Rough large deviation estimates for the optimal convergence speed exponent of generalized simulated annealing algorithms. *Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist.*, 32(3) : 299–348, 1996.
11. B. Ycart. *Modèles et algorithmes markoviens*, volume 39 de *Mathématiques & Applications*. Springer, Berlin, 2002.