

Expérimentations numériques sur les variantes et paramètres de la méthode du recuit simulé

L. Pibouleau*, S. Domenech, A. Davin, C. Azzaro-Pantel

Laboratoire de Génie Chimique, UMR CNRS-INP-UPS 5503, ENSIACET, 118 route de Narbonne, 31077 Toulouse Cedex 4, France

Received 1 September 2003; received in revised form 1 February 2004; accepted 1 June 2004

Résumé

La méthode du recuit simulé, largement utilisée en génie des procédés, nécessite le codage des solutions potentielles, et comporte de nombreuses variantes dans sa mise en œuvre ainsi que plusieurs paramètres de contrôle. Ces divers points sont étudiés sur la base de six fonctions à solutions connues, afin de déterminer des règles générales d'utilisation de la procédure. La méthode stochastique d'acceptation des solutions de Metropolis et al. (1953) combinée avec le schéma de décroissance géométrique de la température de Kirkpatrick et al. (1982) sont les variantes les plus efficaces. Parmi les trois codages testés, aucun ne supplante les autres. La température initiale, la longueur du palier de température, le facteur multiplicatif de décroissance de la température et le test d'arrêt ont été étudiés au moyen d'un plan factoriel 2^4 . Le paramètre le plus important est la longueur du palier de température, le moins important est la température initiale, et le coefficient de décroissance de la température et le nombre de paliers pour effectuer l'arrêt ont une importance similaire.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

Mots-clés: Recuit simulé; Implémentation; Codage; Paramètres de contrôle; Plan d'expériences

Abstract

The simulated annealing procedure, commonly used in process system engineering, requires potential solutions to be encoded, and involves several variants in its implementation as well as various control parameters. On the basis of six mathematical functions with known solutions, these points are studied in order to propose general guidelines for using the simulated annealing method. The stochastic acceptance procedure of a solution proposed by Metropolis et al. (1953), combined with the temperature decreasing geometric scheme of Kirkpatrick et al. (1982) are the most efficient variants. For the three codes used, the convergence rates are similar, so it can be noted that they are rather equivalent. The initial temperature, the length of temperature plateau, the decreasing multiplicative factor for the temperature and the stopping criterion are analysed through a design of experiments. The most significant parameter is the length of temperature plateau, the least significant one is the initial temperature value, and the decreasing temperature scheme and the number of temperature plateaux for stopping the search, have a similar influence.

© 2004 Elsevier B.V. All rights reserved.

Keywords: Simulated annealing; Implementation; Code; Control parameters; Design of experiments

1. Introduction

Contrairement aux méthodes classiques de la recherche opérationnelle (programmation mathématique, programmation mixte, programmation dynamique, méthodes arbores-

centes), les algorithmes stochastiques de type **Recuit Simulé (RS)** n'exigent aucune connaissance des propriétés mathématiques du problème; il est seulement nécessaire de pouvoir évaluer la qualité d'une solution. Il s'agit là d'un point qui plaide en leur faveur pour des applications en Génie des Procédés, où les fonctions objectif sont généralement évaluées à partir de modèles de simulation complexes, dont aucune expression analytique n'est

* Corresponding author. Tél.: +33 562 885839; fax: +33 562 25 3903.
E-mail address: luc.pibouleau@ensiacet.fr (L. Pibouleau).

Nomenclature

A	coefficient utilisé pour calculer la valeur initiale de la température
B	coefficient utilisé pour calculer la longueur du palier de température
C	coefficient utilisé dans le schéma de décroissance de la température
D	nombre de paliers successifs sur lesquels la solution courante demeure inchangée (test d'arrêt)
ddl	nombre de degrés de liberté
f	fonction objectif
f^*	valeur de la fonction objectif pour la solution théorique
f_a	valeur minimale de la fonction objectif déterminée par la procédure du recuit simulé
GA	probabilité de [12], décroissance de la température de [1]
GK	probabilité de [12], décroissance de la température de [13]
h	amplitude de l'intervalle de confiance pour sm2
H	matrice d'Hadamard
I	matrice identité
MA	probabilité de [16], décroissance de la température de [1]
MK	probabilité de [16], décroissance de la température de [13]
n	nombre d'essais pour une combinaison donnée de paramètres
nev_i	nombre d'évaluations de la fonction objectif pour l'essai i
p	probabilité d'acceptation d'une solution S'
sm1	pourcentage de succès
sm2	nombre moyen d'évaluations (en milliers) de la fonction objectif
S	solution courante
S'	solution voisine générée à partir de la solution S
$t_{0,975}$	valeur donnée par la table de Student au niveau de probabilité de 95%
T_i	température
x_i	variable de la fonction objectif
x_i^*	valeur optimale de x_i
α_1	borne inférieure de l'intervalle de confiance pour sm1/sm2
α_2	borne supérieure de l'intervalle de confiance pour sm1/sm2

β	borne de l'intervalle de confiance pour sm1/sm2
γ	nombre aléatoire compris entre 0 et 1, utilisé pour accepter ou rejeter une solution S' dégradant la fonction objectif
σ^2 (sm2)	variance des mesures
σ^2	variance des estimations
+	niveau haut du plan d'expériences
-	niveau bas du plan d'expériences
0	centre du plan d'expériences

disponible, ce qui rend impossible l'étude de leurs propriétés mathématiques. De plus, ces algorithmes sont également faciles à mettre en œuvre (le moteur est commun, il y a moins de programmation spécifique à chaque problème traité). Le Tableau 1 récapitule les différences entre une approche de type recherche opérationnelle et la résolution du même problème par un algorithme stochastique. Ce Tableau semble plaider de façon irrévocable en faveur des algorithmes stochastiques, mais le fait que la précision des résultats ne soit pas maîtrisée, car les conditions d'arrêt ne le sont pas, constitue un handicap pour ces derniers. Par ailleurs, les algorithmes stochastiques comportent un grand nombre de paramètres, dont un mauvais réglage peut conduire à des solutions de piètre qualité. Néanmoins, ils sont très efficaces pour la détermination rapide de bonnes solutions à un problème posé, c'est pourquoi ils sont actuellement très en vogue.

2. Applications en génie des procédés

Au cours des deux dernières décennies, les méthodes d'optimisation stochastiques ont largement été mises en œuvre dans divers domaines du génie des procédés, comme le montre l'étude statistique effectuée par [19]. Sans vouloir être exhaustif, il existe à titre d'exemple, des applications à la conception de séquences de séparation [11,14], de réseaux d'échangeurs de chaleur [10,3], de réacteurs pour l'industrie chimique [6], de distribution d'énergie [9], aux problèmes d'ordonnement [18], ou à la modélisation des écoulements dans des locaux ventilés [15]. D'autres applications concernent l'optimisation [4], la conception [5] ou le remodelage [8] d'ateliers discontinus de chimie fine. Le codage des solutions potentielles d'un problème donné constitue un point d'autant plus important des méthodes d'optimisation stochastiques, que le nombre de contraintes est élevé, ce qui est souvent le cas dans les applications en génie des procédés. La stratégie utilisée dans les exemples précédents consistait à introduire directement les contraintes dans le codage.

Tableau 1
Comparaison recherche opérationnelle—algorithmes stochastiques

	Recherche opérationnelle (approche analytique, spécifique)	Algorithmes stochastiques
Rapidité	Selon solution, parfois bonne	Bonne à très bonne
Analyse mathématique du problème	Nécessaire	Non nécessaire
Travail humain	Très variable: de quelques jours à quelques thèses	Faible: quelques jours ou semaines
Applicabilité	Faible: la plupart des problèmes pratiques n'ont pas d'expression mathématique exploitable, ou sont non-calculables, ou "NP-complets" (trop de possibilités)	D'autant plus générale que le problème comporte peu de contraintes
Etapas intermédiaires	Ne sont généralement pas des solutions car la plupart des méthodes sont à chemin irréalisable (il faut attendre la fin des calculs)	Sont des solutions (le processus peut être interrompu à tout moment)
Précision (optimalité) des resultants	Maîtrisée	Non maîtrisée

Toutes ces études font ressortir la difficulté de choisir, d'une part entre les variantes possibles, et d'autre part de définir des valeurs des paramètres de contrôle pour obtenir des solutions de bonne qualité [7].

3. Méthode du recuit simulé

3.1. Principes de la méthode

La méthode du recuit simulé, popularisée par [13], est une procédure d'optimisation multi-variables développée depuis une vingtaine d'années environ. Contrairement aux méthodes déterministes, qui sont pour la plupart des méthodes locales, il s'agit d'une procédure évolutive qui permet d'éviter de se bloquer dans des zones de minima locaux, en autorisant occasionnellement un accroissement de la fonction objectif. Elle se fonde sur une analogie entre les problèmes d'optimisation à caractère combinatoire et ceux de la physique statistique représentant le comportement d'une opération thermodynamique, le recuit physique des solides.

3.2. Le recuit physique des métaux

Considérons par exemple le cas de la croissance d'un monocristal. La technique du recuit consiste à chauffer préalablement le matériau pour le porter quasiment à l'état liquide. L'état thermodynamique du système peut être traduit par une fonction thermodynamique: l'énergie libre. A l'état liquide, cette énergie est élevée.

Le refroidissement lent du système, en marquant des paliers de température, redistribue l'arrangement des atomes de la matière jusqu'à atteindre un état énergétique faible, celui de grands cristaux, soit un état stable. Cet état stable correspond au minimum absolu de l'énergie libre (E). Si la vitesse de refroidissement n'est pas contrôlée correctement, ou si la température initiale n'est pas suffisamment élevée, le solide n'atteint pas l'équilibre thermique à chaque palier de température; dans de telles circonstances, il est obtenu une structure amorphe, état métastable qui correspond à un minimum local de l'énergie libre. Il est donc nécessaire d'atteindre l'équilibre thermodynamique pour chaque palier

de température, qui est caractérisé par une fonction de distribution de Boltzmann des états énergétiques. La probabilité pour un système de posséder une énergie donnée E à la température T est ainsi proportionnelle à $\exp(-E/k_b T)$ où k_b est la constante de Boltzmann. A proximité du zéro absolu, seuls les états de faible énergie ont une probabilité non nulle d'exister.

Ainsi même à basse température, une transition peut subvenir d'un niveau énergétique bas vers un niveau plus haut. La probabilité de telles transitions est d'autant plus faible que le niveau de température est bas. Ce sont ces transitions qui sont supposées être à l'origine des mécanismes permettant d'atteindre in fine un état d'énergie minimale au lieu de conduire à un état métastable.

3.3. Transposition du recuit simulé comme technique d'optimisation

A partir d'un arrangement moléculaire initial (dans ce cas, une solution acceptable S du problème d'optimisation), d'état énergétique E_i donné correspondant à une température T_i particulière, un nouvel arrangement moléculaire (solution acceptable S') possédant une énergie E_j est généré de manière stochastique. Si la nouvelle solution acceptable a pour effet d'abaisser l'énergie, $E_j \leq E_i$ (c'est à dire de diminuer le critère, $f(S') < f(S)$, le changement s'opère car l'état est plus stable. Si, au contraire, l'état énergétique est plus élevé, $E_j \geq E_i$ (le critère croît), la transition peut être acceptée ou non selon une règle statistique. Ces règles d'acceptation permettent de s'extraire de zones à minima locaux, en effet:

- à température élevée, cette probabilité est grande, c'est-à-dire que de très nombreuses solutions dégradant le critère seront conservées, on assure ainsi une large exploration de l'espace de recherche;
- à température basse, cette probabilité tend vers zéro, donc pratiquement toutes les solutions dégradant le critère seront refusés; la procédure tend alors à se comporter comme une méthode de descente classique.

L'implémentation de la procédure du recuit simulé nécessite de fixer quatre paramètres, qui jouent un rôle déterminant sur son efficacité.

- (i) La température initiale.
- (ii) La longueur du palier de température.
- (iii) Le schéma de décroissance de la température.
- (iv) Le nombre de paliers successifs sur lesquels la solution courante S n'évolue pas, et provoque l'arrêt de la recherche.

4. Objectifs de l'étude

A partir de fonctions mathématiques dont les solutions sont connues, des essais numériques systématiques, fondés sur les plans d'expériences, ont été effectués afin de dégager des idées sur la façon de fixer les divers paramètres, ainsi que les variantes de mise en œuvre de la méthode du recuit simulé. En essayant de dégager des grandes orientations dans le choix des paramètres de cet algorithme, cette étude vise à pallier l'empirisme qui est généralement présent dans la mise en œuvre de ces méthodes, et qui peut conduire à un très grand nombre d'essais avant de déterminer un jeu de paramètres adéquats.

5. Variantes de mise en œuvre et paramètres de la procédure du recuit simulé

A partir d'une solution acceptable S , codée en binaire, du problème d'optimisation, une nouvelle solution acceptable S' est générée de manière stochastique. Si la nouvelle solution acceptable a pour effet de diminuer le critère, $f(S') < f(S)$, le changement s'opère car l'état est plus stable. Si, au contraire le critère croît, la nouvelle solution S' peut être acceptée ou non selon une règle statistique. La bibliographie fait ressortir l'existence de deux protocoles classiques communément utilisés:

- la procédure de [16], notée \mathbb{M} , où l'acceptation de la nouvelle solution est réalisée avec une probabilité égale à:

$$\begin{aligned} p(\Delta f = (f(S') - f(S))) &= \exp\left(\frac{-\Delta f}{T_i}\right) \quad \text{si } \Delta f \geq 0; \\ p &= 1 \quad \text{si } \Delta f < 0 \end{aligned} \quad (1)$$

- la variante proposée par [12], notée \mathbb{G} , où la probabilité d'acceptation est uniforme, et définie par:

$$\begin{aligned} p(\Delta f = (f(S') - f(S))) \\ = \exp\left(\frac{-\Delta f}{T_i}\right) / (1 + \exp(-\Delta f/T_i)) \end{aligned} \quad (2)$$

En appliquant une de ces règles d'acceptation, qui permettent de s'extraire de zones à minima locaux, sur un palier de température constant, il est assuré que l'évolution du système vers son équilibre thermodynamique, correspond au minimum d'énergie libre atteignable pour la valeur de la température considérée. Lorsque cet équilibre est atteint,

après un nombre "suffisant" de transformations élémentaires, la température est abaissée "légèrement" selon un schéma de décroissance donné, le système évolue à nouveau pour aboutir à un nouvel état d'équilibre. Il existe deux schémas classiques de décroissance de la température:

- la décroissance géométrique, proposée par [13], notée \mathbb{K} :

$$T_{i+1} = CT_i \quad \text{avec } 0 < C < 1 \quad (3)$$

- la procédure utilisée par [1], notée \mathbb{A} :

$$T_{i+1} = \frac{T_i}{(1 + (T_i \ln(1 + C)/3\sigma))} \quad (4)$$

où σ désigne l'écart-type de l'ensemble des valeurs calculées de la fonction objectif à la température courante et C , le paramètre qui contrôle la vitesse du recuit; plus C est faible, plus le recuit est lent. Ces procédures sont discutées par [10,17].

Outre les variantes qui viennent d'être décrites, l'implémentation de la procédure du recuit simulé nécessite de fixer quatre paramètres, qui jouent un rôle déterminant sur son efficacité.

- La température initiale, dont la dimension (en unité) est celle de la fonction objectif, et dont la valeur dépend directement de la valeur initiale de cette fonction. Son choix devra être tel que la plupart des dégradations sont autorisées en début de procédure, et que seules les transitions améliorant le critère sont acceptées en fin de procédure. Une étude [3] a montré qu'une valeur initiale de la température de l'ordre de celle de la fonction objectif initiale, conduit à de bons résultats. Ainsi, l'initialisation proposée est définie par:

$$T = \frac{f(S)}{A} \quad (5)$$

où $f(S)$ représente la valeur du critère pour la solution initiale S , et A un paramètre à fixer.

- La longueur du palier, qui représente le nombre de solutions testées avant d'appliquer le schéma de décroissance de la température, est supposée constante pour l'ensemble des niveaux de température. Si cette longueur est trop faible, l'exploration de l'espace de recherche peut être trop partielle, alors qu'une valeur trop importante peut avoir pour effet de ralentir, voire même de bloquer la recherche. La stratégie proposée consiste à choisir la longueur du palier proportionnelle à la longueur du codage de l'ensemble des n variables du problème:

$$L = B \sum_{i=1}^n (\text{Longueur du codage de la variable } i) \quad (6)$$

B est le deuxième paramètre à choisir.

- Le troisième paramètre est le coefficient C de réduction de la température, qui doit être tel que:

$$0 < C < 1 \quad (7)$$

Une valeur trop faible pour ce coefficient peut provoquer une exploration très partielle de l'espace de recherche. Les valeurs classiques de ce coefficient se situent dans l'intervalle [0.75, 0.95].

- La procédure du recuit simulé est souvent arrêtée lorsque la température devient inférieure à une valeur donnée. Le choix de cette valeur limite, qui conditionne l'efficacité de la recherche, est très délicat car ce terme est étroitement lié aux autres paramètres de la méthode (température initiale, longueur des paliers, schéma de réduction de la température). Ainsi, un test d'arrêt différent portant sur la non évolution de la solution courante S sur D paliers consécutifs a été mis en œuvre; ce quatrième paramètre D a été choisi tel que:

$$0 < D = 9 \quad (8)$$

L'algorithme de la méthode du recuit simulé est défini par les étapes suivantes.

Etape 1

Choix d'une solution initiale S

Etape 2

Choix de la température initiale $T=f(S)/A$

Etape 3

Palier de température : **Répéter** L (lié à B , voir équ. 6) fois

Générer une solution S' voisine de la solution S

Si $f(S') < f(S)$ **alors**

Poser $S \rightarrow S'$

Sinon

Calculer la probabilité d'acceptation $p : \mathbb{M}$ ou \mathbb{G}

Générer un nombre aléatoire γ uniformément réparti entre 0 et 1

Si $\gamma < p$, poser $S \rightarrow S'$

Sinon, conserver S

Fin Si

Fin Si

Fin palier

Etape 4

Modifier la température $T : \mathbb{K}$ ou \mathbb{A} , avec le paramètre C

Etape 5

Si la solution S n'a pas été modifiée sur D paliers consécutifs, **alors**

Retourner la solution S

Fin de la procédure

Sinon

Revenir à l'étape 3

Fin Si

L'objectif de ce travail consiste en premier lieu à étudier sur des fonctions mathématiques dont les solutions sont connues (fonctions utilisées par [2]), les diverses variantes de la méthode du recuit simulé, reportées ci-dessous:

- GA: Probabilité de [12], décroissance de la température de [1]
- GK: Probabilité de [12], décroissance de la température de [13]
- MA: Probabilité de [16], décroissance de la température de [1]
- MK: Probabilité de [16], décroissance de la température de [13]

Ensuite les effets et interactions des quatre paramètres de contrôle (A , B , C et D) seront analysés

en utilisant la technique des plans d'expériences centrés.

6. Fonctions étudiées et divers codages

Pour chaque cas traité, la longueur du codage dépend conjointement de l'intervalle de variation des variables, c'est à dire de l'espace de recherche, et de la précision requise sur ces variables.

Dans toute la suite, il sera considéré que la convergence est atteinte lorsque $|f^* - fa| < 10^{-3}$ où f^* et fa désignent respectivement la solution théorique et la solution approchée par la procédure du recuit simulé.

Les quatre premières fonctions étudiées possèdent plusieurs minima locaux, alors que les deux dernières comportent uniquement un optimum global, mais sont délicates à optimiser. Pour chacune de ces fonctions, trois codages arbitraires sont utilisés, afin d'analyser leur influence. Le codage 1, dans lequel le signe et la partie entière sont codés en binaire, et la première décimale est représentée par quatre bits de poids respectifs 0.1; 0.2; 0.4 et 0.6, dont la somme est supérieure à l'unité. Pour la deuxième décimale, les poids sont divisés par 10, et ainsi de suite. Le codage 2 est analogue au codage 1 en ce qui concerne le signe et la partie entière, et la première décimale est codée par quatre bits de poids respectifs 0.1, 0.2, 0.3 et 0.3, dont la somme vaut 0.9, mais dans laquelle le terme 0.3 apparaît deux fois, ce qui peut créer un biais. Pour la deuxième décimale, les poids sont divisés par 10, et ainsi de suite. Enfin, le codage 3, qui est également analogue au codage 1 pour son signe et sa partie entière, représente la partie décimale par un codage binaire de type entier, qui est par exemple divisé par 1000, si l'on désire coder trois décimales.

6.1. Fonction dite "boîte d'œufs"

Nom: BOITE

$$f(x_1, x_2) = -x_1 \sin(\sqrt{|x_1|}) - x_2 \sin(\sqrt{|x_2|})$$

$$x_1 \in [-512, 512], \quad x_2 \in [-512, 512]$$

$$f^* = 837.966 \text{ (solution théorique)}$$

$$x_1^* = x_2^* = 420.97 \text{ (solutions théoriques)}$$

où les composantes x_1 et x_2 sont définies à 10^{-3} près (Fig. 1).

6.1.1. Codage 1 et codage 2

Partie entière

$$\pm 2^8 \quad 2^7 \quad 2^6 \quad 2^5 \quad 2^4 \quad 2^3 \quad 2^2 \quad 2^1 \quad 2^0$$

Partie décimale du codage 1

$$\begin{array}{cccccccc} 0.1 & 0.2 & 0.4 & 0.6 & 0.01 & 0.02 & 0.04 & 0.06 \\ 0.001 & 0.002 & 0.004 & 0.006 & & & & \end{array}$$

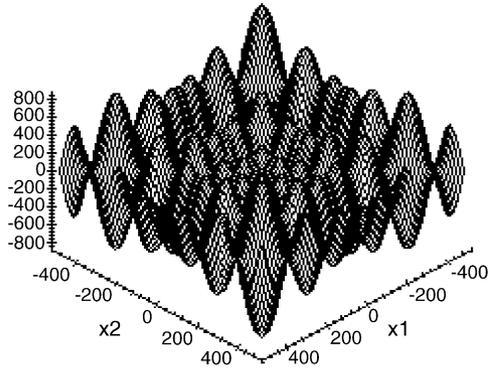


Fig. 1. Fonction BOITE.

Partie décimale du codage 2

0.1 0.2 0.3 0.3 0.01 0.02 0.03 0.03
 0.001 0.002 0.003 0.003

Longueur du codage pour une variable (codage 1 ou codage 2): 22.

6.1.2. Codage 3

Partie entière

$\pm 2^8 \ 2^7 \ 2^6 \ 2^5 \ 2^4 \ 2^3 \ 2^2 \ 2^1 \ 2^0$

Partie décimale

$2^9 10^{-3} \ 2^8 10^{-3} \ 2^7 10^{-3} \ 2^6 10^{-3} \ 2^5 10^{-3}$
 $2^4 10^{-3} \ 2^3 10^{-3} \ 2^2 10^{-3} \ 2^1 10^{-3} \ 2^0 10^{-3}$

Longueur du codage pour une variable: 20.

Pour les cinq autres fonctions présentées ci-dessous, les codages 1, 2 et 3 sont analogues; les longueurs des parties entières dépendent des intervalles de définition des variables, et les longueurs des parties décimales sont liées à la précision requise.

6.1.3. Décodage

Le codage 2 étant pris à titre d'exemple, au sein de la procédure du recuit simulé, le couple (x_1, x_2) est représenté par un vecteur binaire S , de longueur égale à 2×22 , et codant x_1 sur sa première moitié et x_2 sur la seconde. Pour un vecteur S donné, la valeur réelle du couple (x_1, x_2) est calculée comme suit.

Par exemple, le vecteur S suivant, où les signes sont écrits en italiques, les parties entières en caractères gras et les parties décimales en caractères normaux:

$S = 00110001010101001110011$
 000111101110000001110

représente les variables:

$$x_1 = -(2^7 + 2^6 + 2^2 + 2^0 + 0.2 + 0.3 + 0.03 + 0.03 + 0.001 + 0.003) = -197.564$$

$$x_2 = +(2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^2 + 2^0 + 0.1 + 0.2 + 0.001 + 0.002 + 0.003) = 61.306$$

Les valeurs réelles des variables sont utilisées pour calculer la fonction objectif. La procédure de calcul des valeurs réelles des variables est analogue pour tous les autres codes et toutes les autres fonctions.

6.2. Fonction de Griewank

Nom: GRIE

$$f(x_1, x_2) = 0.00025(x_1^2 + x_2^2) - \cos(x_1) \cos\left(\frac{x_2}{\sqrt{2}}\right)$$

$$x_1 \in [-\pi, \pi], \quad x_2 \in [-\pi, \pi]$$

$$f^* = -1$$

$$x_1^* = x_2 = 0$$

où les composantes x_1 et x_2 sont définies à 10^{-7} près.

Pour les codages 1 et 2, la longueur du codage pour une variable est égale à 34; pour le codage 3, cette longueur vaut 31 (Fig. 2).

6.3. Fonction de De Jong

Nom: JONG

La fonction est définie à partir de:

$$a_1 = \begin{bmatrix} -32 & -16 & 0 & 32 & -32 & -16 & 0 & 0 \\ 16 & 32 & -32 & -16 & 0 & 16 & 32 \\ -32 & 16 & 0 & 16 & 32 & -32 \\ -16 & 0 & 16 & 32 \end{bmatrix}$$

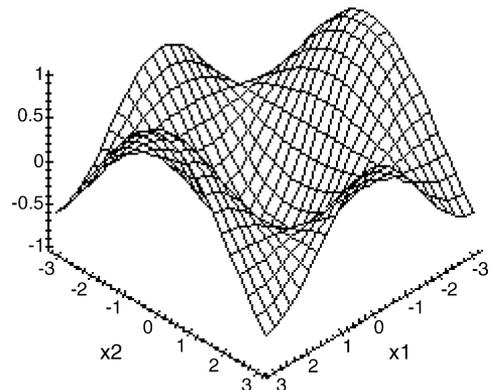


Fig. 2. Fonction GRIE.

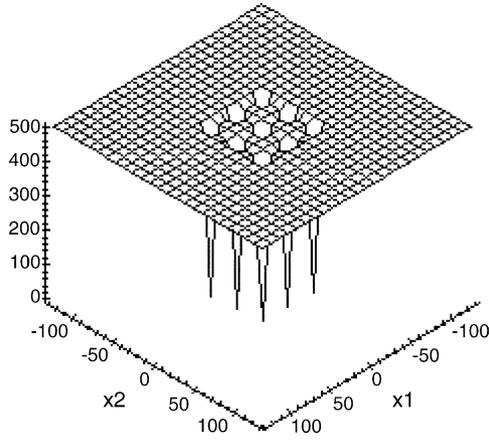


Fig. 3. Fonction Jong.

$$a2 = \begin{bmatrix} -32 & -32 & -32 & -32 & -32 & -16 & -16 \\ -16 & -16 & -16 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 16 & 16 & 16 & 16 & 16 & 32 \\ 32 & 32 & 32 & 32 & & & \end{bmatrix}$$

$$\text{Somme} = \sum_{i=1}^{25} \frac{1}{i + (x1 - a1(i))^6 + (x2 - a2(i))^6}$$

$$f(x1, x2) = 0.002 + \frac{1}{1/500 + \text{Somme}}$$

$$x1 \in [-128, 128], \quad x2 \in [-128, 128]$$

$$f^* = 1$$

$$x1^* = x2^* = -32$$

où les composantes $x1$ et $x2$ sont définies à 10^{-3} près.

Pour les codages 1 et 2, la longueur du codage pour une variable est égale à 20; pour le codage 3, cette longueur vaut 18 (Fig. 3).

6.4. Fonction de Michalevitch

Nom: MICHA

$$f(x) = -\sin(x) \left[\sin\left(\frac{10x^2}{\pi}\right) \right]^{20}$$

$$x \in [0, \pi]$$

$$f^* = -1$$

$$x^* = \frac{\pi}{2}$$

où la composante x est définie à 10^{-7} près.

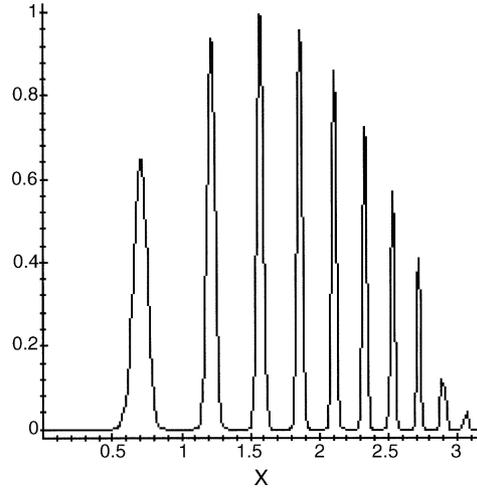


Fig. 4. Fonction Micha.

La variable étant positive, le signe n'est pas codé; pour les codages 1 et 2, la longueur du codage est égale à 33; pour le codage 3, cette longueur vaut 30 (Fig. 4).

6.5. Fonction de Pibouleau

Nom: PIB

$$f(x1, x2) = (1 - x1)^2 + k(x2^2 - x1^2) \quad \text{avec } k = 0.001$$

$$x1 \in [-\pi, \pi], \quad x2 \in [-\pi, \pi]$$

$$f^* = -\frac{k}{1-k} = -0.001$$

$$x1^* = \frac{1}{1-k}, \quad x2^* = 0$$

où les composantes $x1$ et $x2$ sont définies à 10^{-7} près.

Pour les codages 1 et 2, la longueur du codage pour une variable est égale à 34; pour le codage 3, cette longueur vaut 31 (Fig. 5).

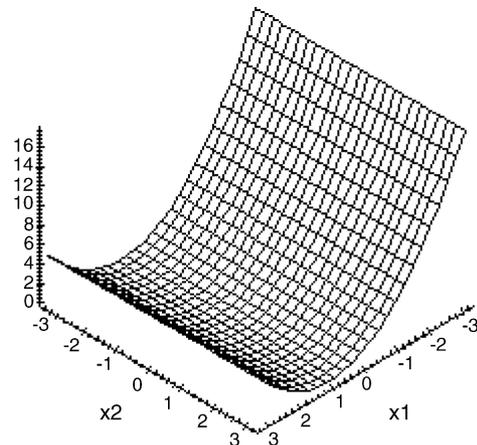


Fig. 5. Fonction Pib.

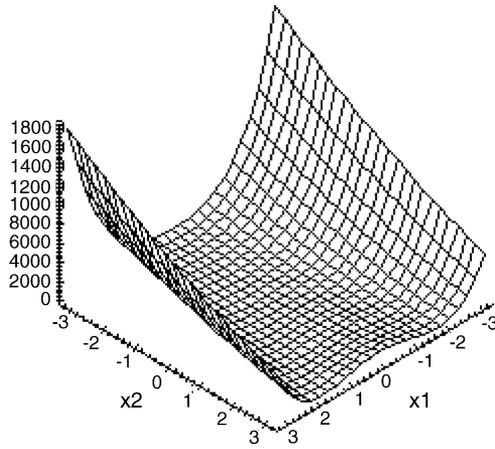


Fig. 6. Fonction Ros.

6.6. Fonction de Rosenbrock

Nom: ROS

$$f(x_1, x_2) = 100(x_1^2 - x_2)^2 + (1 - x_1)^2$$

$$x_1 \in [-\pi, \pi], \quad x_2 \in [-\pi, \pi]$$

$$f^* = 0$$

$$x_1^* = x_2^* = 1$$

où les composantes x_1 et x_2 sont définies à 10^{-7} près.

Pour les codages 1 et 2, la longueur du codage pour une variable est égale à 34; pour le codage 3, cette longueur vaut 31 (Fig. 6).

7. Génération d'une solution S' voisine de la solution courante S

Les problèmes testés étant purement mathématiques, il est supposé que les codages de chaque variable sont identiques pour toutes, ce qui peut ne pas être le cas pour des problèmes physiques où les variables ont des ordres de grandeurs différents. Ainsi le vecteur binaire S représentant l'ensemble des variables du problème est de longueur m avec $m = n \times l_{code}$ où n et l_{code} désignent respectivement le nombre de variables du problème et la longueur du codage de chaque variable.

La génération d'une solution S' voisine de la solution courante S est effectuée comme suit. Un nombre entier k compris entre 1 et m est généré selon une loi uniforme; pour définir S' , on remplace la $k^{ième}$ composante du vecteur S par son complément binaire.

8. Comparaison des méthodes

8.1. Essais effectués

Pour chaque fonction présentée ci-dessus, les valeurs choisies pour les quatre paramètres A , B , C et D sont reportées dans le Tableau 2.

En utilisant la technique des plans d'expériences centrés, il existe 17 combinaisons de paramètres (en tenant compte du centre des essais présenté en dernière position), comme il est mentionné dans le tableau ci-dessous. Pour chaque combinaison de ces paramètres, cinq essais consécutifs avec initialisations aléatoires ont été réalisés, ce qui conduit à 85 essais par fonction (Tableau 3).

8.2. Etude des succès

Rappelons que par définition, un succès est tel que $|f^* - fa| < 10^{-3}$ où f^* et fa désignent respectivement la solution théorique et la solution approchée par la procédure du recuit simulé.

Dans les tableaux de résultats, les conventions suivantes ont été utilisées (Tableaux 4–6):

- Valeurs en caractères normaux: pourcentage de succès (resp. échecs) sur 85 essais pour chaque fonction.
- Moy-Méth: pourcentage moyen de succès (resp. échecs) sur les six fonctions, pour chaque méthode.

Tableau 2
Valeurs des paramètres de contrôle

Variable	Niveau haut (+)	Niveau bas (–)	Centre (0)
A	1.75	0.25	1
B	1.75	0.25	1
C	0.95	0.75	0.85
D	9	1	5

Tableau 3
Essais effectués

Essai	A	B	C	D
1	–	–	–	–
2	+	–	–	–
3	–	+	–	–
4	+	+	–	–
5	–	–	+	–
6	+	–	+	–
7	–	+	+	–
8	+	+	+	–
9	–	–	–	+
10	+	–	–	+
11	–	+	–	+
12	+	+	–	+
13	–	–	+	+
14	+	–	+	+
15	–	+	+	+
16	+	+	+	+
17	0	0	0	0

Tableau 4
Pourcentage de succès avec le codage 1

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	12.9	75.3	70.6	10.6	98.8	3.5	45.2
GK	27.1	89.4	74.1	24.7	82.4	7.1	50.8
MA	16.5	77.6	77.6	15.3	98.8	3.5	48.2
MK	28.2	94.1	82.4	25.9	83.5	14.1	57.4
Moy-Fct	21.2	84.1	76.2	19.1	90.9	7.1	49.7

Tableau 5
Pourcentage de succès avec le codage 2

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	32.9	80.0	71.8	20.0	95.3	5.9	51.0
GK	40.0	89.4	72.9	21.2	90.6	3.5	52.9
MA	32.9	81.2	70.6	8.2	91.8	11.8	49.4
MK	43.5	90.6	75.3	21.2	97.6	3.5	55.3
Moy-Fct	37.3	85.3	72.7	17.7	93.8	6.2	52.2

Tableau 6
Pourcentage de succès avec le codage 3

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	28.2	74.1	52.9	14.1	95.3	10.5	45.9
GK	35.3	91.8	72.9	10.6	97.6	14.1	53.7
MA	29.4	77.6	65.9	15.3	100.0	9.4	49.6
MK	43.5	89.4	69.4	14.1	98.8	10.5	54.3
Moy-Fct	34.1	83.2	65.3	13.5	97.9	11.1	50.9

Tableau 7
Pourcentage d'échecs avec le codage 1

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	67.1	21.2	0	0	0	71.7	26.7
GK	57.6	3.5	0	0	0	0	10.2
MA	68.2	10.6	0	0	0	69.4	24.7
MK	51.8	1.2	0	0	0	1.2	9.0
Moy-Fct	61.2	9.1	0	0	0	35.6	17.7

- Moy-Fct: pourcentage moyen de succès (resp. échecs) sur les quatre méthodes, pour chaque fonction.

8.3. Etude des échecs notoires

Par définition, un échec notoire est tel que $|f^* - fa| > 1$ où f^* et fa désignent respectivement la solution théorique et la solution approchée par la procédure du recuit simulé (Tableaux 7–9).

Tableau 8
Pourcentage d'échecs avec le codage 2

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	51.8	16.5	0	0	0	0	11.4
GK	51.8	3.5	0	0	0	0	9.2
MA	55.3	12.9	0	0	0	0	11.4
MK	47.1	1.2	0	0	0	0	8.1
Moy-Fct	51.5	8.5	0	0	0	0	10.0

Tableau 9
Pourcentage d'échecs avec le codage 3

	Boîte	Jong	Grie	Micha	Pib	Ros	Moy-Méth
GA	62.4	22.4	0	0	0	1.2	14.3
GK	51.8	1.2	0	0	0	0	8.8
MA	51.8	20.0	0	0	0	0	12.0
MK	43.5	4.7	0	0	0	0	8.0
Moy-Fct	52.4	12.1	0	0	0	0.3	10.8

9. Discussion

De l'étude des succès, il peut être conclu que, quelque soit le codage:

- la méthode MK est la plus performante;
- la méthode de [1] utilisée pour faire évoluer la température est la moins efficace.

Ces deux conclusions sont confirmées par l'étude des échecs.

Il est évident que pour traiter un problème physique, le codage est un élément primordial, qui doit pouvoir représenter sans ambiguïté et de manière biunivoque l'ensemble des solutions acceptables. Dans le cas présent, les trois codages mis en œuvre satisfont ce principe, ont des longueurs comparables, et l'on ne note pas de différence significative sur les pourcentages moyens de succès et d'échecs par fonction selon le codage utilisé.

Par la suite l'étude sera poursuivie avec la méthode MK, en utilisant par exemple le codage 1.

10. Etude des effets et des interactions

10.1. Données de l'étude

Pour étudier les effets des quatre paramètres cités ci-dessus, ainsi que leurs interactions, un plan factoriel complet à quatre facteurs a été mis en œuvre; son format général est donné dans le Tableau 10, où la sous-matrice carrée d'ordre 16 définie par les effets, les interactions et la moyenne constitue une matrice d'Hadamard, notée H , qui vérifie donc:

$$H^T H = 16I \quad (9)$$

Pour chaque combinaison de paramètres, le terme sm1 (second membre 1) représente le pourcentage de succès sur les cinq essais réalisés avec initialisations aléatoires, et le terme sm2 donne le nombre moyen (exprimé en milliers) d'évaluations de la fonction objectif. La valeur de sm2 n'est pas reportée lorsque sm1 est nul. Les valeurs des seconds membres sont reportées dans le tableau ci-après pour chacune des six fonctions étudiées (Tableau 11).

10.2. Effets et interactions

Les effets et interactions, pour le critère sm1, puis pour le critère sm1/sm2, des variables du plan

Tableau 10
Plan factoriel complet à quatre facteurs

Essai	A	B	C	D	AB	AC	AD	BC	BD	CD	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD	Moy	sm1	sm2
1	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	-	-	+	+		
2	+	-	-	-	-	-	-	+	+	+	+	+	+	-	-	+		
3	-	+	-	-	-	+	+	-	-	+	+	+	-	+	-	+		
4	+	+	-	-	+	-	-	-	-	+	-	-	+	+	+	+		
5	-	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	-	+	+	-	+		
6	+	-	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+	-	+	+	+		
7	-	+	+	-	-	-	+	+	-	-	-	+	+	-	+	+		
8	+	+	+	-	+	+	-	+	-	-	+	-	-	-	-	+		
9	-	-	-	+	+	+	-	+	-	-	-	+	+	+	-	+		
10	+	-	-	+	-	-	+	+	-	-	+	-	-	+	+	+		
11	-	+	-	+	-	+	-	-	+	-	+	-	+	-	+	+		
12	+	+	-	+	+	-	+	-	+	-	-	+	-	-	-	+		
13	-	-	+	+	+	-	-	-	-	+	+	+	-	-	+	+		
14	+	-	+	+	-	+	+	-	-	+	-	-	+	-	-	+		
15	-	+	+	+	-	-	-	+	+	+	-	-	-	+	-	+		
16	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+	+		

d'expériences sont reportées dans les tableaux ci-dessous (Tableau 12).

En considérant le seul critère sm1 (pourcentage de succès), on ne peut pas dégager de conclusion nette sur les effets moyens des paramètres *A*, *B*, *C* et *D*; il en est de même pour leurs interactions (Tableau 12). Ce constat conduit à utiliser un second critère, constitué par le rapport sm1/sm2 (terme supposé nul lorsque sm1 est nul), qui semble mieux représenter l'efficacité d'une méthode (Tableau 13).

10.2.1. Analyse qualitative

Le classement des effets et interactions pour le critère sm1/sm2 est reporté dans le tableau ci-dessous (Tableau 14).

L'effet moyen le plus important constaté est dû au paramètre *B*, et le paramètre *A* a l'effet moyen le plus faible. En effet, le paramètre *A* représente la façon d'initialiser la température, et dans la mesure où le test d'arrêt est effectué sur la non évolution de la fonction objectif sur *D* paliers consécutifs et non sur une valeur minimale de la température,

Tableau 11
Valeurs des seconds membres

Boîte	Jong		Grie		Micha		Pib		Ros		Essai
	sm1	sm2	sm1	sm2	sm1	sm2	sm1	sm2	sm1	sm2	
0		100	3	80	6	20	0.4	100	7	0	1
0		100	3	80	5	20	0.25	60	4	0	2
40	5	100	36	80	54	20	0.3	100	78	20	3
20	4.7	100	36	100	70	20	0.4	100	72	40	4
0		100	14	100	31	60	2.8	80	30	20	5
0		100	13	100	27	40	1	100	36	20	6
60	26	100	198	100	358	0		100	390	40	7
0		100	184	80	290	20	0.6	80	318	20	8
20	15	100	6	100	1052	20	0.6	100	11	20	9
0		60	4	80	9	20	0.6	60	7	0	10
20	6.6	100	45	80	89	40	4	80	77	40	11
20	4.7	100	43	80	80	40	4	40	38	0	12
40	3.8	100	29	80	126	20	0.2	100	63	0	13
0		100	29	80	45	20	2.7	80	544	0	14
40	3	100	226	80	350	20	14	100	460	20	15
40	2.7	100	210	80	340	40	12	100	485	20	16

Tableau 12
Effets et interactions pour le critère sm1

Fonction	A	B	C	D	AB	AC	AD	BC	BD	CD	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD
Boîte	-8.75	11.25	3.75	3.75	-1.25	-3.75	1.25	1.25	-3.75	3.75	-1.25	8.75	1.25	1.25	3.75
Jong	-2.5	2.5	2.5	-2.5	2.5	2.5	-2.5	-2.5	2.5	2.5	-2.5	2.5	2.5	-2.5	-2.5
Grie	-1.25	-1.25	1.25	-3.75	1.25	-1.25	-1.25	-1.25	-1.25	-3.75	-3.75	1.25	3.75	3.75	1.25
Micha	1.25	-1.25	1.25	1.25	3.75	1.25	1.25	-6.25	8.75	-3.75	3.75	-1.25	1.25	3.75	-1.25
Pib	-8.75	1.25	6.25	-3.75	1.25	6.25	-3.75	1.25	-3.75	6.25	-3.75	1.25	1.25	6.25	6.25
Ros	-3.75	8.75	1.25	-3.75	-1.25	1.25	-3.75	-1.25	-1.25	-3.75	-1.25	-1.25	6.25	3.75	3.75

Tableau 13
Effets et interactions pour le critère sm1/sm2

Fonction	A	B	C	D	AB	AC	AD	BC	BD	CD	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD
Boîte	-0.95	2.38	1.26	2.05	0.53	-0.47	-0.19	0.11	0.56	2.50	0.68	1.29	-0.65	1.35	0.50
Jong	-0.06	-6.75	-5.30	-2.75	0.08	0.14	-0.13	4.28	2.61	1.75	-0.14	0.14	0.06	-1.64	-0.08
Grie	0.82	-2.61	-2.05	-1.62	-0.81	-0.62	0.43	1.57	1.49	1.05	0.61	-0.41	-0.35	-0.93	0.33
Micha	-1.59	-11.92	-7.90	-8.91	3.91	-3.26	-9.75	-4.42	-6.74	11.09	9.75	7.90	-8.08	-2.58	2.07
Pib	-0.06	-3.03	-2.73	-1.00	0.08	-0.10	-0.18	2.25	0.92	0.53	0.09	0.17	-0.01	-0.47	0.03
Ros	-0.45	2.96	-2.72	-0.49	0.70	0.55	-0.42	-2.24	-0.93	-1.13	-0.76	-2.11	3.93	0.90	2.74

Tableau 14
Classement des effets et interactions pour le critère sm1/sm2

Fonction	Effets moyens	Interactions d'ordre 2	Interactions d'ordre 3
Boîte	<i>B-D-C-A</i>	<i>CD BD AB AC AD BC</i>	<i>BCD ABD ABC ACD</i>
De Jong	<i>B-C-D-A</i>	<i>BC BD CD AC AD AB</i>	<i>BCD ABD ABC ACD</i>
Grie	<i>B-C-D-A</i>	<i>BC BD CD AB AC AD</i>	<i>BCD ABC ABD ACD</i>
Micha	<i>B-D-C-A</i>	<i>CD AD BD BC AB AC</i>	<i>ABC ACD ABD BCD</i>
Pib	<i>B-C-D-A</i>	<i>BC BD CD AD AC AB</i>	<i>BCD ABD ABC ACD</i>
Ros	<i>B-C-D-A</i>	<i>AD BC CD BD AB AC</i>	<i>ACD ABD BCD ABC</i>

il semble normal que le paramètre *A* ait peu d'influence sur la convergence. Ce constat est confirmé par les faibles interactions d'ordre deux faisant intervenir *A*.

Après l'élimination de ce paramètre, on constate, d'après les effets moyens et les interactions, que les paramètres *C* et *D* se comportent sensiblement de la même manière, l'effet moyen du paramètre *C* étant toutefois légèrement plus important.

10.2.2. Analyse quantitative: essais au centre du plan (*A* = 1, *B* = 1, *C* = 0.85, *D* = 5)

Dans la mesure où pour chaque fonction, au plus cinq mesures par point du plan sont disponibles pour le terme sm1/sm2 (en cas de non convergence pour un essai, le nombre d'évaluations de la fonction objectif n'est pas connu), le test de Fisher portant sur l'égalité des variances est non significatif, et il peut donc être considéré que la variance des mesures $\sigma_2(\text{sm2})$, demeure constante pour l'ensemble des points du plan. La variance commune σ^2 de sm2 pour les effets moyens, les interactions, et la moyenne calculées à partir des 16 mesures, est alors donnée par:

$$\sigma_2 = \frac{1}{16}(16\sigma_2(\text{sm2})) = \frac{1}{16}(\sigma_2(\text{sm2})) \tag{10a}$$

sachant que:

$$\text{sm2} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \text{nev}_i; \text{ddl} = n - 1 \tag{10b}$$

$$\sigma^2(\text{sm2}) = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (\text{nev}_i - \text{sm2})^2 \tag{10c}$$

où *n* représente le nombre d'essais pour une combinaison donnée de paramètres (ici *n* = 5) et *nev_i* est le nombre d'évaluations de la fonction objectif pour l'essai *i*.

L'écart-type des estimations se déduit donc de celui des mesures ($\sigma(\text{sm2})$) en le divisant par quatre.

De façon classique, l'étude des variances et des intervalles de confiance est restreinte au centre du plan, qui correspond à *A* = 1, *B* = 1, *C* = 0.85 et *D* = 5.

Le nombre de réponses assurant la convergence variant selon l'exemple, l'analyse est effectuée fonction par fonction. Dans un premier temps cinq essais (c'est à dire cinq exécutions de la procédure du recuit simulé, avec des initialisations aléatoires) par fonction ont été effectués, et pour certaines (Boîte, Micha, Pib), le nombre d'essais concluants était égal à un (conduisant à un nombre de degrés de liberté (ddl) infini), ou à deux (nombre de ddl égal à un, fournissant une valeur très élevée dans la table de Student). Pour pallier cette difficulté, le nombre d'essais a été augmenté à 10.

La variable considérée est le rapport sm1/sm2, où l'intervalle de confiance pour sm2 a une amplitude égale à *h*; l'intervalle de confiance pour le rapport sm1/sm2 est donné par:

$$\left[\frac{\text{sm1}}{\text{sm2} + h}, \frac{\text{sm1}}{\text{sm2} - h} \right] \tag{11}$$

Cet intervalle de confiance n'est pas symétrique par rapport à la valeur de sm1/sm2. On peut aisément se ramener au cas classique d'un intervalle symétrique, en supposant l'écart-type de sm2 faible devant sm2, hypothèse qui a été confirmée par les divers calculs. Soit $\alpha 1$ le terme:

$$\alpha 1 = \frac{\text{sm1}}{\text{sm2} + h} = \text{sm1} \left(\frac{1}{\text{sm2}} \times \frac{1}{1 + h/\text{sm2}} \right) \approx \text{sm1} \left(\frac{1}{\text{sm2}} \times 1 - \frac{h}{\text{sm2}^2} \right) \tag{12}$$

il vient:

$$\alpha 1 = \text{sm1} \left(\frac{1}{\text{sm2}} - \frac{h}{\text{sm2}^2} \right) = \frac{\text{sm1}}{\text{sm2}} - \frac{h \times \text{sm1}}{\text{sm2}^2} = \frac{\text{sm1}}{\text{sm2}} - \beta \tag{13}$$

avec:

$$\beta = \frac{h \times \text{sm1}}{\text{sm2}^2} \tag{14}$$

De même, on a:

$$\alpha 2 = \frac{\text{sm1}}{\text{sm2} - h} = \frac{\text{sm1}}{\text{sm2}} + \beta \tag{15}$$

où β est toujours défini par la relation (14).

Les valeurs de sm1 et sm2 sont mentionnées dans le Tableau 15. Les nombres d'évaluations (exprimés en milliers)

Tableau 15
Valeurs de sm1 et sm2

Fonction	sm1	sm2
Boîte	40	3.182
Jong	100	7.724
Grie	80	13.578
Micha	40	1.041
Pib	90	42.973
Ros	40	10.780

des fonctions sont reportés pour chacun des 10 essais dans le **Tableau 16**, où les cellules vides correspondent à des échecs (pas de convergence). Pour chaque fonction, le **Tableau 17** donne la moyenne sm2, l'écart-type $\sigma(\text{sm2})$, l'écart-type σ des estimations, le nombre de degrés de liberté, la valeur de la variable de Student t , la valeur absolue h de l'intervalle de confiance pour sm2, et enfin la valeur absolue β de la borne de l'intervalle de confiance pour le rapport sm1/sm2. Les intervalles de confiance sont calculés au niveau de probabilité de 95%.

Rappelons qu'un effet ou une interaction est significatif si son intervalle ne contient pas la valeur zéro; dans le cas contraire, cet élément est considéré comme non significatif. A partir des valeurs reportées dans le **Tableau 13**, sont mentionnés dans le **Tableau 18** uniquement les éléments significatifs; les cellules vides correspondent à des termes non significatifs.

Tableau 16
Nombres d'évaluations des fonctions (en milliers)

Fonction	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Boîte	3.433		3.847				3.033	4.127		
Jong	7.641	7.481	7.881	8.162	7.601	8.203	7.923	7.802	7.021	7.522
Grie		9.349	13.213	18.709	10.825	16.003	12.601		17.721	10.204
Micha	0.981				1.116		1.182		0.885	
Pib	40.777	47.477	46.933	31.593		41.695	32.968	45.611	50.802	48.902
Ros	5.689			10.881				9.807	16.744	

Tableau 17
Éléments statistiques

Fonction	sm2	$\sigma(\text{sm2})$	$\sigma(\text{estimation})$	ddl	$t_{0,975}$ (Student)	Borne h ($h = \sigma^* t_{0,975}$)	Borne β ($\beta = h^* \text{sm1}/(\text{sm2}^2)$)
Boîte	3.182	0.479	0.120	3	3.182	0.381	1.17
Jong	7.724	0.351	0.088	9	2.262	0.198	0.33
Grie	13.578	3.532	0.883	7	2.365	2.088	0.91
Micha	1.041	0.133	0.033	3	3.182	0.106	3.92
Pib	42.973	6.850	1.713	8	2.306	3.949	0.19
Ros	10.780	4.562	1.141	3	3.182	3.629	1.25

Tableau 18
Effets et interactions significatifs

Fonction	A	B	C	D	AB	AC	AD	BC	BD	CD	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD
Boîte		2.38	1.26	2.05						2.50		1.29		1.35	
DeJonG		-6.75	-5.30	-2.75				4.28	2.61	1.75					-1.64
Grie		-2.61	-2.05	-1.62				1.57	1.49	1.05					-0.93
Micha		-11.92	-7.90	-8.91			-9.75	-4.42	-6.74	11.09	9.75	7.90	-8.08		
Pib		-3.03	-2.73	-1.00				2.25	0.92	0.53					-0.47
Ros		2.96	-2.72					-2.24					-2.11	3.93	2.74

A titre d'exemple, l'intervalle de confiance pour l'effet de A pour la fonction Boîte qui est $[-0.95 - 1.17; -0.95 + 1.17] = [-2.12; +0.22]$, permet de conclure que l'effet de A est non significatif.

De même, l'intervalle de confiance pour l'effet de B pour la fonction Boîte, égal à $[2.38 - 1.17; 2.38 + 1.17] = [1.21; 3.55]$, indique qu'il est significatif.

Cette étude statistique confirme et affine les résultats fournis par l'analyse qualitative, à savoir que l'effet de A est négligeable, celui de B est prédominant, C et D jouent des rôles comparables, avec un léger avantage pour C. Les interactions d'ordre deux faisant intervenir A ne sont pas significatives, ce qui est moins net pour les interactions d'ordre trois, et l'interaction d'ordre quatre est négligeable dans la majorité des cas.

11. Conclusion

Les principales variantes de mise en œuvre de la méthode du recuit simulé, divers codages des variables, ainsi que les quatre principaux paramètres de contrôle (température initiale, longueur du palier de température, décroissance de la température et test d'arrêt) ont été étudiés à partir de six fonctions dont les solutions analytiques sont connues.

Un plan factoriel complet 2^4 a été mis en œuvre pour définir les variations des paramètres de contrôle, et pour

chaque fonction, la procédure du recuit simulé est exécutée cinq fois à partir de solutions initiales générées aléatoirement, au centre du plan et sur les seize sommets.

Dans un premier temps, l'étude du taux de convergence a permis de constater qu'au niveau de la mise en œuvre, la procédure de [16] couplée avec le schéma de décroissance de la température de [13] fournissait les meilleurs résultats, alors que le schéma de décroissance de la température de [1] conduisait aux plus mauvais. Cette conclusion a été confortée par l'étude du taux d'échecs (c'est à dire de non convergence).

Trois codages pour les variables ont été également utilisés, mais aucune conclusion nette au sujet de leur influence sur le taux de convergence n'a pu être dégagée. Il est évident que pour traiter un problème physique, le codage est un élément primordial, qui doit pouvoir représenter sans ambiguïté et de manière biunivoque l'ensemble des solutions acceptables. Dans le cas présent, les trois codages mis en œuvre satisfont ce principe, ont des longueurs comparables, et aucune différence significative n'est notée sur les pourcentages moyens de succès et d'échecs par fonction selon le codage utilisé.

Ces deux constats ont conduit à poursuivre l'étude des effets et interactions des quatre paramètres de contrôle avec un seul codage et l'implémentation de Metropolis – Kirkpatrick. Le plan factoriel complet 2^4 a été mis en œuvre pour les six fonctions avec cinq essais à chaque sommet du plan, et avec deux types de réponses: le pourcentage de succès (sm1) et l'efficacité définie par le rapport sm1/sm2 où sm2 représente le nombre d'évaluations (exprimé en milliers) de la fonction objectif. En considérant la seule réponse sm1, aucune conclusion nette n'a pu être dégagée sur les effets moyens et interactions des paramètres, alors que la réponse sm1/sm2 a permis de constater qualitativement et quantitativement des tendances claires. L'étude quantitative a été réalisée pour chaque fonction, de façon classique au centre du plan à partir de 10 essais avec initialisations aléatoires.

Le calcul des intervalles de confiance a permis de déterminer les seuils de signification des effets et interactions. Pour l'ensemble des six fonctions, l'effet moyen le plus important est dû au paramètre B (qui définit la longueur du palier de température en fonction de la longueur du codage des variables), tandis que le paramètre A (qui permet de calculer la température initiale en fonction de la valeur initiale de la fonction objectif) avait l'effet moyen le plus faible. En effet, le paramètre A donne la température initiale, et dans la mesure où le test d'arrêt est effectué sur la non évolution de la fonction objectif sur D paliers consécutifs, et non sur une valeur minimale de la température, il semble normal que ce paramètre ait peu d'influence sur la convergence. Ce constat a été confirmé par la non signification des interactions d'ordre deux faisant intervenir A , ainsi que par la non signification de l'interaction d'ordre quatre. Les paramètres C (coefficient de décroissance géométrique de la température) et D se comportent sensiblement de la même manière, avec un léger avantage pour C .

En conclusion, et en l'absence de toute autre information, il peut être préconisé d'utiliser la méthode du recuit simulé avec les éléments suivants:

- acceptation d'une solution dégradant la fonction objectif: règle de Metropolis;
- décroissance de la température: schéma géométrique de Kirkpatrick;
- valeur initiale de la température: valeur de la fonction objectif pour la solution initiale ($A = 1$);
- longueur du palier de température: somme des longueurs des codages de chaque variable ($B = 1$);
- coefficient de réduction de la température: 0.85 ($C = 1$);
- nombre de paliers successifs sur lesquels la solution demeure inchangée: 5 ($D = 1$).

On suggère le centre du plan pour les paramètres A , B , C , et D , car se placer au niveau haut permet d'assurer un bon taux de convergence avec toutefois un nombre élevé d'évaluations de la fonction objectif (paliers de température longs, nombre élevé de paliers successifs pour l'arrêt de la procédure), alors que le niveau bas peut conduire à des taux de convergence assez faibles. Le centre du plan réalise donc un compromis acceptable.

References

- [1] E.H.L. Aarts, P.J. Van Laarhoven, Statistical cooling: a general approach to combinatorial optimization problems, *Philips J. Res.* 40 (1985) 193.
- [2] J.M. Alliot, T. Scheix, *Intelligence Artificielle et Informatique Théorique*, Editions Cépadués, 1993.
- [3] G. Athier, P. Floquet, L. Pibouleau, S. Domenech, Synthesis of optimum heat exchanger networks by simulated annealing, *AIChE J.* 43 (11) (1997) 3007–3020.
- [4] P. Baudet, C. Azzaro-Pantel, S. Domenech, L. Pibouleau, Ordonnement à court terme d'un atelier discontinu de chimie fine, *Can. J. Chem. Eng.* 77 (1998) 300–314.
- [5] C. Bernal-Haro, C. Azzaro-Pantel, L.M. Pibouleau, S. Domenech, Multi-objective batch plant design: a two-stage methodology. Part II. Development of a genetic algorithm and results analysis, *Ind. Eng. Chem. Res.* 41 (23) (2002) 5738–5743.
- [6] J.C. Cordero, A. Davin, S. Domenech, P. Floquet, L. Pibouleau, Conception optimale de réseaux de réacteurs par une méthode mixte, *Entropie* 219 (1999) 15–21.
- [7] A. Davin, J.C. Cordero, G. Athier, P. Floquet, S. Domenech, L. Pibouleau, Optimisation des paramètres du recuit simulé en génie des procédés appliquée aux réseaux d'appareillages (réacteurs, échangeurs de chaleur), *Entropie* 231 (2001) 12–28.
- [8] S. Dedieu, C. Azzaro-Pantel, S. Domenech, L. Pibouleau, A retrofit design strategy for multipurpose batch plants, *Comp. Chem. Eng. Suppl.* (1999) S15–S18.
- [9] W.B. Dolan, P.T. Cummings, M.D. Le Van, Process optimization via simulated annealing: application to network design, *AIChE J.* 35 (5) (1989) 725–736.
- [10] W.B. Dolan, P.T. Cummings, M.D. Le Van, Algorithmic efficiency of simulated annealing for heat exchanger network design, *Comput. Chem. Eng.* 14 (20) (1990) 1039–1050.
- [11] P. Floquet, L. Pibouleau, S. Domenech, Separation sequence synthesis: how to use simulated annealing procedure? *Comput. Chem. Eng.* 18 (11–12) (1994) 1141–1148.

- [12] R.J. Gauber, Time-dependent statistics of the Ising Model, *J. Math. Phys.* 4 (1963) 294.
- [13] S. Kirkpatrick, C.D. Gelatt, M.P. Vecchi, Simulated annealing: theory and applications, IBM Research Report RC 9355, 1982.
- [14] C. Laquerbe, P. Floquet, S. Domenech, L. Pibouleau, Conception de séquences de séparation par un algorithme génétique, *RAIRO RO* 31 (4) (1997) 375–398.
- [15] C. Laquerbe, J.C. Laborde, S. Soares, P. Floquet, L. Pibouleau, S. Domenech, Synthesis of RTD Models via stochastic procedures: simulated annealing and genetic algorithms, *Comput. Chem. Eng.* 25 (2001) 1169–1184.
- [16] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087–1092.
- [17] A.N. Patel, R.S.H. Mah, I.A. Karimi, Preliminary design of multiproduct noncontinuous plants using simulated annealing, *Comput. Chem. Eng.* 7 (1991) 451–469.
- [18] E. Peyrol, L. Pibouleau, P. Floquet, J.P. Couderc, S. Domenech, Simulation par événements discrets d'un atelier de fabrication de composants électroniques, *Entropie* 178 (1993) 3–16.
- [19] L. Pibouleau, P. Floquet, S. Domenech, C. Azzaro-Pantel, A survey of optimisation tools through ESCAPE symposia, *Comput. Chem. Eng. Suppl.* (1999) S495–S498.