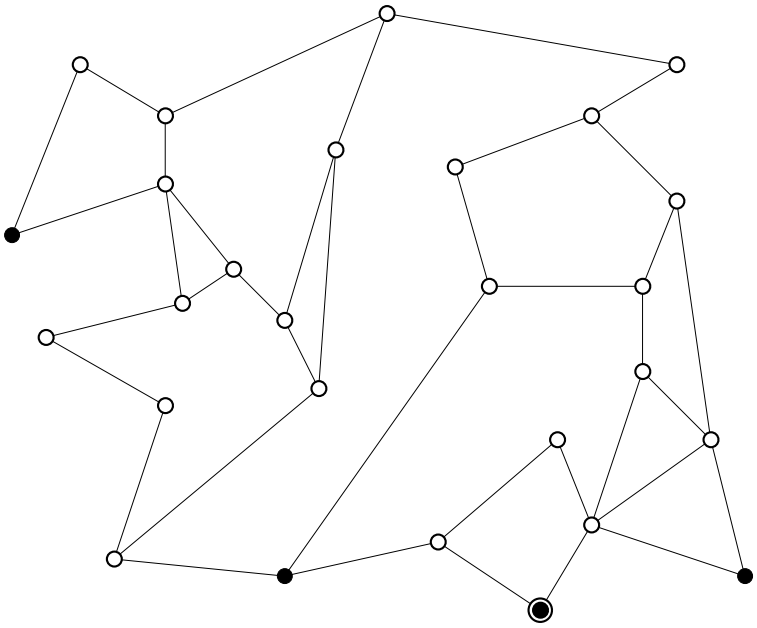
OPTIMISATION DISCRETE PAR RECUIT SIMULE ET MACHINES DE BOLTZMAN



Fabien Campillo
DESS Mathématiques
1992/93

Table des matières

1 Chaînes de Markov **1**

1.1 Modélisation . . . 1
1.2 Classification des états . . . 4
1.3 Comportement asymptotique . . . 5
1.4 Identification . . . 6
1.5 Estimation paramétrique . . . 9

2 Recuit Simulé **17**

2.1 Problèmes d'optimisation discrète . . . 17
2.1.1 Définitions . . . 17
2.1.2 Problème du voyageur de commerce . . . 18
2.1.3 Problème du couplage de poids minimal . . . 19
2.1.4 Un problème de réseau . . . 20
2.2 Algorithme de recherche locale . . . 21
2.3 Mesure de Gibbs . . . 25
2.4 Dynamique de Metropolis . . . 28
2.5 Algorithme de recuit simulé . . . 31
2.5.1 L'Algorithme . . . 32
2.5.2 Convergence en loi . . . 32
2.5.3 Autres résultats . . . 35
2.6 Mise en œuvre pratique . . . 37
2.6.1 Statistiques empiriques . . . 37
2.6.2 Protocole de refroidissement . . . 37
2.6.3 Calcul de $H(y) - H(x)$ . . . 42

3 Machines de Boltzmann **45**

3.1 Description . . . 45
3.2 Machines de Boltzmann séquentielles . . . 46
3.3 Machines de Boltzmann parallèles . . . 49
3.3.1 Parallélisme partiel . . . 49
3.3.2 Parallélisme total . . . 52
3.4 Optimisation discrète et machines de Boltzmann . . . 54
3.4.1 Démarche générale . . . 54
3.4.2 Application au problème du voyageur de commerce . . . 55

Annexes **57**
A.1 Chaînes de Markov non–homogènes 57

Bibliographie **59**

Index **61**

Index **61**

NOTATIONS

- $\mathcal{P}(E)$: ensemble des parties de E.
- $|E|$: cardinal d'un ensemble E.
- $\mathbf{1}_E$: fonction indicatrice d'un ensemble E ($\mathbf{1}_E(x) = 1$ si $x \in E$, 0 sinon).
- $f(x) \triangleq x^2$: égal par définition.

Chapitre 1

Chaînes de Markov

1.1 Modélisation

On considère un espace d'état *fini* $\mathcal{X}$. Une probabilité ν sur $\mathcal{X}$ est une famille $\{\nu(x)\,,\, x \in \mathcal{X}\}$ vérifiant

$$0 \leq \nu(x) \leq 1\ , \quad \forall x \in \mathcal{X}\ , \qquad \text{et} \qquad \sum_{x \in \mathcal{X}} \nu(x) = 1\ .$$

Définition 1.1.1 *Un processus $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ de v.a. à valeurs dans $\mathcal{X}$ est appelé* chaîne de Markov *si pour tout $n \geq 0$ et $x_i \in \mathcal{X}$ $(i = 1, \ldots, n)$*

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \cdots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n)$$

dès que $P(X_0 = x_0, \cdots, X_n = x_n) > 0$. Cette chaîne de Markov est dite homogène *si l'application*

$$(x, y) \to P(X_{n+1} = y \mid X_n = x)$$

ne dépend pas de n.

Définition 1.1.2 *Soit $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ une chaîne de Markov à valeurs dans $\mathcal{X}$. la loi initiale ν d'une chaîne de Markov $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ à valeurs dans $\mathcal{X}$ est la loi de X_0, i.e.*

$$\nu(x) = P(X_0 = x)\ , \quad x \in \mathcal{X}\ .$$

La matrice de transition Π_n de cette chaîne de Markov à l'instant n est la famille

$$\{\pi_n(x, y)\,,\, x, y \in \mathcal{X}\}$$

définie par

$$\pi_n(x, y) = P(X_{n+1} = y \mid X_n = x)\ .$$

Si la chaîne de Markov $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ est homogène, la matrice de transition, notée Π, ne dépend pas de n.

Dans ce chapitre nous ne considérons que des chaînes de Markov homogènes.

La notion de chaîne de Markov généralise la notion de système dynamique déterministe (machine à état fini, suite récurrente, ou équation différentielle ordinaire), en ce sens que la distribution de probabilité de l'état futur X_{n+1} de la chaîne ne dépend que de l'état présent X_n.

Proposition 1.1.3 *La* distribution de probabilité *de la chaîne de Markov* $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$*, de loi initiale* ν *et de matrice de transition* Π*, est donnée par*

$$P(X_0 = x_0, \cdots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x_n) = \nu(x_0) \cdot \pi(x_0, x_1) \cdots \pi(x_{n-1}, x_n) \ .$$

Preuve On définit l'événement

$$A_n = \{X_0 = x_0, \cdots, X_{n-1} = x_{n-1}, X_n = x_n\} \ .$$

Donc $A_n = A_{n-1} \cup \{X_n = x_n\}$. Si $P(A_{n-1}) > 0$, on peut conditionner par l'événement A_{n-1} et appliquer la propriété de Markov

$$\begin{aligned} P(A_n) &= P(A_{n-1})\, P(X_n = x_n | A_{n-1}) \\ &= P(A_{n-1})\, \pi(x_{n-1}, x_n) \ . \end{aligned}$$

Si $P(A_{n-1}) = 0$, alors $P(A_n) = 0$ et la relation est encore vraie. En itérant cette relation, on obtient le résultat annoncé. □

Remarque 1.1.4 *Il résulte de la Proposition 1.1.3 que la loi initiale* ν *et la matrice de transition* Π *déterminent de façon unique la distribution de probabilité de* $(X_0, X_1, \cdots, X_n)$ *pour tout* $n \geq 0$.

Définition 1.1.5 *Une* matrice markovienne Π *sur* $\mathcal{X}$ *est une famille*

$$\Pi = \{\pi(x, y)\,,\, x, y \in \mathcal{X}\}$$

vérifiant

$$0 \leq \pi(x, y) \leq 1 \ , \quad \forall x, y \in \mathcal{X} \ , \qquad \text{et} \qquad \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi(x, y) = 1 \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ .$$

Remarque 1.1.6 *Une matrice de transition est markovienne. Mais on peut aussi montrer que, quelque soit* ν *une probabilité sur* $\mathcal{X}$ *et* Π *une matrice markovienne, on peut construire une espace de probabilité* $(\Omega, \mathcal{F}, P)$ *et une chaîne de Markov défini sur cette espace et à valeurs dans* $\mathcal{X}$ *de densité initiale* ν *et matrice de transition* Π*. Pour cela on note* $\Omega = E^{\mathbb{N}}$ *l'espace canonique des trajectoires, et* $\omega = (\omega_0, \omega_1, \cdots)$ *un élément quelconque de* Ω*. On définit* $X_n(\omega) = \omega_n$*, et* $\mathcal{F}$ *la plus petite tribu de* Ω *qui rend mesurable toutes les applications* X_n*. D'après le théorème de Kolmogorov, il existe une unique probabilité* $P_{\nu,\pi}$ *sur* $(\Omega, \mathcal{F})$ *telle que* $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ *soit une chaîne de Markov de loi initiale* ν *et de matrice de transition* Π*. Par abus de notation, on écrit* P *lorsqu'il n'y a pas d'ambiguïté sur* ν *et* Π.

Définition 1.1.7 *On introduit l'opérateur de* translation $\theta : \Omega \to \Omega$ *défini par* $\theta(\omega) = (\omega_1, \omega_2, \cdots)$, *et son itéré d'ordre* n *par* $\theta_n(\omega) = (\omega_n, \omega_{n+1}, \cdots)$.

On notera $\mathcal{F}_n = \sigma(X_0, X_1, \cdots, X_n)$, P_x la probabilité conditionnelle

$$P_x(A) = P(A|X_0 = x) \ ,$$

et E_x l'espérance associée.

La propriété de Markov (faible) peut alors se réécrire sous la forme plus générale suivante :

Proposition 1.1.8 [Propriété de Markov faible]

$$E(Z \circ \theta_n \mid \mathcal{F}_n) = E_{X_n}(Z) \ , \quad \forall Z \ \textit{v.a. bornée sur} \ (\Omega, \mathcal{F}),$$

ou, de manière équivalente,

$$P((X_n, X_{n+1}, \ldots) \in A|\mathcal{F}_n) = P_{X_n}(A) \ , \quad \forall A \in \mathcal{F} \ .$$

Définition 1.1.9 *On appelle* temps d'arrêt *une v.a.* T *à valeurs dans* $\mathbb{N}$, *qui vérifie*

$$\{T = n\} \in \mathcal{F}_n \ , \quad \forall n \geq 0 \ .$$

La tribu des événements antérieurs *à* T, *est la tribu des parties de* Ω *définie par*

$$\mathcal{F}_T = \left\{ \ B \in \mathcal{F} \ : \ B \cap \{T = n\} \in \mathcal{F}_n \, , \, \forall n \geq 0 \ \right\} \ .$$

On définit enfin l'opérateur de translation $\theta_T : \Omega \to \Omega$ par

$$\theta_T(\omega) = (\omega_{T(\omega)}, \omega_{T(\omega)+1}, \cdots) \ .$$

Théorème 1.1.10 [Propriété de Markov forte] *Pour tout temps d'arrêt* T,

$$E\left[\ Z \circ \theta_T \ 1_{(T < \infty)} \mid \mathcal{F}_T \ \right] = 1_{(T < \infty)} \ E_{X_T}(Z) \ ,$$
$$\forall Z \ \textit{v.a. bornée sur} \ (\Omega, \mathcal{F}),$$

ou, de manière équivalente,

$$P((X_T, X_{T+1}, \ldots) \in A|\mathcal{F}_T) = P_{X_T}(A) \ , \quad \forall A \in \mathcal{F} \ .$$

Preuve La v.a. $1_{(T < \infty)} \ E_{X_T}(Z)$ est $\mathcal{F}_T$–mesurable, et pour tout $A \in \mathcal{F}_T$

$$\begin{aligned}
\int_A Z \circ \theta_T \ 1_{(T < \infty)} \, dP &= \sum_{n \geq 0} \int_{A \cap (T=n)} Z \circ \theta_T \ 1_{(T < \infty)} \, dP \\
&= \sum_{n \geq 0} \int_{A \cap (T=n)} Z \circ \theta_n \, dP \\
&= \sum_{n \geq 0} \int_{A \cap (T=n)} E_{X_n}(Z) \, dP \\
&= \int_A 1_{(T < \infty)} \ E_{X_T}(Z) \, dP \ .
\end{aligned}$$

□

1.2 Classification des états

Pour toute partie $\Gamma \subset \mathcal{X}$, on note T_Γ le premier temps d'atteinte de Γ par la chaîne de Markov

$$T_\Gamma = \inf\{n \geq 0 \,:\, X_n \in \Gamma\} \ .$$

On vérifie aisément qu'il s'agit d'un temps d'arrêt. Par abus de notation, on écrit T_x lorsque $\Gamma = \{x\}$.

Définition 1.2.1 *Un état $x \in \mathcal{X}$ est dit* récurrent *si, partant de x la chaîne revient p.s. en x, c'est–à–dire si $P_x(T_x < \infty) = 1$.*

Il est dit transient *ou* transitoire *dans le cas contraire, c'est–à–dire si $P_x(T_x < \infty) < 1$.*

Remarque 1.2.2 *Toute chaîne de Markov à espace d'état fini possède au moins un état récurrent.*

On définit N_x le nombre de passages de la chaîne dans l'état x après l'instant 0

$$N_x = \sum_{n \geq 1} 1(X_n = x) \ ,$$

et les coefficients

$$\rho_{x,y} = P_x(T_y < \infty) = P_x(N_y \geq 1) \ .$$

Théorème 1.2.3 *Soit $x \in \mathcal{X}$.*

(i) Si x est récurrent, alors $P_x(N_x = \infty) = 1$.

(ii) Si x est transient, alors $P_x(N_x < \infty) = 1$. En outre, pour tout $k \geq 1$

$$P_x(N_x = k) = (1 - \rho_{x,x})\rho_{x,x}^{k-1} \ .$$

Définition 1.2.4 *Soit $x, y \in \mathcal{X}$.*

On dit que l'état y est accessible *à partir de l'état x, si $\rho_{x,y} > 0$.*

On dit que les états x et y communiquent*, et on note $x \sim y$, si $\rho_{x,y} > 0$ et $\rho_{y,x} > 0$.*

La relation $\sim$ est une relation d'équivalence.

Théorème 1.2.5 *Soit $x \in \mathcal{X}$ un état récurrent.*

(i) Si $y \sim x$, alors $P_x(N_y = \infty) = 1$.

(ii) Si $y \not\sim x$, alors $P_x(N_y = 0) = 1$.

Le résultat suivant montre que la propriété de récurrence ou de transience est une propriété de classe :

Corollaire 1.2.6 *Si $x \sim y$, les états x et y sont soit tous les deux récurrents, soit tous les deux transients.*

Définition 1.2.7 *Un ensemble* $\Gamma \subset \mathcal{X}$ *est* clos *si partant d'un état* x *de* Γ *la chaîne reste (p.s.) dans* Γ*, c'est à dire*

$$P_x(X_1 \in \Gamma) = 1 \ , \quad \forall x \in \Gamma \ .$$

Un ensemble clos $\Gamma \subset \mathcal{X}$ *est* irréductible *s'il ne contient pas deux deux sous–ensembles clos disjoints.*

Remarque 1.2.8 *On peut donc partionner* $\mathcal{X}$ *en*

$$\mathcal{X} = \mathcal{X}_T \cap \mathcal{X}_R$$

où $\mathcal{X}_T$ *désigne l'ensemble des états transients et* $\mathcal{X}_R$ *l'ensemble des états récurrents. Ce dernier se décompose lui–même en une partition*

$$\mathcal{X}_R = \mathcal{X}_R^1 \cap \cdots \cap X_R^p$$

de p *ensembles clos et irréductibles. Comme* $\mathcal{X}$ *est un ensemble fini, il existe au moins un état récurrent, on a donc* $p \geq 1$.

Définition 1.2.9 *Une chaîne de Markov est dite* récurrente *et* irréductible*, si l'espace d'état forme une unique classe récurrente.*

1.3 Comportement asymptotique

On définit

$$N_y^x = \sum_{0 \leq n < T_x} 1(X_n = y)$$

le nombre de passages de la chaîne dans l'état y avant le premier passage dans l'état x.

Théorème 1.3.1 *Pour toute chaîne de Markov irréductible et récurrente sur un espace d'état* fini $\mathcal{X}$*, il existe une unique* probabilité μ *strictement positive sur* $\mathcal{X}$*, invariante par la matrice de transition* Π*, i.e. telle que*

$$\sum_{y \in \mathcal{X}} \mu(y)\, \pi(y, x) = \mu(y) \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ .$$

En outre

$$E_x(N_y^x) = \frac{\mu(y)}{\mu(x)} \ , \quad \forall x, y \in \mathcal{X} \ .$$

Remarque 1.3.2 *Dans le cas où l'espace d'état* $\mathcal{X}$ *est seulement* dénombrable*, on peut toujours montrer l'existence d'une mesure* μ *strictement positive sur* $\mathcal{X}$*, invariante par la matrice de transition* Π*, mais cette mesure n'est pas nécessairement* bornée.

Si f est une fonction définie sur $\mathcal{X}$, on note

$$\langle f, \mu \rangle = \sum_{x \in \mathcal{X}} f(x)\ \mu(x)\ .$$

Théorème 1.3.3 (Théorème ergodique) *Soit μ l'unique probabilité invariante. Soit f une fonction définie sur $\mathcal{X}$. Pour toute loi initiale ν, on a*

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n} f(X_k) \xrightarrow{p.s.} \langle f, \mu \rangle\ .$$

Si F est une fonction définie sur $\mathcal{X}^2$, on note πF la fonction définie sur $\mathcal{X}$ par

$$[\pi F](x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} F(x,y)\, \pi(x,y)\ , \quad \forall x \in \mathcal{X}\ .$$

Théorème 1.3.4 *Soit F une fonction définie sur $\mathcal{X}^2$. Pour toute loi initiale ν, on a*

$$(i) \qquad \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} F(X_{k-1}, X_k) \xrightarrow{p.s.} \langle \pi F, \mu \rangle\ ,$$

$$(ii) \qquad \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{k=1}^{n} \left(F(X_{k-1}, X_k) - \pi F(X_{k-1}) \right) \xrightarrow{loi} \mathcal{N}(0, \sigma^2(F))\ ,$$

avec : $\sigma^2(F) = \langle \pi F^2 - (\pi F)^2, \mu \rangle$.

1.4 Identification

Le problème consiste à estimer la matrice de transition Π, ayant observé les états successifs

$$(X_0, X_1, \cdots, X_n)$$

de la chaîne jusqu'à l'instant n. On utilise l'approche du maximum de vraisemblance pour ce problème d'estimation. Si l'on considère que la loi initiale ν est connue, alors la *fonction de vraisemblance* pour l'estimation de Π est définie par :

$$L_n(\Pi) = \pi(X_0, X_1) \cdot \cdots \cdot \pi(X_{n-1}, X_n)\ .$$

On introduit :

- le nombre $N^n_{x,y}$ de transitions de l'état x vers l'état y, jusqu'à l'instant n

$$N^n_{x,y} = \sum_{k=1}^{n} 1(X_{k-1} = x, X_k = y)\ ,$$

– le nombre N_x^n de passages dans l'état x, jusqu'à l'instant $n-1$

$$N_x^n = \sum_{k=1}^{n} 1_{(X_{k-1}=x)} \ ,$$

et on vérifie immédiatement que

$$\sum_{y\in\mathcal{X}} N_{x,y}^n = N_x^n \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ . \tag{1.1}$$

La fonction de vraisemblance peut se réécrire

$$L_n(\Pi) = \prod_{(x,y)\in\mathcal{X}^2} [\pi(x,y)]^{N_{x,y}^n} \ ,$$

et la log–vraisemblance

$$\ell_n(\Pi) = \log L_n(\Pi) = \sum_{(x,y)\in\mathcal{X}^2} N_{x,y}^n \ \log \pi(x,y) \ .$$

Proposition 1.4.1 *L'estimateur du* maximum de vraisemblance *pour la probabilité de transition $\pi(x,y)$, basé sur l'observation des états successifs $(X_0, \cdots, X_n)$ de la chaîne jusqu'à l'instant n, est défini par*

$$\widehat{\pi}_n(x,y) = \frac{N_{x,y}^n}{N_x^n} \ .$$

Preuve Il s'agit de maximiser la fonction

$$\ell_n(\Pi) = \sum_{(x,y)\in\mathcal{X}^2} N_{x,y}^n \ \log \pi(x,y) \ ,$$

par rapport aux coefficients $\{\pi(x,y)\ ,\ x,y \in \mathcal{X}\}$, sous les contraintes

$$0 \le \pi(x,y) \le 1 \ , \quad \forall x,y \in \mathcal{X} \ , \qquad \text{et} \qquad \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi(x,y) = 1 \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ .$$

On introduit les multiplicateurs de Lagrange $\{\lambda_x\ ,\ x \in \mathcal{X}\}$ et l'hamiltonien

$$H_n(\Pi) = \sum_{(x,y)\in\mathcal{X}^2} (N_{x,y}^n \ \log \pi(x,y) - \lambda_x \ \pi(x,y)) \ .$$

L'annulation de la dérivée partielle de $H_n(\Pi)$ par rapport au coefficient $\pi(x,y)$ donne

$$N_{x,y}^n = \lambda_x \ \widehat{\pi}_n(x,y) \ .$$

On détermine le multiplicateur λ_x en exprimant que l'estimateur obtenu doit satisfaire la contrainte, ce qui donne

$$N_x^n = \sum_{y\in\mathcal{X}} N_{x,y}^n = \lambda_x \sum_{y\in\mathcal{X}} \widehat{\pi}_n(x,y) = \lambda_x \ .$$

$\square$

Remarque 1.4.2 *Cet estimateur apparaît comme le rapport de la fréquence empirique des transitions de l'état x vers l'état y, sur la fréquence empirique des passages dans l'état x. Pour espérer obtenir un bon estimateur d'une probabilité de transition $\pi(x,y) > 0$, il faut donc que la chaîne passe* infiniment souvent *de l'état x vers l'état y. Nous allons en fait supposer que la chaîne de Markov est* irréductible *et* récurrente, *de sorte que l'espace d'état $\mathcal{X}$ consiste en une unique classe récurrente, tous les états communicant entre eux.*

On peut alors montrer les résultats de *consistance* et de *normalité asymptotique* pour l'estimateur empirique du maximum de vraisemblance.

Théorème 1.4.3 *On suppose que la chaîne de Markov $\{X_n\,,\, n \geq 0\}$ est* irréductible *et* récurrente. *Soit μ l'unique probabilité* invariante. *On a*

$$(i) \qquad \widehat{\pi}_n(x,y) \xrightarrow{p.s.} \pi(x,y) \ ,$$

$$(ii) \qquad \sqrt{n\,\mu(x)}\,\left(\widehat{\pi}_n(x,y) - \pi(x,y)\right) \xrightarrow{loi} \mathcal{N}(0, \pi(x,y)\,[1-\pi(x,y)]) \ .$$

Preuve On se fixe $x, y \in \mathcal{X}$. Pour démontrer (i), on remarque que

$$\frac{1}{n}\,N^n_{x,y} = \frac{1}{n}\,\sum_{k=1}^{n} 1_{(X_{k-1}=x,\,X_k=y)} \ ,$$

et on introduit la fonction

$$F(x',y') = 1_{(x'=x,\,y'=y)} \ .$$

On a d'abord

$$[\pi F](x') = \sum_{y'\in\mathcal{X}} F(x',y')\,\pi(x',y') = \pi(x,y)\,1_{(x'=x)} \ ,$$

et ensuite

$$\langle \pi F, \mu\rangle = \sum_{x'\in\mathcal{X}} [\pi F](x')\,\mu(x') = \mu(x)\,\pi(x,y) \ .$$

Il résulte alors de la loi des grands nombres (Théorème 1.3.4 (i)), que

$$\frac{1}{n}\,N^n_{x,y} \xrightarrow{p.s.} \mu(x)\,\pi(x,y) \ .$$

De la même manière, on montre que

$$\frac{1}{n}\,N^n_{x} \xrightarrow{p.s.} \mu(x) \ ,$$

d'où le résultat.

Pour démontrer (ii), on remarque que

$$\sum_{k=1}^{n} \pi F(X_{k-1}) = \pi(x,y) \sum_{k=1}^{n} 1_{(X_{k-1}=x)} = \pi(x,y)\, N_x^n \ .$$

On a d'abord

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \left(N_{x,y}^n - \pi(x,y)\, N_x^n\right) = \sqrt{n}\, \left(\widehat{\pi}_n(x,y) - \pi(x,y)\right) \frac{1}{n}\, N_x^n \ .$$

D'autre part

$$\langle \pi F^2, \mu \rangle = \langle \pi F, \mu \rangle = \mu(x)\, \pi(x,y) \ ,$$

et

$$\langle (\pi F)^2, \mu \rangle = \sum_{x' \in \mathcal{X}} [\pi F]^2(x')\, \mu(x') = \mu(x)\, \pi^2(x,y) \ ,$$

de sorte que

$$\sigma^2(F) = \mu(x)\, \pi(x,y)\, (1 - \pi(x,y)) \ .$$

Il résulte alors du théorème de limite centrale (Théorème 1.3.4 (ii)), que

$$\sqrt{n}\, \left(\widehat{\pi}_n(x,y) - \pi(x,y)\right) \mu(x) \xrightarrow{loi} \mathcal{N}(0, \mu(x)\, \pi(x,y)\, [1 - \pi(x,y)]) \ ,$$

d'où le résultat, en divisant par $\sqrt{\mu(x)}$. □

1.5 Estimation paramétrique

Dans cette partie, on suppose que la matrice de transition Π^θ dépend d'un paramètre inconnu $\theta \in \Theta \subset \mathbb{R}^p$. La loi initiale ν est connue, et on note P_θ la probabilité P_{ν,Π^θ}. Le problème consiste à estimer le paramètre $\theta \in \Theta$, ayant observé les états successifs $(X_0, X_1, \cdots, X_n)$ de la chaîne jusqu'à l'instant n. On utilise encore l'approche du maximum de vraisemblance pour ce problème d'estimation.

Définition 1.5.1 *On dit que la famille* $\{\Pi^\theta\ ,\ \theta \in \Theta\}$ *de matrices de transitions est* dominée, *si l'ensemble des* transitions possibles

$$D = \left\{\ (x,y) \in \mathcal{X}^2\ :\ \pi^\theta(x,y) > 0\ \right\}$$

ne dépend pas de $\theta \in \Theta$.

Remarque 1.5.2 *Cette propriété permet de garantir que* $\forall \theta, \theta' \in \Theta$

$$\pi^{\theta'}(X_{k-1}, X_k) > 0 \ , \qquad P_\theta - p.s. \ .$$

En effet, sous P_θ *la transition* (X_{k-1}, X_k) *vérifie nécessairement*

$$\pi^\theta(X_{k-1}, X_k) > 0 \ .$$

Mais alors $\pi^{\theta'}(X_{k-1}, X_k) > 0$ *aussi.*

On suppose que le modèle $\{\Pi^\theta\,,\,\theta\in\Theta\}$ est dominé. La *fonction de vraisemblance* pour l'estimation de θ est définie par :

$$L_n(\theta)=\pi^\theta(X_0,X_1)\cdots\pi^\theta(X_{n-1},X_n)\ ,$$

et la log–vraisemblance

$$\ell_n(\theta)=\log L_n(\theta)=\sum_{k=1}^n\log\pi^\theta(X_{k-1},X_k)\ .$$

Pour chaque $\theta\in\Theta$, on considère la suite $\{U_n(\theta)\,,\,n\geq 0\}$ définie par

$$U_n(\theta)=-\frac{1}{n}[\,\ell_n(\theta)-\ell_n(\alpha)\,]\ ,$$

où $\alpha\in\Theta$ est la *vraie* valeur (inconnue) du paramètre. L'estimateur du maximum de vraisemblance pour le paramètre inconnu $\theta\in\Theta$, basé sur l'observation des états successifs $(X_0,\cdots,X_n)$ de la chaîne jusqu'à l'instant n, est défini par

$$\widehat{\theta}_n\in\operatorname{Arg}\max_{\theta\in\Theta}\ell_n(\theta)=\operatorname{Arg}\min_{\theta\in\Theta}U_n(\theta)\ .$$

On introduit les hypothèses suivantes

Hypothèse 1.5.3 (ergodicité) *On suppose que pour chaque $\theta\in\Theta$, la chaîne de Markov $\{X_n\,,\,n\geq 0\}$ est irréductible et récurrente, et on note μ^θ l'unique probabilité invariante, strictement positive.*

Hypothèse 1.5.4 (identifiabilité) *On suppose que le modèle est* identifiable *au point α, c'est–à–dire que, pour tout $\theta\neq\alpha$*

$$\{\ (x,y)\in\mathcal{X}^2\ :\ \pi^\theta(x,y)\neq\pi^\alpha(x,y)\ \}\neq\emptyset\ .$$

Remarque 1.5.5 *L'Hypothèse 1.5.3 permet d'obtenir des résultats asymptotiques quand $n\uparrow\infty$, en appliquant le Théorème 1.3.4. L'Hypothèse 1.5.4 garantit que la vraie valeur $\alpha\in\Theta$ est la seule limite possible pour le maximum de vraisemblance $\widehat{\theta}_n$.*

On peut alors définir l'*information de Kullback*

$$K(\theta,\alpha)=\sum_{x,y\in\mathcal{X}}\mu^\alpha(x)\,\pi^\alpha(x,y)\,\log\frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)}\ .$$

Proposition 1.5.6 *L'information de Kullback est une fonction de contraste, associée au processus $\{U_n(\theta)\,,\,n\geq 0\}$, c'est–à–dire que : $K(\alpha,\alpha)=0$, et $K(\theta,\alpha)>0$, $\forall\theta\neq\alpha$, et d'autre part*

$$U_n(\theta)\stackrel{P_\alpha-p.s.}{\longrightarrow}K(\theta,\alpha)\ .$$

Preuve Il est immédiat que $K(\alpha,\alpha)=0$. D'autre part

$$K(\theta,\alpha) \;=\; \sum_{x\in\mathcal{X}} \mu^\alpha(x) \sum_{y\in\mathcal{X}} \left[\frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)} \log \frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)} + 1 - \frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)}\right] \pi^\theta(x,y) \ ,$$

et la fonction $\xi \mapsto (\xi \ \log\xi + 1 - \xi)$ est positive et ne s'annule que pour $\xi = 1$, ce qui permet de conclure.

On remarque ensuite que

$$U_n(\theta) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \log \frac{\pi^\alpha(X_{k-1},X_k)}{\pi^\theta(X_{k-1},X_k)} \ ,$$

et on introduit la fonction

$$F(x,y) = \log \frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)} \ .$$

On a d'abord

$$[\pi^\alpha F](x) = \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^\alpha(x,y) \ \log \frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)} \ ,$$

et ensuite

$$\langle \pi^\alpha F, \mu^\alpha \rangle = \sum_{x,y\in\mathcal{X}} \mu^\alpha(x)\, \pi^\alpha(x,y) \ \log \frac{\pi^\alpha(x,y)}{\pi^\theta(x,y)} = K(\theta,\alpha) \ .$$

Il résulte alors de la loi des grands nombres (Théorème 1.3.4 (i)), que sous la probabilité P_α correspondant à la vraie valeur $\alpha \in \Theta$ du paramètre

$$U_n(\theta) \stackrel{P_\alpha - p.s.}{\longrightarrow} K(\theta,\alpha) \ .$$

□

Théorème 1.5.7 *Sous les Hypothèses 1.5.3 et 1.5.4, tout estimateur du maximum de vraisemblance $\widehat{\theta}_n$ est consistant, si $\Theta \subset \mathbb{R}^p$ est compact, et la famille $\{\theta \to \log \pi^\theta(x,y)\,,\ (x,y) \in D\}$ est équicontinue sur Θ.*

Remarque 1.5.8 *Comme l'ensemble $\mathcal{X}$ est fini, il suffit que $\theta \to \log \pi^\theta(x,y)$ soit continue sur Θ, pour tout $(x,y) \in D$.*

Preuve On montre d'abord que l'application $\theta \mapsto U_n(\theta)$ est continue sur Θ. En effet

$$\begin{aligned} U_n(\theta) - U_n(\theta') \;&=\; -\frac{1}{n}[\ell(\theta) - \ell(\theta')] \\ &=\; -\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \left[\log \pi^\theta(X_{k-1},X_k) - \log \pi^{\theta'}(X_{k-1},X_k)\right] \ , \end{aligned}$$

de sorte que

$$|U_n(\theta) - U_n(\theta')| \le \max_{(x,y)\in D} |\log \pi^\theta(x,y) - \log \pi^{\theta'}(x,y)| \ .$$

On peut également montrer de la même manière que l'application $\theta \mapsto K(\theta, \alpha)$ est continue sur Θ.

Soit $\delta > 0$ et B la boule ouverte $B(\alpha, \delta)$. D'après la Proposition 1.5.6

$$\inf_{\theta \in \Theta \setminus B} K(\theta, \alpha) = c > 0 \ . \tag{1.2}$$

Par continuité de l'application $\theta \mapsto U_n(\theta)$, il existe $\eta > 0$ tel que

$$|\theta - \theta'| < \eta \ , \quad \text{implique} \quad |U_n(\theta) - U_n(\theta')| < \tfrac{1}{2}c \ .$$

Comme l'ensemble $\Theta \setminus B$ est compact, il existe un recouvrement de cet ensemble par un nombre fini I de boules de centres $\{\theta_i \, , \, 1 \leq i \leq I\}$ et de rayons inférieurs à η.

Pour tout $\theta \in \Theta \setminus B$, il existe $1 \leq i \leq I$ tel que $|\theta - \theta_i| < \eta$, et donc

$$U_n(\theta) \geq U_n(\theta_i) - |U_n(\theta) - U_n(\theta_i)| \geq U_n(\theta_i) - \tfrac{1}{2}c \geq \min_{1 \leq i \leq I} U_n(\theta_i) - \tfrac{1}{2}c \ ,$$

de sorte que

$$\inf_{\theta \in \Theta \setminus B} U_n(\theta) \geq \min_{1 \leq i \leq I} U_n(\theta_i) - \tfrac{1}{2}c \ .$$

Par suite

$$\left\{ \widehat{\theta}_n \in \Theta \setminus B \right\} \subset \left\{ \inf_{\theta \in \Theta \setminus B} U_n < 0 \right\} \subset \left\{ \min_{1 \leq i \leq I} U_n(\theta_i) < \tfrac{1}{2}c \right\} \ .$$

Il résulte alors de la Proposition 1.5.6 que

$$P_\alpha(|\widehat{\theta}_n - \alpha| > \delta) \leq P_\alpha(\min_{1 \leq i \leq I} U_n(\theta_i) < \tfrac{1}{2}c) \xrightarrow{n \uparrow \infty} P_\alpha(\min_{1 \leq i \leq I} K(\theta_i, \alpha) < \tfrac{1}{2}c) = 0 \ ,$$

puisque, d'après (1.2)

$$\left\{ \min_{1 \leq i \leq I} K(\theta_i, \alpha) < \tfrac{1}{2}c \right\} \subset \left\{ \inf_{\theta \in \Theta \setminus B} K(\theta, \alpha) < \tfrac{1}{2}c \right\} = \emptyset \ .$$

□

Pour obtenir un résultat de vitesse de convergence, de type *normalité asymptotique* sur l'estimateur du maximum de vraisemblance $\widehat{\theta}_n$, on introduit l'hypothèse supplémentaire suivante

Hypothèse 1.5.9 (régularité)

(*i*) *Il existe un voisinage V de α dans $\Theta \subset \mathbb{R}^p$ dans lequel $\theta \to \log \pi^\theta(x, y)$ est deux fois continûment différentiable, pour tout $(x, y) \in D$.*

(*ii*) *Pour tout $x \in \mathcal{X}$, on définit la matrice d'*information de Fisher *au point α pour le modèle $\{\pi^\theta(x, y) \, , \, x \in \mathcal{X} \, , \, \theta \in \Theta\}$*

$$\begin{aligned} I^\alpha_{l,m}(x) &= \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi^\alpha(x, y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^l} \log \pi^\alpha(x, y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^m} \log \pi^\alpha(x, y) \\ &= -\sum_{y \in \mathcal{X}} \pi^\alpha(x, y) \, \frac{\partial^2}{\partial \theta^l \partial \theta^m} \log \pi^\alpha(x, y) \ , \quad 1 \leq l, m \leq p \ . \end{aligned}$$

On note

$$I^{\alpha}_{l,m} = \sum_{x\in\mathcal{X}} \mu^{\alpha}(x)\, I^{\alpha}_{l,m}(x) \ ,$$

et on suppose que la matrice I^{α} est inversible.

(*iii*) *On définit*

$$\omega(r) = \sup_{|\theta-\alpha|<r} \max_{(x,y)\in D} \Big| \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m} \log \pi^{\theta}(x,y) - \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m} \log \pi^{\alpha}(x,y) \Big| \ ,$$

et on suppose que

$$\omega(r) \stackrel{r\downarrow 0}{\longrightarrow} 0 \ ,$$

pour tout $1 \le l, m \le p$.

Remarque 1.5.10 *Sous l'Hypothèse 1.5.9, on vérifie que*

$$\sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^{\alpha}(x,y)\, \frac{\partial}{\partial\theta^l} \log \pi^{\alpha}(x,y) = \frac{\partial}{\partial\theta^l} \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^{\alpha}(x,y) = 0 \ . \tag{1.3}$$

En dérivant (1.3) par rapport à θ^m, il vient

$$\sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^{\alpha}(x,y)\, \frac{\partial}{\partial\theta^l} \log \pi^{\alpha}(x,y)\, \frac{\partial}{\partial\theta^m} \log \pi^{\alpha}(x,y)$$
$$+ \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^{\alpha}(x,y)\, \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m} \log \pi^{\alpha}(x,y) = 0 \ ,$$

d'où l'égalité entre les deux expressions données ci–dessus pour $I^{\alpha}_{l,m}$.

Théorème 1.5.11 *Sous les Hypothèses 1.5.3, 1.5.4 et 1.5.9, tout estimateur $\widehat{\theta}_n$ du maximum de vraisemblance, consistant en α, vérifie*

$$\sqrt{n}\, (\widehat{\theta}_n - \alpha) \stackrel{\mathcal{L}(P_\alpha)}{\longrightarrow} \mathcal{N}(0, [I^{\alpha}]^{-1}) \ .$$

Preuve L'idée repose sur un développement de Taylor avec reste intégral, au voisinage de la vraie valeur α

$$\begin{aligned} 0 \ = \ & \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial}{\partial\theta^l} \ell_n(\alpha) + \sum_{m=1}^{p} \sqrt{n}\, (\widehat{\theta}^m_n - \alpha^m)\, \frac{1}{n} \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\theta^m} \ell_n(\alpha) \\ & + \sum_{m=1}^{p} \sqrt{n}\, (\widehat{\theta}^m_n - \alpha^m) \\ & \quad \frac{1}{n} \int_0^1 \Big[\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m} \ell_n(\theta + \lambda(\widehat{\theta}_n - \alpha)) - \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m} \ell_n(\alpha) \Big]\, d\lambda \ . \end{aligned}$$

Il suffit alors de vérifier que

$$-\frac{1}{n}\,\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\ell_n(\alpha) \stackrel{P_\alpha-p.s.}{\longrightarrow} I^\alpha_{l,m}\ , \tag{1.4}$$

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\ell_n(\alpha) \stackrel{\mathcal{L}(P_\alpha)}{\longrightarrow} \mathcal{N}(0, I^\alpha)\ , \tag{1.5}$$

$$\left|\frac{1}{n}\int_0^1 \left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\ell_n(\theta+\lambda(\widehat{\theta}_n-\alpha)) - \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\ell_n(\alpha)\right] d\lambda\right| \le \omega(|\widehat{\theta}_n-\alpha|)\ . \tag{1.6}$$

Le démonstration de (1.6) repose sur l'Hypothèse 1.5.9 (*iii*) et ne présente pas de difficulté. Pour démontrer (1.4), on remarque que

$$\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\ell_n(\alpha) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\log\pi^\alpha(X_{k-1}, X_k)\ ,$$

et on introduit la fonction

$$F(x,y) = \frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\log\pi^\alpha(x,y)\ .$$

On a d'abord

$$[\pi^\alpha F](x) = \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^\alpha(x,y)\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\log\pi^\alpha(x,y)\ ,$$

et ensuite

$$\langle\pi^\alpha F, \mu^\alpha\rangle = \sum_{(x,y)\in D} \mu^\alpha(x)\,\pi^\alpha(x,y)\,\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\log\pi^\alpha(x,y) = -I^\alpha_{l,m}\ .$$

Il résulte alors de la loi des grands nombres (Théorème 1.3.4 (*i*)), que sous la probabilité P_α correspondant à la vraie valeur $\alpha\in\Theta$ du paramètre

$$-\frac{1}{n}\,\frac{\partial^2}{\partial\theta^l\partial\theta^m}\ell_n(\alpha) \stackrel{P_\alpha-p.s.}{\longrightarrow} I^\alpha_{l,m}\ .$$

Pour démontrer (1.5), on remarque que

$$\frac{\partial}{\partial\theta^l}\ell_n(\alpha) = \sum_{k=1}^n \frac{\partial}{\partial\theta^l}\log\pi^\alpha(X_{k-1}, X_k)\ ,$$

et on introduit la fonction

$$F^l(x,y) = \frac{\partial}{\partial\theta^l}\log\pi^\alpha(x,y)\ .$$

On a d'abord, d'après (1.3)

$$[\pi^\alpha F^l](x) = \sum_{y\in\mathcal{X}} \pi^\alpha(x,y)\,\frac{\partial}{\partial\theta^l}\log\pi^\alpha(x,y) = 0\ .$$

D'autre part

$$[\pi^\alpha F^l F^m](x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi^\alpha(x,y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^l} \log \pi^\alpha(x,y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^m} \log \pi^\alpha(x,y) \ ,$$

et ensuite

$$\begin{aligned} \langle \pi^\alpha F^l F^m, \mu^\alpha \rangle &= \sum_{(x,y) \in D} \mu^\alpha(x) \, \pi^\alpha(x,y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^l} \log \pi^\alpha(x,y) \, \frac{\partial}{\partial \theta^m} \log \pi^\alpha(x,y) \\ &= I^\alpha_{l,m} \ . \end{aligned}$$

Il résulte alors du théorème de limite centrale (Théorème 1.3.4 (*ii*)), que sous la probabilité P_α correspondant à la vraie valeur $\alpha \in \Theta$ du paramètre

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \frac{\partial}{\partial \theta} \ell_n(\alpha) \stackrel{\mathcal{L}(P_\alpha)}{\longrightarrow} \mathcal{N}(0, I^\alpha) \ .$$

□

Chapitre 2

Recuit Simulé

2.1 Problèmes d'optimisation discrète

2.1.1 Définitions

Définition 2.1.1 *On considère une fonction H définie sur un ensemble* fini $\mathcal{X}$ *à valeurs dans* $\mathbb{R}$

$$H \,:\, \mathcal{X} \to \mathbb{R} \ .$$

Le problème d'optimisation discrète consiste à calculer

$$H^* \triangleq \min_{x \in \mathcal{X}} H(x)$$

et à déterminer (au moins) une solution optimale x^*

$$H(x^*) = \min_{x \in \mathcal{X}} H(x) \ . \tag{2.1}$$

$\mathcal{X}$ est appelé ensemble des configurations*, un élément x de $\mathcal{X}$ est une* configuration*. H est appelée* fonction coût*, $H(x)$ est le coût de la configuration x, H^* est le coût optimal.*

Une solution optimale x^* du problème (2.1) est un minimum *globale* de la fonction coût H. On note $\mathcal{X}^*$ l'ensemble de ces minima

$$\mathcal{X}^* \triangleq \left\{ x^* \in \mathcal{X} \,;\, H(x^*) = \min_{x \in \mathcal{X}} H(x) \right\} \ .$$

Dans toute la suite on suppose que le problème n'est pas trivial : $\mathcal{X}^* \neq \mathcal{X}$. Dans la plupart des exemples : $|\mathcal{X}^*| \ll |\mathcal{X}|$.

Lorsque $|\mathcal{X}|$ est petit, ce problème est trivial : il suffit d'explorer *toutes* les configurations possibles x et de trouver ainsi celles de coût minimal. Mais dans les exemples qui nous intéressent ici, $|\mathcal{X}|$ est *très* grand.

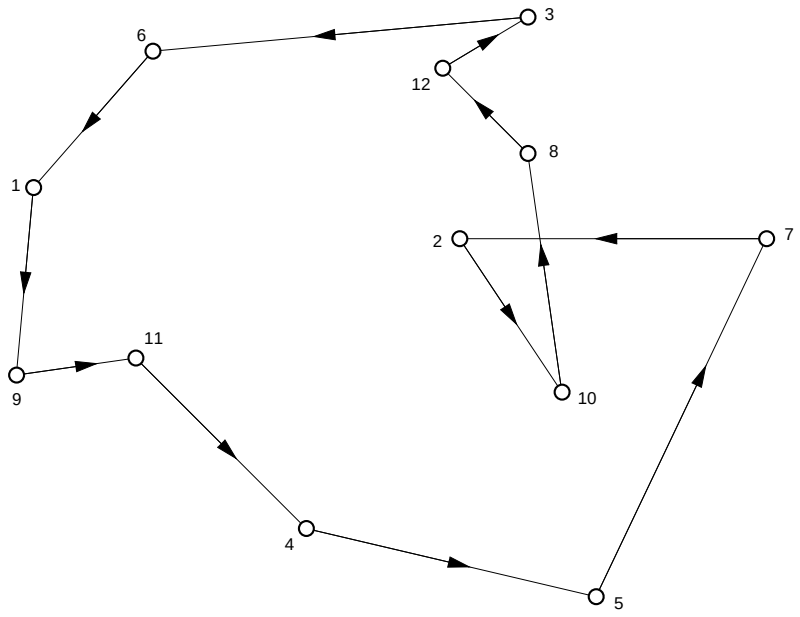


FIG. 2.1 – Une configuration pour le problème du voyageur de commerce.

2.1.2 Problème du voyageur de commerce

Un représentant en dessous féminins doit visiter N villes ; il doit passer une seule fois par chaque ville et revenir à son point de départ. Le problème est de minimiser la distance ainsi parcourue. Il existe $(N-1)!$ parcours possibles ($(N-1)!/2$ si on ne tient pas compte du sens de parcours). Par exemple, pour seulement 12 villes on obtient $(N-1)! = 39\,916\,800$ possibilités (ou $(N-1)!/2 = 19\,958\,400$).

Configurations

L'espace d'état est ici l'ensemble des parcours possibles. Un parcours va être modélisé par une permutation x de N éléments

$$x = (x(1), x(2), \ldots, x(N))$$

où

$$x(k) \text{ est la ville visitée après la ville } k$$

et

$$\forall k = 1, \ldots, N \ : \ x^l(k) \neq k \, , \ l = 1, \ldots, N-1 \text{ et } x^N(k) = k \ .$$

Fonction coût

On se donne $D = (d_{i,j})$ la matrice des distances

$$d_{i,j} \stackrel{\triangle}{=} \text{distance entre les villes } i \text{ et } j.$$

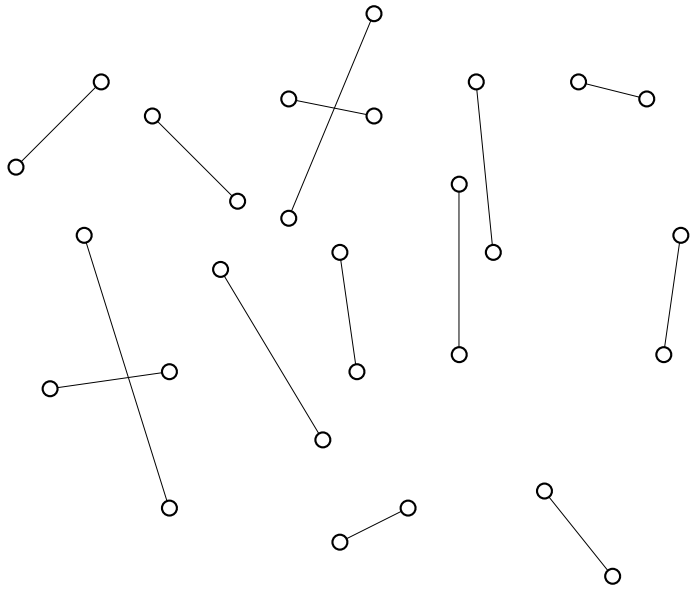


FIG. 2.2 – Une configuration pour le problème du couplage de poids minimal.

On veut donc minimiser

$$H(\pi) \triangleq \sum_{k=1}^{N} d_{k,x(k)}$$

qui représente la longueur du parcours x.

2.1.3 Problème du couplage de poids minimal

On considère un ensemble de $2N$ points dans le plan

$$\mathcal{P} \triangleq \{P(1),\, P(2), \ldots, P(2N)\} \subset \mathbb{R}^2 \ .$$

On cherche à les regrouper deux à deux de telle sorte que la somme des distances entre chaque couple soit minimale.

Configurations

On cherche donc

$$x = (x_1, \ldots, x_N)$$

tel que

$$x_k = \{P_k^1, P_k^2\} \subset \mathcal{P}$$

avec $P_k^1 \neq P_k^2$ et $P_k^i \neq P_l^i$, $k, l = 1, \ldots, N$, $l \neq k$, $i = 1, 2$. Il existe donc $(2N-1) \times (2N-3) \times \cdots \times 3 \times 1$ appariements possibles (pour $2N = 12$, on a 10 395 possibilités.

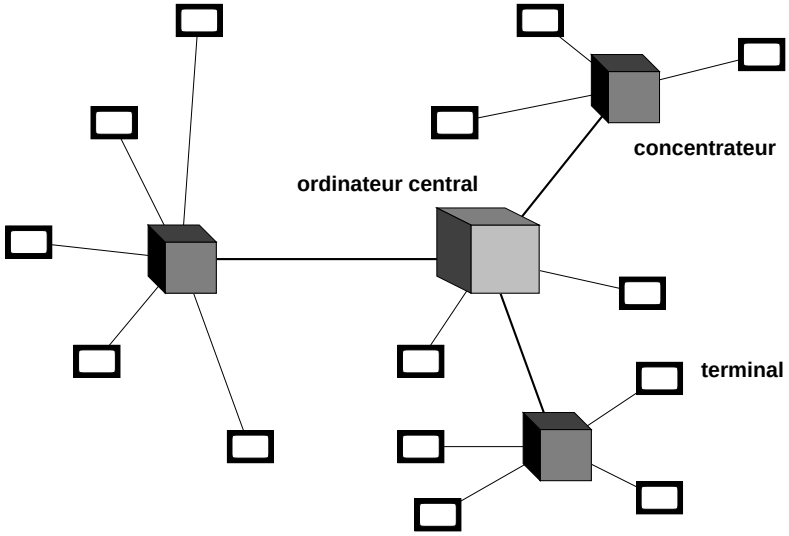


FIG. 2.3 – Une configuration pour le problème du choix de l'emplacement de concentrateurs.

Fonction coût

La fonction coût s'écrit

$$H(x) = \sum_{k=1}^{N} d(P_k^1, P_k^2) \ ,$$

où $d(P_k^1, P_k^2)$ désigne la distance entre les points P_k^1 et P_k^2.

2.1.4 Un problème de réseau

Il s'agit de relier un grand nombre de terminaux à un ordinateur central situé, par exemple, à Paris. On suppose que le coût de connexion d'un terminal est égale à la distance à l'ordinateur central. Connecter directement tous les terminaux à l'ordinateur central est trop coûteux, il faut donc utiliser un réseau en double étoile où les terminaux sont reliés au site central par l'intermédiaire de concentrateurs. On suppose qu'il y a M sites possibles pour installer des concentrateurs.

Configurations

Une configuration est une partie de l'ensemble des M sites (la partie vide est la solution qui consiste à tous les terminaux sont reliés à l'ordinateur central). On a donc 2^M possibilités.

Fonction coût

On se donne une configuration x de N concentrateurs $C_1, \ldots, C_N$.

On définit

$$\begin{array}{rl} \mathcal{C}_1(C_k) & \text{le coût d'installation et de connexion d'un concentrateur,} \\ \mathcal{C}_2(T_i, C_k) & \text{le coût de liaison du terminal } T_i \text{ au concentrateur } C_k, \\ \mathcal{C}_2(T_i, \mathcal{O}) & \text{le coût de liaison du terminal } T_i \text{ à l'ordinateur central.} \end{array}$$

Pour la configuration x, le coût de connexion du terminal T_i $(i = 1 \cdots M)$ est

$$\mathcal{C}_x(T_i) \triangleq \min \{\mathcal{C}_2(T_i, C_1), \ldots, \mathcal{C}_2(T_i, C_N), \mathcal{C}_2(T_i, \mathcal{O})\} \ .$$

Le coût de la configuration x est égal au coût de connexion des terminaux et au coût de connexion et installation des concentrateurs, donc

$$H(x) \triangleq \sum_{i=1}^{M} \mathcal{C}_x(T_i) + \sum_{k=1}^{N} \mathcal{C}_1(C_k) \ .$$

2.2 Algorithme de recherche locale

Pour résoudre un problème d'optimisation $(\mathcal{X}, H)$, on peut évaluer le coût $H(x)$ de toutes les configurations $x \in \mathcal{X}$. Cette approche est impraticable pour les problèmes qui nous intéressent. Une méthode (sous–optimale) consiste à partir d'une configuration initiale donnée et à regarder parmi les configurations "voisines" laquelle est de moindre coût. En itérant ce procédé, on construit une suite de configurations de coûts décroissants. Avant de décrire en détail cet algorithme, il faut préciser la notion de "voisinage".

Définition 2.2.1 *Soit $(\mathcal{X}, H)$ un problème d'optimisation. Un* système de voisinage *est une application*

$$\mathcal{V} \ : \ \mathcal{X} \to \mathcal{P}(\mathcal{X}) \ ,$$

telle que

$$y \in \mathcal{V}(x) \Longleftrightarrow x \in \mathcal{V}(y) \ .$$

A une configuration $x \in \mathcal{X}$, l'application $\mathcal{V}$ associe un ensemble de configurations $\mathcal{V}(x) \subset \mathcal{X}$ dites voisines *de x. Si $y \in \mathcal{V}(x)$, alors x et y sont des configurations voisines.*

Dans la Figure 2.4 on représente le graphe de voisinage : une connexion entre deux configurations signifie qu'elles sont voisines. De plus les configurations représentées par coût croissant (bas→haut).

L'algorithme est donc évident (voir les Figures 2.6 et 2.5) : partant d'une configuration initiale x on cherche dans $\mathcal{V}(x)$ une configuration de coût strictement inférieur à $H(x)$. Si, après plusieurs itérations, il est impossible de trouver une configuration meilleure, on dit que l'algorithme a convergé. Il est clair que la solution obtenue est sous–optimale au sens suivant

Définition 2.2.2 *Soit $(\mathcal{X}, H)$ un problème d'optimisation et $\mathcal{V}$ un système de voisinage associé. $x^* \in \mathcal{X}$ est une* configuration localement optimale *(ou un optimum local, ou minimum local) si*

$$H(x^*) \leq H(x) \ , \ \forall x \in \mathcal{V}(x) \ .$$

On note $\mathcal{X}^*_{loc}$ l'ensemble des configurations localement optimales.

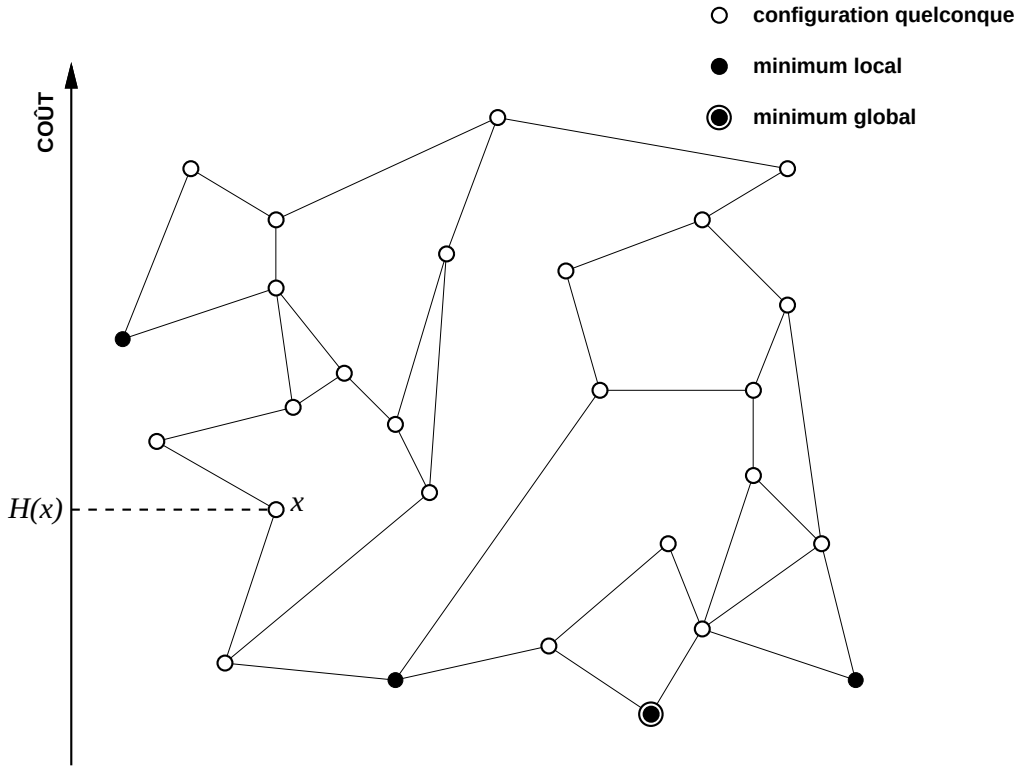


FIG. 2.4 – Graphe de voisinage.

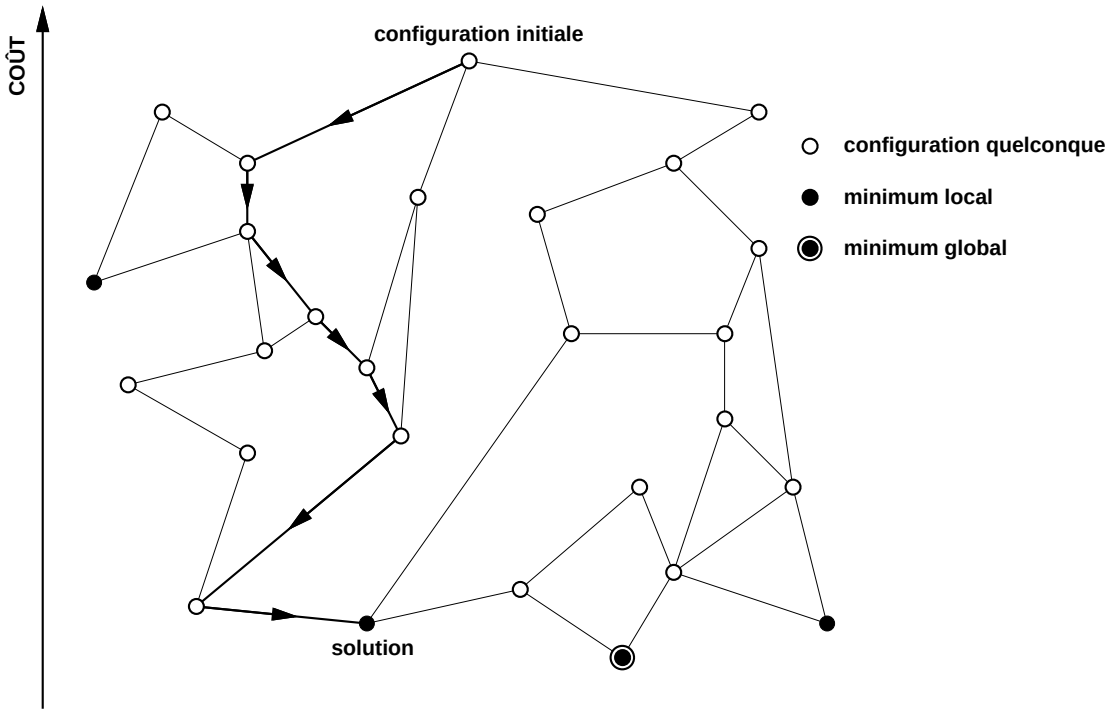


FIG. 2.5 – Algorithme de recherche locale.

La notion de *localité* est relative à un système de voisinage, mais une configuration optimale est localement optimale par rapport à tout système de voisinage.

Exemple 2.2.3 (Le voyageur de commerce – suite) *Partant d'une configuration donnée (i.e. un parcours) on construit des configurations voisines en intervertissant l'ordre de parcours de deux villes. Si dans la configuration initiale on visite la ville i à la position p et la ville j à la position q, dans la configuration voisine on visite la ville i à la position q et la ville j à la position p.*

Exemple 2.2.4 (Couplage de poids minimal – suite) *Partant d'une configuration initiale où les points A_1, B_1 d'une part et les points A_2, B_2 d'autre part sont reliés par des segments, on construit une configuration voisine en reliant les points A_1, B_2 d'une part et les points A_1, B_2 d'autre part.*

Exemple 2.2.5 (Le problème de réseau – suite) *Partant d'une configuration donnée, on construit une configuration voisine en effectuant une des 3 opérations suivantes :*

- *ajout d'un nouveau concentrateur sur un site libre,*
- *suppression d'un concentrateur,*
- *déplacement d'un concentrateur (i.e. la combinaison des 2 premières transformations).*

`recherche_locale`$[\mathcal{X}, H, \mathcal{V}]$: *détermine une configuration localement optimale d'un problème d'optimisation* $(\mathcal{X}, H)$ *pour un système de voisinage* $\mathcal{V}$.

```
procédure recherche_locale[X, H, V]
début
    Initialisation :
        x ← tirage[X]
        V ← V(x) \ {x}

    Itérations :
        jusqu'à V = ∅ faire
            génération
                y ← tirage[V]
            critère d'acceptation
                si H(y) < H(x) alors
                    x ← y
                    V ← V(x) \ {x}
                sinon
                    V ← V \ {y}
                fin_si
        fin_faire
    solution ← x
fin
```

`tirage`$[\mathcal{S}]$: *génére une configuration* x *dans l'ensemble* $\mathcal{S}$*, le plus souvent à l'aide d'un algorithme de tirage aléatoire. On peut, par exemple, utiliser une loi uniforme :*

```
procédure tirage[S = {x_1, ..., x_n}]
début
    u ← loi_uniforme[0, 1]
    i ← partie_entière[n × u]
    solution ← x_i
fin
```

FIG. 2.6 – Procédure de recherche d'une configuration localement optimale.

2.3 Mesure de Gibbs

Définition 2.3.1 *La* mesure de Gibbs $G_T(x)$ *sur* $\mathcal{X}$ *est définie par*

$$G_T(x) \triangleq \frac{1}{Z_T} \exp\left(-\frac{H(x)}{T}\right) \quad , \quad x \in \mathcal{X} \ , \tag{2.2}$$

où Z_T *est la* fonction de partition

$$Z_T \triangleq \sum_{x \in \mathcal{X}} \exp\left(-\frac{H(x)}{T}\right) \ . \tag{2.3}$$

Définition 2.3.2 *Soit* P *une mesure de probabilité sur* $(\mathcal{X}, \mathcal{P}(\mathcal{X}))$, l'entropie *de* P *est définie par*

$$\mathcal{H}(P) \triangleq -\sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log(P(x)) \ .$$

On note $\mathcal{E}(T) = \mathcal{H}(G_T)$ *l'entropie de la mesure de Gibbs à température* T.

Proposition 2.3.3 *On note* $\mathcal{M}_\rho$ *l'ensemble des mesures de probabilité* P *sur* $(\mathcal{X}, \mathcal{P}(\mathcal{X}))$ *telles que l'énergie moyenne associée soit* ρ, *c'est à dire telles que*

$$\sum_{x \in \mathcal{X}} H(x)\, P(x) = \rho \ . \tag{2.4}$$

Alors, au sein de la classe $\mathcal{M}_\rho$, *la mesure* P *qui maximise l'entropie* $\mathcal{H}(P)$ *est la mesure de Gibbs* G_T, *où la température* T *est déterminée par (2.4).*

Preuve On note

$$\begin{aligned} F(P) &= \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) \log P(x) \ , \\ C_1(P) &= \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x) - 1 \ , \\ C_2(P) &= \sum_{x \in \mathcal{X}} P(x)\, H(x) - \rho \ . \end{aligned}$$

On veut donc minimiser $F(P)$ sous les contraintes $C_1(P) = C_2(P) = 0$. On utilise les multiplicateurs de Lagrange : on cherche P tel que

$$\nabla F(P) + \lambda_1 \nabla C_1(P) + \lambda_2 \nabla C_2(P) = 0 \ .$$

Comme

$$\frac{\partial F(P)}{\partial P(x)} = \log P(x) - 1 \, , \quad \frac{\partial C_1(P)}{\partial P(x)} = 1 \, , \quad \frac{\partial C_2(P)}{\partial P(x)} = H(x)$$

d'où, pour tout $x \in \mathcal{X}$, $\log P(x) - 1 + \lambda_1 + \lambda_2 H(x) = 0$, c'est à dire

$$P(x) = \exp(1 - \lambda_1) \exp(-\lambda_2 H(x)) \ .$$

La condition $C_1(P) = 0$ donne $\exp(1-\lambda_1) = [\sum_x \exp(-\lambda_2\, H(x))]^{-1}$. On pose enfin $\lambda_2 = 1/T$, on obtient $P(x) = G_T(x)$, la constante T est déterminée par la relation (2.4). $\square$

Proposition 2.3.4 *Lorsque $T \to 0$, la loi G_T se concentre sur l'ensemble des configurations optimales $\mathcal{X}^*$,*

$$\lim_{T\to 0} G_T(x) = G^*(x)\ , \quad \forall x \in \mathcal{X},$$

où G^* est la loi uniforme sur $\mathcal{X}^*$

$$G^*(x) \triangleq \mathbf{1}_{\mathcal{X}^*}(x) \times \frac{1}{|\mathcal{X}^*|}\ .$$

Preuve

$$\begin{aligned}
G_T(x) &= e^{-H(x)/T} \left[\sum_{y\in\mathcal{X}} e^{-H(y)/T}\right]^{-1} \\
&= e^{[H^*-H(x)]/T} \left[\sum_{y\in\mathcal{X}} e^{[H^*-H(y)]/T}\right]^{-1} \\
&= \mathbf{1}_{\mathcal{X}^*}(x) \times 1 \times \left[\sum_{y\in\mathcal{X}} e^{[H^*-H(y)]/T}\right]^{-1} \\
&\quad + \mathbf{1}_{\mathcal{X}\setminus\mathcal{X}^*}(x) v \times e^{[H^*-H(x)]/T} \left[\sum_{y\in\mathcal{X}} e^{[H^*-H(y)]/T}\right]^{-1} \\
&\to \mathbf{1}_{\mathcal{X}^*}(x)\, \frac{1}{|\mathcal{X}^*|} + 0
\end{aligned}$$

quand $T \to 0$ (on utilise le fait que $\lim_{x\downarrow 0} e^{c/x} = 1$ si $c = 0$, 0 si $c < 0$). $\square$

Définition 2.3.5 *Le coût moyen d'ordre k à l'équilibre est défini par*

$$\hat{H}_k(T) \triangleq \sum_{x\in\mathcal{X}} H(x)^k\, G_T(x)\ .$$

$\hat{H}_1(T)$ est sera aussi noté $\hat{H}(T)$. La variance du coût à l'équilibre est définie par

$$\sigma^2(T) \triangleq \sum_{x\in\mathcal{X}} (H(x) - \hat{H}(T))^2\, G_T(x) = (\hat{H}_1(T))^2 - \hat{H}_2(T)\ .$$

Proposition 2.3.6

$$\frac{d\hat{H}(T)}{dT} = \frac{\sigma^2(T)}{T^2}\ , \qquad \frac{d\mathcal{E}(T)}{dT} = \frac{\sigma^2(T)}{T^3}\ .$$

Preuve Ce déduit aisément des Définitions 2.3.5, 2.3.2 et de la définition de la mesure de Gibbs (2.2). □

D'une manière générale, on note $\varphi(0) = \lim_{T\downarrow 0} \varphi(T)$ et $\varphi(\infty) = \lim_{T\uparrow\infty} \varphi(T)$. En reprenant la même technique utilisée pour la preuve de la Proposition 2.3.4, on montre la proposition suivante

Proposition 2.3.7

$$\begin{aligned}
\hat{H}(\infty) &= \frac{1}{|\mathcal{X}|}\sum_{x\in\mathcal{X}} H(x) \ , & \hat{H}(0) &= H^* \ , \\
\sigma^2(\infty) &= \frac{1}{|\mathcal{X}|}\sum_{x\in\mathcal{X}} (H(x)-\hat{H}(\infty))^2 \ , & \sigma^2(0) &= 0 \ , \\
\mathcal{E}(\infty) &= \log|\mathcal{X}| \ , & \mathcal{E}(0) &= \log|\mathcal{X}^*| \ .
\end{aligned}$$

Proposition 2.3.8 *On suppose que $\mathcal{X}^* \neq \mathcal{X}$.*

(i) pour $x \in \mathcal{X}^*$

$$\frac{\partial}{\partial T} G_T(x) < 0 \ ,$$

(ii) pour $x \notin \mathcal{X}^*$ avec $H(x) \geq \hat{H}(\infty)$

$$\frac{\partial}{\partial T} G_T(x) > 0 \ ,$$

(iii) pour $x \notin \mathcal{X}^*$ avec $H(x) < \hat{H}(\infty)$, il existe $T_x > 0$ tel que

$$\frac{\partial}{\partial T} G_T(x) \begin{cases} > & 0 \quad si\ T < T_x \ , \\ = & 0 \quad si\ T = T_x \ , \\ < & 0 \quad si\ T > T_x \ . \end{cases}$$

Preuve D'après (2.3)

$$\frac{\partial}{\partial T} Z_T = \sum_{x\in\mathcal{X}} \frac{H(x)}{T^2} \exp\left(-\frac{H(x)}{T}\right) \ ,$$

donc

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial T} G_T(x) &= \frac{\partial}{\partial T} \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \\
&= \frac{H(x)}{T^2} \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} - \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T^2} \frac{\partial}{\partial T} Z_T \\
&= \frac{G_T(x)}{T^2} H(x) - \frac{G_T(x)}{T^2} \frac{1}{Z_T} \sum_{x\in\mathcal{X}} H(x)\, e^{-H(x)/T} \\
&= \frac{G_T(x)}{T^2} \left[H(x) - \hat{H}(T)\right] \ .
\end{aligned}$$

Le signe de $\partial G_T(x)/\partial T$ dépend donc du signe de $H(x) - \hat{H}(T)$. D'après les Propositions 2.3.7 et 2.3.6, $\hat{H}(T)$ croit strictement (à condition que $\mathcal{X}^* \neq \mathcal{X}$) de H^* à $\hat{H}(\infty)$ quand $T \uparrow \infty$.

Donc, pour $x \in \mathcal{X}^*$: $H(x) < \hat{H}(T)$, ce qui montre (i).

Dans le cas $x \notin \mathcal{X}^*$: si $H(x) \geq \hat{H}(\infty)$ alors $\partial G_T(x)/\partial T > 0$; si $H(x) < \hat{H}(\infty)$ alors il existe une température $T_x > 0$ à laquelle $H(x) - \hat{H}(T)$ change de signe, ce qui montre (ii) et (iii). □

2.4 Dynamique de Metropolis

L'inconvénient de l'algorithme de recherche local est de se laisser "piéger" par les minimums locaux : un fois une configuration localement optimale atteinte, l'algorithme de recherche local a convergé. Un idée consiste donc à autoriser — sous certaines conditions — l'algorithme à choisir une configuration de coût plus élevé.

On considère $(\mathcal{X}, H)$ un problème d'optimisation. Partant d'une configuration $X_n = x$, étant donnée une configuration voisine $y \in \mathcal{V}(x)$, la prochaine configuration X_{n+1} sera choisi de la manière suivante : si $H(y) \leq H(x)$ alors on accepte la nouvelle configuration $X_{n+1} = y$; si $H(y) > H(x)$ on accepte cette nouvelle configuration avec une probabilité $\exp(-[H(y) - H(x)]/T)$ où $T > 0$ est un paramètre de contrôle. Donc — contrairement à l'algorithme de recherche locale — on peut accepter une configuration de coût plus élevée avec une certaine probabilité ; celle–ci est grande lorsque le paramètre T est grand, petite dans le cas contraire. Pour $T = 0$ on retrouve une méthode de recherche locale.
Un itération de cet algorithme se décompose en deux étapes

(i) choix d'une configuration voisine,

(ii) application d'un critère de sélection.

Définition 2.4.1 (Dynamique de Metropolis) *On construit une suite*

$$X_0,\ X_1, \ldots, X_n, \ldots$$

de variables aléatoires à valeurs dans $\mathcal{X}$ (des configuration aléatoires) en deux étapes

Phase d'exploration *On tire une configuration aléatoire Y_n telle que*

$$P(Y_n = y | X_0, \ldots, X_n) = q(X_n, y) \ ,$$

où $Q = [q(x,y)\,;\, x, y \in \mathcal{X}]$ est une matrice de Markov symétrique arbitraire appelée matrice d'exploration.

Phase de sélection *On accepte Y_n comme nouvelle configuration avec probabilité $p_T(X_n, Y_n)$ avec*

$$p_T(x,y) \triangleq \exp\left(-\frac{[H(y) - H(x)]^+}{T}\right) \ , \tag{2.5}$$

c'est à dire

$$\begin{aligned} P(X_{n+1} = Y_n | X_0, \ldots, X_n, Y_n) &= p_T(X_n, Y_n) \ , \\ P(X_{n+1} = X_n | X_0, \ldots, X_n, Y_n) &= 1 - p_T(X_n, Y_n) \ . \end{aligned}$$

Les deux étapes se font de manière indépendante.

L'algorithme peut donc se décrire sans faire référence à un système de voisinage sur $\mathcal{X}$. Toutefois, c'est dans le choix de la matrice Q qu'intervient le système de voisinage comme le montre l'exemple ci–dessous.

Exemple 2.4.2 *On considère un système de voisinage $\mathcal{V}$ sur $\mathcal{X}$, un choix possible de matrice Q est donné par*

$$q(x,y) = \frac{1}{|\mathcal{V}(x)|}\,\mathbf{1}_{\mathcal{V}(x)}(y) \ .$$

Proposition 2.4.3 *Le processus X_n est une chaîne de Markov sur l'espace des configurations $\mathcal{X}$, de matrice de transition $\Pi = [\pi(x,y)\,;\,x,y \in \mathcal{X}]$*

$$\pi(x,y) \stackrel{\triangle}{=} P(X_{n+1} = y | X_n = x) \ ,$$

donnée par

$$\pi(x,y) \stackrel{\triangle}{=} \begin{cases} q(x,y)\,p_T(x,y) \ , & si\ x \neq y \ , \\ 1 - \displaystyle\sum_{z \neq x} \pi(x,z) \ , & si\ x = y \ . \end{cases}$$

Hypothèse 2.4.4 *On suppose que la matrice Q est symétrique et fait communiquer toutes les configurations entre elles en temps fini : pour tout $x, y \in \mathcal{X}$, il existe $m \in \mathbb{N}$ et $x_0, \ldots, x_m \in \mathcal{X}$ tels que*

$$x_0 = x,\ x_m = y \ et\ q(x_0,x_1) \times q(x_1,x_2) \times \cdots \times q(x_{m-1},x_m) > 0 \ .$$

En d'autres termes : pour tout $x, y \in \mathcal{X}$, il existe $m \in \mathbb{N}$ tel que

$$[Q^m](x,y) > 0 \ .$$

Proposition 2.4.5 *Sous l'Hypothèse 2.4.4, la chaîne de Markov X_n admet la mesure de Gibbs $G_T(x)$ comme unique mesure invariante :*

$$\lim_{n\to\infty} P(X_n = x) = G_T(x) \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ .$$

Preuve L'Hypothèse 2.4.4 implique que la chaîne X_n fait communiquer deux à deux tous les éléments de $\mathcal{X}$. La chaîne X_n est donc irréductible et récurrente, elle admet donc une unique mesure invariante solution de

$$\mu(x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi(y,x)\,\mu(y) \ , \quad \forall x \in \mathcal{X} \ . \tag{2.6}$$

Il suffit donc de vérifier que la mesure de Gibbs (2.2) est solution de l'équation (2.6). Soit $x \in \mathcal{X}$ fixé, on considère

$$\begin{aligned}
\sum_{y\in\mathcal{X}} \pi(y,x)\, G_T(y) &= \sum_{y\neq x} q(y,x)\, e^{-[H(x)-H(y)]^+/T}\, \frac{e^{-H(y)/T}}{Z_T} \\
&\quad + \left(1 - \sum_{y\neq x} \pi(x,y)\right) \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \\
&= \sum_{y\neq x} q(y,x)\, e^{-[H(x)-H(y)]^+/T}\, \frac{e^{-H(y)/T}}{Z_T} \\
&\quad + \left(q(x,x) + \sum_{y\neq x} q(x,y)\, \left(1 - e^{-[H(y)-H(x)]^+/T}\right)\right) \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \ .
\end{aligned}$$

Posons

$$A_x \triangleq \{y \in \mathcal{X}; H(y) \leq H(x)\} \ , \qquad B_x \triangleq \mathcal{X} \setminus A_x = \{y \in \mathcal{X}; H(y) > H(x)\} \ ,$$

on a

$$\begin{aligned}
\sum_{y\in\mathcal{X}} \pi(y,x)\, G_T(y) &= \sum_{y\neq x, y\in A_x} q(y,x)\, \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} + \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(y,x)\, \frac{e^{-H(y)/T}}{Z_T} \\
&\quad + q(x,x)\, \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \\
&\quad + \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(x,y)\, \left(1 - e^{-[H(y)-H(x)]^+/T}\right) \\
&= \sum_{y\neq x, y\in A_x} q(y,x)\, \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} + \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(y,x)\, \frac{e^{-H(y)/T}}{Z_T} \\
&\quad + q(x,x)\, \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} + \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(x,y) \\
&\quad - \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(x,y)\, \frac{e^{-H(y)/T}}{Z_T} \ .
\end{aligned}$$

Comme Q est symétrique,

$$\begin{aligned}
\sum_{y\in\mathcal{X}} \pi(y,x)\, G_T(y) &= \left(\sum_{y\neq x, y\in A_x} q(x,y) + q(x,x) + \sum_{y\neq x, y\in B_x} q(x,y)\right) \frac{e^{-H(x)/T}}{Z_T} \\
&= G_T(x) \ .
\end{aligned}$$

□

La Proposition 2.3.4 justifie l'intérêt de l'algorithme de Metropolis : pour T *suffisamment* petit, et n *suffisamment* grand, la loi de X_n sera *proche* de loi uniforme sur l'ensemble des configurations optimales.

```
metropolis[x_new, x_old, 𝒳, H, 𝒱, T] : Dynamique de Metropolis
(𝒳, H) un problème d'optimisation discrète, 𝒱 un système de voisinage. A
température T fixée et à partir d'une configuration x_old donnée, détermine
une nouvelle configuration x_new.

procédure metropolis[x_new, x_old, 𝒳, H, 𝒱, T]
début
   génération
      y ← tirage[𝒱(x_old)]
   critère d'acceptation
      u ← loi_uniforme[0, 1]
      si exp[−(H(y) − H(x_old))^+/T] ≥ u alors
         x_new ← y
      sinon
         x_new ← x_old
      fin_si
fin
```

FIG. 2.7 – Dynamique de Metropolis (température T fixée). Pour matrice d'exploration Q on utilise celle de l'Exemple 2.4.2.

Une méthode consiste donc à partir avec T suffisamment grand, puis à effectuer un certain nombre d'itérations à température fixée. Quand l'algorithme a convergé, on se fixe une nouvelle température, inférieure à la précédente et ainsi de suite. On obtient ainsi l'algorithme de recuit simulé.

2.5 Algorithme de recuit simulé

D'après les Propositions 2.4.5 et 2.3.4, on a

$$\lim_{T\to 0}\lim_{n\to\infty} P_T(X_n \in \mathcal{X}^*) = 1 \ ,$$

où $P_T(X_n \in \mathcal{X}^*)$ signifie que la chaîne est générée à température T fixée. On peut donc essayer de trouver une suite de températures T_n, strictement décroissante vers 0, telle que

$$\lim_{n\to\infty} P(X_n \in \mathcal{X}^*) = 1 \ , \tag{2.7}$$

ou, en d'autres termes, que X_n converge en loi vers G^*, la loi uniforme sur $\mathcal{X}^*$:

$$\lim_{n\to\infty} P(X_n = x) = G^*(x) \ .$$

2.5.1 L'Algorithme

On se donne une suite $T_n \downarrow 0$, on construit une chaîne de Markov non–homogène X_n de matrice de transition $\Pi_n = [\pi_n(x,y)\,;\, x,y \in \mathcal{X}]$

$$\pi_n(x,y) \triangleq P(X_{n+1} = y | X_n = x) \ ,$$

donnée par (voir Définition 2.4.1)

$$\pi_n(x,y) \triangleq \begin{cases} q(x,y)\, p_{T_n}(x,y) \ , & \text{si } x \neq y \ , \\ 1 - \displaystyle\sum_{z \neq x} \pi_n(x,z) \ , & \text{si } x = y \ . \end{cases}$$

2.5.2 Convergence en loi

On se donne une suite de températures constante par morceaux, chaque plage de température constante étant de longueur L donnée

$$T_n = \bar{T}_l \ , \quad lL < n \leq (l+1)L \ ,$$

avec $\bar{T}_l \downarrow 0$ lorsque $l \to \infty$.

Pour simplifier les démonstrations, on suppose que $|\mathcal{V}(x)|$ ne dépend pas de x

$$N_{\mathcal{V}} \triangleq |\mathcal{V}(x)| \ , \ \forall x \in \mathcal{X} \ ,$$

et que la matrice Q est donnée par

$$q(x,y) = \frac{1}{N_{\mathcal{V}}} \mathbf{1}_{\mathcal{V}(x)}(y) \ .$$

Sous certaines conditions de vitesse de convergence de $\bar{T}_l$ vers 0 et sur la longueur L, nous allons montrer que la chaîne de Markov X_n de l'algorithme de recuit converge en loi vers G^* (la loi uniforme sur $\mathcal{X}^*$)

Définition 2.5.1 *Soient $x, y \in \mathcal{X}$, $x \neq y$, on définit le nombre minimal de transitions nécessaires pour aller de x à y par*

$$N(x,y) \triangleq \min\{n \geq 1\,;\, [Q^n](x,y) > 0\} \ .$$

D'après l'Hypothèse 2.4.4, $N(x,y) < \infty$. On définit aussi le nombre minimal de transitions nécessaires pour atteindre $\mathcal{X}^*$ partant de x

$$N(x) \triangleq \min_{y \in \mathcal{X}^*} N(x,y) \ .$$

Théorème 2.5.2 *Soit X_n la chaîne de Markov de l'algorithme de recuit simulé. Supposons que*

(*i*) *l'Hypothèse 2.4.4 vérifiée,*

(*ii*) *L est le maximum du nombre minimum de transitions nécessaires pour atteindre $\mathcal{X}^*$ partant de x, pour tout $x \in \mathcal{X}$*

$$L = \max_{x \in \mathcal{X}} N(x) \ ,$$

(*iii*) *pour tout $l \geq 0$*

$$\bar{T}_l \geq \frac{(L+1)\,\Delta}{\log(l+2)} \ ,$$

où

$$\Delta \triangleq \max_{x \in \mathcal{X}} \max_{y \in \mathcal{V}(x)} [H(y) - H(x)] > 0 \ .$$

Alors

$$\lim_{n \to \infty} P(X_n \in \mathcal{X}^*) = 1 \ .$$

Lemme 2.5.3 *Sous les hypothèses du Théorème 2.5.2, la chaîne X_n du recuit simulé est faiblement ergodique.*

Preuve On utilise le critère du Théorème A.1.4. Il est clair que

$$\forall n \geq 0 \,,\ \forall x \in \mathcal{X} \,,\ \forall y \in \mathcal{V}(x) \setminus x \ : \quad \pi_n(x,y) \geq \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\, e^{-\Delta/T_n} \ , \tag{2.8}$$

puisque pour $y \in \mathcal{V}(x)$: $[H(y) - H(x)]^+ \leq \Delta$.

Par ailleurs, soit $\mathcal{X}_{loc}^{max}$ l'ensemble des maxima locaux (l'ensemble des x dont aucun voisin n'est de coût strictement supérieur), on peut montrer que

$$\exists n_0 \geq 0 \ : \ \forall n > n_0 \,,\ \forall x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}_{loc}^{max} \ : \quad \pi_n(x,x) \geq \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\, e^{-\Delta/T_n} \ , \tag{2.9}$$

en effet, posons

$$\delta \triangleq \min_{x \in \mathcal{X}} \min_{y \in \mathcal{V}(x)}{}^{+} [H(y) - H(x)] \ ,$$

($\min^+$ est le minimum pris sur les termes positifs uniquement), $0 < \delta \leq \Delta$. Il existe donc n_0 tel que pour tout $n \geq n_0$

$$1 - e^{-\delta/T_n} \geq e^{-\Delta/T_n} \ .$$

On considère $n \geq n_0$ et $x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}_{loc}^{max}$. Il existe $\bar{y} \in \mathcal{V}(x) \setminus x$ tel que $H(\bar{y}) > h(x)$.

$$\begin{aligned}
\pi_n(x,x) &= 1 - \sum_{y \in \mathcal{V}(x) \setminus x} \pi_n(x,y) \\
&= 1 - \sum_{y \in \mathcal{V}(x) \setminus x} \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\, e^{-[H(y)-H(x)]^+/T_n} \\
&= 1 - \frac{1}{N_{\mathcal{V}}} \left(\sum_{y \in \mathcal{V}(x) \setminus \{x, \bar{y}\}} e^{-[H(y)-H(x)]^+/T_n} + e^{-[H(\bar{y})-H(x)]/T_n} \right)
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&\geq 1 - \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\left[N_{\mathcal{V}} - 1 + e^{-\delta/T_n}\right] \\
&= \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\left[1 - e^{-\delta/T_n}\right] \\
&\geq \frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\, e^{-\Delta/T_n} \ .
\end{aligned}
$$

Ce qui prouve (2.9).

On se fixe $x^* \in \mathcal{X}^* \setminus \mathcal{X}_{loc}^{max}$, on définit alors $\tilde{x} \in \mathcal{X}$ tel que

$$
\pi_{n,n+L}(\tilde{x}, x^*) = \min_{y \in \mathcal{X}} \pi_{n,n+L}(y, x^*) \ .
$$

On a

$$
\begin{aligned}
\min_{y \in \mathcal{X}} \pi_{n,n+L}(y, x^*) &= P(X_{n+L} = x^* | X_{n-1} = \tilde{x}) \\
&= \sum_{x_1 \in \mathcal{X}} \pi_n(\tilde{x}, x_1)\, P(X_{n+L} = x^* | X_n = x_1) \\
&= \sum_{x_1 \in \mathcal{X}} \sum_{x_2 \in \mathcal{X}} \cdots \sum_{x_L \in \mathcal{X}} \pi_n(\tilde{x}, x_1)\, \pi_{n+1}(x_1, x_2) \cdots \pi_{n+L}(x_L, x^*) \ .
\end{aligned}
$$

Sous l'hypothèse (ii) du Théorème 2.5.2, on a, pour tout $n \geq n_0$: on peut trouver une suite de configurations $y_0, y_1, \ldots, y_{L+1}$ telle que $y_0 = \tilde{x}$, $y_{L+1} = x^*$, $y_{i+1} \in \mathcal{V}(y_i)$ pour $0 \leq i \leq I$ et $y_{i+1} = y_i = x^*$ pour $I + 1 \leq i \leq L + 1$. Ainsi, avec (2.8) et (2.9), on obtient

$$
\min_{y \in \mathcal{X}} \pi_{n,n+L}(y, x^*) \geq \pi_n(\tilde{x}, y_1)\, \pi_{n+1}(y_1, y_2) \cdots \pi_{n+L}(y_L, x^*) \geq \left[\frac{1}{N_{\mathcal{V}}}\, e^{-\Delta/T_n}\right]^{L+1} \ .
$$

Donc, pour tout $n \geq n_0$

$$
\begin{aligned}
1 - \tau(\Pi_{n,n+L}) &= \min_{x,y \in \mathcal{X}} \sum_{z \in \mathcal{X}} \pi_{n,n+L}(x, z) \wedge \pi_{n,n+L}(y, z) \\
&\geq \min_{x,y \in \mathcal{X}} \left[\pi_{n,n+L}(x, x^*) \wedge \pi_{n,n+L}(y, x^*)\right] \\
&= \min_{x \in \mathcal{X}} \pi_{n,n+L}(x, x^*) \\
&\geq (N_{\mathcal{V}})^{-L-1} e^{-(L+1)\Delta/T_n} \ .
\end{aligned}
$$

Donc en prenant $n_l = lL$, on obtient

$$
\begin{aligned}
\sum_{l=1}^{\infty} [1 - \tau(\Pi_{n_l, n_{l+1}})] &\geq \sum_{l=n_0}^{\infty} [1 - \tau(\Pi_{lL, lL+L})] \\
&\geq \sum_{l=n_0}^{\infty} (N_{\mathcal{V}})^{-L-1} e^{-(L+1)\Delta/\bar{T}_l} \\
&\geq \sum_{l=n_0}^{\infty} (N_{\mathcal{V}})^{-L-1} (l+2)^{-1} = \infty \ .
\end{aligned}
$$

Le lemme est donc démontré à l'aide du Théorème A.1.4. $\square$

Preuve du Théorème 2.5.2 On démontre les points (i), (ii), (iii) du Théorème A.1.5. Le lemme précédent établit (i). L'hypothèse (i) du Théorème 2.5.2 implique (ii), donc pour tout n la mesure invariante de Π_n est la mesure de Gibbs G_{T_n}.

On montre maintenant (iii) : d'après la Proposition 2.3.8, on a

$$\forall n\,,\ \forall x \in \mathcal{X}^*\ , \quad G_{T_{n+1}}(x) - G_{T_n}(x) \geq 0$$

et

$$\exists n_1\,,\ \forall n > n_1\,,\ \forall x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}^*\ :\ G_{T_{n+1}}(x) - G_{T_n}(x) \leq 0\ .$$

Ainsi, pour $n > n_1$

$$\|G_{T_n} - G_{T_{n+1}}\| = \sum_{x \in \mathcal{X}*} [G_{T_{n+1}}(x) - G_{T_n}(x)] + \sum_{x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}*} [G_{T_n}(x) - G_{T_{n+1}}(x)]$$

mais $\sum_{x \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{X}*} G_T(x) = 1 - \sum_{x \in \mathcal{X}*} G_T(x)$, donc

$$\|G_{T_n} - G_{T_{n+1}}\| = 2 \left[\sum_{x \in \mathcal{X}*} G_{T_{n+1}}(x) - \sum_{x \in \mathcal{X}*} G_{T_n}(x) \right]\ .$$

D'où

$$\sum_{n > n_1} \|G_{T_n} - G_{T_{n+1}}\| = 2 \left[\sum_{x \in \mathcal{X}*} G_{T_\infty}(x) - \sum_{x \in \mathcal{X}*} G_{T_{n_1+1}}(x) \right] \leq 2\ .$$

On en déduit que le somme $\sum_{n \geq 0} \|G_{T_n} - G_{T_{n+1}}\|$ est finie, ce qui achève la preuve du théorème. □

2.5.3 Autres résultats

On peut établir une condition nécessaire est suffisante de convergence en loi. On introduit pour cela quelques définitions (cf. Figure 2.8).

Définition 2.5.4 *Deux configurations* $x, y \in \mathcal{X}$ communiquent au niveau h *si*

- $x = y$ *et* $H(x) \leq h$,

ou si

- *il existe* $k \geq 2$ *et* $x_1, \ldots, x_k \in \mathcal{X}$ *tels que* $x_1 = x$, $x_k = y$ *et*

$$H(x_j) \leq h\,,\ x_{j+1} \in V(x_j)\,,\ j = 1 \cdots k\ .$$

Définition 2.5.5 *Soit* $x \in \mathcal{X}^*_{loc}$ *(une configuration localement optimale). La* profondeur d_x *est le plus petit réel* $D > 0$ *tel qu'il existe* $y \in \mathcal{X}$ *vérifiant :*

- x *et* y *communiquent au niveau* $H(x) + D$,
- $H(y) < H(x)$.

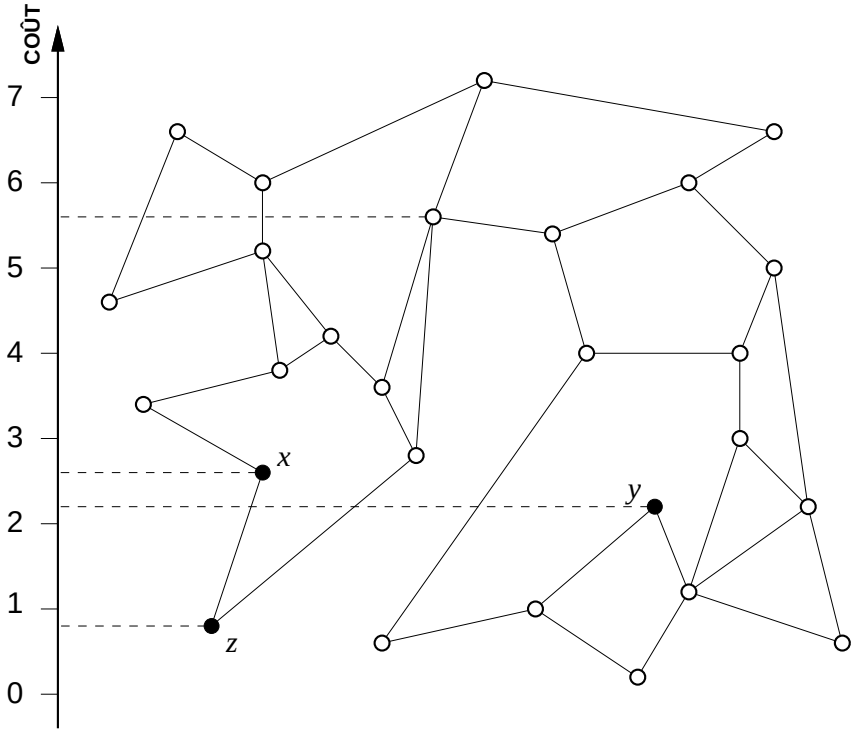


FIG. 2.8 – Les configurations x et y communiquent au niveau 5.6 ; la profondeur de la configuration localement optimale (minimum local) z est $d_z = 4.8$.

Et on pose $d_x = +\infty$ *si* $x \in \mathcal{X}^*$.

Théorème 2.5.6 (Hajek [2]) *La convergence*

$$P(X_n \in \mathcal{X}^*) \to 1$$

a lieu si et seulement si

$$\sum_{n=0}^{\infty} \exp\left(-\frac{D}{T_n}\right) = +\infty \ ,$$

où

$$D \triangleq \sup(d_x \, ; \, x \in \mathcal{X}^*_{loc} \setminus \mathcal{X}^*) \ .$$

2.6 Mise en œuvre pratique

2.6.1 Statistiques empiriques

Supposons que l'on génère L variables $X_0, \ldots, X_{L-1}$ suivant la dynamique de Metropolis à une température T donnée. On définit

- *le taux d'acceptation* par

$$\chi(T) \triangleq \frac{\text{nombre de transitions acceptées}}{\text{nombre de transitions proposées}} \ , \tag{2.10}$$

- *le coût moyen empirique*

$$\bar{H}(T) \triangleq \frac{1}{L} \sum_{n=0}^{L-1} H(X_n) \simeq \hat{H}(T) \ , \tag{2.11}$$

- *l'écart type empirique du coût*

$$\bar{\sigma}(T) \triangleq \left(\frac{1}{L} \sum_{n=0}^{L-1} (H(X_n) - \bar{H}(T))^2 \right)^{1/2} \simeq \sigma(T) \ . \tag{2.12}$$

2.6.2 Protocole de refroidissement

Définition 2.6.1 *Un* protocole de refroidissement *est une suite finie de températures, décroissante par palier. Au palier* m *(*$0 \leq m \leq M$*) on associe une température* $\bar{T}_m$ *et une longueur de palier* L_m*. On suppose donc que*

$$\bar{T}_0 > \bar{T}_1 > \cdots > \bar{T}_M > 0$$

et que $L_m > 0$*. La suite de températures* T_n *pour l'algorithme de recuit simulé est donc donnée par*

$$T_n = \bar{T}_m \ , \quad \text{si } K_m \leq n < K_{m+1}$$

avec $K_m = K_{m-1} + L_{m-1}$*,* $K_0 = 0$ *(cf. Figure 2.9).*

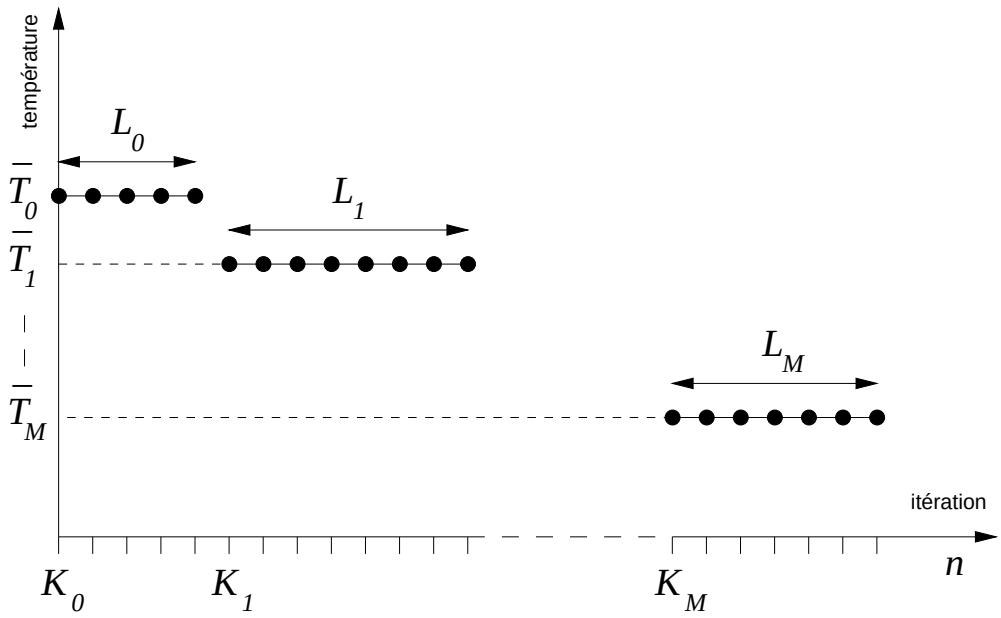


FIG. 2.9 – Protocole de refroidissement.

Exemple 2.6.2

Température initiale *On veut que, dans les premières itérations, l'algorithme accepte presque toutes les transitions proposées :* $\chi(\bar{T}_0) \simeq 1$. *Pour cela on fait* M *transitions à température* T *donnée et on calcule* $\chi(T)$ *à l'aide de (2.10). Si* $\chi(T) \ll 1$, *on augmente la température (par exemple :* $T \leftarrow CT$ *avec* $C > 1$*) pour ensuite simuler à nouveau* M *transitions jusqu'à ce que* $\chi(T) \simeq 1$. *Cette température est alors utilisée comme température initiale de l'algorithme.*

Vitesse de refroidissement *On peut prendre une vitesse de refroidissement de la forme* $\bar{T}_{m+1} = \alpha \bar{T}_m$ *avec* $\alpha < 1$ *(typiquement* $0.8 \leq \alpha \leq 0.99$*).*

Test d'arrêt *On considère que l'algorithme a convergé lorsque que le coût obtenu à différents paliers de température successifs n'évolue presque plus.*

Longueur des paliers de température *A chaque palier de température* $\bar{T}_m$ *on doit faire suffisamment de transitions pour établir un état d'équilibre, i.e. être proche de la loi d'équilibre* $G_{T_m}(x)$. *Donc si* $\Delta T = \bar{T}_{m+1} - \bar{T}_m$ *est petit on peut se contenter de peu de transitions (i.e.* L_m *petit), dans le cas contraire il faut faire beaucoup de transitions (i.e.* L_m *grand). En toute rigueur, il faut faire un nombre infini de transitions pour rétablir l'équilibre, il faut donc ce donner* $L_{max} < \infty$ *et imposer* $L_m \leq L_{max}$.

On présente maintenant une analyse plus fine pour le choix d'un protocole de refroidissement.

Choix de la température initiale

On génère une suite de $m+1$ configurations aléatoires

$$X_0,\, X_1, \ldots,\, X_m$$

(m nombre de transitions) à l'aide de la dynamique de Metropolis à température T fixée. On note I_1 (resp. I_2) l'ensemble des transitions i telles que $H(Y_i) \leq H(X_i)$ (resp. $H(Y_i) < H(X_i)$,

$$\begin{aligned} I_1 &\triangleq \{i = 0, \ldots, m-1 \,:\, H(Y_i) \leq H(X_i)\} \ , \\ I_2 &\triangleq \{i = 0, \ldots, m-1 \,:\, H(Y_i) > H(X_i)\} \ . \end{aligned}$$

On définit

$$\overline{\Delta H}^+ \triangleq \frac{1}{|I_2|} \sum_{i \in I_2} [H(Y_i) - H(X_i)] \ ,$$

et $m_1 = |I_1|$, $m_2 = |I_2|$ ($m = m_1 + m_2$). Un approximation de $\chi(T)$, le taux d'acceptation à température T, est donc donnée par

$$\chi = \frac{m_1 + m_2 \exp(-\overline{\Delta H}^+/T)}{m_1 + m_2}$$

ou

$$T = \frac{\overline{\Delta H}^+}{\log\left(\frac{m_2}{m_2\,\chi - m_1\,(1-\chi)}\right)} \ . \tag{2.13}$$

Cette approximation peut être utilisée de la manière suivante: On se donne χ_0 un taux d'acceptation initial recherché, par exemple $\chi_0 = 0.99$. On prend $T = 0$, on effectue m transitions, après chaque transitions on calcule la nouvelle température à l'aide de (2.13) avec $\chi = \chi_0$.

Test d'arrêt

On définit

$$\Delta H(T) \triangleq \hat{H}(T) - H^* \ .$$

On arrête l'algorithme lorsque $\Delta H(T)$ est petit comparé à $\hat{H}(T_0)$. En pratique, T_0 est choisi grand, on peut donc supposer que $\hat{H}(T_0) \simeq \hat{H}(\infty)$.

D'après la Proposition 2.3.7, $H^* = \hat{H}(0)$, donc pour T petit, l'approximation suivante est valide

$$\Delta H(T) = \hat{H}(T) - \hat{H}(0) \simeq T\,\frac{\partial \hat{H}(T)}{\partial T} \ .$$

Une approximation de $\Delta H(T)/\hat{H}(T_0)$ est donc définie par

$$\Psi(T) \triangleq \frac{T}{\hat{H}(\infty)}\,\frac{\partial \hat{H}(T)}{\partial T} \ . \tag{2.14}$$

On arrête l'algorithme au premier instant m tel que

$$\Psi(\bar{T}_m) \leq \varepsilon_{stop} \tag{2.15}$$

où $\varepsilon_{stop} > 0$ est donné a priori.

D'après la Proposition 2.3.6 et (2.12), on a

$$\frac{\partial \hat{H}(T)}{\partial T} = \frac{\sigma^2(T)}{T^2} \simeq \frac{\bar{\sigma}^2(T)}{T^2}$$

donc

$$\frac{\Delta H(T)}{\hat{H}(T_0)} \simeq \frac{\bar{\sigma}^2(T)}{T\,\hat{H}(\infty)} \ .$$

Longueur des paliers de température

Lemme 2.6.3 *Soit E un ensemble de cardinale N, la valeur moyenne de la fraction d'éléments de E sélectionnés par M tirages aléatoires indépendants d'éléments de E avec remise est équivalent à $1 - e^{-N/M}$ pour n et M grand.*

Preuve On cherche donc p la probabilité de sélectionner un élément de E avec M tirages. La probabilité de ne pas sélectionner un élément après M tirage est $(1 - 1/N)^M$. Donc

$$p = 1 - \left(\frac{N-1}{N}\right)^M \ .$$

En posant $r = M/N$ (constant) et en faisant $N, M \to \infty$ on obtient

$$p = 1 - \left(\frac{N-1}{N}\right)^{rN} \simeq 1 - e^{-r} \ .$$

□

Dans notre protocole de refroidissement on prend

$$L_m = L \equiv |\mathcal{V}(x)| \text{ (qui ne dépend pas de x)} \ .$$

Donc durant L itérations de la dynamique de Metropolis, en supposant que toutes les transitions sont rejetées, la fraction de voisins ainsi visités est approximativement $1 - e^{-}1 \sim 2/3$ (avec le lemme précédent $N = |\mathcal{V}(x)|$ et $M = L = |\mathcal{V}(x)|$. Donc après 3 paliers, approximativement toutes les configurations voisines sont visitées.

Résultat 2.6.4 (Protocole de refroidissement en temps fini)
On se donne une suite de températures

$$\bar{T}_{m+1} = \frac{\bar{T}_m}{1 + \alpha_m \bar{T}_m}$$

avec

$$\alpha_m = \frac{\log(1+\delta)}{3\,\sigma(\bar{T}_m)} \ ,$$

où $\delta > 0$ est fixé.

Soit M le premier instant tel que

$$\Psi(\bar{T}_M) \leq \varepsilon_{stop}$$

où $\varepsilon_{stop} > 0$ est donné et Ψ est défini par (2.14). Alors il existe une constante $\eta > 0$ telle que

$$M \leq \eta \log |\mathcal{X}| \ .$$

Preuve formelle On écrit d'abord M en fonction de $\bar{T}_M$. Soit $\alpha = \min_m \alpha_m$, on montre facilement par récurrence que $\bar{T}_m \leq \bar{T}_0/(1 + m\,\alpha\,\bar{T}_0)$. Donc

$$M \leq \frac{\bar{T}_0 - \bar{T}_M}{\alpha\,\bar{T}_0\,\bar{T}_M} < \frac{1}{\alpha\,\bar{T}_M} = \frac{3\,\max_m \sigma(\bar{T}_m)}{\log(1+\delta)\,\bar{T}_M} \simeq \frac{3\,\sigma(\infty)}{\log(1+\delta)\,\bar{T}_M} \ .$$

Maintenant on suppose qu'à chaque palier de température $\bar{T}_m$, l'équilibre est atteint. On peut donc utiliser les résultats du paragraphe 2.3, en particulier d'après la Proposition 2.3.6

$$\frac{d\hat{H}(T)}{dT} = T\,\frac{d\mathcal{E}(T)}{dT} \ ,$$

et que $\mathcal{E}(T)$ est croissant (avec $T \uparrow \infty$). Enfin d'après la Proposition 2.3.7, $\mathcal{E}(\infty) = \log |\mathcal{X}|$ et $\mathcal{E}(0) = \log |\mathcal{X}^*|$.

Comme $\Psi(\bar{T}_M) \leq \varepsilon_{stop}$, il existe $\varepsilon \in]0, \varepsilon_{stop}$ tel que $\Psi(\bar{T}_M) = \varepsilon$. Donc par définition de Ψ, on a

$$\varepsilon = \frac{\bar{T}_M^2}{\hat{H}(\infty)}\ \left.\frac{\partial \mathcal{E}(T)}{\partial T}\right|_{T=\bar{T}_M} \ .$$

Comme $\bar{T}_M \ll 1$, on approche $\left.\frac{\partial \mathcal{E}(T)}{\partial T}\right|_{T=\bar{T}_M}$ par $(\mathcal{E}(\bar{T}_M) - \mathcal{E}(0))/\bar{T}_M$, d'où

$$\varepsilon \simeq \frac{\bar{T}_M^2}{\hat{H}(\infty)}\,\frac{\mathcal{E}(\bar{T}_M) - \log |\mathcal{X}^*|}{\bar{T}_M} < \frac{\bar{T}_M \log |\mathcal{X}|}{\hat{H}(\infty)} \ .$$

Finalement, $\bar{T}_M > \hat{H}(\infty)\,\varepsilon / \log |\mathcal{X}|$ et

$$M < \frac{1}{\alpha\,\bar{T}_M} < \frac{\log |\mathcal{X}|}{\alpha\,\hat{H}(\infty)\,\varepsilon} \ .$$

□

Remarque 2.6.5 *A l'aide du résultat précédent, on peut évaluer $\mathcal{T}$, le temps de calcul total du recuit simulé,*

$$\mathcal{T} = \mathcal{O}(\tau\,L\,\log |\mathcal{X}|)$$

où $\log |\mathcal{X}|$ est une borne supérieure du nombre de palier, L est le nombre de transitions par palier et τ est le temps de calcul d'une transition. Enfin, si $\log |\mathcal{X}|$ est polynômial en la taille du problème (ce qui est souvent le cas), alors l'algorithme de recuit simulé tourne en un temps polynômial.

2.6.3 Calcul de $H(y) - H(x)$

Dans la plupart des applications le calcul de

$$\Delta H(x, y) \triangleq H(y) - H(x)$$

est très simplifié lorsque $y \in \mathcal{V}(x)$. En effet, dans ce cas y est une "petite perturbation" de la configuration x

Exemple 2.6.6 (Le voyageur de commerce – suite) *Dans la configuration*

$$x = (x(1), x(2), \ldots, x(N))$$

$x(k)$ est la ville visitée après la ville k. Une configuration voisine consiste à prendre deux villes

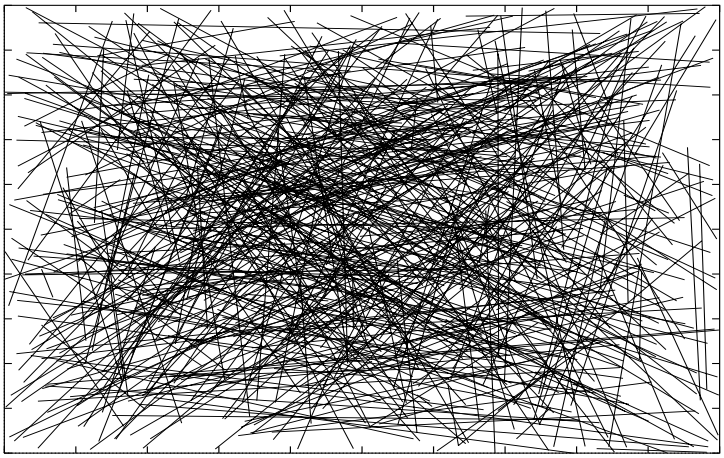
Soit k tel que $x^k(p) = q$ $(1 < k < N)$, on pose

$$\begin{array}{rcl} y(p) & = & x^{-1}(q) = x^{k-1}(p) \ , \\ y(x(p)) & = & q = x^k(p) \ , \\ y(x^r(p)) & = & x^{r-1}(p) \ , \quad r = 2, \ldots, k-1 \ , \\ y(s) & = & x(s) \ , \quad \textit{dans les autres cas.} \end{array}$$

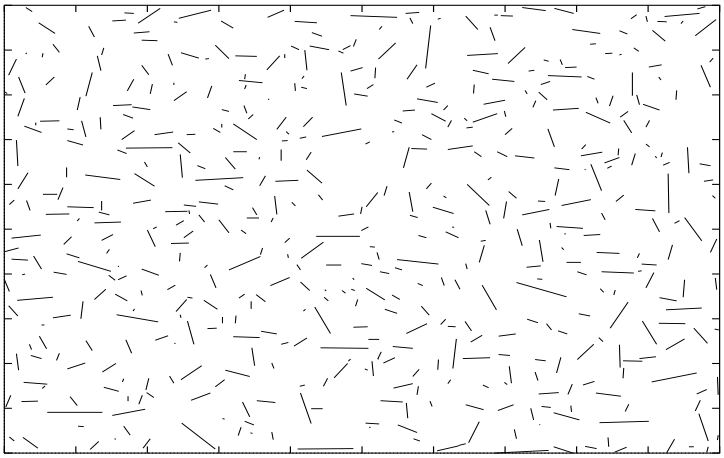
Exemple 2.6.7 (Couplage de poids minimal – suite) *On considère l'exemple suivant*

nombre d'itérations par palier	*1000*
nombre de paliers	*1000*
température initiale	*3000*
α	*0.85*
nombre de points	*1000*

Le résultat est présenté à la figure 2.10.



configuration initiale



configuration obtenue après 1000^2 *itérations*

FIG. 2.10 – Recuit simulé pour le problème d'appariement.

Chapitre 3

Machines de Boltzmann

3.1 Description

Une *machine de Boltzmann* peut être vue comme un réseau d'unités (neurones), connectées entre elles d'une certaine manière. Ces unités peuvent avoir deux états possibles : 0 (unité inactive) ou 1 (unité active). Ce réseau se met sous la forme

$$\mathcal{B} = (\mathcal{U}, \mathcal{C})$$

ou $\mathcal{U}$ est l'ensemble des unités, $\mathcal{C}$ est l'ensemble des connexions (synapses), c'est à dire un ensemble de paires non–ordonnées de $\mathcal{U}$. Si $\{u, v\} \in \mathcal{C}$, alors les unités u et v sont dites connectées (ou adjacentes), $\{u, v\}$ est la connexion qui relie u à v.

Définition 3.1.1 *Une machine de Boltzmann $\mathcal{B} = (\mathcal{U}, \mathcal{C})$ est la donnée d'un ensemble fini $\mathcal{U}$ d'unités et d'un ensemble $\mathcal{C}$ de connexions. Une connexion est une paire non–ordonnée de $\mathcal{U}$: $\mathcal{C} \subset \{\{u, v\}\,;\, u, v \in \mathcal{U}\}$. On suppose que $\mathcal{C}$ contient les* boucles *: $\{u, u\} \in \mathcal{C}$ pour tout $u \in \mathcal{U}$.*

Définition 3.1.2 *Une* configuration *x d'une machine de Boltzmann $(\mathcal{U}, \mathcal{C})$ est une suite de longueur $|\mathcal{U}|$: $(x(u); u \in \mathcal{U})$, où $x(u)$ désigne l'état (0 ou 1) de l'unité u. L'espace des configurations est donc*

$$\mathcal{X} = \{0, 1\}^{|\mathcal{U}|}$$

et $|\mathcal{X}| = 2^{|\mathcal{U}|}$.

Définition 3.1.3 *La connexion $\{u, v\} \in \mathcal{C}$ est dite* active *dans une configuration donnée $x \in \mathcal{X}$, si u et u sont actives, c'est à dire si*

$$x(u) \,.\, x(v) = 1 \ .$$

Dans le cas contraire, la connexion n'est pas active.

Définition 3.1.4 *A toute connexion $\{u, v\} \in \mathcal{C}$ on associe une* efficacité synaptique *(ou "poids synaptique", ou simplement "poids") $w(u, v)$ qui prend ses valeurs dans $\mathbb{R}$:*

$$w \,:\, \mathcal{C} \to \mathbb{R} \ .$$

Par définition, $w(u, v) = w(v, u)$.

Si $w(u,v) > 0$, la connexion $\{u,v\}$ est dite *excitatrice* et le système "désire" que la connexion soit active. Dans le cas contraire, la connexion est dite *inhibitrice* : le système "désire" que la connexion ne soit pas active.

Définition 3.1.5 *La* fonction de consensus $C : \mathcal{X} \to \mathbb{R}$, *associe à chaque configuration* $x \in \mathcal{X}$ *du réseau la somme des efficacités des connexions actives*

$$C(x) \triangleq \sum_{\{u,v\}\in\mathcal{C}} w(u,v)\, x(u)\, x(v) \ . \tag{3.1}$$

Le consensus $C(x)$ est grand quand beaucoup de connexions excitatrices sont actives et petit quand beaucoup de connexions inhibitrices sont actives.

Etant données une machine de Boltzmann $\mathcal{B} = (\mathcal{U}, \mathcal{C})$ et une efficacité synaptique $w : \mathcal{C} \to \mathbb{R}$, le but est donc d'atteindre une configuration qui est un maximum global de la fonction de consensus $C(x)$, c'est à dire trouver $x^* \in \mathcal{X}$ tel que

$$C(x^*) = \max_{x\in\mathcal{X}} C(x) \ .$$

On note $\mathcal{X}^*$ l'ensemble des configurations optimales.

Pour atteindre un consensus maximal, on introduit un mécanisme de transition d'état qui permet aux unités d'ajuster leur état par rapport aux unités voisines. Cet ajustement est une fonction aléatoire de l'état des unités voisines et des efficacités synaptiques associées.

3.2 Machines de Boltzmann séquentielles

Dans ce modèle, à chaque pas de temps, une seule unité peut changer d'état.

Définition 3.2.1 *On considère une machine de Boltzmann dans une configuration* $x \in \mathcal{X}$. *Soit* $u \in \mathcal{U}$, *on définit la configuration* $x_u \in \mathcal{X}$ *par*

$$x_u(v) \triangleq \begin{cases} x(v)\,, & si\ v \neq u\ , \\ 1 - x(v)\,, & si\ v = u\ . \end{cases} \tag{3.2}$$

Les configurations x *et* x_u *ne diffèrent donc que sur une seule unité, elles sont donc dites voisines. On note* $\mathcal{V}(x)$ *l'ensemble des configurations voisines de* x

$$\mathcal{V}(x) = \{x_u\,;\ u \in \mathcal{U}\}\ .$$

On définit $\mathcal{C}_u$ l'ensemble des connexions incidentes à u (sauf la boucle $\{u,u\}$)

$$\mathcal{C}_u \triangleq \{\{u,v\}\,;\ v \in \mathcal{U}\setminus\{u\},\ \{u,v\}\in\mathcal{C}\} \subset \mathcal{C}\ ,$$

et $\bar{\mathcal{C}}_u$ l'ensembles des connexions non–incidentes à u

$$\bar{\mathcal{C}}_u \triangleq \mathcal{C} \setminus \mathcal{C}_u \setminus \{u,u\}\ .$$

La différence de consensus entre x et son voisin x_u est notée

$$\Delta C(x;u) \triangleq C(x_u) - C(x) \ .$$

Comme la contribution des connexions de $\bar{\mathcal{C}}_u$ au consensus est identique pour x et x_u, on a d'après (3.1)

$$\begin{aligned} \Delta C(x;u) \ &= \ \left[x_u(u) \sum_{\{u,v\}\in\mathcal{C}_u} w(u,v)\, x_u(v) + w(u,u)\, x_u^2(u) \right] \\ &\quad - \left[x(u) \sum_{\{u,v\}\in\mathcal{C}_u} w(u,v)\, x(v) + w(u,u)\, x^2(u) \right] \end{aligned}$$

ce qui, avec (3.2) donne

$$\Delta C(x;u) = (1 - 2\, x(u)) \left[\sum_{\{u,v\}\in\mathcal{C}_u} w(u,v)\, x(v) + w(u,u) \right] \ . \tag{3.3}$$

Définition 3.2.2 *Une configuration x est* localement maximale *si*

$$\Delta C(x;u) \leq 0 \ , \quad \forall u \in \mathcal{U} \ .$$

On note $\mathcal{X}^*_{loc}$ l'ensemble des configurations localement maximales.

On construit une suite de configurations aléatoires

$$X_0,\ X_1, \ldots, X_n, \ldots$$

formant une chaîne de Markov de matrice de transition

$$\pi_T(x,y) = P_T(X_{n+1} = y | X_n = x)$$

où

$$\pi_T(x,y) = \begin{cases} q(u)\, a_T(x;u)\,, & \text{si } y = x_u \ , \\ 1 - \sum_{u\in\mathcal{U}} \pi_T(x,x_u)\,, & \text{si } y = x \ , \\ 0\,, & \text{sinon.} \end{cases} \tag{3.4}$$

avec

- $Q = (q(u)\,;\, u \in \mathcal{U})$ est une matrice de probabilité, qui permet de générer une transition $x \to x_u$. Par exemple, Q peut être la loi uniforme sur $\mathcal{U}$: $q(u) = 1/|\mathcal{U}|$.
- $a_T(x;u)$ est une probabilité d'acceptation de la configuration x_u partant de la configuration x, on prendra

$$a_T(x;u) \triangleq \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)} \ . \tag{3.5}$$

– $T > 0$ est un paramètre de contrôle (température).

On définit la mesure de Gibbs

$$G_T(x) \triangleq \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{C(x)}{T}\right) , \tag{3.6}$$

avec

$$Z_T \triangleq \sum_{x \in \mathcal{X}} \exp\left(\frac{C(x)}{T}\right) .$$

On a l'équivalent des Propositions 2.4.5 et 2.3.4

Proposition 3.2.3 *La chaîne de Markov X_n admet G_T comme unique mesure invariante :*

$$\lim_{n \to \infty} P_T(X_n = x) = G_T(x) .$$

Par ailleurs

$$\lim_{T \to 0} G_T(x) = \frac{1}{|\mathcal{X}^*|} \mathbf{1}_{\mathcal{X}^*}(x) .$$

Preuve Il reste à démontrer que

$$G_T(x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi_T(y, x)\, G_T(y) .$$

En fait il suffit de montrer

$$G_T(x)\, \pi_T(x, y) = G_T(y)\, \pi_T(y, x) . \tag{3.7}$$

En effet, d'après cette dernière équation

$$G_T(x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi_T(x, y)\, G_T(x) = \sum_{y \in \mathcal{X}} \pi_T(y, x)\, G_T(y) .$$

On démontre donc (3.7) : soit $y \in \mathcal{V}(x)$ (dans les autres cas la démonstration est triviale), $y = x_u$

$$\begin{aligned}
G_T(x)\, \pi_T(x, y) &= G_T(x)\, q(u)\, a_T(x; u) \\
&= \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{C(x)}{T}\right) q(u) \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)} \\
&= \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{C(x_u)}{T}\right) q(u) \frac{\exp\left(-\frac{C(x_u) - C(x)}{T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)} \\
&= \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{C(x_u)}{T}\right) q(u) \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x_u;u)}{T}\right)} \\
&= G_T(x_u)\, q(u)\, a_T(x_u; u) \\
&= G_T(x_u)\, \pi_T(y, x) .
\end{aligned}$$

□

3.3 Machines de Boltzmann parallèles

Avec l'apparition des calculateurs parallèles, les machines de Boltzmann (et d'une manière générale, les réseaux neuronaux) ont bénéficié d'un important regain d'intérêt.

L'un des intérêts majeurs des machines de Boltzmann réside dans la formule (3.3) définissant la différence de consensus $\Delta C(x;u)$, celle-ci ne fait intervenir que la valeur de l'état des unités voisines, ainsi que l'efficacité des connexions incidentes :

$$\Delta C(x;u) = F(x(u),\, x(v),\, v \in N_u)\ , \tag{3.8}$$

où N_u est l'ensemble des unités voisines de u

$$N_u \triangleq \{v \in \mathcal{U}\,;\, \{u,v\} \in \mathcal{C},\, v \neq u\}\ . \tag{3.9}$$

3.3.1 Parallélisme partiel

Il est possible de mettre à jour à chaque instant, non plus une seule unités (mode asynchrone), mais tout un ensemble $\mathcal{U}_s$ (mode synchrone). Pour retrouver la dynamique présentée au paragraphe précédent, il faut donc que la mise à jour d'une unité u de $\mathcal{U}_s$ n'ai pas d'influence sur les autres unités de $\mathcal{U}_s$, d'où la définition

Définition 3.3.1 *Un sous–ensemble $\mathcal{U}_s$ de $\mathcal{U}$ est dit* indépendant *si, pour tout $u,\, v \in \mathcal{U}$*

$$u,\, v \in \mathcal{U}_s \Rightarrow \{u,v\} \notin \mathcal{C}\ . \tag{3.10}$$

On se donne maintenant une *partition* $\{\mathcal{U}_s\,;\, s = 1,\ldots,m\}$ de $\mathcal{U}$ en m sous–ensembles indépendants.

L'algorithme se décompose en 2 étapes, partant d'une configuration x,

- on choisit un élément de la partition suivant une loi $q(\mathcal{U}_s)$ donnée. Les unités de $\mathcal{U}_s$ pourront changer d'état, les autres demeurent inchangées ;
- chaque unité $u \in \mathcal{U}_s$ évalue si elle doit ou non changer d'état, suivant une probabilité $a_T(x;u)$.

Ces deux étapes sont indépendantes l'une de l'autre.

Posons

$$\mathcal{U}_{xy} \triangleq \{u \in \mathcal{U}\,;\, x(u) \neq y(u)\}\ . \tag{3.11}$$

Donc, partant d'une configuration x, si l'ensemble $\mathcal{U}_s$ est choisi, la nouvelle configuration sera y si

(i) $\mathcal{U}_s \ni \mathcal{U}_{xy}$,

(ii) toutes les unités de $\mathcal{U}_{xy}$ acceptent la transition, les autres $(\mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy})$ refusent.

La matrice de transition

$$\pi_T(x,y) \triangleq P_T(X_{n+1} = y | X_n = x)$$

est donnée par

$$\pi_T(x,y) = \begin{cases} \displaystyle\sum_{\mathcal{U}_s \ni \mathcal{U}_{xy}} q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} a_T(x;u) \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \ , & \text{si } x \neq y \ , \\ \displaystyle 1 - \sum_{z \in \mathcal{X} - x} \pi_T(x,z) \ , & \text{si } x = y \ , \end{cases} \tag{3.12}$$

où $q(\mathcal{U}_s)$ est la probabilité de sélectionner $\mathcal{U}_s$

$$q(\mathcal{U}_s) \geq 0 \ , \quad \sum_{s=1}^{m} q(\mathcal{U}_s) = 1 \ ,$$

et $a_T(x,y)$ est défini par (3.5).

Lemme 3.3.2 *Soit $x, y \in \mathcal{X}$ et $\mathcal{U}_s$ un sous–ensemble indépendant d'unités telles que*

$$\mathcal{U}_{xy} \subset \mathcal{U}_s \ , \tag{3.13}$$

alors

$$C(y) - C(x) = \sum_{u \in \mathcal{U}_{xy}} \Delta C(x;u) \tag{3.14}$$

et

$$\Delta C(x;u) = \begin{cases} -\Delta C(y;u) \ , & si \ u \in \mathcal{U}_{xy} \ , \\ \Delta C(y;u) \ , & si \ u \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy} \ . \end{cases} \tag{3.15}$$

Preuve On pose $\mathcal{U}_{xy} = \{u^1, \ldots, u^p\}$ et $x^0 = x$, $x^i = x^{i-1}_{u^i}$, donc $x^p = y$ et $\mathcal{U}_{xx^{i-1}} = \{u^1, \ldots, u^{i-1}\}$.

Par ailleurs, en utilisant (3.8),

$$\begin{aligned} C(y) - C(x) &= \sum_{s=1}^{m} [C(x^i) - C(x^{i-1})] \\ &= \sum_{s=1}^{m} \Delta C(x^{i-1}; u^i) \\ &= \sum_{s=1}^{m} F(x^{i-1}(u^i),\, x^{i-1}(v),\, v \in N_{u^i}) \\ &= \sum_{s=1}^{m} F(x(u^i),\, x(v),\, v \in N_{u^i}) \end{aligned}$$

car $x^{i-1}(u^i) = x(u^i)$ et, pour $v \in N_{u^i}$, $x^{i-1}(v) = x(v)$ puisque $u^i \in \mathcal{U}_{xy} \subset \mathcal{U}_s$ donc les voisins v de u^i ne sont pas dans $\mathcal{U}_{xy}$. Ce qui montre (3.14).

On montre maintenant (3.15).

$$\Delta C(x;u) = (1 - 2\,x(u)) \sum_{v \in N_u} [w(u,v)\,x(v) + w(u,u)] \ .$$

Si $u \in \mathcal{U}_{xy}$ alors $x(u) = 1 - y(v)$ et $x(v) = y(v)$ pour $v \in N_u$ car $u \in \mathcal{U}_{xy} \subset \mathcal{U}_s$ donc les voisins de u ne sont pas dans $\mathcal{U}_{xy}$. On a donc démontrer que $\Delta C(x;u) = -\Delta C(y;u)$.

Enfin, si $u \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}$, alors $x(u) = y(u)$ et les voisins v de u sont en dehors de $\mathcal{U}_s \supset \mathcal{U}_{xy}$, donc $x(v) = y(v)$. Ce qui montre $\Delta C(x;u) = \Delta C(y;u)$. □

Proposition 3.3.3 *On suppose que $q(\mathcal{U}_s) = 1/m$, $s = 1, \ldots, m$. La chaîne de Markov X_n de matrice de transition (3.12) est ergodique et admet la mesure de Gibbs comme mesure invariante*

$$\lim_{n \to \infty} P_T(X_n = x) = G_T(x) \ .$$

Preuve La preuve est équivalente à celle de la proposition 3.2.3, on veut montrer que, pour tout $x, y \in \mathcal{X}$

$$G_T(x)\,\pi_T(x,y) = G_T(y)\,\pi_T(y,x) \ .$$

Soit $x \neq y$ et $\mathcal{U}_{xy} \subset \mathcal{U}_s$ (dans les autres cas la preuve est triviale),

$$\begin{aligned}
G_T(x)\,\pi_T(x,y) &= G_T(x)\,q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} a_T(x;u) \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \\
&= \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{C(x)}{T}\right) q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} a_T(x;u) \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \\
&= G_T(y) \exp\left(-\frac{C(y) - C(x)}{T}\right) \\
&\qquad q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} a_T(x;u) \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \ .
\end{aligned}$$

En utilisant le Lemme 3.3.2, on a

$$\begin{aligned}
G_T(x)\,\pi_T(x,y) &= G_T(y) \exp\left(-\frac{1}{T} \sum_{u \in \mathcal{U}_{xy}} \Delta C(x;u)\right) \\
&\qquad q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)} \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \\
&= G_T(y)\,q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} \frac{\exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{\Delta C(x;u)}{T}\right)} \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(x;v)) \\
&= G_T(y)\,q(\mathcal{U}_s) \prod_{u \in \mathcal{U}_{xy}} a_T(y;u) \prod_{v \in \mathcal{U}_s \setminus \mathcal{U}_{xy}} (1 - a_T(y;v)) \\
&= G_T(y)\,\pi_T(y,x) \ .
\end{aligned}$$

□

Remarque 3.3.4 *Le lemme 3.3.2 et les résultats de ce paragraphe sont faux si $\mathcal{U}_s$ n'est pas indépendant. Si les mise à jours se font sur des ensembles non–indépendants, la loi limite n'est plus une mesure de Gibbs (cf. paragraphe suivant).*

3.3.2 Parallélisme total

Toutes les unités tentent, à chaque instant n, de changer d'état. Pour déterminer la matrice de transition de la chaîne de Markov X_n ainsi obtenue, il suffit de prendre $\mathcal{U}_s = \mathcal{U}$ dans (3.12), on obtient

$$\pi_T(x,y) = \begin{cases} \displaystyle\prod_{u\in\mathcal{U}_{xy}} a_T(x;u) \prod_{v\in\mathcal{U}\setminus\mathcal{U}_{xy}} (1-a_T(x;v)) \ , & \text{si } x \neq y \ , \\ \displaystyle 1 - \sum_{z\in\mathcal{X}-x} \pi_T(x,z) \ , & \text{si } x = y \ . \end{cases}$$

En posant

$$\begin{aligned} \Delta C(x;u) &= h(x;u)\, k(x;U) \ , \\ h(x;u) &\triangleq 1 - 2\, x(u) \in \{-1,1\} \ , \\ k(x;u) &\triangleq \sum_{v\in N_u} [w(u,v)\, x(v) + w(u,u)] \ , \end{aligned}$$

on a

$$\pi_T(x,y) = \begin{cases} \displaystyle\prod_{u\in\mathcal{U}} \left[1 + \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{T}\right)\right]^{-1} \ , & \text{si } x \neq y \ , \\ \displaystyle 1 - \sum_{z\in\mathcal{X}-x} \pi_T(x,z) \ , & \text{si } x = y \ . \end{cases} \tag{3.16}$$

Proposition 3.3.5 *La chaîne de Markov X_n de matrice de transition (3.16) est ergodique et*

$$\lim_{n\to\infty} P_T(X_n = x) = \tilde{G}_T(x) \ ,$$

avec

$$\tilde{G}_T(x) \triangleq \frac{1}{\tilde{Z}_T} \prod_{u\in\mathcal{U}} 2\, \cosh\left(\frac{k(x;u)}{2T}\right) \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,v)\, x(u)}{2T}\right) \ ,$$

et

$$\tilde{Z}_T \triangleq \sum_{x\in\mathcal{X}} \prod_{u\in\mathcal{U}} 2\, \cosh\left(\frac{k(x;u)}{2T}\right) \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,v)\, x(u)}{2T}\right) \ .$$

Par ailleurs

$$\lim_{T\downarrow 0} \tilde{G}_T(x) = \frac{1}{|\tilde{\mathcal{X}}^*|}\, \mathbf{1}_{\tilde{\mathcal{X}}^*}(x)$$

où $\tilde{\mathcal{X}}^*$ est l'ensemble des configurations pseudo–optimales, *i.e. l'ensemble des configurations qui maximise la pseudo fonction de consensus*

$$\tilde{C}(x) \triangleq \sum_{u \in \mathcal{U}} \left[|k(x;u)| - k(x;u) - 2\, w(u,u)\, x(u) \right] \ .$$

Preuve Comme précédemment, on reprend la preuve de la proposition 3.2.3, on veut montrer que, pour tout $x \neq y$

$$\tilde{G}_T(x)\, \frac{\pi_T(x,y)}{\pi_T(y,x)} = \tilde{G}_T(y) \ .$$

$$\begin{aligned}
\frac{\pi_T(x,y)}{\pi_T(y,x)} &= \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \left[1 + \exp\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{T} \right) \right]}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \left[1 + \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{T} \right) \right]} \\
&= \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \left[\exp\left(-\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right) + \exp\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right) \right]}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \left[\exp\left(-\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right) + \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right) \right]} \, \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} \\
&= \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} \, \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} \ . \qquad (3.17)
\end{aligned}$$

En utilisant $\cosh(-x) = \cosh(x)$ et l'égalité suivante (qui découle des définitions de $h(x;u)$ et $k(x;u)$)

$$\frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} = \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(y;u) + 2\, w(u,u)\, y(u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,u)\, x(u)}{2T} \right)} \ .$$

(3.17) devient

$$\frac{\pi_T(x,y)}{\pi_T(y,x)} = \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} \, \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(y;u) + 2\, w(u,u)\, y(u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,u)\, x(u)}{2T} \right)}$$

et

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_T(x)\, \frac{\pi_T(x,y)}{\pi_T(y,x)} &= \frac{1}{\tilde{Z}_T} \prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{k(x;u)}{2T} \right) \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,u)\, x(u)}{2T} \right) \\
&\quad \times \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(x;u)\, k(y;u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{h(y;u)\, k(x;u)}{2T} \right)} \, \frac{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(y;u) + 2\, w(u,u)\, y(u)}{2T} \right)}{\prod_{u \in \mathcal{U}} \exp\left(-\frac{k(x;u) + 2\, w(u,u)\, x(u)}{2T} \right)} \\
&= \frac{1}{\tilde{Z}_T} \prod_{u \in \mathcal{U}} 2 \cosh\left(\frac{k(y;u)}{2T} \right) \exp\left(-\frac{k(y;u) + 2\, w(u,u)\, y(u)}{2T} \right) \\
&= \tilde{G}_T(y) \ .
\end{aligned}$$

Ce qui montre la première partie de la proposition.

Pour la deuxième partie, il suffit de noter que

$$\tilde{G}_T(x) \triangleq \frac{1}{\tilde{Z}_T} \exp\left(\sum_{u\in\mathcal{U}} -\frac{k(x;u) + 2\,w(u,v)\,x(u) - \log(2\,\cosh(k(x;u)))}{2T}\right) ,$$

et que, pour r petit, $\log(\cosh(r)) \simeq |r|$, on en déduit la deuxième partie de la proposition. □

3.4 Optimisation discrète et machines de Boltzmann

Le but est de résoudre un problème d'optimisation discrète à l'aide d'une machine de Boltzmann.

3.4.1 Démarche générale

On considère un problème d'optimisation discrète sous la forme

$$(\mathcal{S}, \mathcal{S}', f) , \tag{3.18}$$

où $\mathcal{S}$ est l'ensemble des *solutions*, $\mathcal{S}' \subset \mathcal{S}$ l'ensemble des *solutions réalisables*, i.e. l'ensemble des solutions qui réalisent une contrainte donnée, enfin $f : \mathcal{S} \to \mathbb{R}$ est la fonction coût à minimiser. Le but est de trouver une *solution réalisable optimale*, on note $\mathcal{S}^*$ l'ensemble de ces solutions.

On suppose que l'ensemble des solutions peut se décomposer en

$$\mathcal{S} = \mathcal{R}_1 \times \cdots \times \mathcal{R}_n$$

et donc tout $s \in \mathcal{S}$ s'écrit sous la forme $s = (r_1, \ldots r_n)$.

Pour utiliser une machine de Boltzmann pour résoudre le problème d'optimisation (3.18) on construit une bijection entre l'espace des configurations $\mathcal{X}$ et l'espace des solutions $\mathcal{S}$

$$\varphi : \mathcal{X} \to \mathcal{S} ,$$

en utilisant la démarche suivante

- on formule (3.18) de telle sorte que $\mathcal{R}_i = \{0, 1\}$;
- on construite une machine de Boltzmann $(\mathcal{U}, \mathcal{C})$, telle que $\mathcal{U} = \{u_1, \ldots, u_n\}$, avec $s = (r_1, \ldots r_n) = \varphi(x)$ si et seulement si $r_i = x(u_i)$.

Enfin on se donne une fonction de consensus C qui est *réalisable* et qui *préserve l'ordre* :

Définition 3.4.1 *Avec les définitions de ce paragraphe, la fonction de consensus C est* réalisable *si*

$$\varphi(\mathcal{X}^*_{loc}) \subset \mathcal{S}' ,$$

où $\mathcal{X}^*_{loc}$ est l'ensemble des maxima locaux de C.

C préserve l'ordre *si, pour tout x, $y \in \mathcal{X}$ telles que $\varphi(x)$, $\varphi(y) \in \mathcal{S}'$, on a*

$$f(\varphi(x)) < f(\varphi(y)) \implies C(x) > C(y) .$$

Si fonction de consensus C est réalisable et préserve l'ordre, alors C est maximale pour des configurations correspondantes à des solutions optimales réalisables. De plus à des configurations quasi–optimales correspondent des solutions quasi–optimales et réalisables.

3.4.2 Application au problème du voyageur de commerce

On se donne donc n villes numérotées de 1 à n et $D = [d_{ij}]$ la matrice des distances : d_{ij} est la distance entre les villes i et j. Une configuration $x = [x_{ip}\,;\, i, p = 1, \ldots, n]$ où

$$x_{ip} \triangleq \begin{cases} 1\ , & \text{si on visite la ville } i \text{ à la } p\text{–ième position,} \\ 0\ , & \text{sinon.} \end{cases}$$

On veut donc minimiser la fonction

$$f(x) \triangleq \sum_{i,j,p,q=0}^{n-1} a_{ijpq}\, x_{ip}\, x_{jq}$$

sous les contraintes

$$\sum_{i=0}^{n-1} x_{ip} = 1\ , \quad \sum_{p=0}^{n-1} x_{ip} = 1$$

(c'est à dire : on ne visite qu'une fois et une seule chaque ville), avec

$$a_{ijpq} \triangleq \begin{cases} d_{ij}\ , & \text{si } q = p + 1 \pmod n, \\ 0\ , & \text{sinon.} \end{cases}$$

On définit maintenant l'ensemble des connexions comme la réunion de trois ensembles disjoints $\mathcal{C} = \mathcal{C}_b \cup \mathcal{C}_d \cup \mathcal{C}_i$ correspondant à trois types de connexions

- boucles :

$$\mathcal{C}_b \triangleq \{\{u_{ip}, u_{ip}\}\,;\, i, p = 1, \ldots, n\}\ ,$$

- connexions de distances :

$$\mathcal{C}_d \triangleq \{\{u_{ip}, u_{jq}\}\,;\, i \neq j \text{ et } q = p + 1 \pmod n\}\ ,$$

- connexions inhibitrices :

$$\mathcal{C}_i \triangleq \{\{u_{ip}, u_{jq}\}\,;\, (i = j \text{ et } p \neq q) \text{ ou } (i \neq j \text{ et } p = q)\}\ .$$

On obtient ainsi $2n^3 - n^2$ connexions.

Proposition 3.4.2 (cf. [1]) *Avec les notations de ce paragraphe : on choisit une efficacité synaptique w telle que*

$$\begin{array}{rcll} w(u_{ip}, u_{ip}) & > & \max[d_{ik} + d_{il}\,;\, k \neq l]\ , & \forall \{u_{ip}, u_{ip}\} \in \mathcal{C}_b\ , \\ w(u_{ip}, u_{jq}) & = & d_{ij}\ , & \forall \{u_{ip}, u_{jq}\} \in \mathcal{C}_d\ , \\ w(u_{ip}, u_{jq}) & < & -\min[w(u_{ip}, u_{ip})\,,\, w(u_{jq}, u_{jq})]\ , & \forall \{u_{ip}, u_{jq}\} \in \mathcal{C}_i\ , \end{array}$$

alors C est réalisable et préserve l'ordre.

Annexes

A.1 Chaînes de Markov non–homogènes

Soit X_n une chaîne de Markov non–homogène de matrice de transition

$$\Pi_n = [\pi_n(x,y)\,;\, x,y \in \mathcal{X}]\ .$$

On pose

$$\Pi_{n,m} \triangleq \prod_{k=n}^{m} \Pi_k = [\pi_{n,m}(x,y)\,;\, x,y \in \mathcal{X}]\,,\ 0 \leq n \leq m\ ,$$

donc

$$\pi_{n,m}(x,y) = P(X_m = y | X_{n-1} = x)\ ,$$

de telle sorte que $\Pi_{n,n} = \Pi_n$.

Définition A.1.1 *Une chaîne de Markov non–homogène X_n de matrice de transition Π_n est dite* faiblement ergodique *si pour tout $x, y, z \in \mathcal{X}$ et tout $n > 0$*

$$\lim_{m\to\infty} [\pi_{n,m}(x,z) - \pi_{n,m}(y,z)] = 0\ .$$

Définition A.1.2 *Une chaîne de Markov non–homogène X_n de matrice de transition Π_n est dite* fortement ergodique *s'il existe une mesure de probabilité μ^* sur $\mathcal{X}$ telle que pour tout $x, y \in \mathcal{X}$ et tout $n > 0$*

$$\lim_{m\to\infty} \pi_{n,m}(x,y) = \mu^*(y)\ .$$

Dans ce cas, la chaîne X_n converge en loi vers μ^*, en effet, pour tout $x \in \mathcal{X}$

$$\begin{aligned}
\lim_{m\to\infty} P(X_m = y) &= \lim_{m\to\infty} \sum_{x\in\mathcal{X}} P(X_m = y | X_{n-1} = x)\, P(X_{n-1} = x) \\
&= \sum_{x\in\mathcal{X}} \left[\lim_{m\to\infty} \pi_{n,m}(x,y)\right] P(X_{n-1} = x) \\
&= \mu^*(y) \sum_{x\in\mathcal{X}} P(X_{n_1} = x)\ .
\end{aligned}$$

Définition A.1.3 *Le* coefficient d'ergodicité *d'une chaîne de Markov homogène X_n de matrice de transition Π est définie par*

$$\begin{aligned}\tau(\Pi) &\triangleq \frac{1}{2}\max_{x,y\in\mathcal{X}}\sum_{z\in\mathcal{X}}|\pi(x,z)-\pi(y,z)| \\ &= 1-\min_{x,y\in\mathcal{X}}\sum_{z\in\mathcal{X}}\pi(x,z)\wedge\pi(y,z)\ .\end{aligned}$$

On donne maintenant des conditions suffisantes d'ergodicité

Théorème A.1.4 (Seneta **[3]**) *Une chaîne de Markov non–homogène X_n de matrice de transition Π_n est faiblement ergodique s'il existe une suite strictement croissante d'entiers positifs n_k telle que*

$$\sum_{k=0}^{\infty}\left(1-\tau(\Pi_{n_k,n_{k+1}})\right)=\infty\ .$$

Théorème A.1.5 *Une chaîne de Markov non–homogène X_n de matrice de transition Π_n est fortement ergodique si les conditions suivantes sont vérifiées*

(*i*) *X_n est faiblement ergodique,*

(*ii*) *pour tout n il existe une mesure de probabilité μ_n sur $\mathcal{X}$ telle que*

$$\sum_{y\in\mathcal{X}}\Pi_n(y,x)\,\mu_n(y)=\mu_n(x)\ ,$$

(μ_n est une mesure invariante de de la chaîne de Markov de matrice de transition $Q=\Pi_n$, à n fixé),

(*iii*) *la suite μ_n vérifie*

$$\sum_{n=0}^{\infty}\|\mu_n-\mu_{n+1}\|<\infty\ ,$$

avec $\|\mu-\nu\|=\sum_{x\in\mathcal{X}}|\mu(x)-\nu(x)|$.

De plus, si $\mu^*=\lim_{n\to\infty}\mu(x)$, alors μ^* est la mesure de probabilité introduite à la Définition A.1.2.

Bibliographie

[1] E. AARTS and J. KORST. *Simulated Annealing and Boltzmann Machines. A Stochastic Approach to Combinatorial Optimization and Neural Computing.* Interscience Series in Discrete Mathematics and Optimization. John Wiley & Sons, Chichester, 1989.

[2] B. HAJEK. Cooling schedules for optimal annealing. *Mathematics of Operations Research*, 13(2):311–329, May 1988.

[3] E. SENETA. *Non–Negative Matrix and Markov Chains.* Springer Series in Statistics. Springer Verlag, New–York, 1981.

Index

configurations, 17
consistance, 8
contraste, 10

entropie, 25
ergodicite, 10

Fisher, 12
fonction coût, 17
fonction de contraste, 10
fonction de partition, 25

Gibbs (mesure de), 25

information de Fisher, 12
information de Kullback, 10

Kullback, 10

loi des grands nombres, 6

matrice d'exploration, 28

normalité asymptotique, 8

regularite, 12

théorème de limite centrale, 6
théorème ergodique, 6

voisinage (système de), 21