C. R. Acad. Sci. Paris, t. 310, Série I, p. 783-786, 1990

Probabilités/*Probability Theory*

Recuit simulé sur $\mathbb{R}^n$

Laurent MICLO

Résumé – On se propose de présenter une nouvelle démonstration de la convergence de l'algorithme de recuit simulé sur $\mathbb{R}^n$ (pour certains taux de décroissance de la température). La méthode utilisée, qui consiste en l'étude de l'évolution de l'énergie libre, est très générale et se transpose facilement au cas où l'espace des phases est un ensemble fini ou une variété riemannienne, compacte et connexe. Nous avons même pu l'adapter pour obtenir des résultats sur des espaces de dimension infinie.

Simulated annealing on $\mathbb{R}^n$

Abstract – *We present a new proof of the convergence of simulated annealing algorithm on $\mathbb{R}^n$ (for certain decreasing rate of temperature). The method used, which is based on the study of the evolution of free energy, is very general and can be easily transposed to deal with the case where the phase space is a finite set or a compact, connected Riemannian manifold. We have even been able to adapt it to get some results for infinite dimensional spaces.*

PRÉSENTATION DU RÉSULTAT. – Le recuit simulé est une méthode probabiliste d'estimation des minima globaux d'une certaine fonction U (qui sera ici définie sur $\mathbb{R}^n$), le principe étant de lui associer un processus stochastique qui ira chercher ces minima. Précisons tout de suite les hypothèses que l'on fera sur U :

$$\text{(H1)}\qquad \begin{cases} U \in C^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R}) \\ U(\infty)=\infty, \quad |\nabla U(\infty)|=\infty \\ |\nabla U|^2 - \Delta U \quad \textit{est minorée.} \\ \displaystyle\int \exp(-U(x))\,dx < \infty \end{cases}$$

(H2) U *et chacune de ses dérivées ont une croissance au plus polynômiale en l'infini.* $|\nabla U|$ *est globalement lipschitzien.*

On considérera la diffusion « chercheuse » $(X_t)_{t\geqq 0}$ définie par :

$$(1)\qquad \begin{cases} dX_t = \sqrt{\sigma(t)}\,dB_t - 1/2.\nabla U(X_t)\,dt \\ X_0 \textit{ est de loi } m \textit{ et est indépendante de } (B_t)_{t\geqq 0} \end{cases}$$

où

$\sigma \in C^1(\mathbb{R}_+;]0, 1[)$ représentera l'évolution de la température; on supposera que $\lim_{t\to\infty} \sigma(t)=0$;

$(B_t)_{t\geqq 0}$ est un n-mouvement brownien;

m est une probabilité sur $\mathbb{R}^n$.

On notera, pour $t \geqq 0$, m_t la loi de X_t, et on fera l'hypothèse suivante :

(H3) *La loi m admet des moments de tous ordres.*

Le problème est de déterminer les bons taux de convergence de $\sigma(t)$ vers 0, de manière que la loi m_t ait tendance à se concentrer, pour t grand, au voisinage des minima globaux de U (une décroissance trop rapide de la température pouvant geler le système en des minima locaux).

Note présentée par Paul-André MEYER.

0764-4442/90/03100783 $ 2.00 © Académie des Sciences

Définissons l'énergie libre; il nous faut pour cela introduire la notation suivante : pour $t \geqq 0$ on pose :

$$g_t(.) = \frac{\exp(-\mathrm{U}(.)/\sigma(t))}{\mathrm{Z}_t}$$

où

$$\mathrm{Z}_t = \int \exp\left(-\frac{\mathrm{U}(x)}{\sigma(t)}\right) dx < \infty.$$

Remarquons que g_t est la densité de la probabilité réversible « instantanée », à l'instant t, de la diffusion $(\mathrm{X}_t)_{t \geq 0}$. Cette probabilité sera notée dg_t.

On définit alors l'énergie libre, par rapport à dg_t, d'une probabilité p sur $\mathbb{R}^n$ par :

$$\mathrm{I}_t(p) = \begin{cases} \displaystyle\int \ln\left(\frac{p}{g_t}\right) dp & \text{si } \quad dp \ll dx, \text{ en notant alors encore } p \text{ la densité } \dfrac{dp}{dx}, \\ +\infty & \text{sinon.} \end{cases}$$

$\mathrm{I}_t(p)$ mesure, d'une certaine manière, la distance entre p et dg_t, notamment on a : $\| dg_t - p \| \leq 4 \sqrt{2\,\mathrm{I}_t(p)}$, où $\| . \|$ désigne la variation totale, *cf.* [3].

Notons qu'il est bien connu que dg_t tend à se concentrer au voisinage des minima globaux de U, quand $\sigma(t) \to 0^+$. Ainsi le résultat suivant nous donne une condition suffisante pour la convergence de l'algorithme de recuit :

THÉORÈME. — *Supposons que* (H1), (H2) *et* (H3) *soient vérifiées. Il existe un nombre* $c \geqq 0$ (*cf. la description donnée ci-dessous*), *tel que si, pour t suffisamment grand, on a* $\sigma(t) = k/\ln(t)$ *avec* $k > c$, *alors* $\mathrm{I}_t(m_t) \to 0$ *quand* $t \to \infty$.

Description de c : On a deux descriptions possibles de la constante c. La première, qui est la plus « visuelle »: nous la présente comme le sup, sur l'ensemble des couples de points de $\mathbb{R}^n$, de l'inf, sur les chemins reliant ces deux points, d'une quantité appelée l'élévation de ces chemins, *cf.* [4]. Mais on ne présentera que la seconde, qui est celle que nous utilisons dans la démonstration et qui est liée au comportement asymptotique de la seconde valeur propre de certains opérateurs :

Soit pour $t \geqq 0$,

$$\mathscr{L}_t . = -\frac{1}{2}[\sigma(t)\Delta . - (\nabla \mathrm{U}, \nabla .)]$$

défini, par exemple, sur $\mathrm{C}_c^2(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$.

$\mathscr{L}_t$ est symétrique dans $\mathrm{L}^2(dg_t)$ et positif. Ainsi, si on note L_t son extension de Freidrichs, L_t est auto-adjoint et positif. L'hypothèse (H1) nous assure que le spectre de L_t est discret. Sa première valeur propre est 0 et a pour espace propre les constantes. Soit λ_t sa seconde valeur propre. Remarquons que $\mathrm{L}_t = \sigma(t)/2\,\nabla^* . \nabla$ [où ∇^* désigne l'adjoint de ∇ dans $\mathrm{L}^2(dg_t)$ *i.e.* la divergence dans cet espace].

Ainsi :

$$\lambda_t = \frac{\sigma(t)}{2} \inf \frac{\displaystyle\int |\nabla f|^2 \, dg_t}{\displaystyle\int (f - \langle f \rangle_t)^2 \, dg_t} \tag{2}$$

où $\langle\ .\ \rangle_t$ désigne l'espérance relativement à dg_t et l'inf est pris sur les fonctions non constantes de $L^2(dg_t)$.

Il est alors connu (*cf.* [5]) que l'hypothèse (H1) assure l'existence et la positivité de la limite suivante, qui définit la constante c :

$$c = \lim_{\sigma(t) \to 0} -\sigma(t) \ln(\lambda_t).$$

Esquisse de la démonstration. — La clé de la démonstration est de montrer que, pour t assez grand, $I_t(m_t)$ satisfait certaines inégalités différentielles du type

$$\frac{dI_t(m_t)}{dt} \leqq a_t - b_t I_t(m_t) \tag{3}$$

où on peut prendre :

$$a_t = M \left| \frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\sigma(t)}\right)\right| \exp\left(\frac{\varepsilon}{\sigma(t)}\right) + K\, b_t \exp\left(-\frac{\varepsilon}{2\sigma(t)}\right)$$

$$b_t = 4\lambda_t \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\sigma(t)}\right),$$

M et K étant deux constantes positives (dépendant de m, U et du paramètre $\varepsilon > 0$).

Du fait que, pour tout $t \geqq 0$, on a $I_t(m_t) \geqq 0$ (par l'inégalité de Jensen), pour obtenir $\lim_{t\to\infty} I_t(m_t) = 0$, il suffit d'avoir :

$$\int^{\infty} b_t\, dt = \infty.$$

$$\lim_{t\to\infty} a_t/b_t = 0.$$

On vérifie, via (2), que ces conditions sont remplies si on prend, pour t assez grand, $\sigma(t) = k/\ln(t)$ avec $k > c$ et si on choisit $0 < \varepsilon < (k-c)/2$, d'où le résultat annoncé si on montre (3).

Pour ceci notons que les hypothèses (H2) et (H3) nous permettent d'appliquer le calcul de Malliavin et d'obtenir des résultats très forts, pour $t > 0$, sur la régularité des m_t; notamment $\forall t > 0$, $m_t \ll dx$, la densité, encore notée m_t, appartient à $C_b^\infty(\mathbb{R}^n; \mathbb{R})$ et la norme sup de m_t (ou d'une de ses dérivées) est bornée en t sur les intervalles compacts de $]0; \infty[$.

D'autre part, en appliquant la formule d'Itô et les inégalités de Hölder, on peut voir que, pour tout $\varepsilon > 0$ et tout $p > 0$, il existe $A_{p,\varepsilon}$ tel que :

$$\forall t \geqq 0, \quad \int m_t(dx)\, |U|^p(x) \leqq A_{p,\varepsilon} \exp\left(\frac{\varepsilon}{\sigma(t)}\right).$$

Ces résultats permettent de montrer que, pour tout $t > 0$, $I_t(m_t) < \infty$ et justifient les calculs suivants :

$$\frac{dI_t(m_t)}{dt} = \int \frac{\partial}{\partial t}\left(m_t \ln\left(\frac{m_t}{g_t}\right)\right) dx = \int \frac{\partial m_t}{\partial t} \ln\left(\frac{m_t}{g_t}\right) dx + \int \frac{\partial m_t}{\partial t}\, dx - \int \frac{\partial \ln(g_t)}{\partial t}\, dm_t.$$

Mais le second terme vaut $d/dt \int dm_t$, qui est nul, et le troisième vaut $d/dt\,(1/\sigma(t)) \int \mathrm{U}\, d(m_t - g_t)$, qui est majoré par $\mathrm{M}\,|(d/dt)(1/(t))|\exp(\varepsilon/\sigma(t))$, où M est une constante dépendant de U et de $\mathrm{A}_{1,\varepsilon}$.

Pour évaluer le premier terme notons que l'équation de Fokker-Planck associée à (1) s'écrit

$$\frac{\partial m_t}{\partial t} = \frac{\sigma(t)}{2} \sum_{i=1}^{i=n} \left(g_t \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{m_t}{g_t} \right).$$

Ainsi, en intégrant par parties, il vaut :

$$-\frac{\sigma(t)}{2} \int \frac{g_t}{m_t} \left| \nabla \frac{m_t}{g_t} \right|^2 dg_t = -2\sigma(t) \int \left| \nabla \sqrt{\frac{m_t}{g_t}} \right|^2 dg_t \leqq -4\lambda_t \int \left(\sqrt{\frac{m_t}{g_t}} - \left\langle \sqrt{\frac{g_t}{m_t}} \right\rangle_t \right)^2 dg_t$$

Pour poursuivre le calcul, on a besoin des deux lemmes suivants :

— $\exists\, \delta_0 > 0$ tel que $\forall\, 0 < \delta \leqq \delta_0$, $\forall\, t \geqq 0$ on ait :

$$\int \left(\sqrt{\frac{m_t}{g_t}} - \left\langle \sqrt{\frac{m_t}{g_t}} \right\rangle_t \right)^2 dg_t \geqq \delta \left[\mathrm{I}_t(m_t) - \delta \int \left(\ln\left(\frac{m_t}{g_t} + e \right) + 1 \right)^2 dm_t \right]$$

— $\forall\, \varepsilon > 0$, $\exists\, \mathrm{K} > 0$ tel que $\forall\, t \geqq 0$ on ait :

$$\int \left(\ln\left(\frac{m_t}{g_t} + e \right) + 1 \right)^2 dm_t \leqq \mathrm{K} \exp\left(\frac{\varepsilon}{2\sigma(t)} \right)$$

qui entraînent (3), si on prend, pour t assez grand, $\delta = \exp(-\varepsilon/\sigma(t))$.

Remarques. — La convergence de l'algorithme de recuit sur $\mathbb{R}^n$ avait déjà été démontrée, pour suffisamment grand par T. S. Chiang, C. R. Hwang et S. J. Sheu dans [1], puis par G. Royer dans [6], pour $k > c$. Cependant la méthode présentée ici, basée sur l'évolution de l'énergie libre (l'étude de l'évolution de l'énergie libre spécifique était utilisée auparavant, à température constante, pour montrer des propriétés d'ergodicité de diffusions en dimension infinie, *voir* par exemple [2]), est totalement différente. L'avantage de cette approche, qui semble plus simple et plus précise, est de pouvoir s'adapter en dimension infinie; par exemple, pour des diffusions, invariantes par translations, sur $\mathrm{M}^{\mathbb{Z}^d}$ (où M est une variété riemannienne, compacte, connexe et orientée), dont l'intensité du terme de diffusion tend vers 0 et dont la dérive est formellement le gradient de potentiels d'interactions associés à certaines mesures de Gibbs. Les détails de la preuve paraîtront dans un article en cours de rédaction.

Note remise le 23 mars 1990, acceptée le 26 mars 1990.

Références bibliographiques

[1] T. S. Chiang, C. R. Hwang et S. J. Sheu, Diffusion for global optimization in $\mathbb{R}^n$, *S.I.A.M. J. of Control and Opt.*, 25, n° 3, 1987.

[2] R. Holley et D. Stroock, Diffusions on an infinite dimensional torus, *J.F.A.*, 42, 1981.

[3] R. Holley et D. Stroock, Simulated annealing via Sobolev inequalities, *Com. Math. Phys.*, 115, 1988.

[4] R. Holley, S. Kusuoka et D. Stroock, Asymptotics of the spectral gap with applications to the theory of simulated annealing, *J.F.A.*, 83, 1989.

[5] C. R. Hwang et S. J. Sheu, *The asymptotic behavior of the second eigenvalue of perturbed Fokker-Planck operators*, Preprint.

[6] G. Royer, *A remark on simulated annealing of diffusion process*, Preprint, 1988.

École normale supérieure, 45, *rue d'Ulm*, 75005 *Paris*.