C. R. Acad. Sci. Paris, t. 326, Série I, p. 1003-1006, 1998
Statistique/*Statistics*
(Probabilités/*Probability Theory*)

Recuit simulé avec un estimateur séquentiel de l'énergie

Pierre VANDEKERKHOVE

Laboratoire de probabilités et statistique, EA 720, université Montpellier II, place Eugène-Bataillon, 34095 Montpellier cedex 5, France

(Reçu le 2 avril 1997, accepté après révision le 28 octobre 1997)

Résumé. Dans cette Note nous présentons une généralisation des algorithmes de recuit simulé à des situations où l'énergie H est inconnue, mais approchable par une suite d'estimateurs fonctionnels $(H_n)_{n\geq 0}$ convergeant uniformément vers H avec une vitesse presque sûre convenable. © Académie des Sciences/Elsevier, Paris

Simulated annealing with a sequential estimator of the energy

Abstract. *In this paper we introduce a generalization of the simulated annealing algorithms to the following situations: the energy H is unknown, but can be approximated by a sequence of functional estimators $(H_n)_{n\geq 0}$, and $(H_n)_{n\geq 0}$ converges uniformly towards H with a convenient almost sure rate.* © Académie des Sciences/Elsevier, Paris

1. Hypothèses et résultats

Le cadre de notre travail est le suivant, on considère une suite d'estimateurs fonctionnels réels $(H_n)_{n\geq 0}$ de l'énergie H, définie sur un espace mesuré $(\Theta, \mathcal{B}_\Theta, \lambda)$, telle que les hypothèses suivantes soient vérifiées :

H1. Il existe une suite déterministe $(\delta_n)_{n\geq 0}$ positive, décroissante vers 0 telle que :

$$||H_n - H||_\infty = \mathrm{O}(\delta_n) \text{ p.s.} \tag{1}$$

où $||\cdot||_\infty$ désigne la norme sup sur Θ.

H2. L'énergie H est une fonction de classe C^2 admettant un nombre fini de minima globaux.

On définit pour l'énergie H la mesure de Gibbs $\mathrm{G}_{\beta H}$ à la température $T = 1/\beta$ de densité relativement à λ de la forme

$$\frac{1}{Z_\beta}\mathrm{e}^{-\beta H}, \quad \text{où } Z_\beta = \int_\Theta \mathrm{e}^{-\beta H}\mathrm{d}\lambda.$$

Le lemme qui suit rappelle la propriété de la mesure de Gibbs, lorsque l'énergie H est assez régulière.

Note présentée par Paul DEHEUVELS.

LEMME 1. – *Si l'énergie H vérifie l'hypothèse* H2, *la mesure de Gibbs qui lui est associée vérifie alors :*

$$\mathrm{G}_{\beta H} \xrightarrow[\beta\to\infty]{} \frac{1}{Z}\sum_{\theta\in H^*} k_\theta \delta_\theta,$$

où $k_\theta = (\det \nabla^2 H(\theta))^{-1/2}$ *et* $Z = \sum_{\theta\in H^*} k_\theta$.

Le lemme précédent est l'analogue du théorème de Hwang (*voir* [4]), qui considère le cas où H^* est une variété et H est de classe C^3.

On suppose maintenant que l'énergie H est inconnue mais peut être approchée par des estimateurs fonctionnels H_n, au sens donné en H1. Nous proposons dans ce qui suit une méthode permettant d'optimiser asymptotiquement la fonction H, en optimisant pas à pas les fonctionnelles H_n.

On définit la mesure de Gibbs $\mathrm{G}_{\beta_n H_n}$ adaptée à la fonctionnelle H_n par :

$$\mathrm{G}_{\beta_n H_n} = Z_{H_n}^{-1} \mathrm{e}^{-\beta_n H_n}\mathrm{d}\lambda, \quad \text{où } Z_{H_n} = \int_\Theta \mathrm{e}^{-\beta_n H_n}\mathrm{d}\lambda,$$

où β_n est un paramètre donné a priori dépendant de n. On montre alors le théorème suivant :

THÉORÈME 1. – *Sous les hypothèses* H1-H2 *nous avons :*

$$||\mathrm{G}_{\beta_n H_n} - \mathrm{G}_{\beta_n H}||_{VT} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0 \quad p.s. \quad si \quad \beta_n\delta_n \xrightarrow[n\to\infty]{} 0.$$

De ce théorème nous déduisons que pour une vitesse β_n tendant vers l'infini moins vite que δ_n^{-1}, la mesure de Gibbs $\mathrm{G}_{\beta_n H_n}$ adaptée aux estimateurs fonctionnels H_n, se comporte asymptotiquement comme $\mathrm{G}_{\beta_n H}$ qui d'après le lemme 1, charge tous les minima globaux de la fonction H lorsque $n \to \infty$.

On propose pour simuler le comportement asymptotique du processus à valeurs mesures $(\mathrm{G}_{\beta_n H_n})_{n\geq 0}$, de construire une chaîne de Markov non-homogène dont le noyau de transition pour chaque $n \geq 0$, dit noyau de *Métropolis*, est défini de la manière suivante :

$$\mathrm{N}_{H_n\beta_n}(\theta, \mathrm{d}\xi) = \mathbf{I}_{H_n(\xi)\leq H_n(\theta)}\mathrm{N}(\theta,\mathrm{d}\xi) + \mathbf{I}_{H_n(\xi)\geq H_n(\theta)}\mathrm{e}^{-\beta_n(H_n(\xi)-H_n(\theta))}\mathrm{N}(\theta,\mathrm{d}\xi) + Q_{H_n}\delta_\theta(\mathrm{d}\xi),$$

où Q_{H_n} est ajusté de telle faon que $\int \mathrm{N}_{H_n}(\theta,\mathrm{d}\xi) = 1$, et N est un noyau markovien, homogène, vérifiant les hypothèses suivantes :

H3. Il existe une probabilité α sur Θ, un entier $\ell > 0$ et une constante $c > 0$ tels que pour tout θ, $\mathrm{N}^\ell(\theta,\cdot) \geq c\alpha(\cdot)$.

(Cette hypothèse est connue sous le nom de condition de Harris, *voir* [5].)

H4. λ est une mesure réversible pour le noyau N, c'est-à-dire que pour toute fonction h mesurable bornée de Θ^2 dans $\mathbb{R}$:

$$\int_{\Theta^2} h(\theta,\xi)\lambda(\mathrm{d}\theta)\otimes \mathrm{N}(\theta,\mathrm{d}\xi) = \int_{\Theta^2} h(\theta,\xi)\lambda(\mathrm{d}\xi)\otimes\mathrm{N}(\xi,\mathrm{d}\theta).$$

Grâce à cette dernière hypothèse on montre que $\mathrm{G}_{\beta_n H_n}$ est réversible pour le noyau N_{H_n}, et on montre le théorème suivant :

THÉORÈME 2. – *Sous les hypothèses* H1-H4, *et pour* $\delta_n = n^{-\alpha}$ *avec* $\alpha > 0$, *il existe une constante* $\gamma_0 = \inf(\alpha, 1)(\ell||H||_\infty)^{-1}$ *telle que pour tout* $\gamma < \gamma_0$ *et tout* $\beta_n = \gamma\log n$, *on ait :*

$$||P_{\theta_n} - \mathrm{G}_{\beta_n H}||_{VT} \xrightarrow[n\to\infty]{} 0 \quad p.s.,$$

où les lois successives P_{θ_n} *de* θ_n *se déduisent à l'aide de la formule* $P_{\theta_{n+1}} = P_{\theta_n}\mathrm{N}_{H_n\beta_n}$.

2. Démonstration des théorèmes 2 et 3

Soient U et V deux fonctions bornées sur Θ, et $G_U = Z_U^{-1}\mathrm{e}^{-U}\mathrm{d}\lambda$, $G_V = Z_V^{-1}\mathrm{e}^{-V}\mathrm{d}\lambda$, des mesures de probabilité associées, où Z_U et Z_V sont des facteurs de normalisation. On a alors l'inégalité suivante :

$$||G_U - G_V||_{VT} \leq \frac{1}{2}\,\mathrm{osc}(U - V), \quad \text{où} \quad \mathrm{osc}(W) = \sup_{\theta\in\Theta,\xi\in\Theta}(W(\theta) - W(\xi)).$$

Cette inégalité, appliquée à $\mathrm{G}_{\beta_n H_n}$ et $\mathrm{G}_{\beta_n H}$, nous donne :

$$||\mathrm{G}_{\beta_n H_n} - \mathrm{G}_{\beta_n H}||_{VT} \leq \beta_n ||M_n - H||_\infty = \mathrm{O}(\beta_n \delta_n) \qquad \text{p.s.}$$

Le théorème 3 s'obtient en montrant que le processus $(u_n)_{n\geq 0} = (||P_{\theta_{M_{n\ell}}} - \mathrm{G}_{\beta_{n\ell} H_{n\ell}}||_{VT})_{n\geq 0}$ converge vers 0 pour tout $\beta_n = \gamma \log n$, où $\gamma < \gamma_0 = \inf(\alpha, 1)(\ell ||H||_\infty)^{-1}$. On montre en effet que la convergence de ce processus extrait, donnant la position du processus de recuit par rapport à sa mesure invariante à des intervalles réguliers de longueur ℓ, entraîne la convergence, sur tous les indices de temps n_k de $P_{\theta_{M_{n_k}}}$, vers $\mu_{M_{n_k}}$.

3. Applications

1) La méthode que nous venons de présenter s'applique par exemple au problème de l'estimation algorithmique des modèles de mélanges ou de chaînes de Markov cachées (CMC) (*voir* [8]). Il s'agit dans ces deux cas d'optimiser asymptotiquement une entropie, dont la structure est inconnue, et qui s'exprime comme limite ergodique de moyennes empiriques de fonctions de chaînes de Markov, que nous noterons M_n. Sans rentrer dans les détails, on montre sous de bonnes hypothèses que les estimateurs fonctionnels M_n de l'entropie m-dimensionnelle H pour ces modèles ($m = 1$ pour les mélanges, et $m \geq 2$ pour les CMC, *voir* [7]), convergent à la vitesse :

$$||M_n - H||_\infty = \mathrm{O}\left(\sqrt{\frac{\log\log n}{n}}\right) \qquad \text{p.s.} \tag{2}$$

lorsque l'espace paramétrique Θ est compact.

2) Une autre application concerne l'estimation du mode de la fonction f de régression d'un modèle de régression non-linéaire avec variable explicative stable (*voir* [3], p. 241), dont la forme est rappelée ci-dessous :

$$X_{n+1} = f(\Phi_n) + \varepsilon_{n+1},$$

où $(\Phi_n)_{n\geq 0}$ est une chaîne de Markov stable, $(\varepsilon_n)_{n\geq 0}$ une suite de bruits adaptés à une certaine filtration $\mathbb{F}$, et f une fonction suffisamment régulière (pour le détail des hypothèses, *voir* [3], pp. 238 à 241). Il existe alors, pour ce type de problème, une suite d'estimateurs empiriques $(\hat{f}_n)_{n\geq 0}$ de f convergeant presque sûrement avec des vitesses uniformes sur tout compact de l'ordre de $\mathrm{o}(n^{-1/2+a+dr}) + \mathrm{O}(n^{-a})$, où a, d et r sont des constantes positives vérifiant certaines contraintes. Voici donc un autre type d'application où l'hypothèse H1 est satisfaite, et où la vitesse de convergence presque sûre diffère de celle découlant de la loi du logarithme itéré classiquement rencontrée dans les problèmes de statistique paramétrique.

Remerciements. Je tiens à remercier très chaleureusement Pierre Del Moral et Laurent Miclo (LSP, Université Paul-Sabatier) pour leur écoute et la pertinence de leurs remarques, ainsi que les référés pour leurs suggestions qui ont permis l'amélioration de cette Note.

Références bibliographiques

[1] Aarts E., Korst J., Simulated Annealing and Boltzmann Machines, Wiley Science, 1989.
[2] Del Moral P., Miclo L., On the Convergence and the applications of the generalized Simulated Annealing, Publication du Laboratoire de Statistique et Probabilités de l'université Paul-Sabatier, Toulouse 16-96, 1996.
[3] Duflo M., Random Iterative Models, Springer-Verlag, 1997.
[4] Hwang C.R., Laplace's method revisited, Ann. Probab. 8 (1980) 1177–1182.
[5] Meyn S.P., Tweedie R.L., Markov chains and Stochastic Stability, Springer-Verlag, 1993.
[6] Royer G., Méthode du recuit simulé, Cours de 3^{e} cycle, université d'Orléans, 1988.
[7] Rydén T., Consistent and asymptotically normal parameter estimates for hidden Markov models, Ann. Statist. 22 (1994) 1884–1895.
[8] Vandekerkhove P., Thèse de Doctorat, université Montpellier II, 1997.