

Algorithmes stochastiques, diffusions, inégalités fonctionnelles

Pierre-André Zitt

Université de Bourgogne

Journées MAS, 3 septembre 2010

Plan

① Le recuit simulé

Algorithmes «physiques» d'optimisation

Le recuit simulé : principales propriétés

② Discret ou continu ?

L'algorithme continu

Exemple de Robbins-Monro

③ Des outils «analytiques»

Les objets

Inégalités fonctionnelles

L'utilisation du spectre

④ Quelques résultats

Convergence de l'algorithme

Plan

① Le recuit simulé

Algorithmes «physiques» d'optimisation

Le recuit simulé : principales propriétés

② Discret ou continu ?

L'algorithme continu

Exemple de Robbins-Monro

③ Des outils «analytiques»

Les objets

Inégalités fonctionnelles

L'utilisation du spectre

④ Quelques résultats

Convergence de l'algorithme

Le problème

On cherche à résoudre un problème de minimisation, d'une fonction «potentiel» :

$$F : E \rightarrow \mathbb{R}.$$

On suppose F pas trop sympathique : en particulier F a des minima locaux.

Cadre discret : E est un graphe.

Metropolis

On parcourt *aléatoirement* le graphe E , en favorisant les descentes.

Algorithme de Metropolis à température $\sigma = 1/\beta$

On part de $X_0 = x$. À chaque étape,

- on choisit un voisin y de X_n ,
- si $F(y) < F(X_n)$ on accepte le mouvement : $X_{n+1} = y$
- sinon on accepte avec probabilité

$$\exp\left(-\frac{F(y) - F(X_n)}{\sigma}\right).$$

Les sauts vers le «bas» sont automatiques, ceux vers le haut restent possibles.

Si σ est grand, les sauts sont facilités.

Comportement limite

On considère la mesure :

$$\mu_\sigma(x) = \frac{1}{Z_\sigma} \exp\left(-\frac{F(x)}{\sigma}\right)$$

On vérifie la relation :

$$\mu_\sigma(x)P(x, y) = \mu_\sigma(y)P(y, x)$$

Invariance :

si X_0 est de loi μ_σ , alors X_n est aussi de loi μ_σ .

Réversibilité :

si X_0 est de loi μ_σ , les couples (X_0, X_n) et (X_n, X_0) ont même loi (le sens du temps ne se lit pas sur les trajectoires).

Comportement limite

Convergence

La loi de X_n tend vers la loi limite μ_σ .

Comme $\mu_\sigma(x) \approx \exp\left(-\frac{F(x)}{\sigma}\right)$, $\mu(\sigma)$ se concentre sur les minima de F .

Problème

Comment choisir la température σ ?

Recuit simulé

Introduit par Kirkpatrick, Gelatt et Vecchi (83)

Idée

Faire dépendre la température du temps.

- σ est grand au début (sauts facilités, phase d'exploration).
- σ devient de plus en plus petit ensuite.

Recuit simulé

Théorème (Vitesse critique)

Il existe une constante $d_1(F)$ telle que, pour $\sigma(n) = \frac{c}{\log(n)}$,

- *si $c > d_1(F)$, X_n converge vers le minimum global,*
- *si $c < d_1(F)$ le processus peut ne jamais atteindre le minimum global.*

La constante critique

On décompose l'ensemble E en zones :

- Vallées = composantes connexes d'un ensemble de niveau,
- hauteur d'une vallée = valeur de F au bord – valeur au fond.

Difficulté pour sortir d'une vallée : dépend principalement de sa hauteur.

d_1 = hauteur de la vallée critique (plus haute vallée ne contenant pas le minimum global).

Un argument heuristique

Pour un ensemble E à trois états :

$$F(0) = 0, \quad F(1) = h, \quad F(2) = -1.$$

Probabilité de rester en 0 une fois :

$$\mathbf{P}(X_{n+1} = 0 | X_n = 0) = 1 - \exp(-h/\sigma(n)) = 1 - n^{-h/c}.$$

Probabilité d'y rester indéfiniment :

$$\mathbf{P}[\forall n, X_n = 0] = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - n^{-h/c}).$$

Un argument heuristique

Pour un ensemble E à trois états :

$$F(0) = 0, \quad F(1) = h, \quad F(2) = -1.$$

Probabilité de rester en 0 une fois :

$$\mathbf{P}(X_{n+1} = 0 | X_n = 0) = 1 - \exp(-h/\sigma(n)) = 1 - n^{-h/c}.$$

Probabilité d'y rester indéfiniment :

$$\mathbf{P}[\forall n, X_n = 0] = \prod_{n=1}^{\infty} (1 - n^{-h/c}).$$

- Si $c \geq h$, le produit infini est nul : on saute presque sûrement la barrière.
- Si $c < h$, le produit est non-trivial : on peut rester indéfiniment bloqué.

Plan

- 1 Le recuit simulé
 - Algorithmes «physiques» d'optimisation
 - Le recuit simulé : principales propriétés
- 2 Discret ou continu ?
 - L'algorithme continu
 - Exemple de Robbins-Monro
- 3 Des outils «analytiques»
 - Les objets
 - Inégalités fonctionnelles
 - L'utilisation du spectre
- 4 Quelques résultats
 - Convergence de l'algorithme

Une version continue

On remplace le graphe E par \mathbb{R}^d . On veut suivre l'évolution d'un point dans \mathbb{R}^d . On se place aussi en **temps continu**.

Une version continue

On remplace le graphe E par \mathbb{R}^d . On veut suivre l'évolution d'un point dans \mathbb{R}^d . On se place aussi en **temps continu**.

L'algorithme du recuit :

- suit le gradient...

$$dX_t = -\nabla F(X_t)dt \quad .$$

Une version continue

On remplace le graphe E par \mathbb{R}^d . On veut suivre l'évolution d'un point dans \mathbb{R}^d . On se place aussi en **temps continu**.

L'algorithme du recuit :

- suit le gradient. . .
- en rajoutant (de moins en moins de) bruit

$$dX_t = -\nabla F(X_t)dt + \sqrt{\sigma(t)}dB_t.$$

Une version continue

On remplace le graphe E par \mathbb{R}^d . On veut suivre l'évolution d'un point dans \mathbb{R}^d . On se place aussi en **temps continu**.

L'algorithme du recuit :

- suit le gradient...
- en rajoutant (de moins en moins de) bruit

$$dX_t = -\nabla F(X_t)dt + \sqrt{\sigma(t)}dB_t.$$

Quelles différences apporte le continu ?

Un petit détour par Robbins-Monro

Recuit	$dX_t = -\sigma(t)dB_t - \nabla F(X_t)dt$
Robbins-Monro	$dX_t = -\gamma(t)(\nabla F(X_t) + dB_t)$

- Robbins-Monro : typiquement F est sympathique (convexe), mais son observation est bruitée. Vitesse critique $\gamma(t) = c/t$.
- Recuit simulé : le bruit est rajouté. La «température» décroît plus lentement. F a plusieurs minima. $\sigma(t) = c/\ln(t)$.

Des conditions habituelles pour la convergence

Pour la convergence de Robbins-Monro discret : conditions de croissance modérée de ∇F .

Or si F croît vite à l'infini, le retour devrait être plus rapide et l'algorithme meilleur !

L'oscillation

Dans R.-M. classique, pour $F(x) = \frac{1}{3}x^3$, $\nabla F(x) = x^2 \text{sg}(x)$.

$$X_{n+1} = X_n - 1/n (\nabla(U)(X_n) + \epsilon_n),$$

avec les ϵ_n i.i.d. uniformes sur $[-1, 1]$.

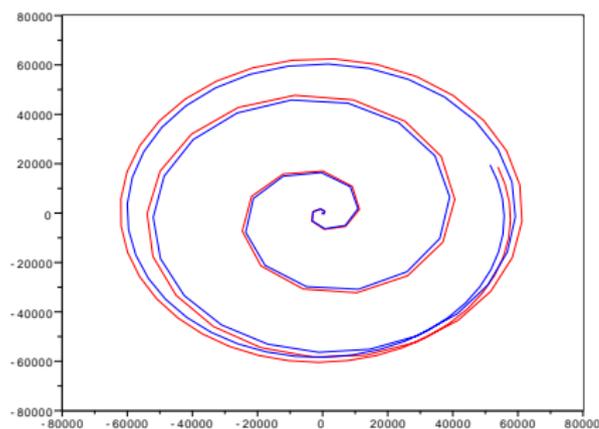
Proposition

Avec probabilité positive, $|X_n|$ converge vers l'infini.

En effet, si jamais $|X_k| \geq k^2$, pour un $k \geq 3$, alors $X_n \geq n^2$ pour tout $n \geq k$.

La force de rappel est «trop forte» et l'algorithme discret ne «voit pas» le changement de paysage quand il repasse zéro.

Des trajectoires discrètes



Trajectoires dans \mathbb{R}^2 de :

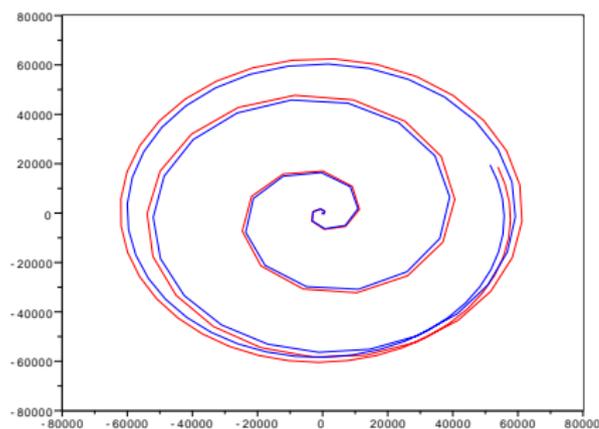
$$X_{n+1} = X_n - \gamma_n A X_n + \gamma_n \xi_n$$

$$\text{où } A = \begin{pmatrix} 1 & 10 \\ -10 & 1 \end{pmatrix}$$

En bleu : avec bruit,

En rouge : sans bruit.

Des trajectoires discrètes



- Vérifie la condition de rappel $\langle AX, X \rangle \geq 0$.
- Pourtant le système commence par exploser !

Quels outils ?

- Multiples outils possibles pour étudier ces algorithmes,
- ici on regarde des inégalités fonctionnelles, bien adaptées au cadre continu.

Plan

- 1 Le recuit simulé
 - Algorithmes «physiques» d'optimisation
 - Le recuit simulé : principales propriétés
- 2 Discret ou continu ?
 - L'algorithme continu
 - Exemple de Robbins-Monro
- 3 Des outils «analytiques»
 - Les objets
 - Inégalités fonctionnelles
 - L'utilisation du spectre
- 4 Quelques résultats
 - Convergence de l'algorithme

On regarde l'EDS

$$dX_t = \sqrt{\sigma(t)}dB_t - \nabla F(X_t)dt.$$

Que se passe-t-il à σ fixé ?

Évolution et équilibre

Le processus définit un *semi-groupe* :

$$P_t f(x) = \mathbf{E}_x[f(X_t)],$$

admettant un *générateur* :

$$Lf(x) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} (P_t f - f) \quad (P_t f = f + tLf + o(t))$$

Ici le générateur est explicite :

$$L_\sigma f = \sigma \Delta f - \nabla F \cdot \nabla f.$$

Évolution et équilibre

On a encore une mesure d'équilibre :

$$\mu_\sigma(dx) = \frac{1}{Z_\sigma} \exp\left(-\frac{F(x)}{\sigma}\right),$$

On retrouve l'invariance et la réversibilité.

Remarque

La réversibilité correspond au caractère auto-adjoint de P_t et L dans $L^2(\mu)$.

Équilibre et évolution

Remarque

L'évolution des densités est gouvernée par $P_t^ = P_t$.*

Si $X_0 \sim f_0 d\mu$,

$$\begin{aligned} \mathbf{E}[g(X_t)] &= \int P_t g(x) f_0(x) d\mu(x) \\ &= \int g(x) P_t^* f_0(x) d\mu(x) : \end{aligned}$$

La loi de X_t est a.c. par rapport à μ , $X_t \sim (P_t^* f_0) d\mu$.

Inégalités fonctionnelles

Idée

- Étudier l'évolution au cours du temps d'une quantité qui contrôle la convergence.
- Utiliser une hypothèse pour obtenir une inégalité différentielle.
- Obtenir des critères simples pour vérifier l'hypothèse. . .

Inégalité de Poincaré

Soit L le générateur d'un semi-groupe de mesure d'équilibre μ .

Définition

La mesure μ vérifie l'inégalité de Poincaré si, pour une constante C_P et pour toute f ,

$$\int (f - \int f d\mu)^2 d\mu \leq C_P \int f \cdot (-L)f d\mu.$$

Cas de référence :

$$Lf = \Delta f - \nabla F \cdot \nabla f,$$

$$\mu(dx) = \exp(-2F(x))dx,$$

$$\int f(-L)f d\mu = \int |\nabla f|^2 d\mu.$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

On veut étudier

$$P_t f - \mu f$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

On veut étudier

$$\mathbf{E}_\mu[(P_t f - \mu f)^2]$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

On veut étudier

$$V_t = \mathbf{Var}_\mu(P_t f) = \mathbf{E}_\mu[(P_t f - \mu f)^2]$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

On veut étudier

$$V_t = \mathbf{Var}_\mu(P_t f) = \mathbf{E}_\mu[(P_t f - \mu f)^2]$$

On dérive en t :

$$\begin{aligned} \frac{dV_t}{dt} &= 2\mathbf{E}[LP_t f (P_t f - \mu f)] \\ &= \dots (\text{IPP}) = -2 \int |\nabla P_t f|^2 d\mu. \end{aligned}$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

On veut étudier

$$V_t = \mathbf{Var}_\mu(P_t f) = \mathbf{E}_\mu[(P_t f - \mu f)^2]$$

On dérive en t :

$$\begin{aligned} \frac{dV_t}{dt} &= 2\mathbf{E}[LP_t f(P_t f - \mu f)] \\ &= \dots \text{(IPP)} = -2 \int |\nabla P_t f|^2 d\mu. \end{aligned}$$

On applique Poincaré à la fonction $P_t f$:

$$\begin{aligned} \frac{dV_t}{dt} &\leq -\frac{2}{C_P} V_t \\ &\implies \text{convergence exponentielle} \end{aligned}$$

Inégalité de Poincaré et décroissance L^2

$V_t = \mathbf{Var}_\mu(P_t f)$. Si $X_0 \sim fd\mu$,

$$V_t = \int (P_t f - 1)^2 d\mu$$

«distance du χ^2 » entre la loi de X_t ($P_t f d\mu$) et la loi limite (μ).

Proposition

Si l'inégalité de Poincaré est valable, la distance du χ^2 à la loi limite décroît exponentiellement.

D'autres inégalités (Sobolev logarithmique) contrôlent d'autres convergences (en entropie relative).

Établir une inégalité fonctionnelle

Nombreux critères :

- sur la fonction V directement,
- en cherchant des fonctions de Lyapunov,
- en reliant à d'autres questions (isopérimétrie, ...)

Établir une inégalité fonctionnelle

Nombreux critères :

- sur la fonction V directement,
- en cherchant des fonctions de Lyapunov,
- en reliant à d'autres questions (isopérimétrie, ...)

Pour l'inégalité de Poincaré, on peut aussi se ramener à l'étude du spectre du générateur dans L^2 .

Retour à la diffusion

Générateur infinitésimal :

$$L_\sigma f = \sigma \Delta f - \nabla F \cdot \nabla f.$$

L_σ admet la valeur propre 0 (f constantes).

L_σ est auto-adjoint dans $L^2(\mu_\sigma)$: son spectre est réel.

$(-L_\sigma)$ est positif.

Proposition

Si le spectre de $-L_\sigma$, privé de 0, est inclus dans $[C, \infty)$, l'opérateur L_σ a un trou spectral C , et

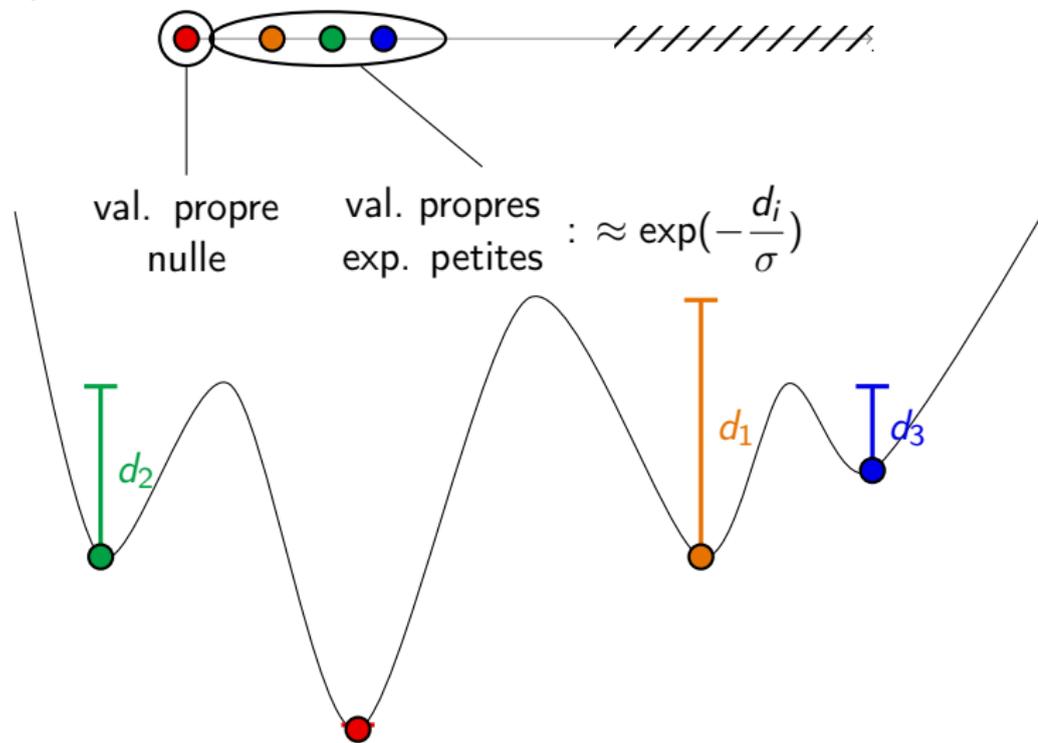
$$\mathbf{Var}_{\mu_\sigma}(P_t^\sigma f - \mu_\sigma f) \leq \exp(-2Ct) \mathbf{Var}_{\mu_\sigma}(f).$$

Le spectre de L_σ

Freidlin, Wentzell ; ... ; Bovier, Eckhoff, Gaynard et Klein :

Proposition

Si $F \rightarrow \infty$, $|\nabla F| \rightarrow \infty$, (...) l'asymptotique du spectre est connue pour $\sigma \rightarrow 0$.

Le spectre de L_σ 

Plan

- 1 Le recuit simulé
 - Algorithmes «physiques» d'optimisation
 - Le recuit simulé : principales propriétés
- 2 Discret ou continu ?
 - L'algorithme continu
 - Exemple de Robbins-Monro
- 3 Des outils «analytiques»
 - Les objets
 - Inégalités fonctionnelles
 - L'utilisation du spectre
- 4 Quelques résultats
 - Convergence de l'algorithme

Convergence de l'algorithme

- Modèle continu étudié par Chiang, Hwang et Sheu (88)
- Utilisation d'inégalités fonctionnelles : Holley, Kusuoka & Stroock (89), cas compact
- Inégalités fonctionnelles dans le cas \mathbb{R}^d : Royer (92), Miclo (92)

Théorème

Résultats de convergence de l'algorithme pour $\sigma(t)$ bien choisi, en un sens faible (la loi de X_t converge vers un Dirac en le minimum global).

Hypothèses dans \mathbb{R}^d : rappel fort en l'infini ($F \rightarrow \infty, \nabla F \rightarrow \infty$).

L'algorithme du recuit

Que se passe-t-il quand le potentiel F croît lentement à l'infini ?

- ① sur les inégalités fonctionnelles : plus d'inégalité de Poincaré
- ② sur le spectre : dégénérescence (cf. infra)

Un résultat de convergence

Théorème (Z.)

Sous des conditions de régularité dans un compact, et des conditions faibles de croissance, l'algorithme converge pour le même choix de $\sigma(t)$.

Un résultat de convergence

Théorème (Z.)

Sous des conditions de régularité dans un compact, et des conditions faibles de croissance, l'algorithme converge pour le même choix de $\sigma(t)$.

Question

Que se passe-t-il sur le spectre ?

Le cas dégénéré

Théorème (Klein, Z.)

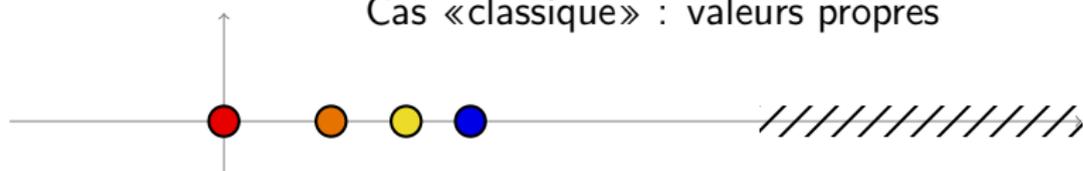
Sous les hypothèses précédentes, pour chaque puits du potentiel, le générateur a une résonance λ_i telle que :

$$\Re(\lambda_i) \approx \exp\left(-\frac{d_i}{\sigma}\right),$$

$$\Im(\lambda_i) \ll \Re(\lambda_i).$$

Résultat

Cas «classique» : valeurs propres



Cas de la croissance lente : résonances

