

Méthodes de Monte Carlo

Méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov

Jean-Michel Marin

Université de Montpellier

Institut Montpelliérain Alexander Grothendieck

Institut de Biologie Computationnelle (IBC)

Labex Numev



Plan

Méthodes faisant intervenir la loi uniforme sur $[0, 1]$

Méthode du rejet

Méthodes de Monte Carlo standard

Méthode de l'échantillonnage préférentiel

Rappels et compléments sur les Chaînes de Markov

Convergence des chaînes de Markov

Algorithme de Metropolis-Hastings

L'échantillonneur de Gibbs

Méthodes faisant intervenir la loi uniforme sur $[0, 1]$

X une variable aléatoire réelle ($X(\Omega) \subseteq \mathbb{R}$)

Fonction de répartition de X : $F_X(x) = \mathbb{P}(X \leq x) = \int_{-\infty}^x f(u) d\mu(u)$

Inverse généralisée de F_X : $F_X^{[-1]}(y) = \inf\{x : F(x) \geq y\}$ ($0 < y < 1$)

Si U est distribuée suivant une loi uniforme sur $[0, 1]$,

alors $F_X^{[-1]}(U)$ est distribuée suivant la loi $F_X(x)$.

$X \sim \text{Exp}(\lambda)$

$F_X(x; \lambda) = 1 - \exp(-\lambda x)$ si $x \geq 0$ et $F_X(x; \lambda) = 0$ si $x < 0$

$F_X^{[-1]}(y) = -\log(1 - y)/\lambda$ si $y \in]0, 1[$

Pour effectuer des simulations probabilistes sur ordinateur, on utilise un générateur de nombres pseudo-aléatoires.

Un tel générateur retourne une suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de nombre réels compris entre 0 et 1. Ces réels sont calculés par **un algorithme déterministe** mais imitent une réalisation d'une suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$.

Le bon comportement de la suite est vérifié à l'aide de tests statistiques.

Une méthode standard pour construire la suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est la congruence :

$$x_n = y_n / N$$

où les y_n sont des entiers compris entre 0 et $(N - 1)$ calculés grâce à la relation de récurrence :

$$y_{n+1} = (ay_n + b) \pmod{N}.$$

Le choix des entiers a , b et N est fait de façon à ce que la période du générateur (toujours plus petite que $N - 1$) soit aussi grande que possible et que les propriétés de la suite $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ soient proches de celles d'une réalisation d'une suite de variables iid suivant la loi uniforme sur $[0, 1]$.

Si U est une variable aléatoire uniforme sur $[0, 1]$ ($U \sim \mathcal{U}([0, 1])$), alors $X = a + (b - a)U$ est distribuée suivant une loi uniforme sur $[a, b]$.

Si $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$, alors $X = \mathbb{I}_{U \leq p} \sim \mathcal{B}(1, p)$.

Si U_1, \dots, U_n sont n variables aléatoires uniformes sur $[0, 1]$ indépendantes, alors $X = \sum_{i=1}^n \mathbb{I}_{U_i \leq p} \sim \mathcal{B}(n, p)$.

Il est toujours possible d'obtenir une simulation suivant une variable aléatoire qui prend les valeurs $(x_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ avec probabilités respectives $(p_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ (avec les $p_i \geq 0$ tels que $\sum_{i \in \mathbb{N}^*} p_i = 1$) à l'aide d'une seule variable uniforme sur $[0, 1]$.

Si $U \sim \mathcal{U}([0, 1])$, alors

$$X = x_1 \mathbb{I}_{U \leq p_1} + x_2 \mathbb{I}_{p_1 < U \leq p_1 + p_2} + \dots + x_i \mathbb{I}_{\sum_{j=1}^{i-1} p_j < U \leq \sum_{j=1}^i p_j} + \dots$$

est distribuée comme une variable aléatoire qui prend les valeurs $(x_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$ avec probabilités respectives $(p_i)_{i \in \mathbb{N}^*}$.

Pour implémenter cette méthode, il faut programmer une boucle sur i avec comme temps d'arrêt $\sum_{j=1}^{i-1} p_j < U \leq \sum_{j=1}^i p_j$. Cela peut s'avérer coûteux en temps de calcul lorsque la série de terme général p_i converge lentement vers 1.

Si U_1 et U_2 sont 2 variables aléatoires $\mathcal{U}([0, 1])$ indépendantes, alors

$$X_1 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \cos(2\pi U_2)$$

et

$$X_2 = \sqrt{-2 \ln(U_1)} \sin(2\pi U_2)$$

sont des variables aléatoires gaussiennes centrées réduites indépendantes.

Rappelons que si $X \sim \mathcal{N}(0, 1)$ alors $\mu + \sigma X \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$.

Méthode du rejet

On souhaite simuler une variable aléatoire qui possède la densité p sur \mathbb{R}^d .

On suppose qu'il existe une densité q sur \mathbb{R}^d suivant laquelle on sait simuler et une constante $k > 0$ telle que :

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \quad p(x) \leq kq(x).$$

L'algorithme d'acceptation-rejet est le suivant :

- 0) $i=1$,
- 1) Simuler Y_i suivant la loi de densité q ,
- 2) Calculer $M = \frac{p(Y_i)}{kq(Y_i)}$,
- 3) Simuler $U_i \sim \mathcal{U}([0, 1])$,
- 4) Si $U_i > M$, alors $i = i + 1$ et retour 1).
Si $U_i \leq M$, alors $X = Y_i$.

Notons $N = \inf\{i \geq 1 : kq(Y_i)U_i \leq p(Y_i)\}$,
nous avons $X = Y_N$.

$X = Y_N$ est distribuée suivant p .

La variable aléatoire N suit une loi géométrique de paramètre $1/k$.

Méthodes de Monte Carlo standard

Définition générale : utilisation du hasard pour résoudre un problème centré sur un calcul.

Il n'y a pas de consensus pour donner une définition plus précise.

Méthodes utilisées depuis plusieurs siècles : on retrouve des traces aussi lointaines qu'à l'époque de Babylone et de l'Ancien Testament !

[1733, aiguille de Buffon] : donner une valeur approchée à π .

On jette une aiguille de longueur l sur un sol formé de lattes parallèles qui créent des bandes de largeur d avec $l \leq d$.

Si l'aiguille est lancée uniformément sur le sol (à préciser !), la probabilité qu'elle intersecte l'une des jointures se trouvant entre les lattes est $\frac{2l}{\pi d}$.

Aussi, si l'on effectue plusieurs lancers indépendants et que l'on note p la proportion d'essais ayant touchés l'une des droites formant les séparations entre les lattes, π peut être estimé par

$$\frac{2l}{pd}.$$

[Pendant la seconde guerre mondiale, Los Alamos : Ulam, Metropolis et von Neumann] : préparation de la première bombe atomique.

L'appellation Monte-Carlo est due à Metropolis, inspiré par l'intérêt de Ulam pour le Poker.

Travail à Los Alamos : simuler directement les problème de dispersion et d'absorption de neutrons pour les matériaux fissibles.

Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires et X une variable aléatoire :

- on dit que $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge presque sûrement vers X ssi

$$\mathbb{P} \left[\left[\lim_{n \rightarrow \infty} X_n = X \right] \right] = 1.$$

- on dit que $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ converge en probabilité vers X ssi

$$\forall \epsilon > 0, \lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P} [|X_n - X| > \epsilon] = 0.$$

- on dit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de loi μ_n converge en loi vers X de loi μ ssi, pour toute fonction f continue bornée,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{E}_{\mu_n} (f(X_n)) = \mathbb{E}_{\mu} (f(X)).$$

$\text{ps} \implies \mathbb{P} \implies \mathcal{L}$.

$X_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X$ ssi les fonctions de répartition de X_n , F_{X_n} convergent vers la fonction de répartition F_X de X en tout point x où F_X est continue.

Théorème (loi forte des grands nombres) Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite iid de variables aléatoires de loi f . Si $\mathbb{E}_f(|X_i|) < \infty$, alors

$$\bar{X}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \xrightarrow{\text{ps}} \mathbb{E}_f(X_1).$$

Théorème (théorème central limite) Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite iid de variables aléatoires de loi f . Si $\mathbb{E}_f(|X_i|^2) < \infty$, alors

$$\sqrt{n} \left(\frac{\bar{X}_n - \mathbb{E}_f(X_1)}{\sqrt{\mathbb{V}_f(X_1)}} \right) \xrightarrow{\mathcal{L}} N(0, 1).$$

Lemme (Slutsky) Si $X_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X$ et $Y_n \xrightarrow{\mathcal{L}} a$, alors

- $X_n Y_n \xrightarrow{\mathcal{L}} aX$,
- $X_n + Y_n \xrightarrow{\mathcal{L}} X + a$,
- Si de plus $a \neq 0$, $\frac{X_n}{Y_n} \xrightarrow{\mathcal{L}} X/a$.

Nous souhaitons approcher

$$\mathbb{E}_f(h(X)) = \int h(x)f(x)d\mu(x) < \infty$$

(f est la densité de X par rapport à la mesure μ).

La méthode de Monte-Carlo standard consiste à simuler une suite iid X_1, \dots, X_n suivant f et approcher $\mathbb{E}_f(h(X))$ par

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i).$$

D'après la loi forte des grands nombres,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \xrightarrow{\text{ps}} \mathbb{E}_f(h(X)),$$

estimateur convergent.

Aussi,

$$\mathbb{E}_{f^{\otimes n}} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \right) = \mathbb{E}_f(h(X))$$

estimateur sans biais.

Par ailleurs,

$$\mathbb{V}_{f^{\otimes n}} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \right] = \frac{1}{n} \mathbb{V}_f(h(X)).$$

où $\mathbb{V}_f(h(X)) = \mathbb{E}_f [(h(X) - \mathbb{E}_f(h(X)))^2]$.

On peut ainsi estimer la variance de l'estimateur Monte-Carlo standard de $\mathbb{E}_f(h(X))$ en utilisant

$$\frac{1}{n} \left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(h(X_i) - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n h(X_j) \right)^2 \right]$$

qui est un estimateur sans biais de $\mathbb{V}_f(h(X))/n$.

Si $\mathbb{E}_f(|h(X)|^2) < \infty$, d'après le théorème central limite,

$$\frac{\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) - \mathbb{E}_f(h(X)) \right)}{\sqrt{\mathbb{V}_f(h(X))}} \longrightarrow_{\mathcal{L}} N(0, 1).$$

On peut construire intervalle de confiance asymptotique pour $\mathbb{E}_f(h(X))$.

Vitesse de convergence pour diverses règles de quadrature et pour la méthode de Monte-Carlo en dimension s et en utilisant n points :

Règle trapézoïdale : $n^{-2/s}$

Règle de Simpson : $n^{-4/s}$

Règle de Gauss (à m points) : $n^{-(2m-1)/s}$

Méthode de Monte-Carlo : $n^{-1/2}$

Méthode de l'échantillonnage préférentiel (Importance Sampling)

Nous souhaitons approcher

$$\mathbb{E}_f(h(X)) = \int h(x)f(x)d\mu(x) < \infty .$$

Nous considérons une nouvelle loi de probabilité de densité g par rapport à μ et telle que $f|h|$ est absolument continue par rapport à g (si $g(x) = 0$ alors $f(x)|h(x)| = 0$).

$$\mathbb{E}_f(h(X)) = \int h(x)f(x)d\mu(x) = \int h(x)\frac{f(x)}{g(x)}g(x)d\mu(x) = \mathbb{E}_g \left[h(X)\frac{f(X)}{g(X)} \right].$$

La méthode de l'échantillonnage préférentiel consiste à simuler une suite iid X_1, \dots, X_n suivant g et approcher $\mathbb{E}_f(h(X))$ par

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)}.$$

g est appelée fonction d'importance.

Si $f|h|$ est absolument continue par rapport à g , d'après la loi forte des grands nombres,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \xrightarrow{\text{ps}} \mathbb{E}_f(h(X)),$$

estimateur convergent.

Aussi,

$$\mathbb{E}_{g^{\otimes n}} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \right) = \mathbb{E}_f(h(X)),$$

estimateur sans biais.

Par ailleurs,

$$\mathbb{V}_{g^{\otimes n}} \left[\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \right] = \frac{1}{n} \mathbb{V}_g \left[h(X) \frac{f(X)}{g(X)} \right]$$

où

$$\mathbb{V}_g \left[h(X) \frac{f(X)}{g(X)} \right] = \mathbb{E}_f \left[h(X)^2 \frac{f(X)}{g(X)} \right] - [\mathbb{E}_f(h(X))]^2 .$$

On peut ainsi estimer la variance de l'estimateur d'échantillonnage préférentiel de $\mathbb{E}_f(h(X))$ en utilisant

$$\frac{1}{n} \left[\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n \left(h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} - \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n h(X_j) \frac{f(X_j)}{g(X_j)} \right)^2 \right]$$

qui est un estimateur sans biais de $\mathbb{V}_g \left[h(X) \frac{f(X)}{g(X)} \right] / n$.

La fonction d'importance qui minimise $\mathbb{V}_g \left[h(X) \frac{f(X)}{g(X)} \right]$ est

$$g^*(x) = \frac{f(x)|h(x)|}{\int f(x)|h(x)|d\mu(x)}.$$

$f|h|$ est absolument continue par rapport à g^* .

Si $\mathbb{E}_g \left[\left| h(X) \frac{f(X)}{g(X)} \right|^2 \right] = \mathbb{E}_f \left[|h(X)|^2 \frac{f(X)}{g(X)} \right] < \infty$, d'après le théorème central limite,

$$\frac{\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} - \mathbb{E}_f(h(X)) \right)}{\sqrt{\mathbb{V}_g [h(X) f(X) / g(X)]}} \xrightarrow{\mathcal{L}} N(0, 1).$$

Si $f(x)/g(x) < M$ et si $\mathbb{V}_f(h(X)) < \infty$, alors

$$\mathbb{E}_f \left[|h(X)|^2 \frac{f(X)}{g(X)} \right] < \infty.$$

$$\mathbb{E}_f \left[|h(X)|^2 \frac{f(X)}{g^*(X)} \right] = (\mathbb{E}_f [|h(X)|])^2 < \infty.$$

Il existe de nombreux cas où la constante de normalisation de f est inconnue (statistique bayésienne) :

$$f(x) = \tilde{f}(x) / \int \tilde{f} d\mu(x) = \tilde{f}(x) / c.$$

La méthode de l'échantillonnage préférentiel auto-normalisée consiste à simuler une suite iid X_1, \dots, X_n suivant g et approcher $\mathbb{E}_f(h(X))$ par

$$\sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \Big/ \sum_{i=1}^n \frac{f(X_i)}{g(X_i)}.$$

Cet estimateur ne dépend que de \tilde{f} et pas de c .

Si f est absolument continue par rapport à g , d'après la loi forte des grands nombres,

$$\sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \bigg/ \sum_{i=1}^n \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \xrightarrow{\text{ps}} \mathbb{E}_f(h(X)),$$

estimateur convergent.

Par contre,

$$\mathbb{E}_{g^{\otimes n}} \left(\sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \bigg/ \sum_{i=1}^n \frac{f(X_i)}{g(X_i)} \right) \neq \mathbb{E}_f(h(X)),$$

estimateur biaisé.

Si $\mathbb{E}_f \left[|h(X)|^2 \frac{f(X)}{g(X)} \right] < \infty$, $\mathbb{E}_f \left[\frac{f(X)}{g(X)} \right] < \infty$, alors

$$\sqrt{n} \left(\sum_{i=1}^n h(X_i) \frac{f(X_i)}{g(X_i)} / \sum_{i=1}^n \frac{f(X_i)}{g(X_i)} - \mathbb{E}_f(h(X)) \right) \xrightarrow{\mathcal{L}}$$

$$N \left(0, \mathbb{E}_f \left([h(X) - \mathbb{E}_f(h(X))]^2 f(X)/g(X) \right) \right) .$$

La fonction d'importance qui minimise

$\mathbb{E}_f \left([h(X) - \mathbb{E}_f(h(X))]^2 f(X)/g(X) \right)$ est

$$g^\#(x) = \frac{f(x) |h(x) - \mathbb{E}_f(h(X))|}{\int f(x) |h(x) - \mathbb{E}_f(h(X))| d\mu(x)} .$$

Remarquons que si h est la fonction constante, alors $f|h|$ n'est pas absolument continue par rapport à $g^\#(x) = 0$ (dans ce cas, l'estimateur d'échantillonnage préférentiel auto-normalisé a une variance nulle).

Dans le cas où f est une densité relativement à la mesure de Lebesgue, $f|h|$ est absolument continue par rapport à $g^\#$.

Rappels et compléments sur les Chaînes de Markov

Soit π une loi de probabilité sur (Ω, \mathcal{A}) .

Définition 1 : Une chaîne de Markov est un processus $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ tel que

$$\mathbb{P}(X_k \in A | X_0 = x_0, \dots, X_{k-1} = x_{k-1}) = \mathbb{P}(X_k \in A | X_{k-1} = x_{k-1}).$$

La chaîne est dite homogène si $\mathbb{P}(X_k \in A | X_{k-1} = x)$ ne dépend pas de k .

Exemple : Marche aléatoire

Il s'agit d'un processus $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ défini comme suit :

$$X_0 \sim \nu$$

et

$$X_k = X_{k-1} + \epsilon_k, \quad \forall k \in \mathbb{N}^*$$

où ϵ_1, \dots est un processus constitué de variables iid de loi \mathcal{L} (par exemple $N(0, \sigma^2)$).

Définition 2 : Une transition sur (Ω, \mathcal{A}) est une application $P : (\Omega, \mathcal{A}) \longrightarrow [0, 1]$ telle que :

- 1) $\forall A \in \mathcal{A}, P(\cdot, A)$ est mesurable ;
- 2) $\forall x \in \Omega, P(x, \cdot)$ est une probabilité sur (Ω, \mathcal{A}) .

$(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène de transition P si

$$\mathbb{P}(X_k \in A | X_{k-1} = x) = P(x, A), \quad \forall x \in \Omega, \quad \forall A \in \mathcal{A}.$$

Dans le cas de la marche aléatoire, si $\mathcal{L} = N(0, \sigma^2)$, le processus $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène de transition : $\forall A \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}}$

$$P(x, A) = \int_A \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(y-x)^2\right) dy.$$

Soit $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène de transition P et de loi initiale $X_0 \sim \nu$, on notera :

- P_ν la loi de la chaîne $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$;
- νP^k la loi de X_k : $\forall A \in \mathcal{A}$,

$$\nu P^k(A) = \mathbb{P}(X_k \in A) = \int \nu(dx_0) P(x_0, dx_1) P(x_1, dx_2) \dots P(x_{k-1}, A) ;$$

- $P^k(x, A) = \mathbb{P}(X_k \in A | X_0 = x)$.

On peut simuler π de façon approché en utilisant une chaîne de Markov homogène.

Pour ce faire, il faut être capable de construire une transition P telle que pour toute loi initiale ν , $\nu P^k \xrightarrow{VT} \pi$ lorsque $k \rightarrow \infty$.

Cette convergence est celle de la norme en variation totale :

$$\|\nu P^k - \pi\|_{VT} = \sup_{A \in \mathcal{A}} |\nu P^k(A) - \pi(A)|.$$

En particulier,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \nu P^k(A) = \pi(A).$$

Définition 3 :

- P est π -irréductible si $\forall x \in \Omega$ et $\forall A \in \mathcal{A}$ tel que $\pi(A) > 0$,
 $\exists k(= k(x, A))$ tel que $P^k(x, A) > 0$.
- P est π -invariante ssi $\pi P = \pi$ ssi

$$\pi P(A) = \int \pi(dx_0) P(x_0, A) = \int_A \pi(dx).$$

- P est π -réversible si $\forall A, B \in \mathcal{A}$,

$$\int_A P(x, B) \pi(dx) = \int_B P(x, A) \pi(dx).$$

Si P est π -réversible alors P est π -invariante.

En effet, si P est π -réversible alors, $\forall B \in \mathcal{A}$,

$$\int_{\Omega} P(x, B) \pi(dx) = \int_B P(x, \Omega) \pi(dx) = \int_B \pi(dx).$$

Définition 4 :

- P est périodique de période $d \geq 2$ s'il existe une partition $\Omega_1, \dots, \Omega_d$ de Ω telle que $\forall x \in \Omega_i, P(x, \Omega_{i+1}) = 1, \forall i$ avec la convention $d+1 = 1$.
- Une chaîne π -irréductible et π -invariante est récurrente :
 $\forall A \in \mathcal{A}$ tel que $\pi(A) > 0$, elle vérifie
 - 1) $\forall x \in \Omega, \mathbb{P}(X_k \in A \text{ infiniment souvent} | X_0 = x) > 0$;
 - 2) $\exists x \in \Omega, \mathbb{P}(X_k \in A \text{ infiniment souvent} | X_0 = x) = 1$.
- Le chaîne est Harris-récurrente si le point 2) de la définition précédente est vérifié pour tout $x \in \Omega$.
- La chaîne est ergodique si elle est Harris-récurrente et apériodique (pas périodique).

Convergence des chaînes de Markov

Si P est π -irréductible et π -invariante alors P est récurrente. Dans ce cas, la mesure invariante est unique (à une constante multiplicative près).

La chaîne est dite positive récurrente si la masse totale de cette mesure est finie (c'est le cas si π est une probabilité).

Théorème : Supposons que P soit π -irréductible et π -invariante. Alors P est récurrente positive et π est l'unique loi invariante de P . Si P est Harris-récurrente et apériodique (ergodique), alors

$$\nu P^k \xrightarrow{VT} \pi .$$

La condition d'Harris-réurrence est difficile à obtenir. Elle est satisfaite pour les 2 principales familles de simulateurs : l'échantillonneur de Gibbs, l'algorithme de Hastings-Metropolis.

Théorème : Si la chaîne de Markov $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est ergodique avec pour distribution stationnaire π et si h est une fonction réelle telle que $\mathbb{E}_\pi(|h(X)|) < \infty$, alors, quelle que soit la distribution initiale ν ,

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) \xrightarrow{\text{ps}} \mathbb{E}_\pi(h(X)).$$

Vitesse de convergence ?

Définition 5 : La chaîne de Markov $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ de noyau de transition P est dite uniformément ergodique s'il existe $M > 0$ et $0 < r < 1$ tel que

$$\sup_{x \in \Omega} \sup_{A \in \mathcal{A}} |P^n(x, A) - \pi(A)| \leq Mr^n .$$

Théorème : Si la chaîne de Markov $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est uniformément ergodique avec pour distribution stationnaire π et si h est une fonction réelle telle que $\mathbb{E}_\pi(|h(X)|) < \infty$, alors, quelle que soit la distribution initiale ν , il existe $\sigma(f) > 0$ telle que

$$\sqrt{n} \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n h(X_i) - \mathbb{E}_\pi(h(X)) \right) \longrightarrow_{\mathcal{L}} N(0, (\sigma(h))^2) .$$

Algorithme de Metropolis-Hastings

La loi de probabilité cible Π admet une densité π par rapport à la mesure dominante μ :

$$\Pi(dx) = \pi(x)\mu(dx).$$

Soit x tel que $\pi(x) > 0$, on dispose d'un noyau de transition Q qui admet pour densité $q(x, \cdot)$ par rapport à μ :

$$Q(x, dy) = q(x, y)\mu(dy).$$

Pour x tel que $\pi(x) > 0$, il n'est pas nécessaire que $Q(x, \cdot)$ soit absolument continu par rapport à μ .

L'algorithme de Metropolis-Hastings est le suivant :

- 0) Choisir $x^{(0)}$ telle que $\pi(x^{(0)}) > 0$ et $t = 1$,
- 1) Simuler $\tilde{x} \sim Q(x^{(t-1)}, \cdot)$,
- 2) Si $\pi(\tilde{x}) = 0$, alors $x^{(t)} = x^{(t-1)}$, $t = t + 1$ et retour 1),
- 3) Si $\pi(\tilde{x}) > 0$, calculer

$$\rho(x^{(t-1)}, \tilde{x}) = \frac{\pi(\tilde{x})/q(x^{(t-1)}, \tilde{x})}{\pi(x^{(t-1)})/q(\tilde{x}, x^{(t-1)})},$$

- 3) Simuler $u \sim \mathcal{U}([0, 1])$,
- 4) Si $u \leq \rho(x^{(t-1)}, \tilde{x})$, alors $x^{(t)} = \tilde{x}$ sinon $x^{(t)} = x^{(t-1)}$,
- 5) $t = t + 1$ et retour 1).

Partant de x ($\pi(x) > 0$), la probabilité d'acceptation du point y ($\pi(y) > 0$) est donnée par :

$$\alpha(x, y) = \min \left[1, \frac{\pi(y)/q(x, y)}{\pi(x)/q(y, x)} \right].$$

Aussi, quelle que soit la valeur de x telle que $\pi(x) > 0$, le noyau de transition associé à l'algorithme de Metropolis-Hastings est donnée par :

$$K(x, dy) = q(x, y)\mu(dy)\alpha(x, y) + \left[1 - \int q(x, z)\alpha(x, z)\mu(dz) \right] \delta_x(dy),$$

où $\delta_x(\cdot)$ est la masse de Dirac au point x .

On peut montrer aisément que K est Π -réversible. En effet,

$$\begin{aligned} \Pi(dx)K(x, dy) &= \min [\pi(y)q(y, x), \pi(x)q(x, y)] \mu(dy)\mu(dx) \\ &+ \left\{ \pi(x)\mu(dx) - \int \min [\pi(z)q(z, x), \pi(x)q(x, z)] \mu(dz) \right\} \delta_x(dy), \end{aligned}$$

et par ailleurs

$$\begin{aligned} \Pi(dy)K(y, dx) &= \min [\pi(x)q(x, y), \pi(y)q(y, x)] \mu(dx)\mu(dy) \\ &+ \left\{ \pi(y)\mu(dy) - \int \min [\pi(x)q(x, z), \pi(z)q(z, x)] \mu(dz) \right\} \delta_y(dx). \end{aligned}$$

Théorème : Si le noyau de transition Q est π -irréductible, alors la chaîne de Markov générée par l'algorithme de Hastings-Metropolis est π -irréductible et π -invariante, Harris-récurrente et apériodique.

Cas particuliers :

i) Q est une transition de type marche aléatoire : $q(x, y) = q_{RW}((x - y))$
et $q_{RW}(x) = q_{RW}(-x)$.

ii) Q est un noyau de transition indépendant : $q(x, y) = q(y)$.

L'échantillonneur de Gibbs

L'objectif : simuler une loi multi-dimensionnelle.

Soit un vecteur aléatoire $X = (X_1, X_2, \dots, X_d)$ de loi Π .

Notons Π_i la loi de X_i sachant

$$X_{-i} = (X_1, \dots, X_{i-1}, X_{i+1}, \dots, X_d) = x_{-i}.$$

Les lois Π_i sont appelées les lois conditionnelles complètes.

L'échantillonneur de Gibbs est construit à partir de ces lois.

L'échantillonneur de Gibbs est le suivant :

- 0) Choisir $x^{(0)}$ et $t = 1$,
- 1) Simuler $x_1^{(t)} \sim \Pi_1(\cdot | x_2^{(t-1)}, \dots, x_d^{(t-1)})$,
- 2) Simuler $x_2^{(t)} \sim \Pi_2(\cdot | x_1^{(t)}, x_3^{(t-1)}, \dots, x_d^{(t-1)})$,
- 3) Simuler $x_3^{(t)} \sim \Pi_3(\cdot | x_1^{(t)}, x_2^{(t)}, x_4^{(t-1)}, \dots, x_d^{(t-1)})$, ...
- d) Simuler $x_d^{(t)} \sim \Pi_d(\cdot | x_1^{(t)}, \dots, x_{d-1}^{(t)})$,
- d+1) $t = t + 1$ et retour 1).

Théorème : La chaîne de Markov générée en utilisant l'échantillonneur de Gibbs est Π -irréductible, Π -invariante, Harris-récurrente et apériodique.