Les méthodes MCMC pour estimer des espérances et le débiaisement des estimateurs MCMC

Anatole Coulais

Université de Montréal

30/11/2023

Unbiased Markov chain Monte Carlo methods with couplings

Pierre E. Jacob,

Harvard University, Cambridge, USA

John O'Leary

Harvard University, Cambridge, and Acadian Asset Management, Boston, USA

and Yves F. Atchadé

Boston University, USA

Sommaire

I/ Les méthodes MCMC et l'algorithme de Métropolis-Hastings pour estimer des espérances I

1) L'idée des méthodes MCMC

Soient $\mathcal{X} \subset \mathbb{R}^d$, $\pi : \mathcal{B}(\mathcal{X}) \mapsto [0:1]$ une mesure de probabilité, $h : \mathcal{X} \mapsto \mathbb{R}$ mesurable telle que $\mathbb{E}_\pi(|h(X)|^p) < \infty$ avec $p > 2$ et $(X_t)_{t \geq 0}$ une chaîne de Markov telle que $\lim\limits_{t \to \infty} \mathbb{E}(h(X_t)) = \mathbb{E}_\pi(h(X))$

On cherche à estimer $\mu := \mathbb{E}_\pi(h(X)) = \displaystyle\int_{\mathcal{X}} h(x)\pi(x)dx$.

Idée des méthodes MCMC : il existe une loi des grands nombres pour les chaînes de Markov. On peut avoir :

$$\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1} h(X_t) \xrightarrow[T \to +\infty]{p.s} \mathbb{E}_\pi(h(X))$$

On a donc une autre méthode que Monte Carlo pour estimer μ. Avec les méthodes MCMC, il n'est pas nécessaire de simuler des copies i.i.d de π.

- Probabilité stationnaire : $(X_t)_{t\geq 0}$ admet π comme probabilité stationnaire (ou invariante) :

$$\text{Si } \exists N \geq 0 \text{ tel que } X_N \sim \pi \implies \forall n \geq N,\ X_n \sim \pi$$

On a l'intuition que sous certaines conditions supplementaires, la chaîne $(X_t)_{t\geq 0}$ qui admet π comme loi invariante va avoir : $X_t \xrightarrow[t\to+\infty]{\mathcal{L}} \pi$

Théorème Ergodique : La loi des grands nombres pour les chaînes de Markov :

- Si $(X_t)_{t\geq 0}$ est une chaîne de Markov, de loi stationnaire π, irreductible, on a :

$$\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1} h(X_t) \underset{T\to+\infty}{\xrightarrow{p.s}} \mathbb{E}_\pi(h(X)) = \mu$$

Algorithme de Metropolis-Hastings :

- Noyau de proposition : $Q(X_t, .)$ une loi de probabilité facile à simuler qui dépend de $X_t \in \mathcal{X}$. On note $q(X_t, .)$ sa densité.
(Souvent, quand $\mathcal{X} = \mathbb{R}$, on utilise $Q(x, .) = \mathcal{N}(x, \sigma^2)$ ou $Q(x, .) = U([x-1, x+1])$ où $x \in \mathbb{R}$.)
- Fonction d'acceptation : $\alpha(x, y) = min\left[1, \frac{\pi(y)q(y, x)}{\pi(x)q(x, y)}\right]$

Algorithme de Metropolis-Hastings :

$$X_0 \sim \pi_0 \text{ (loi de } X_0)$$
$$\forall t \in \mathbb{N},\ U \sim U([0,1]) \text{ et } X^* \sim Q(X_t, .)$$
$$\text{- if } U \leq \alpha(X_t, X^*) \quad : X_{t+1} = X^* \text{ (proposition acceptée)}$$
$$\text{else : } X_{t+1} = X_t \quad \text{(proposition refusée)}$$

Grâce à α, $(X_t)_{t\geq 0}$ est π-stationnaire (et est irreductible). $(X_t)_{t\geq 0}$ vérifie les hypothèses du théorème Ergodique et avec d'autres hypothèses vérifiées par l'algorithme de Metropolis-Hastings, on a :

$$\lim_{T\to\infty} \mathbb{E}(\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1} h(X_t)) = \mathbb{E}_\pi(h(X))$$

L'estimateur est biaisé mais asymptotiquement sans biais.

Rodage : Comme $X_t \xrightarrow[t \to +\infty]{\mathcal{L}} \pi$ mais que l'on n'a pas $\mathcal{L}(X_t) = \pi \ \forall t \in \mathbb{N}$ les premières réalisations de X_t peuvent ne pas ressembler à π. Il est courant d'enlever les $k \in \mathbb{N}$ premiers X_t dans l'estimateur :

$$\frac{1}{T-k+1} \sum_{t=k}^{T} h(X_t)$$

Exemple, l'algorithme de Metropolis-Hastings :

$\forall x \in \mathbb{R}, \pi(x) := \frac{e^{-x}}{C}\mathbb{I}_{[0,1]}(x)$ où $C := \int_0^1 e^{-x}dx\ (= 1 - e^{-1})$

$Q(x,.) := U([x - \frac{3}{4} : x + \frac{3}{4}])$ et $h(x) := Cx$.

On souhaite estimer :

$$\mathbb{E}_\pi(h(X)) = \int_0^1 xe^{-x}dx\ (= 1 - 2e^{-1})$$

Avec l'algorithme de Metropolis on obtient :

$$\frac{1}{T-k+1}\sum_{t=k}^{T} h(x_t) = 0.26389 \approx 1 - 2e^{-1} = \mathbb{E}_\pi(h(X)) \approx 0.26424$$

Où $(x_t)_{t\in[\![k,T]\!]}$ est une réalisation de $(X_t)_{t\in[\![k,T]\!]}$ avec $k = 1000$ et $T = 10^6$.

$\frac{1}{T-k+1}\sum_{t=k}^{T} h(X_t)$ est biaisé mais asymptotiquement sans biais :

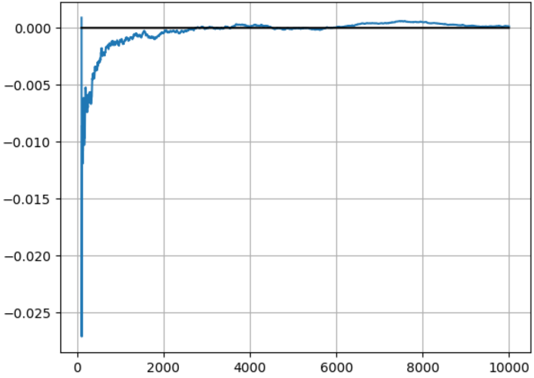
Abscisse :

$T \in [\![100, 10\ 000]\!]$

Ordonnée :

$\frac{1}{R}\sum_{r=1}^{R} \widehat{\mu}_{k,T}^{(r)} - \mathbb{E}_{\pi}(h(X)) \approx \mathbb{E}\left[\frac{1}{T-k+1}\sum_{t=k}^{T} h(X_t) - \mathbb{E}_{\pi}(h(X))\right]$

avec R = 100 et k = 100



- $((X_t, Y_t))_{t\geq 0}$ avec $(Y_t)_{t\geq 0}$ étant une copie de $(X_t)_{t\geq 0}$, qui suit l'algorithme de Metropolis-Hastings de loi cible π et de noyau de proposition $Q(.,.)$. $(X_t)_{t\geq 0}$ et $(Y_t)_{t\geq 0}$ sont corrélées Dans $((X_t, Y_t))_{t\geq 0}$.

- $((X_{t+1}, Y_t))_{t\geq 0}$ est une chaîne de Markov telle que :

après que $\tau := \inf\{t \geq 1 : X_t = Y_{t-1}\}$ soit réalisé les chaînes restent égales : $\forall t \geq \tau,\ X_t = Y_{t-1}$.

On peut definir $((X_t, Y_t))_{t\geq 0}$ pour d'autres algorithmes MCMC que Metropolis-Hastings. Mais dans ce cas, $((X_t, Y_t))_{t\geq 0}$ doit satisfaire des propriétés supplémentaires qui étaient induites par le fait que $(X_t)_{t\geq 0}$ et $(Y_t)_{t\geq 0}$ suivent l'algorithme de Metropolis-Hastings.

On souhaite trouver un estimateur H tel que : $\mathbb{E}(H) = \mathbb{E}_\pi(h(X))$. Soit $l \in \mathbb{N}$:

$$\mathbb{E}_\pi(h(X)) = \lim_{t\to\infty} \mathbb{E}(h(X_t)) \qquad \text{(hypothèse sur } (X_t)_{t\geq 0})$$

$$= \mathbb{E}(h(X_l)) + \left[\lim_{t\to\infty} \mathbb{E}(h(X_t)) - \mathbb{E}(h(X_l))\right]$$

$$= \mathbb{E}(h(X_l)) + \sum_{t=l+1}^{\infty} [\ \mathbb{E}(h(X_t)) - \mathbb{E}(h(X_{t-1}))\ ] \qquad \text{(télescopage)}$$

$$= \mathbb{E}(h(X_l)) + \sum_{t=l+1}^{\infty} \mathbb{E}\left[h(X_t) - h(Y_{t-1})\right] \qquad (\mathcal{L}(X_{t-1}) = \mathcal{L}(Y_{t-1}))$$

$$= \mathbb{E}\left[h(X_l) + \sum_{t=l+1}^{\infty} (h(X_t) - h(Y_{t-1}))\right] \qquad \text{(Inversion série/espérance)}$$

Enfin puisque, $\forall t \geq \tau,\ X_t = Y_{t-1}$, on a :

$$\mathbb{E}_\pi(h(X)) = \mathbb{E}\left[h(X_l) + \sum_{t=l+1}^{\tau-1} (h(X_t) - h(Y_{t-1}))\right].$$

Donc $H_l(X, Y) := h(X_l) + \sum_{t=l+1}^{\tau-1} (h(X_t) - h(Y_{t-1}))$ est un estimateur sans biais de μ.

Soit $m \in \mathbb{N}^*$:
Pour calculer une réalisation de $H_m(X, Y)$ il faut simuler $((X_t, Y_{t-1}))_{t \geq 1}$ jusqu'à $max(\tau, m)$.

Mais comme $max(\tau, l) \leq max(\tau, m)$ pour tout $l \in [\![1, m]\!]$, avec la même réalisation de la chaîne, on peut calculer $H_l(X, Y)$ pour tout $l \in [\![1, m]\!]$.

Soient $k \in \mathbb{N}$ et $m \geq k$, on peut donc considérer l'estimateur sans biais :

$$H_{k:m}(X, Y) := \frac{1}{m - k + 1} \sum_{l=k}^{m} H_l(X, Y).$$

Après reformulation, l'estimateur peut également s'écrire :

$$H_{k:m}(X,Y) = \frac{1}{m-k+1}\sum_{l=k}^{m} h(X_l) \; + \sum_{l=k+1}^{\tau-1} min(1, \frac{l-k}{m-k+1})[h(X_l) - h(Y_{l-1})]$$

III/simulation de $H_{k:m}(X, Y)$ I

1) Première tentative de simulation avec un couplage naïf du processus

L'objectif est maintenant de simuler $max(\tau, m)$ itérations de $((X_t, Y_{t-1}))_{t\geq 1}$ afin de calculer une réalisation de $H_{k:m}(X, Y)$.

On veut que :
1) les deux chaînes $(X_t)_{t\geq 0}$ et $(Y_t)_{t\geq 0}$ suivent marginalement l'algorithme de Metropolis-Hastings.
2) $(X_t)_{t\geq 0}$ et $(Y_t)_{t\geq 0}$ soient couplées de sorte qu'après que τ soit réalisé, elles restent égales : $\forall t \geq \tau,\ X_t = Y_{t-1}$.

Il suffit de simuler les deux chaînes indépendamment en suivant l'algorithme de Metropolis-Hastings jusqu'à ce que τ soit réalisé. Ensuite, il faut les coupler de manière à ce qu'elles continuent de suivre marginalement l'algorithme de Metropolis-Hastings tout en restant égales l'une à l'autre.

Première tentative de simulation de $((X_t, Y_{t-1}))_{t\geq 1}$:

- $X_0 \sim \pi_0, \;\; Y_0 \sim \pi_0$
- $U \sim U([0,1]),\; X^* \sim Q(X_0, .)$

if $U \leq \alpha(X_0, X^*)$: $X_1 = X^*$
else : $X_1 = X_0$

- $\forall t \in [\![1, \tau - 1]\!]$ (i.e $X_t \neq Y_{t-1}$) :

$U, V \sim U([0,1]),\; X^* \sim Q(X_t, .)$ et $Y^* \sim Q(Y_{t-1}, .)$
if $U \leq \alpha(X_t, X^*)$: $X_{t+1} = X^*$
else : $X_{t+1} = X_t$
if $V \leq \alpha(Y_{t-1}, Y^*)$: $Y_t = Y^*$
else : $Y_t = Y_{t-1}$

Première tentative de simulation de $((X_t, Y_{t-1}))_{t\geq 1}$:

On utilise U pour les deux chaînes. Puisque $X_t = Y_{t-1}$,
$Q(X_t, .) = Q(Y_{t-1}, .)$ et X^* peut également servir de proposition pour Y_t.

-$\forall t \in [\![\tau, m-1]\!]$ (donc $X_t = Y_{t-1}$) :
$U \sim U([0,1])$, $X^* \sim Q(X_t, .) = Q(Y_{t-1}, .)$
- if $U \leq \alpha(X_t, X^*) \iff U \leq \alpha(Y_{t-1}, X^*)$: $X_{t+1} = X^*$ et $Y_t = X^*$ (et on a $X_{t+1} = Y_t$)
else : $X_{t+1} = X_t$ et $Y_t = Y_{t-1}$ (et on a $X_{t+1} = Y_t$)

Il reste ensuite à calculer $H_{k:m}(X, Y)$ avec les (X_t, Y_{t-1}) que l'on a simulés.

Toutefois, même si l'algorithme permet en théorie de simuler $H_{k:m}(X, Y)$. En pratique, comme $(X_t)_{t\geq 0}$ et $(Y_t)_{t\geq 0}$ sont indépendantes avant que τ soit réalisé, si X_t et Y_{t-1} sont continues, $\mathbb{P}(\tau = t) = 0 \ \forall t \geq 1$.

L'algorithme a dans certains cas un temps infini de calcul.

Objectifs :

1) Maximiser la probabilité du temps d'arrêt τ à chaque étape $t \in \mathbb{N}^*$ tout en gardant les lois marginales de la chaînes inchangées.

2) Trouver une façon de simuler le processus $((X_t, Y_t))_{t\geq 0}$ avec la probabilité du temps d'arrêt τ maximisée.

Soit $t \geq 1$, on veut trouver un couplage maximal de $(X_{t+1}, Y_t)|X_t, Y_{t-1}$ i.e maximiser $\mathbb{P}(X_{t+1} = Y_t|X_t, Y_{t-1})$ en fonction de $\mathcal{L}((X_{t+1}, Y_t)|X_t, Y_{t-1})$ sous la condition que marginalement, $\mathcal{L}(X_t|X_{t-1}) = \nu_1$ et $\mathcal{L}(Y_{t-1}|Y_{t-2}) = \nu_2$ sont inchangées.

i.e, trouver la loi $\mathcal{L}((X_{t+1}, Y_t)|X_t, Y_{t-1})$ qui vérifie :

$$\mathbb{P}(X_{t+1} = Y_t|X_t, Y_{t-1})$$

$$= \max\{\mathbb{P}(X_{t+1} = Y_t|X_t, Y_{t-1}) : \; X_{t+1}|X_t \sim \nu_1, \; Y_t|Y_{t-1} \sim \nu_2\}$$

L'objectif est maintenant de simuler :
$(X_{t+1}, Y_t) \sim CouplageMaximal(\mathcal{L}(X_{t+1}),\ \mathcal{L}(Y_t))$ sachant X_t et Y_{t-1}.
Il suffit de simuler la même variable $U \sim U([0:1])$ pour les deux chaînes et
$(X^*, Y^*) \sim CouplageMaximal(Q(X_t, .), Q(Y_{t-1}, .))$

Simuler un couplage maximal de $Q(X_t, .)$ et $Q(Y_{t-1}, .)$:

1) $X^* \sim Q(X_t, .)$, $U \sim U([0:1])$
if $Uq(X_t, X^*) \leq q(Y_{t-1}, X^*)$: $Y^* = X^*$
2) else : $Y^* \sim Q(Y_{t-1}, .)$, $U \sim U([0:1])$
while $Uq(Y_{t-1}, Y^*) \leq q(X_t, Y^*)$
    $Y^* \sim Q(Y_{t-1}, .)$, $U \sim U([0:1])$

Résultats sur ce couplage :

- En moyenne, le coût de calcul du couplage maximal des noyaux de proposition avec cet algorithme est faible.

- Mais la variance de ce coût de calcul tend vers l'infini lorsque $\|Q(X_t, .) - Q(Y_{t-1}, .)\|_{TV} \longrightarrow 0$

- Pour remédier à ce problème, il existe une autre technique pour simuler des variables aléatoires qui suivent le couplage maximal. Cependant, cette méthode suppose que les lois vérifient certaines propriétés.

Simulation de $H_{k:m}(X, Y)$:

1) - $X_0 \sim \pi_0, \;\; Y_0 \sim \pi_0$
- $U \sim U([0, 1])$, $X^* \sim Q(X_0, .)$
if $U \leq \alpha(X_0, X^*)$: $X_1 = X^*$
else : $X_1 = X_0$
2) $\forall t \in [\![1, \tau - 1]\!]$ (i.e $X_t \neq Y_{t-1}$) :
$U \sim U([0, 1])$, $(X^*, Y^*) \sim CouplageMaximal(Q(X_t, .), Q(Y_{t-1}, .))$
- if $U \leq \alpha(X_t, X^*)$: $X_{t+1} = X^*$
else : $X_{t+1} = X_t$
- if $U \leq \alpha(Y_{t-1}, Y^*)$: $Y_t = Y^*$
else : $Y_t = Y_{t-1}$

Simulation de $H_{k:m}(X, Y)$:

3) $\forall t \in [\![\tau, m]\!]$ (donc $X_t = Y_{t-1}$) :
$U \sim U([0,1])$, $X^* \sim Q(X_t, .) = Q(Y_{t-1}, .)$
- if $U \leq \alpha(X_t, X^*) \iff U \leq \alpha(Y_{t-1}, X^*)$: $X_{t+1} = X^*$ et $Y_t = X^*$
else : $X_{t+1} = X_t$ et $Y_t = Y_{t-1}$
4) $\forall l \in [\![k, m]\!]$, On définit la variable

$$H_l(X, Y) = h(X_k) + \sum_{t=l+1}^{\tau-1} (h(X_t) - h(Y_{t-1}))$$

Et enfin on définit $H_{k:m}(X, Y) = \dfrac{1}{m-k+1} \displaystyle\sum_{l=k}^{m} H_l(X, Y)$

On a bien :

- $(X_t)_{t \geq 0}$ et $(Y_t)_{t \geq 0}$ qui suivent marginalement l'algorithme de Metropolis-Hastings de loi cible π avec le même noyau de proposition $Q(.,.)$

- $\forall t \geq \tau$, $X_t = Y_{t-1}$ et puisque l'on utilise la même loi uniforme $U \sim U([0,1])$ et que les noyaux de proposition sont couplés, cela maximise la probabilité du temps d'arrêt.

On utilise le même exemple :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \pi(x) := \frac{e^{-x}}{C}\mathbb{I}_{[0,1]}(x) \text{ où } C := \int_0^1 e^{-x}dx \ (= 1 - e^{-1})$$

$Q(x, .) := U([x - \frac{3}{4} : x + \frac{3}{4}])$ et $h(x) := Cx$.

On souhaite estimer :

$$\mathbb{E}_\pi(h(X)) = \int_0^1 xe^{-x}dx \ (= 1 - 2e^{-1})$$

$H_{k:m}(X, Y)$ est bien un estimateur sans biais de μ :

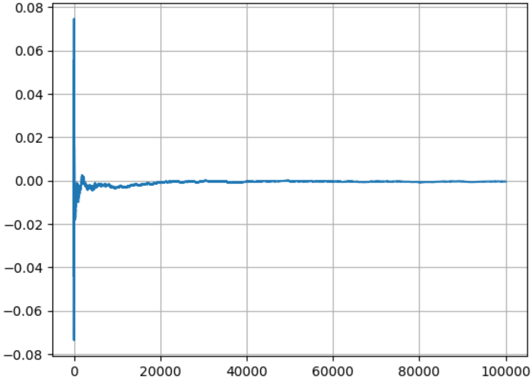
Abscisse :

$R \in [\![1, 100\ 000]\!]$

Ordonnée :

$\frac{1}{R}\sum_{r=1}^{R} H_{5:10}^{(r)}(X, Y) - \mathbb{E}_\pi(h(X)) \approx$

$\mathbb{E}\left[H_{5:10}(X, Y) - \mathbb{E}_\pi(h(X))\right]$



FIN DE LA PRESENTATION