

Introduction aux méthodes de Monte Carlo par dynamique Hamiltonienne

Shmuel RAKOTONIRINA-RICQUEBOURG, Amaury DURAND

5 décembre 2017

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	Méthodes de Monte Carlo	1
1.2	Monte Carlo Markov Chains (MCMC)	2
1.2.1	Loi invariante et réversibilité	2
1.2.2	Ergodicité	2
1.2.3	Algorithme de Metropolis (Random Walk Metropolis)	2
1.3	Principe du Hamiltonian Monte Carlo	2
1.3.1	Dynamique Hamiltonienne	3
1.3.2	Principe général	3
2	Dynamique hamiltonienne	4
2.1	Propriétés de la dynamique hamiltonienne	4
2.2	Discretisation des équations	5
3	Hamiltonian Monte-Carlo	7
3.1	Cas idéal : solution exacte de la dynamique hamiltonienne	7
3.2	Cas concret : solution approchée de la dynamique hamiltonienne	8
4	Simulations	9

1 Introduction

Ce rapport présente le travail effectué lors d'un projet du cours d'approfondissements en chaînes de Markov par Eric Moulines dans le cadre du master Mathématiques de l'aléatoires à l'université Paris-Sud. Le contenu présenté ci-dessous repose essentiellement sur [1] et [2].

Les méthodes de Monte Carlo par dynamique Hamiltonienne, plus communément appelées Hamiltonian Monte Carlo (HMC), font partie d'une grande famille de méthodes de simulation : les méthodes de Monte Carlo, et plus précisément dans la famille des méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov (ou Monte Carlo Markov Chains). Ces méthodes se placent dans le cadre suivant :

Définition 1.1 (Cas général). Soit $(\mathbb{X}, \mathcal{X})$ un espace mesurable. Soit π une loi de probabilité sur cet espace. On suppose que π n'est connue qu'à un facteur de proportionnalité près i.e on connaît $\lambda\pi$ où $\lambda \in \mathbb{R}$ une constante. Le but est de pouvoir approcher $\pi f = \mathbb{E}[f(X)]$ avec $X \sim \pi$ et $f \in \mathbb{F}_+(\mathbb{X}, \mathcal{X}) \cup \mathbb{F}_b(\mathbb{X}, \mathcal{X})$.

1.1 Méthodes de Monte Carlo

La méthode de Monte Carlo la plus simple (appelée Monte Carlo naïf) est la suivante : supposons que l'on sait simuler des variables aléatoires de loi π alors en tirant n échantillons $X_1, \dots, X_n \stackrel{\text{iid}}{\sim} \pi$, la loi des grands nombre nous indique qu'une bonne approximation de πf est $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(X_i)$. D'autres méthodes permettent d'atteindre le même but en ne sachant pas simuler de variables aléatoires de loi π . C'est le cas par exemple de l'échantillonnage d'importance qui consiste à simuler des variables i.i.d sous une loi différente de π .

Dans ces deux cas, l'approximation de πf repose sur une simulation de variables aléatoires i.i.d. Cette particularité permet alors de montrer des résultats de convergence notamment grâce à la loi des grands nombre. Les méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov ne reposent pas sur le caractère i.i.d des variables mais sur les propriétés des Chaînes de Markov.

1.2 Monte Carlo Markov Chains (MCMC)

Les méthode MCMC se basent sur les notions de loi invariante, de réversibilité et d'ergodicité.

1.2.1 Loi invariante et réversibilité

On considère P un noyau de Markov sur $\mathbb{X} \times \mathcal{X}$.

Définition 1.2. Une loi de probabilité π sur $(\mathbb{X}, \mathcal{X})$ est dite

- P -invariante si $\pi P = \pi$
- P -réversible si $\forall A, B \in \mathcal{X}, \pi \otimes P(A \times B) = \pi \otimes P(B \times A)$

Proposition 1.1. Toute probabilité P -réversible est P -invariante.

1.2.2 Ergodicité

Théorème 1.1. Soit $(X_k)_{k \in \mathbb{N}}$ une chaîne de Markov de noyau P admettant une unique loi invariante π . Alors pour tout $f \in \mathbb{F}_+(\mathbb{X}, \mathcal{X}) \cup \mathbb{F}_b(\mathbb{X}, \mathcal{X})$ et pour π -presque tout $x \in \mathbb{X}$,

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{\mathbb{P}_x - p.s.} \pi f$$

Les algorithmes MCMC visent à construire, à partir de π , une chaîne de Markov vérifiant les hypothèses de ce théorème afin d'approcher πf par $\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(X_k)$.

1.2.3 Algorithme de Metropolis (Random Walk Metropolis)

Avant de présenter la méthode HMC, nous définissons ici un autre algorithme MCMC, l'algorithme de Metropolis, que nous utiliserons comme base de comparaison. On se place dans le cas où $\mathbb{X} = \mathbb{R}^d$ et $\mathcal{X} = \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$.

On suppose que π a une densité h_π par rapport à une mesure μ . On considère de plus une loi Q (appelée loi instrumentale) sur $(\mathbb{X}, \mathcal{X})$ symétrique par rapport à 0 ($Q(A) = Q(-A)$). La construction de la chaîne de Markov se fait en proposant un mouvement (dont l'incrément suit Q), puis en acceptant ou en rejetant ce mouvement (algorithme 1.1).

Algorithme 1.1 : Random Walk Metropolis

Données : h_π proportionnel à la densité cible, Q loi simulable

$X_0 \leftarrow x \in \mathbb{X}$ arbitraire;

$(U_k)_{k \in \mathbb{N}} \stackrel{\text{iid}}{\sim} Q$;

répéter

$Y_{k+1} \leftarrow X_k + U_{k+1}$; // Proposer un mouvement

$\alpha_{k+1} \leftarrow \alpha(X_k, Y_{k+1})$ où $\alpha(x, y) = 1 \wedge \frac{h_\pi(y)}{h_\pi(x)}$;

$X_{k+1} \leftarrow \begin{cases} Y_{k+1} & \text{avec probabilité } \alpha_{k+1} \\ X_k & \text{with probability } 1 - \alpha_{k+1} \end{cases}$; // Accepter ou rejeter le mouvement

jusqu'à une condition d'arrêt;

retourner $(X_k)_k$

Dans cet algorithme, on cherche à explorer l'espace \mathbb{X} en visitant moins souvent les régions où h_π est faible (peu chargées par π) car ce sont les régions de forte probabilité qui donnent des informations sur la loi π . Ainsi, si le mouvement proposé vérifie $h_\pi(Y_{k+1}) \geq h_\pi(X_k)$, on se dirige vers une zone plus chargée par π , on accepte donc le mouvement. Dans le cas contraire, il est moins intéressant de bouger. On autorise quand même le mouvement avec une probabilité $\frac{h_\pi(Y_{k+1})}{h_\pi(X_k)}$ d'autant plus faible que la position proposée est dans une région de probabilité faible.

1.3 Principe du Hamiltonian Monte Carlo

On se place dans le cas où $\mathbb{X} = \mathbb{R}^d$, $\mathcal{X} = \mathcal{B}(\mathbb{R}^d)$ et μ est la mesure de Lebesgue.

L'algorithme HMC fait partie des algorithmes MCMC, le but est en effet de construire une chaîne de Markov de loi invariante la loi à simuler. Il diffère néanmoins de l'algorithme de Metropolis-Hastings notamment par le fait que le mouvement proposé suit une *dynamique hamiltonienne* associée à la loi à simuler.

1.3.1 Dynamique Hamiltonienne

Un système physique de position $x : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^d$ et de quantité de mouvement $p : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^d$ (toutes deux fonctions du temps t) est caractérisé par des équations de mouvement de type $\forall t \geq 0, \forall i \in \llbracket 1, d \rrbracket$,

$$\begin{aligned} x'_i(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_i}(x(t), p(t)) \\ p'_i(t) &= -\frac{\partial H}{\partial x_i}(x(t), p(t)) \end{aligned} \quad (1)$$

où $H : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ s'appelle le *hamiltonien* du système.

Le Hamiltonien s'interprète comme une énergie sur x et p . En général $H(x, p) = U(x) + K(p)$ où U est l'énergie potentielle et K l'énergie cinétique.

Remarque 1.1. Les équations (1) se réécrivent comme une équation différentielle ordinaire d'ordre 1 :

$$\forall t \geq 0, \quad z'(t) = F(z(t)) \quad (\text{EDO})$$

avec $z : \mathbb{R}_+ \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$
 $t \mapsto [x_1(t), \dots, x_d(t), p_1(t), \dots, p_d(t)]^\top$ et $\forall z \in \mathbb{R}^{2d}, F(z) = J \nabla H(z)$ où $J = \begin{bmatrix} 0_d & I_d \\ -I_d & 0_d \end{bmatrix}$. Une solution de (EDO) est dite solution du hamiltonien H .

1.3.2 Principe général

La dynamique hamiltonienne décrit le mouvement d'un objet qui glisse sans frottement le long d'une surface ou d'une courbe. L'objet est décrit par sa position $x \in \mathbb{R}^d$ et sa quantité de mouvement $p \in \mathbb{R}^d$ et on lui associe des énergies potentielle $U(x)$ et cinétique $K(p)$.

Définition 1.3 (Distribution canonique). En physique, une énergie $E : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ et une température $T > 0$ sont associées à une loi de probabilité par la loi de Boltzmann (ou distribution canonique) de densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^n ,

$$\forall x \in \mathbb{R}^n, \quad p(x) \propto \exp\left(-\frac{E(x)}{T}\right)$$

Dans le cas des HMC, on étend l'espace d'états $\mathbb{X} = \mathbb{R}^d$ à $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ et on va construire une chaîne de Markov $(Z_k = (X_k, P_k))_{k \in \mathbb{N}}$ à valeurs dans ce nouvel espace avec $\forall k \in \mathbb{N}, X_k \perp\!\!\!\perp P_k$ et de loi invariante $\tilde{\pi} = \pi \otimes \nu$ où π est une distribution canonique associée à l'énergie potentielle et ν est une distribution canonique associée à l'énergie cinétique. Ainsi leurs densités h_π et h_ν par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbb{R}^d vérifient $\forall x \in \mathbb{R}^d, \forall p \in \mathbb{R}^d$,

$$\begin{aligned} h_\pi(x) &\propto \exp\left(-\frac{U(x)}{T}\right) \\ h_\nu(p) &\propto \exp\left(-\frac{K(p)}{T}\right) \end{aligned}$$

Ce qui donne une loi jointe de densité $h_{\tilde{\pi}}$ telle que $\forall (x, p) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$,

$$h_{\tilde{\pi}}(x, p) \propto \exp\left(-\frac{H(x, p)}{T}\right) \quad (2)$$

où le Hamiltonien est défini par $H : (x, p) \mapsto U(x) + K(p)$.

Remarque 1.2. En dimension 1, on décrit le glissement sans frottement d'un objet sur une rampe. Comme l'énergie potentielle est proportionnelle à la hauteur de la rampe, (2) donne que les creux de la rampe représentent les régions de forte probabilité. L'objet aura tendance à glisser vers les creux de la rampe, mais peut remonter une pente si sa quantité de mouvement p (et donc son énergie cinétique $K(p)$) est assez grande.

L'algorithme HMC propose ses mouvements selon le principe suivant :

1. Considérer un objet placé en X_k de quantité de mouvement P_k . Cela correspond à l'état $Z_k = (X_k, P_k)$ de l'objet à l'instant k .
2. Tirer une nouvelle quantité de mouvement $\tilde{P}_k \sim \nu$ indépendante de la chaîne et considérer le nouvel état $\tilde{Z}_k = (X_k, \tilde{P}_k)$.
3. A partir de l'état \tilde{Z}_k , simuler la dynamique hamiltonienne (déterministe) de l'objet pendant une durée fixée.
4. Considérer Z_{k+1}^{prop} l'état de l'objet à la fin de la simulation, et accepter ou rejeter le mouvement selon une fonction de rejet α dépendant de H .

Il est important de noter que le HMC n'est pas une méthode de Métropolis-Hastings car, bien que le principe soit similaire (proposer un mouvement et le choisir selon une fonction de rejet dépendant de la loi cible), le HMC tire une nouvelle quantité de mouvement à chaque étape.

Plusieurs problématiques sont alors soulevées : les questions les plus importantes sont de savoir si la loi $\tilde{\pi}$ est bien invariante et si l'algorithme converge vers cette loi. Nous ne nous intéresserons ici qu'à la question de l'invariance sans résoudre la question de la convergence. De plus, la forme de loi que l'on considère impose des conditions sur les lois π et ν , notamment des conditions de régularité de leurs densités (on doit pouvoir dériver le Hamiltonien). Enfin, comment simuler la dynamique hamiltonienne et quelles sont les différences entre le cadre idéal où le mouvement proposé est exactement celui décrit par les équations (1) et le cadre pratique où l'on doit discrétiser ces équations ?

Hypothèses : Afin de pouvoir modéliser le problème par un HMC, on suppose

$$\begin{aligned} h_\pi \text{ et } h_\nu &\text{ sont strictement positives sur } \mathbb{R}^d \\ \exists k \geq 1, \ln(h_\pi) \text{ et } \ln(h_\nu) &\text{ sont de classe } \mathcal{C}^k \text{ sur } \mathbb{R}^d \\ h_\nu &\text{ est paire} \\ H : (x, p) &\mapsto U(x) + K(p) \text{ avec } U(x) = -T \ln(h_\pi(x)), K(p) = -T \ln(h_\nu(p)) \end{aligned} \tag{H}$$

Remarque 1.3. La première hypothèse de (H) est nécessaire pour écrire les densités sous la forme canonique. La deuxième permet d'avoir des garanties de régularité des solutions de (1). Les deux dernières permettront d'avoir une propriété de réversibilité (proposition 2.2).

$k = 1$ suffit pour tous les résultats énoncés sauf pour la proposition 3.2 où on aura besoin de $k = 2$.

Nous allons voir que, sous ces hypothèses, dans le cadre idéal (théorique) où l'on a accès aux solutions de (EDO), le fait de tirer une quantité de mouvement aléatoire puis de suivre la dynamique hamiltonienne laisse la mesure $\tilde{\pi}$ invariante. Dans le cadre où l'on simule la dynamique en discrétisant les équations (1), nous verrons que cela n'est plus le cas mais qu'il est alors possible de rendre $\tilde{\pi}$ invariante en incluant le mouvement proposé dans un cadre Métropolis-Hastings (c'est à dire en acceptant le mouvement selon une fonction de rejet). Pour cela, nous avons besoin de quelques propriétés de la dynamique hamiltonienne énoncées dans la section suivante.

2 Dynamique hamiltonienne

2.1 Propriétés de la dynamique hamiltonienne

Proposition 2.1 (conservation du hamiltonien). *Le hamiltonien est conservé sur la trajectoire i.e si z est solution de (EDO) alors $H \circ z$ est constant.*

Démonstration. Remarquons tout d'abord que la matrice J définie dans la remarque 1.1 vérifie $\forall u \in \mathbb{R}^{2d}, \langle u, Ju \rangle = 0$. Ainsi, si z est solution de (EDO),

$$\forall t \in \mathbb{R}_+, (H \circ z)'(t) = \langle \nabla H(z(t)), z'(t) \rangle = \langle \nabla H(z(t)), J \nabla H(z(t)) \rangle = 0.$$

□

Définition 2.1 (flot hamiltonien). On définit le flot du hamiltonien par

$$\begin{aligned} \forall t \in \mathbb{R}, \phi_t : \mathbb{R}^{2d} &\rightarrow \mathbb{R}^{2d} \\ z_0 = (x_0, p_0) &\mapsto \phi_t(z_0) = (\phi_t^{(1)}(z_0), \phi_t^{(2)}(z_0)) \end{aligned}$$

où $t \mapsto \phi_t(z_0)$ est l'unique solution de (EDO) avec condition initiale $z(0) = z_0$ (en étendant les solutions à tout \mathbb{R}).

Propriété 2.1.

$$\forall t, s \in \mathbb{R}, \phi_{t+s} = \phi_t \circ \phi_s.$$

Démonstration. Soient $s \in \mathbb{R}$ et $z_0 \in \mathbb{R}^{2d}$, notons $f : t \mapsto \phi_t(z_0)$, $h : t \mapsto t + s$ et $g : t \mapsto \phi_t \circ \phi_s(z_0)$. Alors f et g sont solutions de (EDO) avec conditions initiales $f(0) = z_0$ et $g(0) = \phi_s(z_0)$. De plus $\forall t \in \mathbb{R}, (f \circ h)'(t) = f'(h(t)) = F(f \circ h(t))$ donc $f \circ h$ est aussi solution de (EDO). Or $f \circ h(0) = \phi_s(z_0) = g(0)$ donc par unicité de la solution $f \circ h = g$ i.e $\forall t \in \mathbb{R}, \phi_{t+s}(z_0) = \phi_t \circ \phi_s(z_0)$. □

Lemme 2.1. Soit $z = (x, p)$ une solution de (EDO). On définit $\bar{z} = (\bar{x}, \bar{p}) : \mathbb{R}_- \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ et $\bar{H} :$

$$\begin{aligned} \mathbb{R}^{2d} &\rightarrow \mathbb{R}^{2d} \\ (x, p) &\mapsto H(x, -p) \end{aligned} \text{ . Alors}$$

1. \bar{z} est solution du hamiltonien \bar{H} sur \mathbb{R}_- (avec d'autres conditions initiales).

2. Si $\bar{H} = H$ alors $\forall t \in \mathbb{R}_+, \phi_t(\bar{z}(-t)) = \bar{z}(0)$

Démonstration. 1. Notons $s : z = (x, p) \mapsto (x, -p)$ alors $\forall t \in \mathbb{R}_-, \bar{z}(t) = s \circ z(-t)$ et $\bar{H} = H \circ s$. De plus

$$\forall z \in \mathbb{R}^{2d}, \frac{ds}{dz}(z) = \begin{bmatrix} I_d & 0_d \\ 0_d & -I_d \end{bmatrix} \doteq S. \quad (3)$$

Remarquons alors que $SJ = -JS$ et $s^{-1} = s$. Ainsi, $\forall y \in \mathbb{R}^{2d}, \nabla \bar{H}(y) = S \nabla H(s(y))$ et pour $t \in \mathbb{R}_+$,

$$\bar{z}'(t) = -S z'(-t) = -S J \nabla H(z(-t)) = JS \nabla H(z(-t)) = J \nabla \bar{H}(s^{-1}(z(-t))) = J \nabla \bar{H}(s(z(-t))) = J \nabla \bar{H}(\bar{z}(t)).$$

2. Si $\bar{H} = H$, \bar{z} est solution de (EDO) sur \mathbb{R}_- donc $\forall t \in \mathbb{R}_+, \bar{z}(-t) = \phi_{-t}(\bar{z}(0))$ donc $\phi_t(\bar{z}(-t)) = \phi_0(\bar{z}(0)) = \bar{z}(0)$ \square

Remarque 2.1. Sous les hypothèses (H), la parité de h_ν donne la parité de K . Comme $H(x, p) = U(x) + K(p)$, on en déduit $H = \bar{H}$.

Proposition 2.2 (réversibilité). *On se place les hypothèses (H). Alors pour $t \in \mathbb{R}_+, \phi_t$ est un \mathcal{C}^k -différomorphisme et*

$$\phi_t^{-1} : (x, p) \mapsto (\phi_t^{(1)}(x, -p), -\phi_t^{(2)}(x, -p))$$

Démonstration. ϕ_t est \mathcal{C}^k comme flot d'une équation différentielle \mathcal{C}^k . Si on admet la formule de l'inverse, on y lit que ϕ_t^{-1} est \mathcal{C}^k . Il suffit donc de montrer cette formule.

Fixons $t \in \mathbb{R}_+$ et $(x_0, p_0) \in \mathbb{R}^{2d}$. Notons $z = (x, p)$ la solution sur \mathbb{R}_+ de (EDO) avec $z(0) = (x_0, p_0)$ et notons

$$\bar{\phi}_t : (x, p) \mapsto (\phi_t^{(1)}(x, -p), -\phi_t^{(2)}(x, -p))$$

• D'une part,

$$\bar{\phi}_t(\phi_t(x_0, p_0)) = \bar{\phi}_t(z(t)) = (\phi_t^{(1)}(\bar{z}(-t)), -\phi_t^{(2)}(\bar{z}(-t))) \stackrel{(\text{lemme 2.1})}{=} (x_0, p_0)$$

car $\bar{z}(0) = (x_0, -p_0)$.

• D'autre part,

$$\bar{\phi}_t(x_0, -p_0) = (\phi_t^{(1)}(x_0, p_0), -\phi_t^{(2)}(x_0, p_0)) = (x(t), -p(t)) = \bar{z}(-t)$$

donc

$$\phi_t(\bar{\phi}_t(x_0, -p_0)) = \phi_t(\bar{z}(-t)) = \bar{z}(0) = (x_0, -p_0).$$

Ceci étant vrai pour tout (x_0, p_0) , on a donc $\bar{\phi}_t = \phi_t^{-1}$. \square

Proposition 2.3 (conservation du volume). *La dynamique hamiltonienne conserve le volume, au sens où*

$$\forall t \in \mathbb{R}_+, \forall z \in \mathbb{R}^{2d}, \det \left(\frac{d\phi_t}{dz}(z) \right) = 1.$$

Démonstration. On ne donnera pas de preuve détaillée de cette proposition, mais la preuve repose sur le caractère symplectique lié à la remarque 1.1. \square

2.2 Discrétisation des équations

Algorithme 2.1 : Discrétisation de l'évolution par saute-mouton (*leapfrog*)

Données : pas ϵ , nombre de pas L , état initial (x_0, p_0)

pour $k \in \llbracket 0, L-1 \rrbracket$ **faire** // **Saute-mouton**

$x_{k+1} \leftarrow x_k + \epsilon \nabla K \left(p_k - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x_k) \right);$
 $p_{k+1} \leftarrow p_k - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x_k) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x_{k+1});$

retourner (x_L, p_L)

Définition 2.2 (flot approché). Soient $\epsilon > 0$ et $L \in \mathbb{N}^*$, on définit le flot approché du hamiltonien par L itérations de l'algorithme leapfrog par $\hat{\phi}_L = \hat{\phi}^L$ où

$$\hat{\phi} : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{2d} & \rightarrow & \mathbb{R}^{2d} \\ z = (x, p) & \mapsto & (\hat{\phi}^{(1)}(z), \hat{\phi}^{(2)}(z)) \end{array}$$

avec

$$\begin{aligned} \hat{\phi}^{(1)} : (x, p) &\mapsto x + \epsilon \nabla K \left(p - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) \right) \\ \hat{\phi}^{(2)} : (x, p) &\mapsto p - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\hat{\phi}^{(1)}(x, p)) \end{aligned}$$

La proposition 2.4 est l'analogie de la proposition 2.3 mais pour le flot approché.

Proposition 2.4 (conservation du volume). *Sous les hypothèses (H) avec $k = 2$ (U et K de classe \mathcal{C}^2), la discrétisation de la dynamique hamiltonienne par l'algorithme leapfrog conserve le volume, au sens où*

$$\forall z \in \mathbb{R}^{2d}, \det \left(\frac{d\hat{\phi}}{dz}(z) \right) = 1.$$

Démonstration. $\hat{\phi}$ conserve le volume comme composée de cisaillements (qui préservent le volume). Plus précisément, la définition 2.2 peut s'écrire $\hat{\phi} = \varphi_p \circ \varphi_x \circ \varphi_p$ où

$$\varphi_x : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{2d} & \rightarrow & \mathbb{R}^{2d} \\ (x, p) & \mapsto & (x + \epsilon \nabla K(p), p) \end{array} \quad \text{et} \quad \varphi_p : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{2d} & \rightarrow & \mathbb{R}^{2d} \\ (x, p) & \mapsto & (x, p - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x)) \end{array}$$

U et K étant calC^2 , on a les jacobiniennes

$$\frac{d\varphi_x}{dz}(x, p) = \begin{pmatrix} I_d & \epsilon \frac{d\nabla K}{dp}(p) \\ 0 & I_d \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \frac{d\varphi_p}{dz}(x, p) = \begin{pmatrix} I_d & 0 \\ -\frac{\epsilon}{2} \frac{d\nabla U}{dx}(x) & I_d \end{pmatrix}$$

qui sont bien de déterminant 1 en tout point (I_d désigne la matrice identité de taille d). Ainsi, pour $z \in \mathbb{R}^{2d}$,

$$\det \left(\frac{d\hat{\phi}}{dz}(z) \right) = \det \left(\frac{d\varphi_p}{dz}(\varphi_x(\varphi_p(z))) \right) \det \left(\frac{d\varphi_x}{dz}(\varphi_p(z)) \right) \det \left(\frac{d\varphi_p}{dz}(z) \right) = 1.$$

□

Proposition 2.5 (réversibilité). *Sous les hypothèses (H), $\hat{\phi}$ est inversible avec $\hat{\phi}^{-1} : (x, p) \mapsto (\hat{\phi}^{(1)}(x, -p), -\hat{\phi}^{(2)}(x, -p))$, ce qui entraîne $\forall L \in \mathbb{N}^*$, $\hat{\phi}_L$ est inversible avec $\hat{\phi}_L^{-1} : (x, p) \mapsto (\hat{\phi}_L^{(1)}(x, -p), -\hat{\phi}_L^{(2)}(x, -p))$.*

Démonstration. Notons $\bar{\phi} : (x, p) \mapsto (\hat{\phi}^{(1)}(x, -p), -\hat{\phi}^{(2)}(x, -p))$, ainsi $\bar{\phi} = s \circ \hat{\phi} \circ s$ avec $s : (x, p) \mapsto (x, -p)$. Alors

- Soient $x, p \in \mathbb{R}^d$. Notons $(\tilde{x}, \tilde{p}) = \hat{\phi}(x, -p)$ de sorte que $\bar{\phi}(x, p) = (\tilde{x}, -\tilde{p})$

$$\begin{aligned} \hat{\phi}^{(1)}(\bar{\phi}(x, p)) &= \tilde{x} + \epsilon \nabla K \left(-\tilde{p} - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) \right) \\ &= x + \epsilon \nabla K \left(-p - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) \right) + \epsilon \nabla K \left(p + \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) + \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) \right) \\ &= x + \epsilon \nabla K \left(-p - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) \right) + \epsilon \nabla K \left(p + \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) \right) \\ &= x \text{ car sous (H), } K \text{ est paire donc } \nabla K \text{ est impaire.} \end{aligned}$$

De plus

$$\begin{aligned} \hat{\phi}^{(2)}(\bar{\phi}(x, p)) &= -\tilde{p} - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\hat{\phi}^{(1)}(\bar{\phi}(x, p))) \\ &= p + \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) + \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(\tilde{x}) - \frac{\epsilon}{2} \nabla U(x) \\ &= p \end{aligned}$$

Donc $\hat{\phi} \circ \bar{\phi} = \text{Id}$

- On a donc

$$\text{Id} = \hat{\phi} \circ \bar{\phi} = \hat{\phi} \circ s \circ \hat{\phi} \circ s.$$

En composant à gauche et à droite par s , on obtient

$$s^2 = s \circ \hat{\phi} \circ s \circ \hat{\phi} \circ s^2$$

soit, en utilisant $s^2 = \text{Id}$,

$$\text{Id} = s \circ \hat{\phi} \circ s \circ \hat{\phi}.$$

Ainsi $\hat{\phi}^{-1} = \bar{\phi}$

□

3 Hamiltonian Monte-Carlo

3.1 Cas idéal : solution exacte de la dynamique hamiltonienne

Dans le cas idéal où l'on a accès à une solution exacte de la dynamique hamiltonienne, i.e. si l'on connaît le flot ϕ_t pour tout $t \in \mathbb{R}_+$, la stratégie proposée est de suivre le flot à chaque étape après avoir tiré aléatoirement une quantité de mouvement.

Algorithme 3.1 : Hamiltonian Monte-Carlo, cas idéal

Données : h_π proportionnel à la densité cible, t une durée sur laquelle suivre la dynamique

$X_0 \leftarrow x \in \mathbb{X}$ arbitraire;

répéter

$\tilde{P}_k \sim \nu$ et $\tilde{P}_k \perp\!\!\!\perp (Z_0, \dots, Z_k)$; // Tirer la quantité de mouvement

$\tilde{Z}_k \leftarrow (X_k, \tilde{P}_k)$;

$Z_{k+1} = (X_{k+1}, P_{k+1}) \leftarrow \phi_t(\tilde{Z}_k)$; // Suivre la dynamique

jusqu'à une condition d'arrêt;

retourner $(X_k)_k$

Définition 3.1 (semi-groupe Markovien). Une famille $(P_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ de noyaux de Markov est un semi-groupe Markovien si $\forall t, s \in \mathbb{R}_+, P_{t+s} = P_t P_s$

Proposition 3.1 (invariance de la loi). On se place sous les hypothèses (H). Alors

1. Pour $t \in \mathbb{R}_+$, le processus $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ défini par l'algorithme 3.1 est une chaîne de Markov homogène de noyau QP_t sur \mathbb{R}^{2d} avec

$$Q((x, p), \cdot) = \delta_x \otimes \nu$$

$$P_t((x, p), \cdot) = \delta_{\phi_t(z)}$$

2. $(P_t)_{t \in \mathbb{R}_+}$ est un semi-groupe Markovien.

3. Pour tout $t \in \mathbb{R}_+$, $\tilde{\pi}$ est QP_t -invariante.

Démonstration. 1. On note $(\mathcal{F}_k)_{k \in \mathbb{N}} = (\sigma(Z_j, j \leq k))_{k \in \mathbb{N}}$ la filtration canonique associée à Z . Soit $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d})$ alors $\mathbb{P}(Z_{k+1} \in A \mid \mathcal{F}_k) = \mathbb{P}(\phi_t(X_k, \tilde{P}_k) \in A \mid \mathcal{F}_k) = \mathbb{P}(\phi_t(X_k, \tilde{P}_k) \in A \mid \mathcal{F}_k)$. Comme $\tilde{P}_k \perp\!\!\!\perp \mathcal{F}_k$, on a donc $\mathbb{P}(Z_{k+1} \in A \mid \mathcal{F}_k) = \hat{F}(X_k)$ où $\forall x \in \mathbb{R}^d, \hat{F}(x) = \mathbb{P}(\phi_t(x, \tilde{P}_1) \in A)$. Ainsi $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène de noyau N tel que

$$\forall (x, p) \in \mathbb{R}^{2d}, \forall A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d}), N((x, p), A) = \mathbb{P}(\phi_t(x, \tilde{P}_1) \in A) = \int \mathbb{1}_A(\phi_t(x, p_1)) \nu(dp_1).$$

Or

$$QP_t((x, p), A) = \int Q((x, p), dx_1 dp_1) P_t((x_1, p_1), A) = \int \delta_x(dx_1) \nu(dp_1) \mathbb{1}_A(\phi_t(x_1, p_1)) = \int \mathbb{1}_A(\phi_t(x, p_1)) \nu(dp_1).$$

Donc $(Z_k)_{k \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov homogène de noyau QP_t .

2. Soient $t, s \in \mathbb{R}_+, z \in \mathbb{R}^{2d}$ et $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d})$. Alors

$$P_t P_s(z, A) = \int P_t(z, dz_1) P_s(z_1, A) = \int \delta_{\phi_t(z)}(dz_1) \mathbb{1}_A(\phi_s(z_1)) = \mathbb{1}_A(\phi_s \circ \phi_t(z)) = \mathbb{1}_A(\phi_{s+t}(z)) = P_{s+t} = P_{t+s}$$

3. Montrons que $\tilde{\pi}$ est Q et P_t invariante (elle sera donc QP_t -invariante). Soit $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d})$, alors

$$\tilde{\pi}Q(A) = \int \pi(dx) \nu(dp) \delta_x(dx_1) \nu(dp_1) \mathbb{1}_A(x_1, p_1) = \int \pi(dx) \nu(dp_1) \mathbb{1}_A(x, p_1) = \int \tilde{\pi}(dx dp_1) \mathbb{1}_A(x, p_1) = \tilde{\pi}(A)$$

Soient $t \in \mathbb{R}_+$ et $A \in \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d})$, alors

$$\begin{aligned} \tilde{\pi}P_t(A) &= \int \tilde{\pi}(dz) P_t(z, A) \\ &\propto \int \exp\left(-\frac{H(z)}{T}\right) \mathbb{1}_A(\phi_t(z)) dz \\ &\stackrel{(*)}{=} \int \exp\left(-\frac{H \circ \phi_t^{-1}(y)}{T}\right) \mathbb{1}_A(y) dy \\ &\stackrel{(**)}{=} \int \exp\left(-\frac{H(y)}{T}\right) \mathbb{1}_A(y) dy \\ &= \tilde{\pi}(A). \end{aligned}$$

(*) : en faisant le changement de variable $y = \phi_t(z)$ comme ϕ_t est un \mathcal{C}^1 difféomorphisme (proposition 2.2) de jacobien égal à 1 (proposition 2.3)

(**) : par la proposition 2.1 on sait que $H \circ \phi_t = H$. De plus sous les hypothèses (H), $\bar{H} = H \circ s = H$ où $s : (x, p) \mapsto (x, -p)$. Ainsi $H \circ \phi_t^{-1} = H \circ s \circ \phi_t \circ s = H \circ \phi_t \circ s = H \circ s = H$

□

3.2 Cas concret : solution approchée de la dynamique hamiltonienne

Dans le cas où l'on n'a pas accès aux solutions exactes de (EDO), on utilise le flot approché $\hat{\phi}_L$. La première idée serait de simplement remplacer ϕ_t par $g \circ \hat{\phi}_L$ dans l'algorithme 3.1 où $g : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ est une fonction à déterminer. On obtient donc des noyaux Q (défini en proposition 3.1) et

$$\hat{P}_L : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{2d} \times \mathcal{B}(\mathbb{R}^{2d}) & \rightarrow & [0, 1] \\ (z, A) & \mapsto & \delta_{g \circ \hat{\phi}_L(z)}(A) \end{array}$$

$\tilde{\pi}$ est toujours Q -invariante mais n'est plus forcément \hat{P}_L -invariante car après la discrétisation, on n'a plus la propriété de conservation du hamiltonien. Néanmoins la proposition suivante montre que pour un bon choix de g , il est possible d'utiliser le mouvement proposé dans un algorithme de Métropolis.

Proposition 3.2 (réversibilité). *Sous les hypothèses (H) avec $k = 2$ (U et K de classe \mathcal{C}^2), on considère $g = s : (x, p) \mapsto (x, -p)$ et on définit*

$$\alpha : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{2d} \times \mathbb{R}^{2d} & \rightarrow & [0, 1] \\ (z_0, z_1) & \mapsto & 1 \wedge \exp\left(\frac{-H(z_1) + H(z_0)}{T}\right) \end{array}$$

et on note \hat{P}_L^α le noyau de Metropolis-Hasting associé au noyau instrumental \hat{P}_L et à la fonction de rejet α . Alors $\tilde{\pi}$ est \hat{P}_L^α -réversible (et donc \hat{P}_L^α -invariant).

Démonstration. Notons $\psi_L = s \circ \hat{\phi}_L$, de sorte que $\hat{P}_L(z, \cdot) = \delta_{\psi_L(z)}$. Ainsi,

$$\hat{P}_L^\alpha(z, A) = \alpha(z, \psi_L(z)) \mathbb{1}_A(\psi_L(z)) + (1 - \alpha(z, \psi_L(z))) \mathbb{1}_A(z)$$

et pour A, B boréliens,

$$\tilde{\pi} \otimes \hat{P}_L^\alpha(A \times B) = \int \mathbb{1}_A(z) \hat{P}_L^\alpha(z, B) e^{-H(z)/T} dz = \Lambda_1(A, B) + \Lambda_2(A, B)$$

où

$$\Lambda_1(A, B) = \int \mathbb{1}_A(z) \mathbb{1}_B(\psi_L(z)) \alpha(z, \psi_L(z)) e^{-H(z)/T} dz$$

et

$$\Lambda_2(A, B) = \int \mathbb{1}_A(z) \mathbb{1}_B(z) (1 - \alpha(z, \psi_L(z))) e^{-H(z)/T} dz.$$

Il suffit, pour avoir la \hat{P}_L^α -réversibilité, que les expressions $\Lambda_1(A, B)$ et $\Lambda_2(A, B)$ soient toutes les deux symétriques en A et B . C'est le cas pour Λ_2 , reste à étudier Λ_1 .

D'après l'expression définissant α , on a $\alpha(z_0, z_1) e^{-H(z_0)/T} = e^{-H(z_0)/T} \wedge e^{-H(z_1)/T}$, donc

$$\Lambda_1(A, B) = \int \mathbb{1}_A(z) \mathbb{1}_B(\psi_L(z)) \left(e^{-H(z)/T} \wedge e^{-H(\psi_L(z))/T} \right) dz \quad (4)$$

On cherche à faire un changement de variable $z \mapsto \psi_L(z)$. Par proposition 2.5, on a $(\psi_L)^{-1} = \psi_L$. U et K sont de classe \mathcal{C}^2 par hypothèse donc $\hat{\phi}$ est, par définition 2.2, de classe \mathcal{C}^1 . Comme $(\psi_L)^{-1} = \psi_L = s \circ \hat{\phi}^L$, ψ_L est donc un \mathcal{C}^1 -difféomorphisme. De plus, s oppose le volume ($\det\left(\frac{ds}{dz}(z)\right) = -1$ par équation (3)) et $\hat{\phi}$ conserve le volume (par proposition 2.4), donc ψ_L aussi :

$$\forall z \in \mathbb{R}^{2d}, \det\left(\frac{d\psi_L}{dz}(z)\right) = \det\left(\frac{ds}{dz}\left(\hat{\phi}^L(z)\right)\right) \det\left(\frac{d\hat{\phi}^L}{dz}(z)\right) = -1.$$

Ainsi, le changement de variable dans (4) donne

$$\Lambda_1(A, B) = \int \mathbb{1}_A(\psi_L(z)) \mathbb{1}_B(z) \left(e^{-H(z)/T} \wedge e^{-H(\psi_L(z))/T} \right) dz = \Lambda_1(B, A).$$

Ainsi, Λ_1 et Λ_2 sont bien symétriques en A et B , donc $\tilde{\pi} \otimes \hat{P}_L^\alpha(A \times B) = \tilde{\pi} \otimes \hat{P}_L^\alpha(B \times A) : \tilde{\pi}$ est \hat{P}_L^α -réversible. □

Algorithme 3.2 : Hamiltonian Monte-Carlo

Données : h_π proportionnel à la densité cible, ϵ pas du saute-mouton, L nombre de pas du saute-mouton

$X_0 \leftarrow x \in \mathbb{X}$ arbitraire;

répéter

$P_k \sim \mathcal{N}(0, 1)$; // Tirer la quantité de mouvement

$(X_{prop}, P_{prop}) \leftarrow \text{leapfrog}(X_k, P_k)$; // Proposer un mouvement

$U_k \leftarrow U(X_k)$;

$K_k \leftarrow \|P_k\|^2/2$;

$U_{prop} \leftarrow U(X_{prop})$;

$K_{prop} \leftarrow \|P_{prop}\|^2/2$;

si $\mathcal{U}([0, 1]) < \exp(U_k - U_{prop} + K_k - K_{prop})$ **alors**

$X_{k+1} \leftarrow X_{prop}$; // **Accepter**

sinon

$X_{k+1} \leftarrow X_k$; // **Rejeter**

jusqu'à une condition d'arrêt;

retourner $(X_k)_k$

4 Simulations

Références

- [1] Neal Radford M. MCMC using Hamiltonian dynamics. *Handbook of Markov Chain Monte Carlo*, 54 :113–162, 2010.
- [2] Douc Randal ; Moulines Eric ; Priouret Pierre ; Soulier Philippe. *Markov Chains*. 2017.