Vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis–Hastings

L'objectif de ce devoir est d'étudier le temps de mélange d'une version de l'algorithme de Metropolis, qui permet de simuler une loi π sur un espace d'états $\mathfrak{X}$. Dans tout ce qui suit, on fixe un ensemble *fini* $\mathfrak{X}$ et une mesure de probabilité π sur cet ensemble : $\sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x) = 1$. Quitte à réduire la taille de $\mathfrak{X}$, on peut supposer $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in \mathfrak{X}$. On fixe également une matrice de transition $Q = (Q(x,y))_{x,y\in\mathfrak{X}}$ sur $\mathfrak{X}$, qu'on suppose irréductible. Cette matrice Q n'a *a priori* aucun rapport avec π (en particulier, la mesure invariante de Q n'est pas supposée être égale à π). On impose en revanche l'hypothèse simplificatrice suivante : si $Q(x,y) > 0$ pour une paire d'états (x,y), alors on a aussi $Q(y,x) > 0$.

1 Forme générale de l'algorithme de Metropolis–Hastings

Soit $(A(x,y))_{x\neq y}$ une collection de nombres réels compris entre 0 et 1, indexée par les paires d'états (x,y) de $\mathfrak{X}$ avec $x \neq y$. On appelle *matrice de Metropolis–Hastings de matrice génératrice Q et de probabilités d'acceptation A* la matrice stochastique définie par :

$$P(x,y) = \begin{cases} A(x,y)\,Q(x,y) & \text{si } x \neq y, \\ Q(x,x) + \sum_{x\neq y}(1 - A(x,y))\,Q(x,y) & \text{si } x = y. \end{cases}$$

1. Vérifier que P est bien une matrice stochastique.

Les transitions de la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ associée à la matrice P se réalisent comme suit : si l'on est au temps n à l'état $X_n = x$, on choisit un état-candidat y pour la transition $X_n \to X_{n+1}$ suivant la loi de transition $Q(x,\cdot)$. Si cet état y est différent de x, alors :

- conditionnellement au fait que l'état-candidat soit y, on réalise effectivement la transition $x \to y$ ($X_{n+1} = y$) avec probabilité $A(x,y)$;
- avec probabilité conditionnelle $1 - A(x,y)$, on reste en l'état x.

L'algorithme de Metropolis–Hastings correspond au choix de coefficients d'acceptation $A(x,y)$ tels que la mesure invariante de P soit la loi π fixée initialement. Soit $S = (S(x,y))_{x\neq y}$ une famille symétrique ($S(x,y) = S(y,x)$ pour tout couple (x,y) d'états distincts), et

$$T(x,y) = \begin{cases} \frac{\pi(x)\,Q(x,y)}{\pi(y)\,Q(y,x)} & \text{si } Q(x,y) > 0, \\ 0 & \text{si } Q(x,y) = 0. \end{cases}$$

On pose alors $A(x,y) = \frac{S(x,y)}{1+T(x,y)}$.

2. On suppose que $0 \leq S(x,y) \leq 1 + \min(T(x,y), T(y,x))$ pour tout couple (x,y). Montrer que la matrice de Metropolis–Hastings P de matrice génératrice Q et de probabilités d'acceptation A admet pour mesure réversible (et donc invariante) π.

3. Donner une condition suffisante simple sur la matrice S pour que la matrice stochastique P soit irréductible et apériodique. En déduire que dès que $\mathrm{card}\,(\mathfrak{X}) \geq 2$, il existe une infinité de matrices stochastiques irréductibles apériodiques P pour lesquelles π est la mesure réversible.

Une matrice stochastique P privilégiée pour l'algorithme de Metropolis correspond au choix extrémal pour les coefficients $S(x,y)$: dans tout ce qui suit, on suppose que

$$S(x,y) = 1 + \min(T(x,y), T(y,x)) \quad \text{pour tout couple } x \neq y.$$

4. Montrer que sous ces hypothèses, les coefficients d'acceptation $A(x,y)$ s'écrivent

$$A(x,y) = \begin{cases} \min\left(1, \frac{\pi(y)\,Q(y,x)}{\pi(x)\,Q(x,y)}\right) & \text{si } Q(x,y) > 0, \\ 1 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Que dire de la matrice P si π est réversible pour Q ? Montrer dans tous les cas que si Q est irréductible apériodique, alors P est irréductible apériodique de mesure réversible π.

2 Vitesse de convergence et forme de Dirichlet

On rappelle l'inégalité suivante : si P matrice stochastique irréductible admettant une mesure réversible π a pour valeurs propres $1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_N$, alors la chaîne de Markov $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ associée à P vérifie pour tout temps n

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \leq C\,\mathrm{e}^{-\rho n}, \quad \text{avec } C = \frac{1}{2}\sqrt{\max_{x\in\mathfrak{X}}\left(\frac{1}{\pi(x)} - 1\right)},$$

où $\rho = \min(1 - |\lambda_2|, 1 - |\lambda_N|)$ est le trou spectral de P, et $\pi_n = \pi_0\,P^n$ est la loi marginale de X_n. L'objectif de cette section est d'obtenir des estimées simples de ce trou spectral. On va introduire à cet effet la *forme de Dirichlet* d'une paire (matrice stochastique P, mesure réversible π).

5. On fixe une matrice P de loi réversible π (par exemple la matrice définie dans la section précédente par la méthode de Metropolis–Hastings). On définit l'énergie de Dirichlet d'une fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$ par la formule suivante :

$$\mathscr{E}(f) = \langle (I-P)f \mid f \rangle_\pi = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\,((I-P)f)(x)\,f(x),$$

où I est la matrice identité et $I - P$ agit sur les fonctions à gauche (les fonctions sont vues comme des vecteurs colonnes). Montrer que l'énergie de Dirichlet se réécrit sous la forme

$$\mathscr{E}(f) = \frac{1}{2}\sum_{x,y\in\mathfrak{X}} \pi(x)\,P(x,y)\,(f(x) - f(y))^2,$$

et donc qu'elle est positive. Si f est une fonction arbitraire et c est une constante, quelles sont les relations entre les énergies $\mathscr{E}(f)$ et $\mathscr{E}(f+c)$?

6. On considère une base de diagonalisation $(f_1, f_2, \ldots, f_N)$ de la matrice P correspondant aux valeurs propres ordonnées $1 = \lambda_1 > \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_N$. Comme π est réversible par rapport à P, on peut supposer que cette base est orthonormée dans $\mathscr{L}^2(\mathfrak{X}, \pi)$. Montrer qu'on peut prendre pour f_1 la fonction constante égale à 1. Montrer aussi que toutes les autres fonctions $f_2, \ldots, f_N$ ont moyenne nulle sous π : $\pi(f_i) = \sum_{x\in\mathfrak{X}} \pi(x)\,f_i(x) = 0$ si $i \geq 2$.

7. La variance d'une fonction f sous la mesure π est donnée par

$$\mathrm{Var}_\pi(f) = \sum_{x \in \mathfrak{X}} \pi(x)\,(f(x) - \pi(f))^2.$$

Montrer que $\mathrm{Var}_\pi(f) = 0$ si et seulement si f est une fonction constante. Montrer ensuite la caractérisation suivante de la seconde valeur propre λ_2 de P :

$$1 - \lambda_2 = \inf\left\{ \frac{\mathscr{E}(f)}{\mathrm{Var}_\pi(f)} \mid f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R},\ f \text{ fonction non constante} \right\}.$$

On pourra décomposer une fonction f sur la base $(f_1, \ldots, f_N)$ de la question précédente.

8. Montrer aussi que pour toute valeur propre λ_i de P, il existe $x \in \mathfrak{X}$ tel que

$$|\lambda_i - P(x,x)| \leq 1 - P(x,x).$$

On pourra considérer x tel que $|f_i(x)|$ soit maximal. En déduire que $1 + \lambda_N \geq 2 \min_{x \in \mathfrak{X}} P(x,x)$.

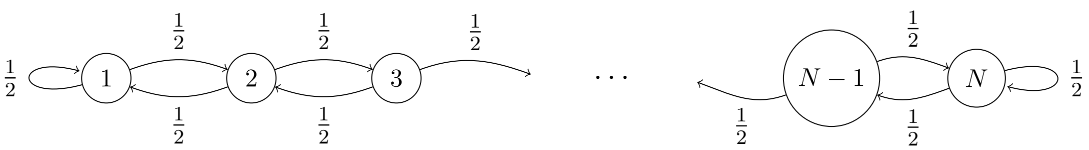
3 Simulation d'une loi à décroissance exponentielle

Dans cette dernière section, on considère l'espace des états $\mathfrak{X} = [\![1, N]\!]$, et une mesure de probabilité sur $\mathfrak{X}$ qui s'écrit sous la forme

$$\pi(x) = \frac{1}{Z_a}\, a^{h(x)},$$

où $a \in (0,1)$, $h : [\![1, N]\!] \to \mathbb{R}$ est une fonction telle que $h(x+1) - h(x) \geq 1$ pour tout $x \in [\![1, N-1]\!]$, et Z_a est la constante de normalisation telle que $Z_a = \sum_{x=1}^N a^{h(x)}$. On a donc une loi à décroissance au moins exponentielle, concentrée sur les petits entiers de $[\![1, N]\!]$.

9. On considère la matrice de transition Q associée à la marche aléatoire symétrique sur $[\![1, N]\!]$, avec probabilités de rebond $\frac{1}{2}$ aux deux bords 1 et N :



Montrer que la matrice stochastique P associée à Q et à la mesure π par l'algorithme de Metropolis–Hastings de la première partie est donnée par les valeurs suivantes :

$$P(x, x-1) = \frac{1}{2} \qquad \text{si } x \geq 2;$$
$$P(x, x+1) = \frac{a^{h(x+1)-h(x)}}{2} \qquad \text{si } x \leq N-1;$$
$$P(x,x) = \frac{1 - a^{h(x+1)-h(x)}}{2} \qquad \text{si } 2 \leq x \leq N-1;$$

$P(1,1) = 1 - \frac{a^{h(2)-h(1)}}{2}$ et $P(N,N) = \frac{1}{2}$.

10. Montrer que la plus petite valeur propre λ_N de la matrice P est plus grande que $-a$.

Pour toute paire d'états distincts ($x \neq y$) de $\mathfrak{X}$, on note $c(x,y) = \pi(x)\,P(x,y)$, qui est symétrique en (x,y). On introduit également le chemin $\gamma_{x,y}$ qui est le chemin le plus court reliant x à y dans le graphe de la matrice de transition Q ; si $x < y$, alors $\gamma_{x,y}$ est constitué des transitions $x \to x+1 \to \cdots \to y-1 \to y$, et on a une description similaire si $x > y$. On peut voir $\gamma_{x,y}$ comme une suite d'arêtes orientées $e = (e_- \to e_+)$.

11. Pour $x \neq y$, on pose $D(x,y) = \sum_{f \in \gamma_{x,y}} \frac{1}{(c(f))^{1/2}}$. Montrer la suite d'inégalités suivantes : pour toute fonction $f : \mathfrak{X} \to \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}_\pi(f) &= \frac{1}{2}\sum_{x \neq y} \pi(x)\pi(y)\,(f(x)-f(y))^2 \\ &\leq \frac{1}{2}\sum_{x\neq y} \pi(x)\pi(y)\,D(x,y)\left(\sum_{e \in \gamma_{x,y}} (c(e))^{1/2}\,(f(e_-)-f(e_+))^2\right) \\ &\leq \frac{1}{2}\sum_{e} c(e)\,(f(e_-)-f(e_+))^2 \left(\frac{1}{(c(e))^{1/2}} \sum_{x,y\,|\,e\in\gamma_{x,y}} \pi(x)\pi(y)\,D(x,y)\right)\end{aligned}$$

où la dernière somme $\sum_e$ est effectuée sur toutes les arêtes orientées $(x \to x+1)$ ou $(x \to x-1)$ du graphe de la matrice Q. En déduire que la seconde valeur propre de P vérifie :

$$\frac{1}{1-\lambda_2} \leq A = \max_e \left(\frac{1}{(c(e))^{1/2}} \sum_{x,y\,|\,e\in\gamma_{x,y}} \pi(x)\pi(y)\,D(x,y)\right).$$

12. Montrer que si $e = (x \to x+1)$ ou $(x+1 \to x)$, alors $c(e) = \frac{\pi(x+1)}{2}$. En déduire que pour tout couple $x < y$,

$$D(x,y) \leq \frac{\sqrt{2}}{(\pi(y))^{1/2}\,(1-a^{1/2})}.$$

On pourra borner $(\pi(y))^{1/2}\,D(x,y)$ par une série géométrique. Montrer finalement qu'on peut borner supérieurement A par

$$A \leq \frac{2}{(1-a^{1/2})^2}.$$

On pourra remarquer que si $e = (u, u+1)$, alors les x, y tels que $e \in \gamma_{x,y}$ sont $x \in [\![1,u]\!]$ et $y \in [\![u+1,N]\!]$.

13. Déduire des questions précédentes le résultat suivant : le trou spectral ρ de la matrice de Metropolis–Hastings P pour la simulation de la loi π vérifie

$$\rho \geq \rho(a) = \frac{(1-a^{1/2})^2}{2}.$$

14. Modifier légèrement la preuve du théorème C.8 des notes de cours pour établir l'inégalité suivante : si l'on part de l'état initial 1 ($\pi_0 = \delta_1$), alors la loi $\pi_n = \delta_1 P^n$ vérifie :

$$d_{\mathrm{TV}}(\pi_n, \pi) \leq F(a)\,\mathrm{e}^{-\rho(a)\,n}$$

pour tout temps $n \in \mathbb{N}$, et pour une certaine fonction $F(a)$ qu'on explicitera et qui ne dépend que de a (en particulier, elle ne dépend pas de N).

15. Écrire un programme `Python` ou `Sage` qui simule la loi π lorsque $h(x) = x$ et lorsque $h(x) = x + \log x$ (pour tous a et N). Peut-on calculer Z_a pour ces modèles, et en a-t-on besoin ?