Méthode de Monte Carlo par chaînes de Markov - I

TD4-MAPI3

2016-2017

1 Algorithme de Metropolis-Hastings

Soit E un espace d'état fini et μ une mesure de probabilité sur E qui charge tous les états. Rappelons que l'algorithme de Metropolis-Hastings pour un noyau auxiliaire de transition Q (tel que $Q(x, y) = 0$ si et seulement si $Q(y, x) = 0$) s'écrit:

Etape 0 :
`Initialiser` X_0 ;
Etape n+1 :
`Choisir` y `selon la loi` $Q(X_n, y)$;
`Poser` $X_{n+1} = y$ `avec proba` $\min\left(1, \frac{\mu(y)Q(y,X_n)}{\mu(X_n)Q(X_n,y)}\right)$, `sinon poser` $X_{n+1} = X_n$

1) Montrer que si la probabilité d'acceptation-rejet $\min\left(1, \frac{\mu(y)Q(y,x)}{\mu(x)Q(x,y)}\right)$ est remplacée par

$$\frac{\mu(y)Q(y, x)}{\mu(y)Q(y, x) - \mu(x)Q(x, y)},$$

la chaîne de Markov définie par l'algorithme de Metropolis-Hastings aura encore μ pour mesure invariante.

2) On remplace plus généralement la probabilité d'acceptation-rejet $\min\left(1, \frac{\mu(y)Q(y,x)}{\mu(x)Q(x,y)}\right)$ par

$$\alpha\left(\frac{\mu(y)Q(y, x)}{\mu(x)Q(x, y)}\right),$$

avec $\alpha : \mathbb{R}_+ \to]0, 1]$. Donner une condition suffisante sur la fonction α pour que la mesure μ soit la mesure invariante de la chaîne de Markov définie par l'algorithme de Metropolis-Hastings.

2 Metropolis-Hastings en échec

Une pièce d'échec se déplace aléatoirement sur un échiquier de 8×8 cases. En partant d'une position fixée (disons en bas à gauche) et en ne faisant que des déplacements autorisés, on veut modéliser une distribution uniforme μ sur l'échiquier.

1) On considère une tour (tous les mouvements horizontaux et verticaux sont autorisés). Montrer que choisir de façon équiprobable un déplacement autorisé à chaque étape conduit à une chaîne de Markov de mesure invariante μ. La loi de la position de la tour converge donc vers μ.

2) On considère une dame (tous les mouvements horizontaux, verticaux et en diagonal sont autorisés). Montrer que choisir de façon équiprobable un déplacement autorisé à chaque étape conduit à une chaîne de Markov qui n'a pas μ pour mesure invariante. La loi de la position de la dame ne converge donc pas vers μ.

3) Décrire une chaîne de Markov pour la dame utilisant les déplacements autorisés et le stationnement (laisser la dame sur place) de mesure invariante μ. On pourra par exemple utiliser l'algorithme de Metropolis-Hastings.

3 Metropolis-Hastings pour variable continue

Simuler la loi réelle de densité proportionnelle à $\exp(-|x|^4)$ en utilisant l'algorithme de Metropolis-Hastings avec un noyau d'exploration $Q(x, dy)$ donnée par une gaussienne centrée en x.

4 Recuit simulé - refroidissement trop rapide

Soit $E = \{1, 2, 3\}$ et $V : E \to \mathbb{R}$ donnée par $V(1) = 0$, $V(2) = 1$ et $V(3) = -1$ (la fonction V possède un minimum local en 1 et un minimum global en 3).

1) Ecrire l'algorithme de recuit simulé pour la matrice de transition

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

et la suite de température $T_n = \frac{c}{\log n}$, $n \geq 0$.

2) On suppose maintenant que la chaîne de Markov $(X_n)_{n\geq 0}$ évoluant selon cet algorithme part de $X_0 = 1$. Montrer que, pour tout $n \geq 2$, on a

$$\mathbb{P}[X_n = 3] \leq \sum_{k=0}^{n-2} \mathbb{P}[X_k = 1, X_{k+1} = 2].$$

3) Calculer $\mathbb{P}[X_k = 1, X_{k+1} = 2]$ en fonction de c.

3) En déduire que pour c suffisamment petit, $\mathbb{P}[X_n = 3]$ ne tend pas vers 1 lorsque n tend vers l'infini (il n'y a pas convergence en probabilité de X_n vers le minimum global 3).

5 Recuit simulé - le voyageur de commerce

On considère le problème du voyageur de commerce suivant. Un commerçant doit visiter N clients dans N villes différentes puis revenir à son point de départ (en ne visitant qu'une seule fois chaque ville). On cherche à minimiser la distance totale parcourue.

On représente les villes par N points $v_1, \ldots, v_N$ dans $[0, 1] \times [0, 1] \subset \mathbb{R}^2$, un trajet possible par une suite $(v_{i(1)}, \ldots, v_{i(N)})$ de points et la distance à minimiser est

$$d\Big((v_{i(1)}, \ldots, v_{i(N)})\Big) = \sum_{k=1}^{N} |v_{i(k)} - v_{i(k+1)}|,$$

où $v_{i(N+1)}$ est $v_{i(1)}$.

1) Justifier que $N!$ est le nombre de trajets possibles.

2) Simuler la position de $N = 10$ villes au hasard dans $[0, 1] \times [0, 1]$.

3) Ecrire l'algorithme de recuit simulé pour le noyau d'exploration Q qui consiste à échanger 2 villes au hasard dans un trajet $(v_{i_1}, \ldots, v_{i_N})$.

3) Représenter graphiquement les étapes de l'algorithme en reliant les villes des parcours.

6 Coloriage de carte

On veut colorier une carte géographique. Un coloriage associe à chaque pays de la carte un vecteur dans $c_i \in [0, 1]^3$ correspondant aux proportions de rouge, de bleu et de vert. Comme il faut que deux pays voisins aient une couleur différente, on se propose de tirer les coloriages avec une probabilités $K \exp(-\beta \sum |c_i - c_j|)$ où la somme s'effectue sur les paires de pays frontaliers, et β est une constante.

En considérant une carte d'Europe centrale (prenons l'Allemagne, la Pologne, l'Autriche, la République Tchèque, la Slovaquie, la Hongrie, la Slovénie et la Suisse), proposer une méthode de Métropolis pour un β constant, puis proposer une version recuit simulé en faisant varier le β à chaque étape.