

Convergence de l'échantillonneur de Gibbs
pour les distributions uniformes

Jeffrey S. Rosenthal

Department of Statistics

University of Toronto

<http://markov.utstat.toronto.edu/jeff/>

jeff@math.toronto.edu

Basé sur trois articles, tous avec **G.O. Roberts** :

Convergence of slice sampler Markov chains. (JRSSB 61:643–660, 1999.)

On convergence rates of Gibbs samplers for uniform distributions. (Ann. Appl. Prob. 8:1291–1302, 1998.)

The polar slice sampler. Soumis.

Chaîne de Markov Monte Carlo :

On s'intéresse à une distribution (compliquée) $\pi(\cdot)$ sur un espace (de grande dimension) \mathcal{X} (par ex. $\mathcal{X} \subseteq \mathbf{R}^d$).

On crée une chaîne de Markov $P(x, \cdot)$ sur \mathcal{X} , qui a la propriété que $\pi P = \pi$, c.à.d. π est une distribution stationnaire pour la chaîne.

Pour l'exécution :

Prendre $X^{(0)}$ d'une distribution initiale μ_0 , puis prendre $X^{(k)}$ de $P(X^{(k-1)}, \cdot)$, pour $k = 1, 2, 3, \dots$

Si k est assez grand, nous espérons que $X^{(k)}$ est à peu près un échantillon de $\pi(\cdot)$, c.à.d. $\mathcal{L}(X^{(k)}) \approx \pi(\cdot)$.

Questions :

Comment choisir $P(x, \cdot)$?

Quelle est la vitesse de convergence? Est-ce qu'on peut trouver des bornes sur

$$\|\mu_k - \pi\|_{\text{var}} \equiv \sup_{A \subseteq \mathcal{X}} \left| \mathbf{P}(X^{(k)} \in A) - \pi(A) \right| ?$$

L'Échantillonneur de Gibbs pour les distributions uniformes :

Soit $R \subseteq \mathbf{R}^d$, et supposons qu'on s'intéresse à $\mathbf{Unif}(R)$, c.à.d. la distribution uniforme dans la région R .

L'échantillonneur de Gibbs (à balayage aléatoire) marche ainsi : Étant donné $X^{(k)}$, choisir d'abord I_k uniforme dans $\{1, 2, \dots, d\}$, puis remplacer $X^{(k)}$ par

$$X^{(k+1)} \sim \mathbf{Unif}\{x \in R; x_j = X_j \text{ pour } j \neq I_k\},$$

c.à.d. choisir $X^{(k+1)}$ uniformément du segment de droite dans R qui touche $X^{(k)}$, et qui est parallèle à l'axe de la I_k -ième coordonnée.

Distribution stationnaire de cet échantillonneur : $\mathbf{Unif}(R)$.

(C'est clair, parce que c'est réversible relatif à $\mathbf{Unif}(R)$: $\mathbf{Unif}(R)(dx) P(x, dy) = \mathbf{Unif}(R)(dy) P(y, dx) \forall x, y$.)

Question spécifique : Quelle est la vitesse de convergence à $\mathbf{Unif}(R)$ de cet échantillonneur?

Motivation et cas spécial :

L'Échantillonneur par tranches (\ll Slice Sampler \gg)

[Développé par Edwards/Sokal, Besag/Green, Higdon, Damien/Walker, Mira/Tierney, Neal, etc. Lié aussi à l'algorithme de Swendsen/Wang.]

Supposons que ν est une distribution sur \mathbf{R}^d , avec une densité proportionnelle à

$$f : \mathbf{R}^d \rightarrow \mathbf{R}^{\geq 0}.$$

Observons que si (X, Y) est uniforme dans

$$R = \{(x, y); x \in \mathbf{R}^d, 0 \leq y \leq f(x)\}$$

(la région sous le graphe de f), alors $X \sim \nu$.

(Ici, Y s'appelle une \ll variable auxiliaire \gg .)

Alors, \llcorner l'échantillonnage par tranches \gg est une forme d'échantillonnage de Gibbs pour (X, Y) pour la distribution $\mathbf{Unif}(R)$.

C'est-à-dire, étant donné $(X^{(k)}, Y^{(k)})$, avec probabilité $\frac{1}{2}$:

(a) remplacer $Y^{(k)}$ avec

$$Y^{(k+1)} \sim \mathbf{Unif}[0, f(X^{(k)})],$$

ou bien (b) remplacer $X^{(k)}$ avec

$$X^{(k+1)} \sim \mathbf{Unif}\{x \in \mathbf{R}^d; f(x) \geq Y^{(k)}\},$$

sans changer l'autre variable.

Nous notons qu'en grande dimension, l'étape (b) peut être difficile; mais pour l'instant nous ne nous en préoccupons pas.

Convergence géométrique :

Rappelons qu'une chaîne de Markov, avec une distribution stationnaire $\pi(\cdot)$, est géométriquement ergodique s'il y a $\rho < 1$ avec

$$\|P^k(x, \cdot) - \pi(\cdot)\| \leq M(x) \rho^k, \quad k = 1, 2, \dots .$$

(La convergence est uniforme si $M(x) \equiv M$.)

Proposition 1. Soit $R \subseteq \mathbf{R}^2$ le \ll triangle tranchant \gg

$$R = \left\{ (x, y) \in \mathbf{R}^2; 0 < x < 1, \right. \\ \left. x \tan \theta < y < (x + x^\alpha) \tan \theta \right\},$$

où $0 < \theta < \pi/2$ et $1 < \alpha < \infty$. L'échantillonneur de Gibbs pour $\mathbf{Unif}(R)$ n'est pas géométriquement ergodique, c.à.d. qu'il converge lentement!

[D'autres exemples, avec vitesse de convergence aussi lente que désirée, sont présentés par C. Bélisle, RCS 1998.]

Par contraste, nous avons

Proposition 2. Soit $R \subseteq \mathbf{R}^2$ le vrai triangle

$$R = \left\{ (x, y) \in \mathbf{R}^2; 0 < x < 1, \right. \\ \left. x \tan \theta < y < x \tan \phi \right\},$$

où $0 < \theta < \phi < \pi/2$. L'échantillonneur de Gibbs pour $\mathbf{Unif}(R)$ est géométriquement ergodique. (Mais ce n'est pas uniformément ergodique.)

Ces deux résultats suggèrent que l'aspect lisse de la frontière de la région R contrôle le taux de convergence.

Si la frontière de R est bien lisse, nous avons :

Théorème 3. Soit R une région ouverte, connexe, et bornée dans \mathbf{R}^d , avec frontière qui est une variété (de $d - 1$ dimensions) qui est deux fois différentiable. Alors l'échantillonneur de Gibbs pour $\mathbf{Unif}(R)$ est uniformément géométriquement ergodique.

Ensuite, soit

$$R_\epsilon = \{\mathbf{x} \in \mathbf{R}^d ; B(\mathbf{x}, \epsilon) \subseteq R\}$$

« l'intérieur ϵ de R », où $B(\mathbf{x}, \epsilon)$ est une boule L^∞ (ou L^2 ou L^1). Alors nous avons

Théorème 4. Soit R une région ouverte, connexe, et bornée dans \mathbf{R}^d . Supposons qu'il y a $m \in \mathbf{N}$, $\epsilon > 0$ et $\delta > 0$ pour que

$$P^m(\mathbf{x}, R_\epsilon) \geq \delta, \quad \mathbf{x} \in R$$

(où P est l'échantillonneur de Gibbs pour $\mathbf{Unif}(R)$). Alors P est uniformément géométriquement ergodique.

Ce théorème dit que l'échantillonneur de Gibbs est géométriquement ergodique s'il n'est jamais « at-trapé » près de la frontière de R .

Retournons à l'échantillonneur par tranches :

Il est bien connu (Mira/Tierney) que, si f est bornée, et le support de f est aussi borné, alors l'échantillonneur par tranches pour f est uniformément géométrique.

C'est bon! Mais, la condition que le support de f soit borné est très forte. Comment l'enlever?

Soit

$$Q(y) = \lambda_d \{x \in \mathbf{R}^d; f(x) \geq y\},$$

où λ_d est la mesure de Lebesgue sur \mathbf{R}^d .

[En effet, la fonction Q contient toute l'information sur la convergence de l'échantillonneur par tranches pour f : Si f et \hat{f} sont deux densités différentes (peut-être même en dimensions différentes), mais leurs échantillonneurs par tranches $\{X_n\}$ et $\{\hat{X}_n\}$ correspondent à la même fonction Q , et $f(X_0) = \hat{f}(\hat{X}_0)$, alors

$$\|\mathcal{L}(X_n) - \pi(\cdot)\| = \|\mathcal{L}(\hat{X}_n) - \hat{\pi}(\cdot)\|, \quad n \in \mathbf{N};$$

voir G.O. Roberts et J.S. Rosenthal (1998), *Markov chains and de-initialising processes*, à paraître dans *Scandinavian Journal of Statistics*.]

Théorème 5. Supposons que f est bornée, et qu'il y a $\alpha > 1$ avec $Q'(y)y^{1+\frac{1}{\alpha}}$ non croissant pour y suffisamment petit. (En dimension $d = 1$, ça veut dire à peu près que les ailes (queues?) de f sont aussi légères que $x^{-\alpha}$.) Alors, l'échantillonneur par tranches pour f est géométriquement ergodique.

Ce théorème nécessite une condition pour les ailes de f qui est beaucoup moins forte que \ll support borné \gg .

(Mais, le théorème perd l'uniformité de la convergence.)

Aussi, la condition que f elle-même soit bornée n'est pas essentielle; il suffit que f^{-1} aussi satisfasse une condition comme $Q'(y)y^{1+\frac{1}{\alpha}}$ non croissant.

Des Bornes quantitatives :

Théorème 6. Supposons que f est bornée, et que $Q'(y)y$ est non croissant pour toutes valeurs de y . (C'est la limite $\alpha \rightarrow \infty$ de l'autre condition. En dimension $d = 1$, ça veut dire à peu près que les ailes de f sont aussi légères que e^{-x} .) Si $[f(X^{(0)}) / \sup_y f(y)] \geq 0.0025$, alors

$$\|\mu_k - \pi\|_{\text{var}} \leq 0.0324 (0.9897)^k (k - 7.79), \quad k \geq 23.$$

Par exemple, $\|\mu_k - \pi\|_{\text{var}} < 0.01$ si $k \geq 530$. Alors, on peut dire que 530 itérations \ll suffisent \gg pour la convergence de l'échantillonnage par tranches, si $Q'(y)y$ est non croissant.

Bien utile! Et, applicable à beaucoup de fonctions f , y compris certaines fonctions en grande dimension.

[Ce résultat utilise des bornes générales d'autres auteurs, y compris Meyn/Tweedie (Ann. Appl. Prob., 1994); Rosenthal (JASA, 1995); Lund/Tweedie (Math. Op. Res., 1996); et Roberts/Tweedie (Stoch. Proc. Appl., 1999; J. Appl. Prob., 2000). La preuve utilise des conditions de minorisation et des conditions de tendance (\ll drift \gg).]

L'Échantillonneur par tranches polaire :

(« Polar Slice Sampler »)

Pour utiliser le Théorème 6, il faut vérifier que $Q'(y)y$ est non croissant. Que veut dire cette condition?

Si $d = 1$, il suffit que $\log f$ soit concave, une condition qui n'est pas rare. Mais si $d > 1$, ça ne suffit pas. C'est dommage!

Alors, nous *changeons* l'algorithme ainsi :

Étant donné $(X^{(k)}, Y^{(k)})$, avec probabilité $\frac{1}{2}$

(a) remplacer $Y^{(k)}$ par

$$Y^{(k+1)} \sim \mathbf{Unif}[0, f(X^{(k)}) |X^{(k)}|^{d-1}],$$

ou bien (b) remplacer $X^{(k)}$ par

$$X^{(k+1)} \sim |x|^{-(d-1)} \mathbf{1}_{\{f(x) |x|^{d-1} \geq Y^{(k)}\}} \lambda_d(dx).$$

sans changer l'autre variable.

(Ça correspond à une autre « factorisation » de f .)

L'échantillonneur par tranches polaire change $Q(y)$ à

$$Q_{\text{polaire}}(y) \equiv \int_{\{f(x) |x|^{d-1} \geq y\}} |x|^{-(d-1)} \lambda_d(dx).$$

On a

Théorème 7. Si $\log f$ est concave (en n'importe quelle dimension), alors $Q'_{\text{polaire}}(y)y$ est non croissant. Alors, l'échantillonneur par tranches polaire pour f converge (avec $\|\mu_k - \pi\|_{\text{var}} \leq 0.01$) en $k \leq 530$ itérations.

[Il y a aussi une condition technique, liée à la « symétrie sphérique » de f ...]

Résumé :

- Nous avons étudié l'échantillonneur de Gibbs pour les distributions uniformes dans les régions R .
- Cet échantillonneur est parfois géométriquement ergodique, mais parfois pas; ça dépend de l'aspect lisse de la frontière de R . Si la frontière de R est deux fois différentiable, alors l'échantillonneur est uniformément géométriquement ergodique.
- L'échantillonneur par tranches est un cas spécial de l'échantillonneur de Gibbs dans la région R sous le graphe de la densité f d'une distribution.
- Si les ailes de f sont polynômiales (à peu près), alors l'échantillonneur par tranches est géométriquement ergodique.
- Si les ailes de f sont exponentielles (à peu près) en dimension 1, alors l'échantillonneur par tranches converge en 530 itérations.
- Si les ailes de f sont exponentielles (à peu près) en *n'importe quelle* dimension, alors l'échantillonneur par tranches *polaire* converge en 530 itérations.

Résumé très bref :

- Pour les régions $R \ll \text{raisonnables} \gg$, et les fonctions $f \ll \text{raisonnables} \gg$, l'échantillonneur de Gibbs et l'échantillonneur par tranches ont de très bonnes propriétés de convergence.

<http://markov.utstat.toronto.edu/jeff/>

jeff@math.toronto.edu