

Analyse semiclassique d'algorithmes de type Metropolis

Laurent Michel¹

1. Introduction

Le calcul numérique effectif est un problème qui se pose fréquemment dans divers domaines des sciences (Physique, Biologie, Médecine, etc.). Dans bien des situations, les méthodes déterministes de calcul sont mises en défaut et on a recours à des méthodes probabilistes dites de Monte-Carlo. Supposons par exemple que f est une fonction continue sur un intervalle borné $[a, b]$ et que $0 \leq f \leq 1$. Si la fonction f varie très vite, les méthodes de discrétisation de l'intervalle $[a, b]$ pour calculer numériquement l'intégrale de f demanderont un très grand nombre de pas. Si ce nombre est trop grand, la méthode devient inopérante pour des raisons de temps de calcul. Une approche probabiliste (qui est le fondement de la théorie de la mesure) consiste à découper $[0, 1]$ en petits morceaux $[a_k, a_{k+1}]$ et à approcher l'intégrale de f par

$$\sum_{k=0}^N p_k a_k,$$

où $p_k/(b-a)$ est la probabilité que $f(x)$ appartienne à $[a_k, a_{k+1}]$. Le nombre d'intervalles nécessaires pour une bonne approximation étant raisonnable, la méthode est efficace, à condition que l'on soit capable de calculer les probabilités p_k . En d'autres termes, le problème initial du calcul numérique de l'intégrale de f se ramène au problème suivant : déterminer un algorithme qui permette de tirer au hasard pour la densité f lorsque celle-ci n'est pas facilement calculable.

L'algorithme de Metropolis, du nom de N. Metropolis, appartient à cette famille et c'est sans doute l'un des algorithmes les plus utilisés. P. Diaconis rapporte souvent l'exemple suivant pour illustrer son efficacité (voir par exemple [Dia09]). Un de ses collègues lui propose de décoder un texte \mathcal{T} écrit avec des symboles puisés dans un ensemble \mathcal{B} . Si l'on note \mathcal{A} l'alphabet latin augmenté des symboles usuels (point, virgule, espace, etc.), il s'agit de déterminer la fonction

$$f : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{A}$$

qui donnera un sens au message. Une approche très naïve consisterait à tester successivement toutes les fonctions d'encodage f . Or, en pratique, ces ensembles ont un cardinal élevé (de l'ordre de 40 symboles pour écrire en français). Par conséquent, l'ensemble des fonctions d'encodage contient $40!$ éléments (en supposant pour simplifier que \mathcal{A} et \mathcal{B} ont même cardinal). La simple énumération de tous ces éléments est donc inaccessible aux ordinateurs.

Il faut donc trouver un algorithme qui en un certain sens favorise les fonctions d'encodage plausibles. Une hypothèse raisonnable, consiste à penser que la fonction f établit une correspondance entre les ensembles \mathcal{B} et \mathcal{A} qui respecte

¹ Université de Nice.

la répartition des lettres dans la langue française. Pour obtenir ces statistiques, on peut partir d'un texte classique et enregistrer pour chaque symboles x et y , la proportion $M(x, y)$ de chaînes xy dans le texte (si l'on utilise par exemple les 2500 pages d'« À la recherche du temps perdu », à raison de 4000 caractères par page, la collecte des occurrences $M(x, y)$ nécessitera de l'ordre de 10^7 opérations, nombre négligeable par rapport à $40!$). Si on note $(t_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$ la suite des symboles apparaissant dans le message codé \mathcal{T} , on introduit alors la plausibilité de f :

$$(1) \quad Pl(f) = \prod_{i=1}^N M(f(t_i), f(t_{i+1})).$$

Plus le nombre $Pl(f)$, est grand plus le décodeur f respecte les statistiques de la langue française. On cherche donc une fonction f qui maximise la plausibilité. Pour cela, on part d'une fonction de codage arbitraire f_1 que l'on va modifier en une fonction f_2 de manière à augmenter sa plausibilité et on itère le procédé. Le choix retenu pour passer de f_1 à f_2 , est donné par l'algorithme de Metropolis qui suit :

- On commence par calculer $p_1 = Pl(f_1)$.
- À partir de f_1 on fabrique une fonction f_1^* en effectuant une transposition aléatoire des valeurs que f_1 attribue à deux symboles.
- On calcule $p_1^* = Pl(f_1^*)$. Si $p_1^* \geq p_1$, on pose $f_2 = f_1^*$.
- Si $p_1^* < p_1$, on joue à pile ou face avec probabilité p_1^*/p_1 . Si le résultat est pile, on pose $f_2 = f_1^*$ et si c'est face on pose $f_2 = f_1$.

On itère ensuite le procédé à partir de f_2 .

Bien que l'ensemble de toutes les fonctions possibles soit très grand, cet algorithme converge très rapidement. C'est du moins, ce qu'on peut observer sur des simulations. On renvoie à [Dia09] pour plus de détails.

Un autre exemple très connu est celui du problème des sphères dures. C'est pour traiter ce problème que Metropolis et al [MRR⁺53] ont élaboré leur algorithme. Étant donné un entier $N \geq 1$ et un réel $\varepsilon > 0$ fixés, on cherche à disposer aléatoirement N disques de rayon ε dans une boîte $\tilde{B} =] - A - \varepsilon, A + \varepsilon[^2$ de manière à ce que les disques ne se recouvrent pas. Ce problème est posé par l'étude de phénomènes de transitions de phases en physique statistique. Dans ce modèle, les disques représentent des atomes et le nombre N est donc très grand (on renvoie à [Uhl68] pour une description du modèle).

Si on numérote les disques et qu'on note x_1, \dots, x_N la position de leurs centres respectifs, on cherche donc à tirer au hasard un point $X = (x_1, \dots, x_N)$ dans l'espace de configuration

$$(2) \quad \mathcal{O}_{N,\varepsilon} = \{X \in B^N, \forall i \neq j, |x_i - x_j| > \varepsilon\},$$

où $B =] - A, A[^2$. Ici, le terme « hasard » signifie « uniformément par rapport à la mesure de Lebesgue sur $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ ». Or, la géométrie de cet ouvert étant très compliquée (par exemple, le volume de $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ est inconnu), la mesure de Lebesgue associée n'est pas directement accessible. Pour dépasser ces difficultés, Metropolis et al [MRR⁺53] ont élaboré un algorithme de type Monte-Carlo. Nous décrivons ici une version semiclassique de cet algorithme qui nécessite la donnée d'un paramètre $h > 0$. On part d'une configuration arbitraire $X^1 = (x_1^1, \dots, x_N^1) \in \mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ et on itère le procédé suivant :

– On choisit un des N disques au hasard, disons le k ème et on déplace son centre x_k^1 au hasard uniformément dans une boule de rayon h . On note $x_k^{1,*}$ sa nouvelle position et $X^{1,*} = (x_1^1, \dots, x_k^{1,*}, \dots, x_N^1) \in \mathbb{R}^{2N}$ la nouvelle configuration. Si $X^{1,*} \in \mathcal{O}_{N,\varepsilon}$, on pose $X^2 = X^{1,*}$.

– Si $X^{1,*} \notin \mathcal{O}_{N,\varepsilon}$, on pose $X^2 = X^1$ (i.e. on reste au point précédent).

On fabrique ainsi une suite de points X^1, \dots, X^n et lorsque n devient grand la répartition des X^n dans l'ouvert $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ est uniforme par rapport à la mesure de Lebesgue.

En pratique, le nombre d'étapes nécessaires pour atteindre l'uniformité est raisonnable (au regard du nombre de disques N) et cet algorithme est très efficace pour simuler un échantillon représentatif de configurations. On peut alors utiliser cet échantillon pour calculer des quantités physiques (des intégrales) par une méthode de Monte-Carlo.

Le but de cet article est de montrer comment obtenir sur certains exemples un contrôle théorique à priori sur le nombre d'étapes nécessaires avant d'atteindre l'uniformité. C'est un sujet très vaste et nous aborderons essentiellement le cas d'algorithmes de Metropolis sur des espaces d'états continus et dans un cadre semiclassique, c'est à dire lorsque le déplacement élémentaire est contrôlé par un petit paramètre h . On renvoie aux articles [LD07], [DL09], [DL09], [LM09], [DLM08] pour des résultats complets et à [Leb] pour une synthèse. Il existe aussi une très large littérature lorsque l'espace d'état est un ensemble fini de cardinal N . Dans ce cas, il est très intéressant de relier la vitesse de convergence de l'algorithme à N (par exemple dans le cas du message codé, $N = \#\mathcal{A}!$). Pour une introduction à cette problématique ainsi que des références complètes, nous référons à [Dia09], [SC97], [DSC98].

L'article est organisée comme suit. Dans une première partie, on rappelle quelques propriétés élémentaires des chaînes de Markov et des noyaux de Markov, puis on donne une définition de l'algorithme de Metropolis dans un cas métrique. La seconde partie est consacrée à des rappels de théorie spectrale des opérateurs. On se limite dans cette partie au cas des opérateurs bornés, afin de simplifier l'exposition. Enfin dans une dernière partie, on montre comment une analyse spectrale fine permet de déterminer la vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis semiclassique. En particulier on traite le problème des sphères dures.

2. Généralités sur les chaînes de Markov

2.1. Chaînes de Markov sur un espace fini

Soit $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ une suite de variables aléatoires sur un espace de probabilités (Ω, \mathcal{F}, P) à valeurs dans un espace X . On dit que $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov si la connaissance de la chaîne au temps n ne dépend que de sa valeur au temps $n-1$. Autrement dit, pour tout $n \in \mathbb{N}$ et pour tout $x_1, \dots, x_n \in X$, on demande

$$(3) \quad P(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1) = P(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1})$$

où $P(A|B)$ désigne la probabilité conditionnelle de A sachant B . On supposera ici que les chaînes de Markov considérées sont homogènes, c'est à dire que pour tout

$x, y \in X$ la probabilité $P(X_n = y | X_{n-1} = x)$ est indépendante de n . On notera $K(x, y)$ cette quantité.

Si on suppose que l'ensemble X est fini de cardinal m . Les probabilités de transitions $(K(x, y))_{x, y \in X}$ définissent une matrice $m \times m$ à coefficients réels, positifs et tels que pour tout $x \in X$

$$(4) \quad \sum_{y \in X} K(x, y) = 1$$

On notera K cette matrice.

Supposons donnée une probabilité $\pi(x)$ sur X . On dit que π est stationnaire pour K si quelque soit $y \in X$ on a

$$(5) \quad \sum_{x \in X} \pi(x) K(x, y) = \pi(y)$$

Autrement dit, on demande que le vecteur $(\pi(y))_{y \in X}$ soit un vecteur propre de la matrice K^t pour la valeur propre 1.

Le théorème fondamental de chaînes de Markov (simple corollaire du théorème de Perron-Frobenius) affirme que sous une simple hypothèse de connectivité, il existe une unique mesure stationnaire et que les itérés K^n de la matrice de transition convergent vers la distribution stationnaire.

Théorème 0.1. *Supposons qu'il existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n \geq n_0$, $K^n(x, y) > 0$ pour tout $x, y \in X$. Alors, K possède une unique distribution stationnaire π et pour tout $x, y \in X$, on a $\lim_{n \rightarrow +\infty} K^n(x, y) = \pi(y)$.*

Autrement dit, quelque soit le point de départ x , au bout de n étapes la chaîne a une probabilité très proche de $\pi(y)$ d'être en y , pourvu que n soit grand. Si l'on cherche à échantillonner π (i.e. à tirer des points au hasard par rapport à π) et que l'on ne connaît pas π , le théorème précédent affirme qu'une chaîne de Markov pour laquelle π est stationnaire fera l'affaire pourvu qu'on l'ait itérée suffisamment. Un problème naturel consiste donc à trouver une chaîne de Markov pour laquelle π est stationnaire qui soit calculable. L'estimation du nombre d'itération nécessaire pour atteindre l'uniformité est aussi d'un grand intérêt.

2.2. Algorithme de Metropolis sur un ensemble fini

On suppose toujours que X est un ensemble fini et on se donne une probabilité π sur X . On suppose en outre que la probabilité π n'est connue qu'à une constante multiplicative près. On cherche à construire une matrice de Markov M pour laquelle π est stationnaire. Une réponse évidente consiste à prendre $M(x, y) = \pi(y)$ quelque soit x . Autrement dit, on choisit une probabilité de transition de x à y uniforme et égale à $\pi(y)$. En pratique ce choix n'a aucun intérêt : la probabilité π étant inconnue, la matrice M l'est aussi.

Supposons maintenant qu'on dispose d'une matrice de Markov $K(x, y)$ (n'ayant a priori aucun lien avec π), qui soit connue et qui vérifie $K(x, y) = 0$ ssi $K(y, x) = 0$. On va fabriquer à partir de K une matrice M pour laquelle

π est stationnaire. Pour cela on introduit le taux d'acceptation $A(x, y) = \pi(y)K(y, x)/\pi(x)K(x, y)$ et on pose :

$$(6) \quad M(x, y) = \begin{cases} K(x, y) & \text{si } x \neq y \text{ et } A(x, y) \geq 1 \\ K(x, y)A(x, y) & \text{si } x \neq y \text{ et } A(x, y) < 1 \\ K(x, y) + \sum_{z|A(x,z)<1} K(x, z)(1 - A(x, z)) & \text{si } x = y \end{cases}$$

Cette formule a une interprétation simple en terme de chaînes de Markov. Supposons que la chaîne est en x . Pour déterminer sa position à l'étape suivante, on choisit y au hasard à l'aide du noyau K . Si $A(x, y) \geq 1$, on bouge en y . Si $A(x, y) < 1$, on accepte ce mouvement avec probabilité $A(x, y)$ et on reste sur place avec probabilité $1 - A(x, y)$. Contrairement à l'exemple trivial discuté au début de ce paragraphe, les coefficients de la matrice M sont calculables, puisqu'ils ne font intervenir que des quotients $\pi(x)/\pi(y)$, quantité dans laquelle la constante de renormalisation inconnue a disparu.

Il est assez facile de voir que la chaîne M vérifie $\pi(x)M(x, y) = \pi(y)M(y, x)$ et par conséquent

$$(7) \quad \sum_x \pi(x)M(x, y) = \sum_x \pi(y)M(y, x) = \pi(y) \sum_x M(y, x) = \pi(y).$$

Autrement dit, π est stationnaire pour M .

Revenons maintenant à l'exemple de cryptographie discuté précédemment. Dans ce cas, X est l'ensemble des bijections de \mathcal{B} dans \mathcal{A} . Si ces ensembles ont disons 40 éléments, alors $\#X = 40!$. La probabilité π est donnée par

$$(8) \quad \pi(f) = z^{-1} \prod_{i=1}^N M(f(t_i), f(t_{i+1}))$$

où z est une constante de renormalisation et $\mathcal{T} = (t_i)_{i=1, \dots, N}$ est le texte codé. En pratique, pour calculer z , on doit sommer la définition précédente sur toutes les fonctions $f \in X$. Or, X contient tant d'éléments que ce calcul est impossible. Par contre, il est très facile de définir la chaîne de Markov K qui consiste à fabriquer une fonction f^* à partir de f en transposant aléatoirement les valeurs que f associe à deux symboles. On applique ensuite le procédé de Metropolis à K et l'on s'aperçoit que le problème du calcul de la constante z disparaît.

2.3. Généralités sur les noyaux de Markov

Soit (X, d) un espace métrique et \mathcal{B} la tribu des Boréliens de X . On note $L^\infty(X)$ l'espace des fonctions bornées sur X , muni de la norme $\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$.

Définition 0.2. Un noyau de Markov $K(x, dy)$ sur X est une application de X à valeurs dans les mesures Boréliennes sur X telle que :

- pour tout $x \in X$, $K(x, dy)$ est une mesure de probabilité
- pour tout $A \in \mathcal{B}$, $x \mapsto K(x, A) = \int_A K(x, dy)$ est une fonction mesurable.

Pour $f \in L^\infty(X)$ on définit $K(f)$ par

$$(9) \quad K(f)(x) = \int_X f(y)K(x, dy).$$

Puisque $K(x, dy)$ est une mesure de probabilité, la fonction $K(f)$ appartient à $L^\infty(X)$ et on a

$$(10) \quad \begin{aligned} K(\mathbf{1}) &= 1 \\ f \geq 0 &\implies K(f) \geq 0 \\ \|K(f)\|_\infty &\leq \|f\|_\infty \end{aligned}$$

On définit les itérées d'un noyau de Markov par

$$(11) \quad K^{m+n}f(x) = \int_X K^m(f)(y)K^n(x, dy)$$

Notons $\mathcal{M}(X)$ l'espace des probabilités sur X . $\mathcal{M}(X)$ s'injecte dans le dual des fonctions continues bornées $C_b^0(X)$ par

$$(12) \quad \langle \pi, f \rangle = \int_X f(x)d\pi(x)$$

Par suite, K^t opère sur $\mathcal{M}(X)$ par

$$(13) \quad \langle K^t(\pi), f \rangle = \langle \pi, K(f) \rangle$$

Définition 0.3. Une probabilité π est dite invariante pour K si $K^t(\pi) = \pi$.

Le théorème suivant est le pendant du théorème 0.1 dans le cas continu.

Théorème 0.4. Supposons que X est un intervalle compact de \mathbb{R} . Supposons que le noyau K vérifie les hypothèses suivantes :

- $\exists n_0 \in \mathbb{N}, \forall n \geq n_0, \forall x \in X, \forall A \in \mathcal{B}, K^n(x, A) > 0$
- Pour toute fonction f uniformément continue sur X , la famille $(K^n(f))_{n \in \mathbb{N}}$ est équicontinue sur X .

Alors, pour tout $x \in X$ et $A \in \mathcal{B}$, on a $\lim_{n \rightarrow \infty} K^n(x, A) = \pi(A)$.

On renvoie à [Fel71] pour la preuve de ce théorème et une exposition générale sur les noyaux de Markov.

Évidemment ce résultat est loin d'être optimal puisqu'il affirme seulement une convergence ponctuelle sans préciser la vitesse à laquelle la convergence a lieu. Par la suite, on travaillera avec la distance de variation totale.

Définition 0.5. Soient μ et ν deux mesures de probabilité sur X . Leur distance en variation totale est définie par

$$(14) \quad \|\mu - \nu\|_{TV} = \sup_{A \in \mathcal{B}} |\mu(A) - \nu(A)| = \frac{1}{2} \sup_{f \in L^\infty, \|f\|_\infty \leq 1} \left| \int f d\mu - \int f d\nu \right|$$

Revenons au cas où $K(x, dy)$ est un noyau de Markov sur X admettant une mesure stationnaire π . Notons Π_0 le projecteur sur les fonctions constantes $\Pi_0(f) = \int_X f(x)d\pi(x)$. La distance de variation totale entre $K^n(x, dy)$ et la mesure stationnaire est une quantité qui dépend du point de départ x . Il est donc naturel d'essayer d'estimer cette quantité indépendamment de x . Il vient de la définition précédente que

$$(15) \quad \sup_{x \in X} \|K^n(x, dy) - \pi\|_{TV} = \frac{1}{2} \|K - \Pi_0\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty}$$

Nous verrons par la suite, comment des techniques spectrales permettent d'estimer cette quantité. Une difficulté notable vient du fait qu'on doit estimer un opérateur dans L^∞ , un espace fonctionnel qui n'est pas naturellement associé à la décomposition spectrale des opérateurs.

2.4. Un algorithme de Metropolis dans le cas continu

Nous décrivons ici la classe d'algorithmes que nous étudions. Ces algorithmes ont été introduits en 1953 par Metropolis et al [MRR⁺53] pour étudier des problèmes de transitions de phase modélisés à travers le problème des sphères dures. De nombreuses généralisations ont été développées depuis. Nous décrivons ici un algorithme de Metropolis semiclassique associé à une mesure de densité sur un ouvert d'une variété Riemannienne.

On se donne une variété Riemannienne, lisse, compacte sans bord (M, g) . On note $d_g(x, y)$ la distance géodésique entre deux points de la variété et $d_g x$ la forme volume induite par la métrique. Pour $h \in]0, 1]$, on note $B(x, h)$ la boule riemannienne centrée en x et de rayon h et on note $|B(x, h)|$ son volume.

Soit Ω un ouvert de M et $\rho(x)$ une fonction bornée sur $\overline{\Omega}$ telle que $d\pi(x) = \rho(x)d_g x$ est une probabilité sur Ω . On considère l'opérateur T_h défini sur les fonctions continues sur Ω par

$$(16) \quad (T_h f)(x) = v_h(x)f(x) + \frac{1}{|B(x, h)|} \int_{\Omega} \mathbf{1}_{B(x, h)}(y)f(y)d_g y$$

avec $v_h(x) = 1 - \frac{1}{|B(x, h)|} \int_{\Omega} \mathbf{1}_{B(x, h)}(y)d_g y$. On remarque que la fonction v_h est à valeurs dans $[0, 1]$. On note t_h le noyau de T_h , qui est donné par

$$(17) \quad t_h(x, dy) = v_h(x)\delta_{y=x} + \frac{\mathbf{1}_{\{d_g(x, y) \leq h\}}}{|B(x, h)|} d_g y, \quad \forall x \in \Omega$$

où $\delta_{y=x}$ est la mesure de Dirac centrée en x : $\int_{\Omega} f(y)\delta_{y=x} = f(x)$ pour toute fonction continue f .

Par définition, quelque soit $x \in \Omega$, $t_h(x, dy)$ est une mesure de probabilité sur Ω , et par conséquent t_h est un noyau de Markov. C'est le noyau associé à la marche aléatoire naturelle sur la variété définie de la manière suivante : si la marche est au point x , elle se déplace en un point $y \in M$ choisi uniformément dans la boule géodésique centrée en x et de rayon h . Si le point fabriqué ainsi est encore dans l'ouvert Ω , on effectue le mouvement, si par contre il sort de Ω , on reste au point x .

Le noyau de Markov ainsi fabriqué admet la mesure stationnaire $d\mu(x) = Z_h |B(x, h)| d_g x$, où Z_h est une constante telle que $d\mu$ est une probabilité sur Ω . Le fait que Z_h est incalculable en pratique pose à priori un problème.

La stratégie de Metropolis consiste à modifier le noyau t_h de sorte qu'il admette $d\pi(x) = \rho(x)d_g x$ comme mesure stationnaire. Pour cela, on remarque que les mesures μ et π sont reliées de la manière suivante :

$$(18) \quad d\pi(x) = \rho(x)d\mu(x)$$

avec $\rho(x) = \frac{Z_h \rho(x)}{|B(x, h)|}$. On définit le taux d'acceptation $A(x, y)$ associé à la fonction $\rho(x)$ par

$$(19) \quad A(x, y) := \min\left(1, \frac{\rho(y)}{\rho(x)}\right) = \min\left(1, \frac{\rho(y)|B(x, h)|}{\rho(x)|B(y, h)|}\right).$$

On remarque au passage que la constante Z_h inconnue a disparu. Le noyau de Metropolis est alors défini par

$$(20) \quad M_h(x, dy) = w_h(x)\delta_{y=x} + \min(1, A(x, y))t_h(x, dy)$$

avec $w_h(x) = 1 - \int_{\Omega} \min(1, A(x, y))K_h(x, dy)$. En terme de marche aléatoire, le noyau précédent se comprend de la manière suivante. Si la marche est au point x , elle se déplace en un point y construit grâce au noyau $t_h(x, dy)$. Si le point obtenu vérifie $\rho(y) \geq \rho(x)$, on garde le déplacement. Dans le cas contraire, on effectue le mouvement avec probabilité $A(x, y)$ et on reste sur place avec probabilité $1 - A(x, y)$.

Si on utilise la définition de t_h , un simple calcul montre que

$$(21) \quad M_h(x, dy) = m_h(x)\delta_{y=x} + K_h(x, dy)$$

avec

$$(22) \quad K_h(x, dy) = \min(1, A(x, y)) \frac{\mathbf{1}_{\{d_g(x, y) \leq h\}}}{|B(x, h)|} d_g y$$

et $m_h(x) = 1 - \int_{\Omega} K_h(x, dy)$.

On traitera plus tard deux exemples : le cas où M est une variété abstraite, $\Omega = M$ et la fonction ρ est constante ainsi que le cas où Ω est un ouvert borné de \mathbb{R}^d (qui peut toujours être plongé dans un tore plat). Dans chacun des cas, le but est d'estimer la vitesse de convergence de M_h^n vers la mesure stationnaire $d\pi(x) = \rho(x)dx$. Au regard de (15), ceci revient à estimer $\|M_h^n - \Pi_0\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty}$. À la manière de ce qui est fait en dimension fini pour calculer les puissances successives d'une matrice on aimerait pouvoir diagonaliser l'opérateur M_h .

3. Quelques résultats classiques en théorie spectrale

3.1. Spectre des opérateurs autoadjoints compacts

On rappelle ici quelques résultats classiques de théorie spectrale. Pour simplifier l'exposition on se limite au cas des opérateurs bornés. On renvoie à [Bre83] et [RS72] pour une exposition plus complète. Supposons que $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ est un espace de Hilbert (par exemple $L^2(\Omega)$). Un opérateur borné T sur \mathcal{H} est une application linéaire continue $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$. Le spectre de T est défini de la manière suivante :

Définition 0.6. On dit que $z \in \mathbb{C}$ n'est pas dans le spectre de T si l'opérateur $T - z$ est inversible. Dans ce cas, on note $R(z) = (T - z)^{-1}$ l'inverse de $T - z$ appelé résolvante. On notera $\text{Spect}(T)$ le spectre de T .

D'après le théorème de l'application ouverte, la résolvante $R(z)$ est un opérateur continu pour toute valeur de z où elle est bien définie. Lorsque \mathcal{H} est un espace de dimension finie, le spectre est constitué de valeurs propres, c'est à dire de nombres complexe λ tels que $(T - \lambda)$ n'est pas injectif. En dimension infinie, il peut exister des éléments du spectre qui ne sont pas valeurs propres.

Définition 0.7. *L'adjoint de T est l'unique opérateur borné T^* tel que $\langle Tf, g \rangle = \langle f, T^*g \rangle$ quels que soient $f, g \in \mathcal{H}$. On dit que l'opérateur T est autoadjoint si on a $T^* = T$.*

Il est facile de voir que lorsque T est autoadjoint, $\text{Spec}(T) \subset \mathbb{R}$. En fait, si on note $\|T\|$ la norme d'opérateur de T , on a $\text{Spec}(T) \subset [-\|T\|, \|T\|]$.

Définition 0.8. *On dit qu'un opérateur borné $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ est compact si l'adhérence de l'ensemble $T(\{f \in \mathcal{H}, \|f\| \leq 1\})$ est compacte.*

Il est bien connu que la précompacité des ensembles bornés d'un espace vectoriel normé caractérise le fait qu'il est de dimension finie. Conséquence de ce théorème dû à Riesz, la théorie spectrale des opérateurs compact est très agréable.

Théorème 0.9. *Soit $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ un opérateur auto-adjoint compact. Les assertions suivantes sont satisfaites :*

- $0 \in \text{Spec}(T)$.
- $\text{Spec}(T)$ est un ensemble discret et le seul point d'accumulation possible de cet ensemble est 0.
- $\text{Spec}(T) \setminus \{0\}$ est constitué de valeurs propres réelles de multiplicité finie .
- Il existe une base hilbertienne de \mathcal{H} formée de vecteurs propres de T .

La dernière conclusion de ce théorème affirme qu'à l'instar des matrices symétriques en dimension finie, les opérateurs compacts se diagonalisent dans une base orthonormée.

3.2. Calcul fonctionnel

3.2.1. Cas des opérateurs compacts

Considérons une fonction $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ continue bornée. On veut définir $f(T)$ pour T opérateur auto-adjoint. En dimension finie, en utilisant la diagonalisabilité des matrices symétriques, il est possible de définir $f(A)$. Cette stratégie s'adapte parfaitement au cas d'opérateurs compacts en dimension infinie. En effet, si on note $\text{Spec}(T) = \{\lambda_0 = 0\} \cup \{\lambda_k, k \in \mathbb{N}^*\}$, E_k les sous espaces propres associés et P_k le projecteur orthogonal sur E_k , il suffit de définir $f(T)$ par la série normalement convergente

$$(23) \quad f(T) = \sum_{k=0}^{\infty} f(\lambda_k) P_k.$$

En particulier, le spectre de $f(T)$ est l'image par f du spectre de T .

3.2.2. Cas des opérateurs non bornés

Il est possible de généraliser tout ce qui a été développé dans ce chapitre au cas où l'opérateur T n'est pas défini sur \mathcal{H} tout entier, mais seulement sur un sous espace dense \mathcal{D} appelé domaine de l'opérateur. On aboutit ainsi à la notion d'opérateur non borné.

Définition 0.10. *Un opérateur non borné T de domaine \mathcal{D} est une application linéaire continue de \mathcal{D} dans \mathcal{H} .*

Le spectre d'un opérateur non borné est défini comme précédemment. C'est l'ensemble des nombres complexes z tels que $T - z$ ne possède pas d'inverse continu. Il faut noter ici, que le domaine \mathcal{D} n'étant pas fermé, le théorème de l'application ouverte ne s'applique plus et il peut exister des éléments z du spectre pour lesquels $T - z$ est inversible mais d'inverse non-continue. La définition d'adjoint et d'opérateur auto-adjoint s'étend aussi au cas des opérateurs non bornés. Enfin, il existe aussi un calcul fonctionnel pour les opérateurs non bornés auto-adjoints.

Un exemple essentiel d'opérateurs non bornés est donné par le Laplacien. Supposons que (M, g) est une variété Riemannienne compacte sans bord et notons Δ_g l'opérateur de Laplace-Beltrami sur cette variété. Fixons un système de coordonnées locales et notons (g_{ij}) la matrice de g , (g^{ij}) celle de g^{-1} . Pour toute fonction régulière f on pose

$$(24) \quad \Delta_g f = \det(g)^{-1/2} \sum_{i,j} \partial_{x_i} \det(g)^{1/2} g^{ij} \partial_{x_j}$$

On définit ainsi un opérateur non borné auto-adjoint sur $L^2(M, d_g x)$ ayant pour domaine l'espace de Sobolev $H^2(M)$. De plus $-\Delta_g$ est positif (au sens des opérateurs), de sorte que $T := -\Delta_g + 1$ est inversible. Les théorèmes d'injection de Sobolev montrent alors que $T^{-1} : L^2(M) \rightarrow L^2(M)$ est compact. Comme 0 ne peut pas être valeur propre de T , il existe une base Hilbertienne (e_k) de $L^2(M)$ formée de vecteurs propres de T associés à des valeurs propres $\mu_k \in]0, 1]$ tendant vers 0 lorsque k tend vers l'infini. En revenant à $-\Delta_g$ on montre que le spectre du Laplacien est formé de valeurs propres positives, isolées ($\lambda_k = 1/\mu_k - 1$), tendant vers $+\infty$ et on récupère une base hilbertienne $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ associée à ce spectre.

En utilisant ces informations, pour toute fonction continue bornée f on peut définir l'opérateur borné sur $L^2(\Omega)$, $f(-\Delta_g)$, au moyen de la formule

$$(25) \quad f(-\Delta_g)\psi = \sum_{k=0}^{\infty} f(\lambda_k) \langle \psi, e_k \rangle e_k.$$

Par construction le spectre de cet opérateur est l'image par f du spectre du Laplacien.

3.3. Estimation de la vitesse de convergence vers la stationnarité

Supposons que T est un opérateur de Markov sur un espace de probabilité (X, π) et supposons que π est stationnaire pour T . Notons $K(x, dy)$ le noyau de T et supposons (pour simplifier) que T est compact sur $L^2(X)$. Comme T est markovien, 1 est nécessairement valeur propre. On suppose que c'est une valeur propre simple et on note (μ_k) la suite des valeurs propres de T ordonnées de sorte

que $\mu_0 = 1$ et $\mu_1 = \sup \text{Spec}(T) \setminus \{\mu_0\}$. En particulier le trou spectral est donné par $g(T) = 1 - \mu_1$. On note $(e_k)_{k \in \mathbb{N}}$ la base hilbertienne associée aux (μ_k) et Π_k le projecteur orthogonal dans $L^2(X)$ sur $\text{Vect}(e_k)$. Enfin, on suppose qu'il existe $\delta_0 > g(T)$ tel que $\text{Spec}(T) \subset [-1 + \delta_0, 1]$.

Alors pour tout $f \in L^2(X)$ et $n \in \mathbb{N}$ on a

$$(26) \quad \|T^n f - \Pi_0 f\|_{L^2}^2 = \|(T - \Pi_0)^n f\|_{L^2}^2 = \left\| \sum_{k=1}^{\infty} \mu_k^n \Pi_k f \right\|_{L^2}^2$$

En utilisant l'orthogonalité des projecteurs, il vient :

$$(27) \quad \|T^n f - \Pi_0 f\|_{L^2}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} |\mu_k|^{2n} \|\Pi_k f\|_{L^2}^2 \leq (1 - \min(g(T), \delta_0))^{2n} \|f\|_{L^2}^2$$

Comme on a supposé que $\delta_0 > g(T)$, il suit $\|T^n - \Pi_0\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq e^{-ng(T)}$. La convergence (en norme L^2) vers la mesure stationnaire se fait donc à vitesse exponentielle; le taux de convergence étant donné par le trou spectral.

Cependant si on est intéressé par l'obtention d'estimations en variation totale, on doit contrôler la norme de $T_h^n - \Pi_0$ comme opérateur sur L^∞ , ce qui est beaucoup plus difficile tant l'orthogonalité des projecteurs est cruciale dans l'estimation précédente. Une stratégie consiste à passer par L^2 et à contrôler les pertes lorsqu'on revient dans L^∞ . Plus précisément, on a :

$$(28) \quad \|T^n - \Pi_0\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq \|T\|_{L^\infty \rightarrow L^2} \|T^{n-2} - \Pi_0\|_{L^2 \rightarrow L^2} \|T\|_{L^2 \rightarrow L^\infty}$$

L'opérateur étant Markovien, la première des normes du produit ci-dessus est bornée par 1. Le second terme est contrôlé par (27). Par contre le dernier terme n'a aucune raison a priori d'être borné (lorsque les paramètres du problème bougent) ni même fini.

La méthode que nous utilisons pour remédier à ce problème consiste à traiter différemment la partie du spectre proche de 1 et celle loin de 1. Étant donné un paramètre $\gamma \in]0, g(T)[$, on écrit $T^n - \Pi_0 = T_1^n + T_2^n$ avec $T_1 = \sum_{\gamma < \mu_k < 1} \mu_k \Pi_k$ et $T_2 = \sum_{\mu_k \leq \gamma} \mu_k \Pi_k$. Pour estimer T_2^n , on profite du fait que T_2 est très petit dans L^2 . Dans l'inégalité

$$(29) \quad \|T_2^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq \|T_2\|_{L^\infty \rightarrow L^2} \|T_2^{n-2}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \|T_2\|_{L^2 \rightarrow L^\infty}$$

le second terme (qui est plus petit que γ^{n-2}) contrôlera le dernier.

Pour traiter le terme T_1 , on écrit

$$(30) \quad \|T_1^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq \sum_{\gamma < \mu_k < 1} \mu_k^n \|\Pi_k\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq (1 - g(T))^n N(\gamma) \sup_{\gamma < \mu_k < 1} \|\Pi_k\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} .$$

où $N(\gamma) = \#\{k, \gamma < \mu_k < 1\}$. Il s'agit alors de démontrer de bonnes estimations sur les projecteurs spectraux ainsi qu'une estimation de la fonction de comptage des valeurs propres $N(\gamma)$.

4. Analyse Semiclassique de l'algorithme de Metropolis

Nous décrivons ici des résultats récents sur l'analyse d'algorithmes de type Metropolis par des méthodes semiclassiques. L'article fondateur est dû à P. Diaconis et G. Lebeau [LD07], [DL09] et concerne le cas où Ω est l'intervalle $]0, 1[$ de \mathbb{R} . Dans cet article les auteurs établissent le lien entre la théorie spectrale de l'opérateur de Metropolis et la théorie spectrale du Laplacien avec condition de Neumann au bord (ici deux points). Ils en déduisent ensuite la convergence en variation totale des itérés du noyau de Metropolis vers la mesure stationnaire. De plus, ils démontrent que les fonctions propres de l'opérateur de Metropolis et celles du Laplacien de Neumann sont exponentiellement proches loin du bord. Dans les deux sections à venir, on présente des généralisations de ce résultat à des cas plus géométriques : le cas d'une variété Riemannienne compacte sans bord [LM09] et le cas d'un ouvert borné de \mathbb{R}^d , [DLM08].

4.1. Cas d'une marche aléatoire sur une variété

On reprend les notations de la partie 2.4 en supposant en outre que l'ouvert Ω est égal à M . L'opérateur T_h défini par (16) devient

$$(31) \quad (T_h f)(x) = \frac{1}{|B(x, h)|} \int_{B(x, h)} f(y) d_g y$$

et son noyau t_h est donné par

$$(32) \quad t_h(x, dy) = \frac{\mathbf{1}_{\{d_g(x, y) \leq h\}}}{|B(x, h)|} d_g y$$

Soit ${}^t T_h$ l'opérateur transposé agissant sur les mesures de Borel sur M , défini par $\langle {}^t T_h(\mu), f \rangle = \langle \mu, T_h(f) \rangle$. Soit c_d le volume de la boule unité dans l'espace Euclidien \mathbb{R}^d . Pour h petit, $h^{-d}|B(x, h)|$ est une fonction régulière sur M qui converge vers c_d uniformément sur M lorsque $h \rightarrow 0$. Soit $d\nu_h$ la mesure de probabilité sur M définie par :

$$(33) \quad d\nu_h = \frac{|B(x, h)|}{Z_h c_d h^d} d_g x$$

où Z_h est une constante de normalisation telle que $d\nu_h(M) = 1$. Alors, pour h petit, $d\nu_h$ est proche de $d_g x / \text{Vol}(M)$ et Z_h est proche de $\text{Vol}(M)$.

On vérifie facilement que T_h est auto-adjoint sur $L^2(M, d\nu_h)$ et admet $d\nu_h$ pour mesure stationnaire. La norme de T_h agissant sur $L^2(M, d\nu_h)$ est égale à 1 et pour tout $h > 0$ fixé, l'opérateur T_h est compact. Par conséquent son spectre $\text{Spec}(T_h)$ est un sous ensemble fermé de $[-1, 1]$ qui est discret dans $[-1, 1] \setminus \{0\}$, avec 0 comme point d'accumulation. Afin de décrire le spectre de l'opérateur T_h , on introduit la fonction G_d définie sur \mathbb{R}^d par

$$(34) \quad G_d(\xi) = \frac{1}{c_d} \int_{|y| \leq 1} e^{iy\xi} dy$$

Au facteur $\frac{1}{c_d}$ près, la fonction G_d est la transformée de Fourier de la fonction caractéristique de la boule unité dans \mathbb{R}^d . C'est une fonction radiale de sorte que l'on est amené à introduire la fonction Γ_d définie sur $[0, \infty[$ par

$$(35) \quad G_d(\xi) = \Gamma_d(|\xi|^2).$$

La fonction Γ_d est analytique et il existe $\gamma_0 < 1$ tel que $\Gamma_d(s) \in [-\gamma_0, 1]$ quelque soit s . De plus, on a $\lim_{s \rightarrow \infty} \Gamma_d(s) = 0$, $\Gamma_d(s) = 1$ ssi $s = 0$, et près de $s = 0$

$$(36) \quad \Gamma_d(s) = 1 - \frac{s}{2(d+2)} + \mathcal{O}(s^2)$$

Avant de décrire les résultats obtenus dans [LM09], considérons l'exemple où la variété est le tore plat de dimension d muni de la métrique euclidienne : $M = (\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z})^d$. Dans ce cas, l'opérateur T_h et le Laplacien sont très étroitement reliés puisque $T_h = \Gamma_d(-h^2\Delta_g)$. En effet sur le tore, le spectre du Laplacien est décrit par la théorie des séries de Fourier. À chaque $k \in \mathbb{Z}^d$ correspond une fonction propre $e_k(x) = e^{i\langle k, x \rangle}$ de $-\Delta_g$ associée à la valeur propre $|k|^2 := \sum_{j=1}^d k_j^2$. De plus, les fonctions e_k , $k \in \mathbb{Z}^d$ forment une base hilbertienne de $L^2(M)$. Par conséquent, il suffit de vérifier que $T_h e_k = \Gamma_d(-h^2\Delta_g)e_k$ pour tout $k \in \mathbb{Z}^d$. Comme la métrique est plate, on calcule facilement :

$$(37) \quad \begin{aligned} T_h e_k(x) &= \frac{1}{c_d h^d} \int_{B(x,h)} e^{i\langle k, y \rangle} dy = \frac{e^{i\langle k, x \rangle}}{c_d} \int_{B(0,1)} e^{i\langle hk, u \rangle} du \\ &= \Gamma_d(h^2|k|^2) e^{i\langle k, x \rangle} = \Gamma_d(-h^2\Delta_g) e_k(x) \end{aligned}$$

Par suite, le spectre de T_h est entièrement décrit par la fonction Γ_d . On voit par exemple très facilement en utilisant le développement limité de Γ_d en 0 que le trou spectral est donné par $g(T_h) = \frac{h^2}{2(d+2)} + \mathcal{O}(h^4)$.

Dans le cas où la variété n'est pas un espace symétrique et lorsque la métrique n'est pas plate, l'opérateur T_h n'est plus une fonction du Laplacien. Cependant, il subsiste quelque chose de l'approximation de T_h par $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)$. Par exemple, on démontre dans [LM09] que les valeurs propres de T_h sont bien approchées par celles de $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)$ pour ce qui concerne les valeurs propres proches de 1. En effet, notons

$$(38) \quad 0 < \dots \leq \mu_{k+1}(h) \leq \mu_k(h) \leq \dots \mu_1(h) < \mu_0(h) = 1$$

la suite décroissante des valeurs propres positives de T_h . On a le théorème suivant :

Théorème 0.11. *Soit $h_0 > 0$ suffisamment petit. Il existe $\gamma < 1$ tel que pour tout $h \in]0, h_0]$ on a $\text{Spec}(T_h) \subset [-\gamma, 1]$ et 1 est une valeur propre simple de T_h . De plus, pour tout $L > 0$, il existe $h'_0 > 0$ et $C > 0$ tels que pour tout $h \in]0, h'_0]$ et pour tout $k \leq L$, on a*

$$(39) \quad \left| \frac{1 - \mu_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)} \right| \leq Ch^2$$

On peut aussi préciser la vitesse de convergence des itérés du noyau K_h vers la mesure stationnaire $d\nu_h$.

Théorème 0.12. *Il existe $C > 0$ et $h_0 > 0$ tels que pour tout $h \in]0, h_0]$ on a*

$$(40) \quad e^{-\gamma'(h)nh^2} \leq 2 \sup_{x \in M} \|K_h^n(x, y) d_g y - d\nu_h\|_{TV} \leq C e^{-\gamma(h)nh^2} \quad \text{pour tout } n$$

Ici $\gamma(h), \gamma'(h)$ sont des fonctions positives telles que $\gamma(h) \simeq \gamma'(h) \simeq \frac{\lambda_1}{2(d+2)}$ lorsque $h \rightarrow 0$.

Autrement dit, la vitesse de convergence est exponentielle quand n tend vers l'infini et le taux de convergence est en $\lambda_1 h^2$ où λ_1 est la première valeur propre non nulle du Laplacien.

Si l'on veut échantillonner la mesure canonique sur la variété (plutôt que $d\nu_h$), il faut modifier légèrement l'opérateur T_h en utilisant le procédé de Metropolis. On doit alors étudier un opérateur M_h qui n'est plus compact mais qui est une petite perturbation de l'opérateur T_h . On peut alors adapter les arguments précédents pour décrire le spectre de M_h et estimer la vitesse de convergence vers la mesure stationnaire.

Nous concluons cette partie en donnant quelques idées des démonstrations des théorèmes ci-dessus. Celles-ci reposent sur de l'analyse micro-locale en version semiclassique. On renvoie à [DS99] et [Mar02] pour des textes de référence. En ce qui concerne le théorème 0.11, la stratégie consiste à comparer les opérateurs T_h et $\Gamma_{d,h} := \Gamma_d(-h^2 \Delta_g)$ et à démontrer qu'ils sont proches en un certain sens. À cette fin, on démontre que pour toute fonction $\Phi_0 \in C_0^\infty$, $T_h \Phi_0(-h^2 \Delta_g)$ et $\Gamma_{d,h} \Phi_0(-h^2 \Delta_g)$ sont des opérateurs pseudo-différentiels et que leurs symboles sont proches. Ceci permet d'utiliser les informations spectrales que nous avons sur $\Gamma_{d,h}$ pour en déduire des résultats sur T_h . En plus de l'approximation des valeurs propres énoncée dans le théorème 0.11, on démontre une estimation de Weyl de la fonction de comptage des valeurs propres ainsi que des estimées des fonctions propres en norme L^∞ : il existe $\delta_0 > 0$ et $h_0 > 0$ tels que pour tout $\lambda \in [0, \delta_0]$ et $h \in]0, h_0]$, on a

$$(41) \quad \#\text{Spec}(T_h) \cap [1 - \lambda, 1] \leq C(1 + h^{-2}\lambda)^{d/2},$$

et pour toute fonction $u_h \in L^2(M)$ et tout $z_h \in [1 - \delta_0, 1]$ tels que $(T_h - z_h)u_h = 0$, on a

$$(42) \quad \|u_h\|_{L^\infty} \leq C((1 + h^{-2}(1 - z_h))^{d/2}).$$

Le point de départ de la preuve du théorème 0.12 est l'égalité (15). Compte tenu des remarques de la section 3.3, il s'agit de démontrer une estimation convenable du projecteur spectral $1_{[1-Ch^2, 1]}(T_h)$ comme opérateur de L^2 dans L^∞ . Ceci est possible grâce aux estimées (41) et (42).

4.2. Opérateur de Metropolis sur un ouvert borné

Nous terminons cet article en décrivant le résultat que nous avons obtenu avec P. Diaconis et G. Lebeau sur l'analyse de l'algorithme de Metropolis sur un domaine borné.

4.2.1. Problème à un corps

On s'intéresse d'abord au problème consistant à déplacer au hasard un point dans un ouvert. On munit \mathbb{R}^d de la métrique euclidienne et on suppose que $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ est un ouvert borné et que sa frontière $\partial\Omega$ est de régularité Lipschitz (i.e. peut être paramétrée localement par une fonction Lipschitz). On se donne une densité $\rho : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ que l'on suppose régulière et on considère le noyau de Metropolis défini en (21), (22). Ici, la métrique est plate de sorte que la forme volume $d_g x$ est donnée par la mesure de Lebesgue et que le volume de la boule $B(x, h)$ est indépendant de x et donné par $c_d h^d$ où c_d est le volume euclidien de la boule unité. Par suite, la fonction $A(x, y)$ est donnée par $A(x, y) = \min(1, \rho(y)/\rho(x))$ et le noyau de Metropolis est

$$(43) \quad M_h(x, dy) = m_h(x)\delta_{y=x} + K_h(x, dy)$$

avec

$$(44) \quad K_h(x, dy) = \frac{1}{c_d h^d} \mathbf{1}_{\{d_g(x, y) \leq h\}} dy$$

et $m_h(x) = 1 - \int_{\Omega} K_h(x, dy)$.

On vérifie facilement que cet opérateur est auto-adjoint sur $L^2(\Omega, \rho(x)dx)$ de sorte que la mesure $\rho(x)dx$ est stationnaire. Se pose donc la question de la convergence des itérés de M_h vers la mesure stationnaire. Pour cela, on étudie le spectre de l'opérateur M_h . Pour simplifier, on suppose ici que $\rho = 1$.

La frontière de l'ouvert Ω étant Lipschitz, on montre facilement qu'il existe une constante $\delta_0 > 0$ telle que pour tout $h > 0$ petit on a $0 \leq m_h(x) < 1 - \delta_0$. Par suite le spectre essentiel de l'opérateur de multiplication par m_h est inclus dans $[-1, 1 - \delta_0]$. Or, l'opérateur K_h étant compact, il est bien connu que le spectre essentiel de $M_h = m_h + K_h$ est lui aussi inclus dans $[-1, 1 - \delta_0]$. Autrement dit, le spectre de M_h est discret dans $[1 - \delta_0, 1]$. On note

$$(45) \quad 0 < \dots \leq \mu_{k+1}(h) \leq \mu_k(h) \leq \dots \mu_1(h) \leq \mu_0(h) = 1$$

la suite décroissante des valeurs propres positives de M_h .

Comme précédemment, on va comparer ces valeurs propres à celles d'un opérateur de référence. On introduit donc le Laplacien de Neumann Δ_N défini par

$$(46) \quad \Delta_N u(x) = \sum_{j=1}^d \partial_{x_j}^2 u(x)$$

qui est auto-adjoint sur le domaine suivant

$$(47) \quad D(\Delta_N) = \{u \in H^2(\Omega), \partial_n u = 0 \text{ sur } \partial\Omega\}$$

où $\partial_n u(x)$ est la dérivée normale de u sur la frontière $\partial\Omega$. Comme pour l'opérateur de Laplace Beltrami sur une variété, les injections de Sobolev montrent que l'inverse de $-\Delta_N + 1$ est compact, de sorte que le spectre de $-\Delta_N$ est constitué de valeurs propres $\lambda_0 = 0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots$ tendant vers l'infini. On a alors le résultat suivant :

Théorème 0.13. Soit $h_0 > 0$ suffisamment petit. Il existe $\gamma < 1$ tel que pour tout $h \in]0, h_0]$ on a $\text{Spec}(M_h) \subset [-\gamma, 1]$ et 1 est une valeur propre simple de M_h . De plus, pour tout $L > 0$ et pour tout $\varepsilon > 0$ petit, il existe $h'_0 > 0$ tel que pour tout $h \in]0, h'_0]$ et pour tout $k \leq L$, on a

$$(48) \quad \left| \mu_k(h) - 1 + \frac{h^2(d+2)}{2} \lambda_k \right| < \varepsilon h^2$$

Comme dans le cas d'une marche aléatoire sur une variété on démontre aussi la convergence exponentielle à l'équilibre :

Théorème 0.14. Il existe $C > 0$ et $h_0 > 0$ tels que pour tout $h \in]0, h_0]$ on a

$$(49) \quad e^{-\gamma'(h)nh^2} \leq 2 \sup_{x \in M} \|M_h^n(x, y) d_g y - d\nu_h\|_{TV} \leq Ce^{-\gamma(h)nh^2} \quad \text{pour tout } n$$

Ici $\gamma(h), \gamma'(h)$ sont des fonctions positives telles que $\gamma(h) \simeq \gamma'(h) \simeq \frac{\lambda_1}{2(d+2)}$ lorsque $h \rightarrow 0$.

La démonstration du théorème 0.13 est un peu différente de celle du théorème 0.11. En effet, pour éviter des problèmes liés au fait que le bord de l'ouvert n'est pas régulier, on n'utilise pas ici d'analyse microlocale. On choisit plutôt une méthode variationnelle qui permet de comparer l'opérateur M_h sur $L^2(\Omega)$ à l'opérateur de Metropolis sur le tore, via leurs formes de Dirichlet respectives. Ceci permet en particulier d'obtenir une estimation similaire à (41).

Une manière élémentaire de voir apparaître le Laplacien avec condition de Neumann, consiste à appliquer l'opérateur M_h à une fonction propre de Δ_N . Supposons pour simplifier que le bord de Ω est régulier et que $(-\Delta_N - \lambda)u = 0$ et $\partial_n u = 0$ sur $\partial\Omega$. Alors u est une fonction régulière et on a

$$(50) \quad T_h u(x) - u(x) = \int_{|z| < 1, x+hz \in \Omega} (u(x+hz) - u(x)) dz$$

Si $\text{dist}(x, \partial\Omega) > h$, un développement de Taylor et l'imparité des fonctions $z \mapsto z_j$ montrent que

$$\begin{aligned} T_h u(x) - u(x) &= h \sum_{j=1}^d \partial_{x_j} u(x) \int_{|z| < 1} z_j dz + \frac{h^2}{2} \sum_{i,j} \partial_{x_i} \partial_{x_j} u(x) \int_{|z| < 1} z_i z_j dz + O_{L^\infty}(h^3) \\ &= \frac{\alpha_d}{2} h^2 \Delta u(x) + O_{L^\infty}(h^3) = \frac{\alpha_d}{2} h^2 \lambda u(x) + O_{L^\infty}(h^3) \end{aligned}$$

Pour x tel que $\text{dist}(x, \partial\Omega) < h$, on utilise des coordonnées telles que localement $\Omega = \{(x_1, x') \in \mathbb{R}^d, x_1 > 0\}$. Un nouveau développement de Taylor montre que

$$T_h u(x) - u(x) = h \sum_{j=1}^d \partial_{x_j} u(x) \int_{|z| < 1, x_1 + h z_1 > 0} z_j dz + O_{L^\infty}(h^2)$$

Un argument de parité montre que les termes d'indices supérieurs à 2 dans la somme ci dessus s'annulent. Par ailleurs, comme $\partial_n u|_{\partial\Omega} = 0$ et $\text{dist}(x, \partial\Omega) < h$ le terme d'indice $j = 1$ est un $O_{L^\infty}(h^2)$. Comme l'ensemble $\{\text{dist}(x, \partial\Omega) < h\}$ est de mesure $O(h)$, il vient

$$\mathbf{1}_{\text{dist}(x, \partial\Omega) < h} (T_h u - u) = O_{L^2}(h^{\frac{5}{2}}).$$

En combinant cette estimation avec l'estimation loin du bord, il vient $T_h u - u = \frac{1}{2}\alpha_d h^2 \lambda u + O_{L^2}(h^{5/2})$. On en déduit aisément l'existence de valeurs propres $\mu_k(h)$ de T_h satisfaisant (48). Il faut par contre travailler un peu plus pour montrer qu'on récupère ainsi toutes les valeurs propres proches de 1. Concernant la preuve du théorème 0.14, la stratégie est la même que dans le cas d'une variété compacte. Cependant, l'approche variationnelle ne permet pas de prouver d'estimation des fonctions propres similaire à (42). Pour estimer les projecteurs spectraux de L^2 dans L^∞ , on passe donc par des estimées de Nash. On renvoie à [DSC96], [DLM08] et [Leb] pour plus de détails.

4.2.2. Le problème des sphères dures

Revenons maintenant au problème historique, dit des sphères dures, que nous avons décrit dans l'introduction. La stratégie que nous avons mise en œuvre pour étudier le déplacement aléatoire d'un point dans un ouvert s'adapte facilement. On reprend ici les notations de l'introduction. L'espace de configurations est donc

$$(51) \quad \mathcal{O}_{N,\varepsilon} = \{x = (x_1, \dots, x_N) \in B^N, \forall 1 \leq i < j \leq N, |x_i - x_j| > \varepsilon\}.$$

où $B =]-A, A]^2$. Il convient de remarquer que lorsque N devient grand, l'ensemble $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ peut être très compliqué. Par exemple, il est démontré dans [Kah09] qu'on peut avoir une faible densité de disques sans que cet ensemble soit connexe. Plus précisément, Kahle montre que $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ peut avoir des composantes connexes d'intérieur vide dès que $N\varepsilon$ est grand et sous la contrainte $N\varepsilon^d$ arbitrairement petit. Cependant, on démontre dans [DLM08] que si $N\varepsilon$ est suffisamment petit, alors l'ouvert $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ est connexe et Lipschitz.

Introduisons maintenant l'opérateur de Metropolis. On note φ la fonction caractéristique de la boule unité dans \mathbb{R}^2 et on introduit le noyau

$$K_h(x, dy) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \delta_{x_1} \otimes \dots \otimes \delta_{x_{j-1}} \otimes h^{-d} \varphi\left(\frac{x_j - y_j}{h}\right) dy_j \otimes \delta_{x_{j+1}} \otimes \dots \otimes \delta_{x_N},$$

et l'opérateur de Metropolis associé sur $L^2(\mathcal{O}_{N,\varepsilon})$

$$M_h(u)(x) = m_h(x)u(x) + \int_{\mathcal{O}_{N,\varepsilon}} u(y)K_h(x, dy),$$

avec

$$m_h(x) = 1 - \int_{\mathcal{O}_{N,\varepsilon}} K_h(x, dy).$$

En terme de chaîne de Markov, ce noyau s'interprète de la manière suivante. Supposons que la chaîne est en $X = (x_1, \dots, x_N)$ au temps n . Pour déterminer sa position au temps $n + 1$, on commence par choisir un entier j au hasard dans $\{1, \dots, N\}$ puis on déplace au hasard le disque x_j dans la boule de rayon h centrée en x_j . On est donc exactement en train de mettre en œuvre la procédure décrite dans l'introduction.

Le noyau M_h admet la mesure de Lebesgue pour mesure stationnaire et comme dans les cas précédents, la convergence des itérés de M_h vers cette mesure se fait

à vitesse exponentielle; le taux de décroissance exponentiel étant donné par une quantité spectrale. Plus précisément, introduisons l'opérateur

$$(52) \quad \begin{aligned} |\Delta|_N &= -\frac{1}{16N}\Delta, \\ D(|\Delta|_N) &= \left\{ u \in H^1(\mathcal{O}_{N,\varepsilon}), -\Delta u \in L^2(\mathcal{O}_{N,\varepsilon}), \partial_n u|_{\partial\mathcal{O}_{N,\varepsilon}} = 0 \right\}. \end{aligned}$$

Comme le bord de $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ est Lipschitz, la dérivée normale est bien définie. Cet opérateur est positif, à résolvante compacte. On note $0 = \nu_0 < \nu_1 \leq \nu_2 \leq \dots$ son spectre. Le théorème suivant donne une première estimation de la vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis pour le problème des sphères dures dans un cadre semiclassique.

Théorème 0.15. *Soit $\varepsilon > 0$ suffisamment petit pour que $\mathcal{O}_{N,\varepsilon}$ soit connexe et Lipschitz. Alors*

$$(53) \quad \sup_{x \in \mathcal{O}_{N,\varepsilon}} \left\| T_h^n(x, dy) - \frac{dy}{\text{vol}(\mathcal{O}_{N,\varepsilon})} \right\|_{TV} \leq C_4 e^{-ng(h)}.$$

avec $\lim_{h \rightarrow 0^+} h^{-2}g(h) = \nu_1$.

La preuve de ce théorème consiste essentiellement à se ramener au cas du théorème 0.14 en itérant suffisamment T_h . On renvoie à [DLM08] pour les détails.

5. Conclusion

Les méthodes d'analyse microlocale se sont avérées très fructueuses pour entamer l'étude de la vitesse de convergence d'algorithmes de Metropolis. Il faut néanmoins mentionner deux limites à cette approche.

En premier lieu, dans les estimations de variation totale du type (53), le taux de décroissance exponentielle est optimal, par contre la constante devant l'exponentielle est très mal connue. En particulier sa dépendance par rapport à la dimension de l'espace reste à étudier.

Une autre limite à cette approche est qu'elle ne s'applique qu'au cas semiclassique, c'est à dire lorsque le mouvement entre deux étapes de la chaîne de Markov est petit. Dans la pratique les algorithmes utilisés sont souvent globaux (on s'autorise à déplacer un point dans tout l'espace de configuration). Pour l'heure ces problèmes semblent hors d'atteinte par des méthodes semiclassiques.

6. Références

- [Bre83] H. Brezis. *Analyse fonctionnelle*. Collection Mathématiques Appliquées pour la Maîtrise. [Collection of Applied Mathematics for the Master's Degree]. Masson, Paris, 1983. Théorie et applications. [Theory and applications].
- [Dia09] P. Diaconis. The Markov chain Monte Carlo revolution. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 46(2) :179–205, 2009.
- [DL09] P. Diaconis and G. Lebeau. Micro-local analysis for the Metropolis algorithm. *Math. Z.*, 262(2) :411–447, 2009.
- [DLM08] P. Diaconis, G. Lebeau, and L. Michel. Analysis of the metropolis algorithm in a bounded domain. *preprint Univ. Nice*, 2008.
- [DS99] M. Dimassi and J. Sjöstrand. *Spectral Asymptotics in the Semi-Classical Limit*. Lecture Note Series. 268. Cambridge University Press, London, 1999.

- [DSC96] P. Diaconis and L. Saloff-Coste. Nash inequalities for finite Markov chains. *J. Theoret. Probab.*, 9(2) :459–510, 1996.
- [DSC98] P. Diaconis and L. Saloff-Coste. What do we know about the metropolis algorithm. *J. Comput. System Sci.*, 57(1) :20–36, 1998.
- [Fel71] William Feller. *An introduction to probability theory and its applications. Vol. I & II.* Second edition. John Wiley & Sons Inc., New York, 1971.
- [Kah09] M. Kahle. Asymptotically zero-density stable configuration of hard discs. *preprint Stanford Univ.*, 2009.
- [LD07] G. Lebeau and P. Diaconis. Métropolis : le jour où l'étoile probabilité entra dans le champ gravitationnel de la galaxie microlocale. In *Séminaire : Équations aux Dérivées Partielles. 2006–2007*, pages Exp. No. XIV, 13. 2007.
- [Leb] G. Lebeau. Introduction à l'analyse de l'algorithme de metropolis. Cours de l'école d'été du GDR MOAD. <http://moad.univ-lyon1.fr/Main.php>
- [LM09] G. Lebeau and L. Michel. Semiclassical analysis of a random walk on a manifold. *Annals of Probability*, 2010.
- [Mar02] A. Martinez. *An introduction to Semiclassical and Microlocal Analysis.* Springer, New York, 2002.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 :1087–1092, 1953.
- [RS72] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. I. Functional analysis.* Academic Press, New York, 1972.
- [SC97] L. Saloff-Coste. Lectures on finite markov chains. Lectures notes in math. 1665. Springer, New York, 1997.
- [Uhl68] G. E. Uhlenbeck. An outline of statistical mechanics. In *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, volume 2, pages 1–19. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1968.

Société Mathématique de France PRIX D'ALEMBERT



Prix décerné
par la Société Mathématique de France
Il vise à encourager
la diffusion de la connaissance
des mathématiques
vers un large public.

D'un montant de 2000 euro, il récompense :

- une œuvre ou un parcours ayant intéressé le public aux développements des mathématiques
- un ouvrage d'enseignement, de vulgarisation ou de pédagogie des mathématiques

candidatures à déposer avant le :
mercredi 15 avril 2010

Société Mathématique de France
IHP - 11 rue Pierre et Marie Curie 75231 Paris cedex 05
<http://smf.emath.fr>

