Projet R–Python
Méthodes de Monte Carlo

stoehr@ceremade.dauphine.fr

Préliminaires.

— Vérifiez que vous et votre binôme êtes inscrit-e-s sur la plateforme MyCourse (accessible via l'ENT) au cours **M1 Maths_2017-2018_Méthodes de Monte Carlo_Julien Stoehr**. **Aucune remise de projet ne sera acceptée par e-mail ! La procédure de dépôt se fera obligatoirement sur la plateforme MyCourse.**

— Renseignez, **avant le 4 décembre**, votre nom et celui de votre binôme à l'adresse : `https://goo.gl/forms/c38mPnXCRzBQowJ83`.

À rendre avant le 08 janvier 2018

Consignes

— Sont à rendre : un rapport au format **.pdf** et un script contenant l'ensemble des codes utilisés. Les différents documents peuvent être archivés au format .zip.

— **Chaque jour de retard sera pénalisé d'un point.**

Le rapport :

— il contiendra les réponses aux différentes questions ainsi que des commentaires sur les expériences menées. Une rédaction soignée et concise sera appréciée.

— Les graphiques doivent être soigneusement annotés et présentés (titre, couleur, légendes, ...).

— Vous pourrez ajouter du pseudo-code pour expliquer les différents algorithmes. Néanmoins, **il est strictement interdit de copier-coller les vrais codes dans le rapport.**

Le code :

— les languages autorisés sont R et Python.

— Les codes doivent être bien commentés. Il est possible qu'une explication orale de votre travail vous soit demandée.

— Les codes doivent être optimisés (vectorisés) un minimum pour utiliser les spécificités du language.

— Les codes fournis doivent s'exécuter sans erreurs et permettre de reproduire l'intégralité des résultats présentés dans le rapport.

Exercice.

Objectifs. On considère $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ une variable aléatoire de $\mathbb{R}^2$ admettant une densité f_1 proportionnelle à

$$\tilde{f}_1(x_1, x_2) = \exp\left(-\frac{1}{2}\left\{\frac{x_1^2}{4} + x_2^2\right\}\right)\mathbb{1}_{\{|x_2|\le 1\}},$$

et $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2)$ une variable aléatoire de $\mathbb{R}^2$ admettant une densité f_2 proportionnelle à

$$\tilde{f}_2(y_1, y_2) = \left\{\cos^2(y_1) + 0.5\sin^2(3y_2)\cos^4(y_1)\right\}\exp\left(-\frac{1}{2}\left\{\frac{y_1^2}{4} + y_2^2\right\}\right).$$

Les objectifs de ce projet sont :

1. simuler des réalisations suivant les lois de densités f_1 et f_2,
2. estimer par des méthodes de Monte Carlo et des méthodes de Monte Carlo par Chaîne de Markov des quantités de la forme $\mathbb{E}[h(\mathbf{X})]$ et $\mathbb{E}[h(\mathbf{Y})]$ pour des fonctions h particulières.

Partie I – Algorithme du rejet

On souhaite simuler suivant une loi de densité f définie sur $\mathbb{R}^2$. On peut écrire f, pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$, sous la forme, $f(\mathbf{x}) = c\tilde{f}(\mathbf{x})$, avec c une constante positive. On suppose qu'il existe existe une densité g et une constante $M \ge 0$ telle que pour tout $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$,

$$\tilde{f}(x) \le Mg(\mathbf{x}).$$

1. Justifiez que pour obtenir une réalisation suivant la loi de densité f, on peut appliquer l'algorithme du rejet à $\tilde{f}$.

2. Trouvez des constantes M_1, M_2, et une densité g telles que, pour tout $\mathbf{x} = (x_1, x_2) \in \mathbb{R}^2$

$$\tilde{f}_1(\mathbf{x}) \le M_1 g(\mathbf{x}) \quad \text{et} \quad \tilde{f}_2(\mathbf{x}) \le M_2 g(\mathbf{x}).$$

3. En déduire une méthode de simulation suivant les densités f_1 et f_2.

4. Comparer les densités marginales empiriques d'un échantillon suivant la loi de densité f_1 avec les densités marignales théoriques de f_1.

Indication. On pourra calculer la constante de normalisation de f_1 en fonction de la fonction de répartition Φ de la loi normale $\mathcal{N}(0,1)$.

Partie II – Retour sur les méthodes de réduction de variance

Pour chacune des méthodes ci-dessous, vous proposerez une expérience de Monte-Carlo permettant d'étudier la convergence en fonction du nombre de réalisations de la loi de densité f_1 ou f_2.

Premier cas. On souhaite calculer pour $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ de densité f_1,

$$p = \mathbb{P}\left[e^{X_1} + e^{X_2} \geq 5\right]$$

1. Proposer une estimation de p par :

(a) la méthode de Monte Carlo classique,

(b) la méthode des variables antithétiques,

(c) la méthode de la variable de contrôle,

Indication. On pourra considérer $\mathbb{P}_\nu\left[\sqrt{e^{X_1+X_2}} \geq K\right]$.

(d) la méthode de stratification avec allocation proportionnelle.

Indication. On pourra partionner suivant x_1 en utilisant le principe utilisé dans le TP n°3.

2. Commenter les différents résultats obtenus.

Second cas. On souhaite calculer

$$\mathscr{I} = \int_{\mathbb{R}^2} \cos(y_1 y_2) \sin(y_1) \exp\left\{\sin(y_1 + y_2)\right\} f_2(y_1, y_2) \mathrm{d}y_1 \mathrm{d}y_2.$$

3. Proposer une estimation de $\mathscr{I}$ par :

(a) la méthode de Monte Carlo classique,

(b) la méthode des variables antithétiques.

4. Commenter les différents résultats obtenus.

Partie III – Recyclage dans l'algorithme du rejet

L'algorithme d'acceptation-rejet génère N réalisations suivant la densité instrumentale g, pour en accepter T, $\left(\mathbf{X}^{(1)}, \ldots, \mathbf{X}^{(T)}\right)$, distribuées suivante la loi d'intérêt f, et en rejeter $N - T$, $\left(\mathbf{Z}^{(1)}, \ldots, \mathbf{Z}^{(N-T)}\right)$. Dans la suite, on considère que le nombre de réalisations N suivant g est fixé alors que T est une quantité aléatoire. On suppose de plus que g et M sont telles que $\left\{\mathbf{x} \in \mathrm{supp}(f) : f(\mathbf{x}) = Mg(\mathbf{x})\right\}$ est de mesure nulle.

1. Donner la densité des $\mathbf{Z}^{(i)}$, $i = 1, \ldots, N - T$, conditionnellement à T.

Dans la suite, on raisonne conditionnellement à $T = t$ ($t \neq 0$ et $t \neq N$). On considère les suites $\left(\mathbf{X}^{(1)}, \ldots, \mathbf{X}^{(t)}\right)$ et $\left(\mathbf{Z}^{(1)}, \ldots, \mathbf{Z}^{(N-t)}\right)$ et on définit, lorsque cela a un sens,

$$\delta_1 = \frac{1}{t} \sum_{i=1}^{t} h\left(\mathbf{X}^{(i)}\right), \quad \text{et} \quad \delta_2 = \frac{1}{N-t} \sum_{i=1}^{N-t} h\left(\mathbf{Z}^{(i)}\right) \frac{(M-1) f\left(\mathbf{Z}^{(i)}\right)}{Mg\left(\mathbf{Z}^{(i)}\right) - f\left(\mathbf{Z}^{(i)}\right)}.$$

2. Montrer que δ_1 et δ_2 sont des estimateurs sans biais de $\mathbb{E}_f[h(\mathbf{X})]$.

3. Montrer que les variables aléatoires δ_1 et δ_2 sont indépendantes et déterminer la variance de $\delta(\alpha) = \alpha\delta_1 + (1-\alpha)\delta_2$.

4. En déduire un choix optimal de α, $\alpha^\star$, et expliquer comment s'opère l'approximation de $\alpha^\star$ en pratique.

5. Proposer une expérience de Monte-Carlo comparant, en fonction de N, la convergence de δ_1, δ_2 et $\alpha^\star\delta_1 + (1-\alpha^\star)\delta_2$ (**attention** au choix de M et g) vers $p = \mathbb{P}\left[e^{X_1} + e^{X_2} \geq 5\right]$:

(a) pour $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ de densité f_1 ;

(b) pour $\mathbf{X} = (X_1, X_2)$ de densité proportionnelle à $\tilde{f}_3(x_1, x_2) = \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x_1^2}{4} + x_2^2\right)\right\}(\mathbb{1}_{\{|x_2|\leq 1\}} + 0.5)$.

(c) Commenter les différents résultats obtenus. Commenter notamment les performances de ces estimateurs à nombre de simulations fixé avec les estimateurs à taille d'échantillon fixé.

Partie IV – Algorithme de Metropolis–Hastings

L'indépendance n'est pas une propriété nécessaire pour l'approximation de fonctionnelles de la forme $\mathbb{E}[h(\mathbf{X})]$ avec $\mathbf{X}$ une variable aléatoire de loi de densité f. Le théorème ergodique nous permet, en effet, d'élargir la loi des grands nombres au cas des chaînes de Markov, $\left(\mathbf{x}^{(t)}\right)_{t\geq 1}$ irréductibles, apériodiques et de loi stationnaire de densité f, au sens où

$$\frac{1}{T}\sum_{t=1}^{T} h\left(\mathbf{x}^{(t)}\right) \xrightarrow[T\to+\infty]{p.s.} \mathbb{E}[h(\mathbf{X})]. \tag{1}$$

Les méthodes de Monte Carlo par chaîne de Markov sont particulièrement utiles lorsque la loi stationnaire n'est connue qu'à une constante de normalisation près.

Un exemple de construction générique de chaîne de Markov vérifiant ces propriétés est l'algorithme de Metropolis–Hastings indépendant. Il est fondé sur le choix d'une loi instrumentale de densité g, **partout positive**, et sur le noyau de transition suivant

$$\mathbf{x}^{(t+1)} = \begin{cases} \xi \sim g & \text{avec probabilité} \quad \alpha\left(\mathbf{x}^{(t)}, \xi\right) \\ \mathbf{x}^{(t)} & \text{avec probabilité} \quad 1 - \alpha\left(\mathbf{x}^{(t)}, \xi\right) \end{cases}$$

avec

$$\alpha\left(\mathbf{x}^{(t)}, \xi\right) = \min\left\{1, \frac{f(\xi)}{f\left(\mathbf{x}^{(t)}\right)}\frac{g\left(\mathbf{x}^{(t)}\right)}{g(\xi)}\right\}.$$

On admettra que la loi de densité f est une loi stationnaire pour cette transition.

1. À l'aide de l'algorithme de Metropolis–Hastings et en utilisant la fonction g obtenue à la question 2, produire une chaîne de Markov $(\mathbf{x}_t)_{t\in\mathbb{N}} = \left(x_1^{(t)}, x_2^{(t)}\right)$ de loi stationnaire f_1 et une chaîne de Markov $\left(\mathbf{y}_t\right)_{t\in\mathbb{N}} = \left(y_1^{(t)}, y_2^{(t)}\right)$ de loi stationnaire f_2.

2. Étudier, par une expérience de Monte-Carlo, la convergence de l'approximation (1) vers les quantités p et $\mathscr{I}$.

3. Commenter les différents résultats obtenus.