Chapitre 3 : Méthodes de Monte Carlo : Calculs d'intégrales

Université Hassiba Benbouali de Chlef

Plan du Cours

Ce chapitre a pour objectif d'introduire les méthodes de Monte Carlo pour approximer des intégrales.

- méthodes de Monte Carlo
- réduction de la variance
- échantillonnage préférentiel

- Les méthodes de Monte Carlo permettent d'approximer des quantités comme moyenne, variance, probabilités, ...
- Dans tous les cas le principe est de considérer la quantité comme une espérance mathématique ; exemples :
  - La variance :

$$\mathbb{V}[Z] = \mathbb{E}\left[(Z - \mathbb{E}[Z])^2\right] = \mathbb{E}[X], \text{ avec } X = (Z - \mathbb{E}[Z])^2 .$$

  - La probabilité :

$$\mathbb{P}[Z \in A] = \mathbb{E}\left[\mathbb{1}_{\{Z \in A\}}\right] = \mathbb{E}[X], \text{ avec } X = \mathbb{1}_{\{Z \in A\}}.$$

  - L'intégrale :

$$\int g(z)\,\mathrm{d}z = \int \frac{g(z)}{f(z)} f(z)\,\mathrm{d}z = \mathbb{E}[X], \text{ avec } X = \frac{g(Z)}{f(Z)} \text{ et } Z \sim f.$$

Principe

Supposons que l'on veuille calculer une quantité I. La première étape est de la mettre sous forme d'une espérance $I = \mathbb{E}[X]$ avec X une variable aléatoire.

- Si on sait simuler des variables $X_1, X_2, \ldots$ indépendantes et identiquement distribuées, alors nous pouvons approcher I par

$$I \approx \frac{X_1 + X_2 + \cdots + X_n}{n}$$

  avec N « grand », sous réserve d'application de la loi des grands nombres. C'est ce type d'approximation que l'on appelle « méthode de Monte-Carlo »
- L'estimateur de Monte Carlo est obtenu comme une moyenne empirique $\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$, où les X_i sont des variables aléatoires.

Moyenne et Variance

Considérons l'estimateur classique $\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i$

- Biais de l'estimateur :

$$\mathbb{E}[\widehat{I}_n] = \mathbb{E}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i\right] = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{E}\left[X_i\right] = \mathbb{E}[X] = I.$$

  $\widehat{I}_n$ est un estimateur sans biais.

- Variance de l'estimateur

$$\mathbb{V}[\widehat{I}_n] = \mathbb{V}\left[\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} X_i\right] = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\mathbb{V}\left[X_i\right] = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Exemple

On s'intéresse à l'estimation de l'intégrale

$$I = \int_0^1 \mathrm{e}^u \, \mathrm{d}u.$$

1. L'estimateur de Monte-Carlo standard est

$$\hat{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathrm{e}^{U_i},$$

où les U_i sont i.i.d uniformes sur $[0, 1]$.

2. Par le Théorème Central Limite on a

$$\sqrt{n}(\hat{I}_n - I) \xrightarrow[n \to \infty]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, \sigma^2),$$

avec

$$\sigma^2 = \mathbb{V}(\mathrm{e}^U) = \mathbb{E}(\mathrm{e}^{2U}) - \mathbb{E}^2(\mathrm{e}^U) = \frac{1}{2}(\mathrm{e}^2 - 1) - (\mathrm{e} - 1)^2 = 0.242$$

Échantillonnage préférentiel

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[\varphi\left(x\right)\right] &= \int \varphi\left(x\right) f(x)\ \mathrm{d}x \\ &= \int \varphi\left(x\right) \frac{f(x)}{g(x)} g(x)\ \mathrm{d}x,\ \ g > 0\end{aligned}$$

Au lieu de simuler les X_i selon la densité originale f de X, on simule selon une densité g qui favorise les valeurs de X dans la zone d'importance (importance sampling).
En considérant la représentation

$$I = \mathbb{E}_f\left[\varphi\left(X\right)\right] = \mathbb{E}_g\left[\varphi\left(Y\right) \frac{f(Y)}{g(Y)}\right]$$

Échantillonnage préférentiel (suite)

On propose l'estimateur

$$\tilde{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \varphi\left(Y_i\right) \frac{f(Y_i)}{g(Y_i)},$$

où les Y_i sont simulée à partir de la densité g.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left[\tilde{I}_n\right] &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_g\left[\varphi\left(Y_i\right) \frac{f(Y_i)}{g(Y_i)}\right] = \mathbb{E}_g\left[\varphi\left(Y\right) \frac{f(Y)}{g(Y)}\right] \\ &= \int \varphi\left(y\right) \frac{f(y)}{g(y)} g(y)\ \mathrm{d}y = \int \varphi\left(y\right) f(y)\ \mathrm{d}y = I \end{aligned}$$

Donc $\tilde{I}_n$ est un estimateur sans biais de I.

Échantillonnage préférentiel (suite)

On a $\tilde{I}_n \xrightarrow[n\longrightarrow\infty]{p.s.} I$ (par la loi fort des grand nombre)

$$\begin{aligned}
\mathbb{V}(\tilde{I}_n) &= \frac{1}{n}\mathbb{V}_g\left(\varphi\left(Y\right)\frac{f(Y)}{g(Y)}\right) = \frac{1}{n}\left[\mathbb{E}_g\left[\varphi^2\left(Y\right)\frac{f(Y)^2}{g(Y)^2}\right] - I^2\right] \\
&= \frac{1}{n}\left[\mathbb{E}_f\left[\varphi^2\left(X\right)\frac{f(X)}{g(X)}\right] - I^2\right].
\end{aligned}$$

Échantillonnage préférentiel (suite)

Car

$$\begin{aligned}\mathbb{E}_g\left[\varphi^2\left(Y\right)\frac{f(Y)^2}{g(Y)^2}\right] &= \int \varphi\left(y\right)^2\frac{f(y)^2}{g(y)^2}g(y)\ \mathrm{d}y\\ &= \int \varphi\left(y\right)^2\frac{f(y)}{g(y)}f(y)\ \mathrm{d}y\\ &= \mathbb{E}_f\left[\varphi^2\left(X\right)\frac{f(X)}{g(X)}\right].\end{aligned}$$

Échantillonnage préférentiel (suite)

On rappelle l'estimateur standard : $\hat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} \varphi(X_i)$. On a

$$\mathbb{V}(\tilde{I}_n) \leq \mathbb{V}(\hat{I}_n) = \frac{1}{n}\left[\mathbb{E}\left[\varphi(x)^2\right] - I^2\right]$$

$$\mathbb{V}(\tilde{I}_n) - \mathbb{V}(\hat{I}_n) \leq 0 \text{ si } \mathbb{E}_f\left[\varphi^2(X)\frac{f(X)}{g(X)}\right] \leq \mathbb{E}_f\left[\varphi^2(X)\right]$$

Si $\mathbb{E}_f\left[\varphi^2(X)\frac{f(X)}{g(X)}\right] = I^2$. Le choix optimal de la densité g est $g_{opt}(x) = \frac{\varphi(x)f(x)}{I}$. On remplace :

$$\mathbb{E}\left[\frac{\varphi^2(X)f(X)}{g_{opt}(X)}\right] = \mathbb{E}_f\left[\frac{\varphi^2(X)f(X)}{\varphi(X)f(X)} \times I\right] = I \times \mathbb{E}_f\left[\varphi(X)\right] = I \times I = I^2$$