Méthodes de Monte Carlo : Calculs d'intégrales

Mohamed CHERFI

Faculté des Sciences Exactes et Informatique 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 :

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

• 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 , . . . indépendantes et identiquement distribuées, alors nous pouvons approcher I par

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

avec $N \ll \text{grand} \gg$, sous réserve d'application de la loi des grands nombres. C'est ce type d'approximation que l'on appelle $\ll \text{méthode de Monte-Carlo} \gg$

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

$$I = \int_0^1 e^u \, du.$$

1 L'estimateur de Monte-Carlo standard est

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

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

Par le Théorème Central Limite on a

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

avec

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

Échantillonnage préférentiel

$$\mathbb{E}\left[\varphi\left(x\right)\right] = \int \varphi\left(x\right) f(x) \, dx$$
$$= \int \varphi\left(x\right) \frac{f(x)}{g(x)} g(x) \, dx, \ g > 0$$

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

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

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

$$\mathbb{E}\left[\tilde{I}_{n}\right] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{E}_{g}\left[\varphi\left(Y_{i}\right) \frac{f(Y_{i})}{g(Y_{i})}\right] = \mathbb{E}_{g}\left[\varphi\left(Y\right) \frac{f(Y)}{g(Y)}\right]$$
$$= \int \varphi\left(y\right) \frac{f(y)}{g(y)} g(y) \, dy = \int \varphi\left(y\right) f(y) \, dy = I$$

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

Échantillonnage préférentiel (suite)

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

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

Car

$$\mathbb{E}_{g}\left[\varphi^{2}(Y)\frac{f(Y)^{2}}{g(Y)^{2}}\right] = \int \varphi(y)^{2}\frac{f(y)^{2}}{g(y)^{2}}g(y) dy$$
$$= \int \varphi(y)^{2}\frac{f(y)}{g(y)}f(y) dy$$
$$= \mathbb{E}_{f}\left[\varphi^{2}(X)\frac{f(X)}{g(X)}\right].$$

Échantillonnage préférentiel (suite)

On rappelle l'estimateur standard : $\hat{I}_{n}=rac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}arphi\left(X_{i}
ight) .$ On a

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

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

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

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