INSEA

73

MCMC: algorithmes avancés

Langevin Dynamics

À l'équilibre, la distribution de ces particules est celle de Boltzmann: $f(x) \propto \exp\left(-\frac{U(x)}{kT}\right)$

$$\Rightarrow \log\left(f(x)\right) = -\frac{U(x)}{kT} + \mathrm{cte}$$

$$\Rightarrow \nabla \log \left(f(x) \right) = -\frac{\nabla U(x)}{kT}$$

Coefficient de diffusion d'Einstein

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \frac{kT}{\gamma}$$

Si on arrive à résoudre cette équation différentielle alors on aura un processus ~ f

Pouvez-vous deviner un moyen de générer des échantillons suivant une densité f ?

Stochastic differential equation (SDE)

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = \frac{kT}{\gamma}\nabla\log\left(f(X_t)\right) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t$$

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = D\nabla \log\left(f(X_t)\right) + \sqrt{2D}\,\xi_t$$

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\gamma}\nabla U(X_t) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t$$

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\gamma}\nabla U(X_t) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t}$$

À l'équilibre, la distribution de ces particules est celle de Boltzmann: $f(x) \propto \exp\left(-\frac{U(x)}{kT}\right)$

$$\Rightarrow \log\left(f(x)\right) = -\frac{U(x)}{kT} + \text{cte} \qquad \Rightarrow \nabla \log\left(f(x)\right) = -\frac{\nabla U(x)}{kT}$$

$$\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = \frac{kT}{\gamma}\nabla\log\left(f(X_t)\right) + \sqrt{\frac{2kT}{\gamma}}\xi_t$$

Coefficient de diffusion d'Einstein

$$D \stackrel{\text{def}}{=} \frac{kT}{\gamma}$$

Stochastic differential equation (SDE)

$$\boxed{\frac{\mathrm{d}X_t}{\mathrm{d}t} = D\nabla\log\left(f(X_t)\right) + \sqrt{2D}\xi_t}$$

Pouvez-vous deviner un moyen de générer des échantillons suivant une densité f ?

Si on arrive à résoudre cette équation différentielle alors on aura un processus ~ f

1. Pourquoi Monte-Carlo ? (Exemple de modèle hiérarchique)
2. Introduction à la méthode Monte-Carlo (historique, PRNG)
3. Algorithmes de simulation i.i.d (PRNG, transformation, rejet)
4. Méthodes MCMC (Gibbs, Metropolis)
5. Diagonstics de convergence MCMC
6. Méthodes MCMC avancées (Langevin, HMC, NUTS)

INSEA

$$\mathrm{d}X_t = D\nabla\log\left(f\left(X_t\right)\right)\mathrm{d}t + \sqrt{2D}\xi_t\mathrm{d}t$$