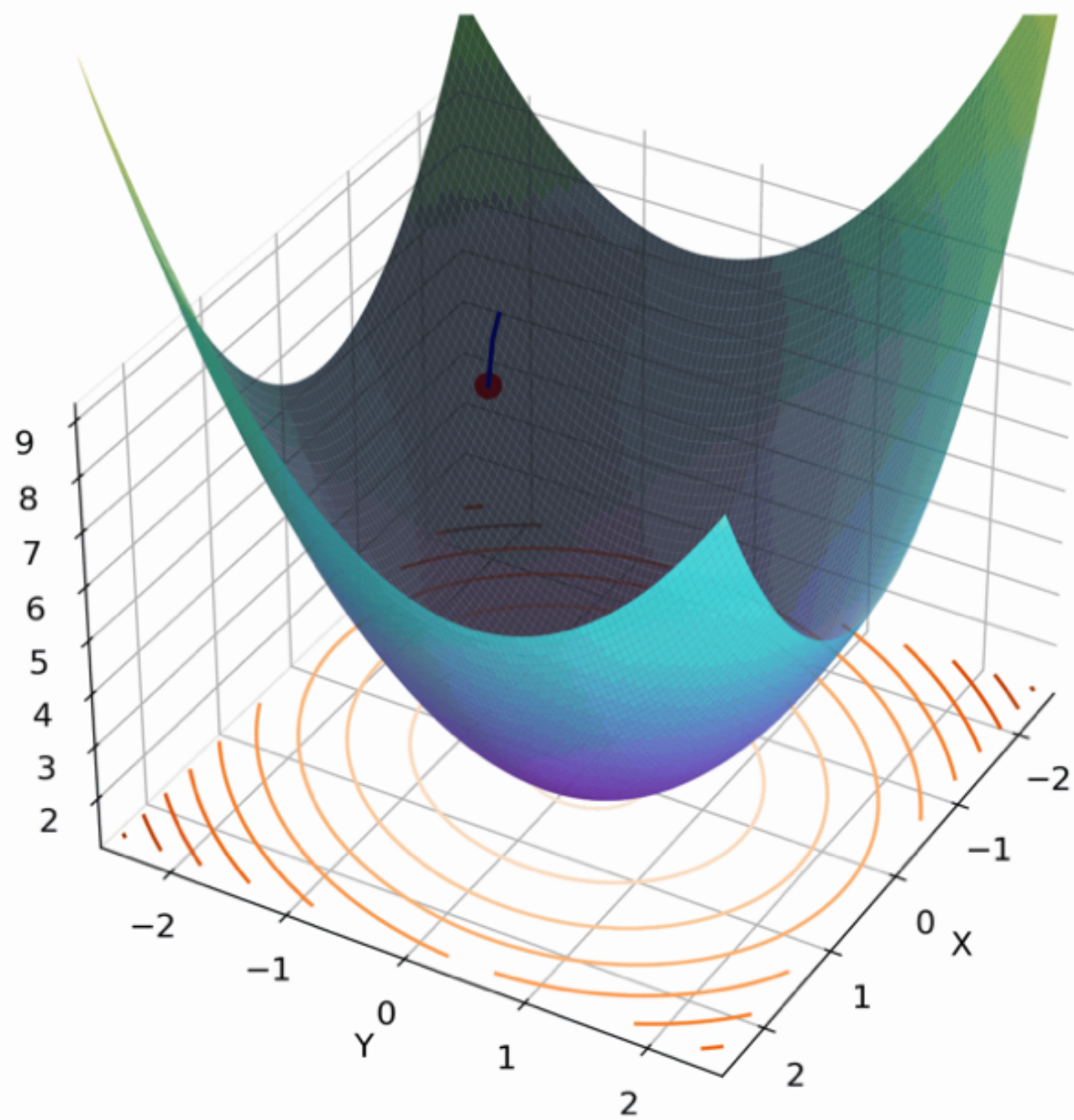




I N S E A









MC MC: algorithmes avancés

Hamiltonian Dynamics

Avec un moment aléatoire p , comment obtenir la trajectoire ?

Principe de conservation de l'Énergie totale = Énergie potentielle + Énergie cinétique

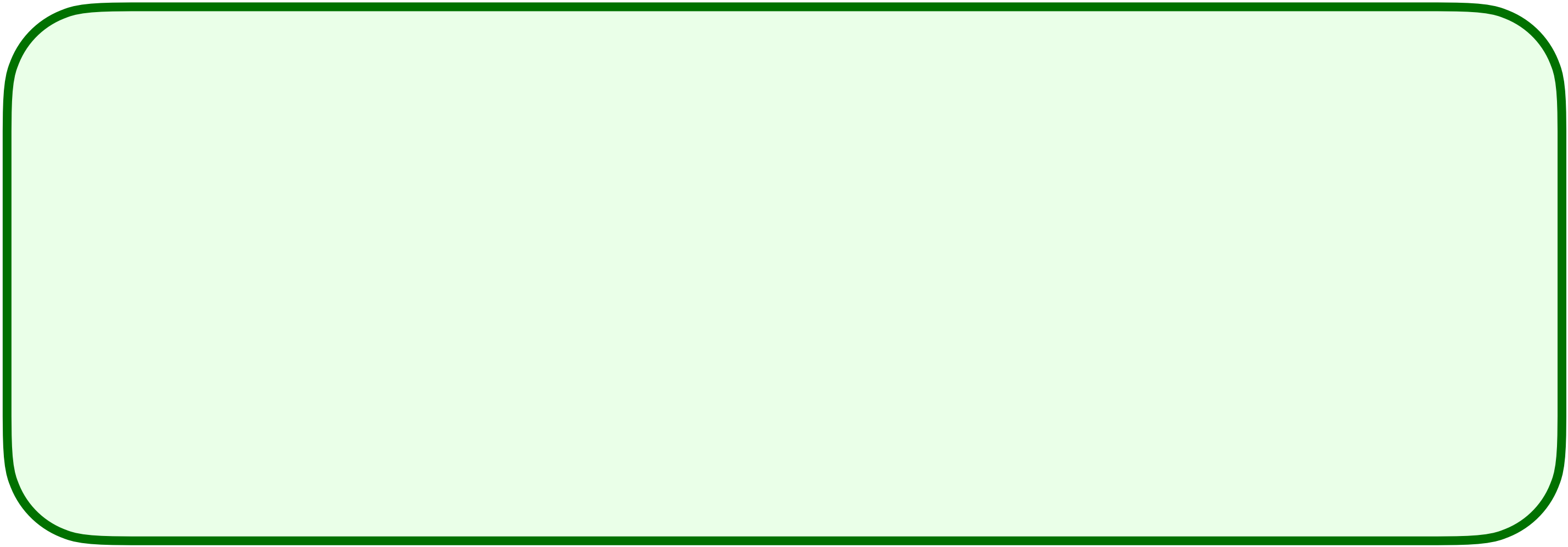
Énergie totale = l'opérateur Hamiltonien: $H(x, p) = U(x) + K(p)$

Conservation de l'énergie dans le temps: $\frac{dH}{dt}(x, p) = 0$

Pour trouver **la trajectoire**, on discrétise l'équation différentielle à **p'** fixé avec un pas $\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \Delta t$

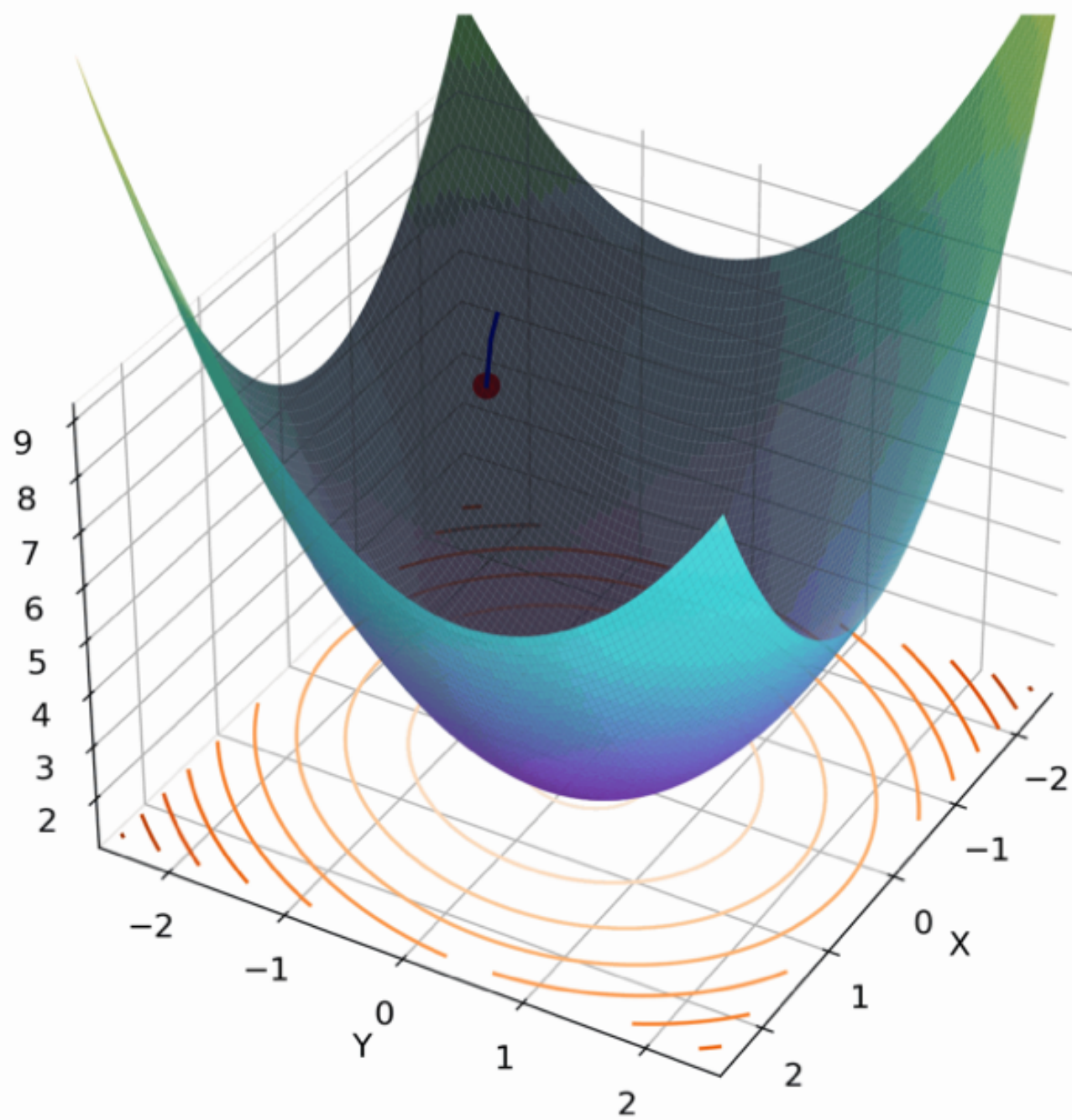
On s'arrête après un nombre de pas égal à **L**

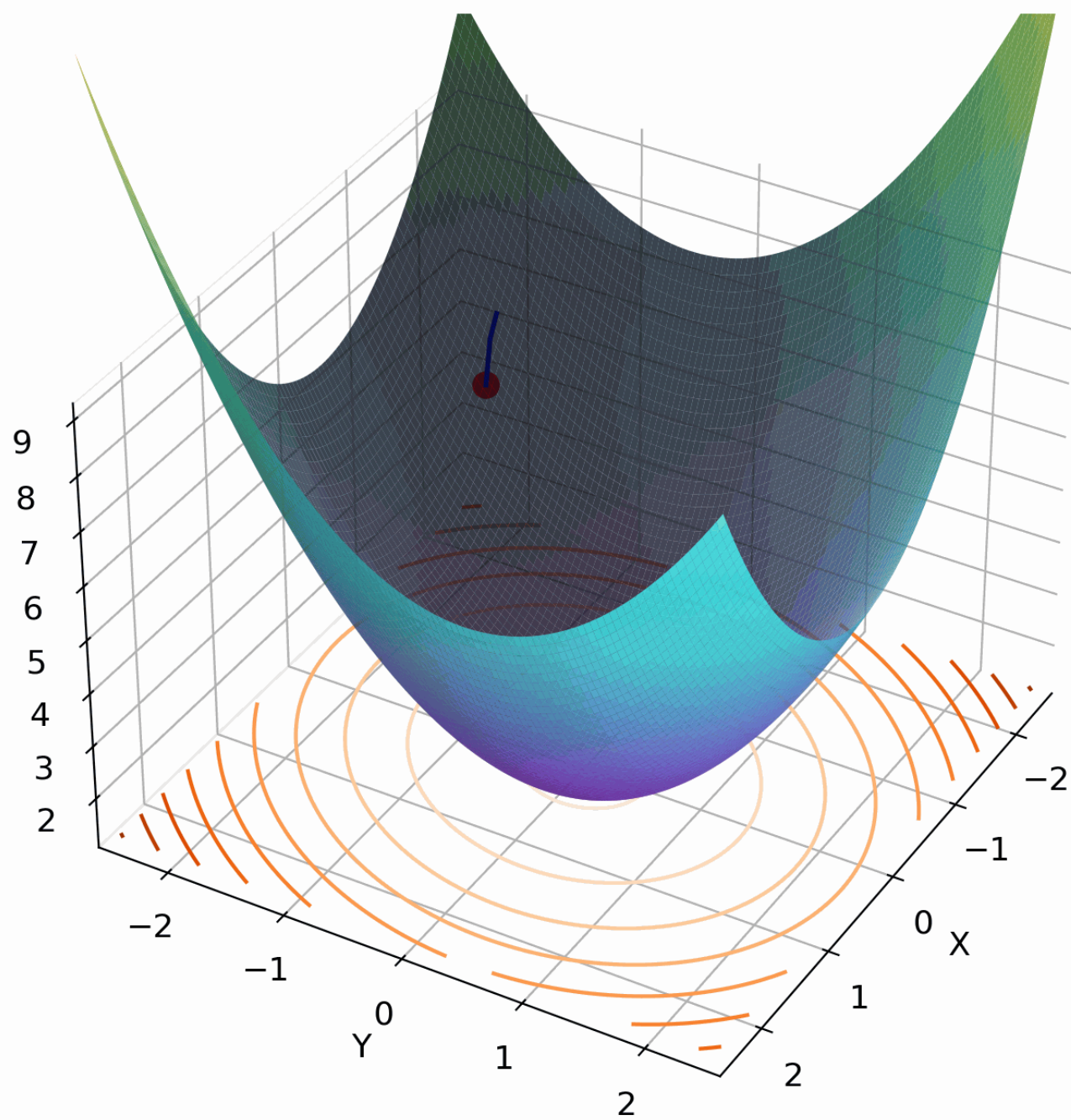
En pratique, L et ε sont difficiles à choisir



1. Simuler un vecteur de **moment p'** (direction et vitesse)
2. Déterminer la trajectoire
3. Suivre la trajectoire et s'arrêter (**nouveau x'**)
4. Accepter ou rejeter (**x'** , **p'**)
5. Répéter

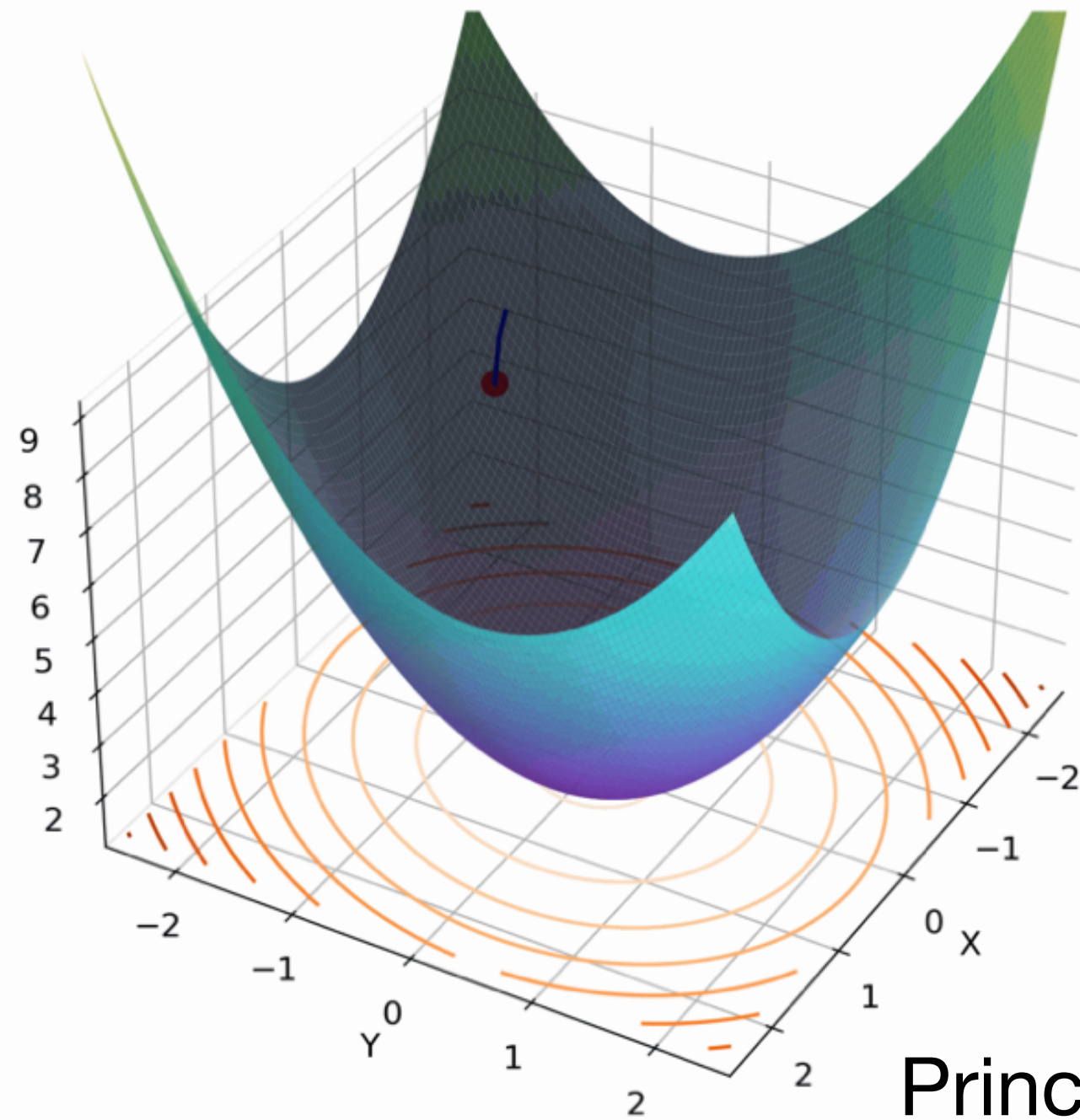
Hamiltonian Monte-Carlo (*Duane 1987, Neal 1996*)





Hamiltonian Monte-Carlo (Duane 1987, Neal 1996)

1. Simuler un vecteur de **moment** \mathbf{p}' (direction et vitesse)
2. Déterminer la trajectoire
3. Suivre la trajectoire et s'arrêter (**nouveau** \mathbf{x}')
4. Accepter ou rejeter (\mathbf{x}' , \mathbf{p}')
5. Répéter



Avec un moment aléatoire \mathbf{p}' , comment obtenir la trajectoire ?

Principe de conservation de l'Énergie totale = Énergie **potentielle** + Énergie **cinétique**

Énergie totale = l'opérateur Hamiltonien: $H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = U(\mathbf{x}) + K(\mathbf{p})$

Conservation de l'énergie dans le temps: $\frac{dH}{dt}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = 0$

Pour trouver **la trajectoire**, on discrétise l'équation différentielle à \mathbf{p}' fixé avec un pas $\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \Delta t$

On s'arrête après un nombre de pas égal à L

En pratique, L et ε sont difficiles à choisir



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. Diagnostics de convergence MCMC
6. Méthodes MCMC avancées (Langevin, HMC, NUTS)



No-U-Turn-Sampler (NUTS) (*Hoffman and Gelman, 2014*)

HMC avec:

