La méthode de Monte-Carlo

Anyone who considers arithmetic methods of producing random digits is, of course, in a state of sin.

John von Neumann

Motivation: “La malédiction de la dimensionnalité” (*The curse of dimensionality*).

L’intégration numérique par échantillonnage uniforme est impraticable si la dimension d est supérieure à trois ou quatre. La convergence est de l’ordre $O(N^{1/d})$.

Nombres aléatoires? Soit une suite aléatoire des points y_i distribués avec la densité $f(y)$.

On a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N h(y_i) = \int h(\theta) f(\theta) d\theta$$

L’échantillonnage aléatoire donne la convergence $O(N^{1/2})$ quelle que soit la dimension !

Aléatoire ou pseudo-aléatoire? En général, on peut se fier aux générateurs de nombres pseudo-aléatoires qui ont fait leurs preuves, à condition toutefois d’éviter quelques pièges: période finie, corrélations entre les nombres consécutifs. Attention: les générateurs congruentiels linéaires ne sont pas fiables pour les simulations en physique statistique, il faut utiliser e.g. Mersenne Twister.

Réduction de variance. Une fonction $g(\theta)$ peut être présentée sous forme d’un produit $g(\theta) = h(\theta) f(\theta)$ de multiples façons. Le but: réduire la variance de $h(\theta)$, le cas extrême étant $h = 1$. Méthode très efficace en une dimension, d’utilité limitée si $d > 1$. Les variables d’ajustement sont la rapidité d’échantillonnage et la variance résiduelle.

Distributions non uniformes. Inversion de la fonction de répartition. Méthodes *ad hoc* (e.g. Box-Mueller pour la distribution normale). Méthodes d’acceptation-rejet (avec ou sans enveloppe). Méthode *hit-and-run* pour les distributions log-concaves.

Chaînes de Markov. Motivation: réduire le taux de rejet. Distribution stationnaire.

Algorithme de Metropolis. Motivation: un modèle rudimentaire de la cinétique. Loi instrumentale $q(y | \theta)$ et l’équilibre détaillé. Probabilité d’acceptation :

$$\rho(\theta, y) = \min \left\{ \frac{f(y)}{f(\theta)}, 1 \right\}$$

Cas discrets et continus. Problème de la longueur du pas. Problème du « préchauffage ».

Méthode de Hastings. Si la loi instrumentale est connue analytiquement, pas besoin de l’équilibre détaillé. Probabilité d’acceptation :

$$\rho(\theta, y) = \min \left\{ \frac{f(y)q(\theta | y)}{f(\theta)q(y | \theta)}, 1 \right\}$$

Méthodes avancées. Monte-Carlo adaptif, problèmes avec l’équilibre détaillé (toujours!). Le cas des événements rares, la queue des événements.

Recuit simulé. Avantage: souvent la seule méthode applicable, e.g. pour le problème de conformation des protéines. Inconvénient: la loi de décroissance de température est choisie de façon purement empirique.

Erreurs fréquentes. Défaut de l’équilibre détaillé (difficile à contrôler dans le cas continu).

Les rejets pris en compte incorrectement (il faut les traiter comme des échantillons dédoublés)