EPFL

Physique Statistique PHYS 338
2024-2025

Série 8: Méthodes de Monte Carlo

Exercise 1 Échantillonnage de π avec MCMC

Dans le cours 7, nous avons vu qu'il était possible d'estimer π en échantillonnant uniformément des points dans un carré défini par $-1 < x < 1$ et $-1 < y < 1$, puis en comptant la proportion de points situés à l'intérieur du cercle unitaire. Pour chaque point $i = 1, \ldots, N$, nous définissons la variable aléatoire

$$S_i = \begin{cases} 4 & \text{si le point est à l'intérieur du cercle} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \tag{1}$$

Contrairement à la méthode précédente, nous utilisons maintenant une chaîne de Markov pour générer nos N points. Le premier point est placé à l'origine $(x_1, y_1) = (0, 0)$. Pour générer les points suivants, nous utilisons l'algorithme de Metropolis avec les déplacements aléatoires

$$\delta_x = \texttt{random.random(-stepsize,stepsize)} \tag{2}$$
$$\delta_y = \texttt{random.random(-stepsize,stepsize)} \tag{3}$$

où `stepsize` est plus grand que zero. La position du point $i + 1$ sera alors

$$(x_{i+1}, y_{i+1}) = \begin{cases} (x_i + \delta_x, y_i + \delta_y) & \text{si le nouveau point est dans le carré} \\ (x_i, y_i) & \text{sinon} \end{cases} \tag{4}$$

Après N étapes, l'estimateur de π sera donné par

$$\hat{m} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} S_i \tag{5}$$

Q1. Implémentez l'algorithme MCMC décrit ci-dessus et tracez la position des points après 1000, 4000 et 20000 étapes. Commentez les résultats obtenus.

Q2. Le choix de `stepsize=0.1` est-il optimal ? Une règle empirique suggère que la probabilité d'acceptation d'un mouvement devrait être d'environ 1/2 sur une longue période. Déterminez la valeur optimale de `stepsize` par apport a cette règle et répétez les tracés de la question précédente. Comparez les résultats avec ceux obtenus précédemment.

Q3. Étudions la convergence de l'estimateur $\hat{m}$. Tracez l'erreur d'estimation en fonction de N pour $N \in [10^2, 10^4]$ et vérifiez si celle-ci est proportionnelle à $1/\sqrt{N}$.

En pratique, les utilisateurs du MCMC utilisent une méthode de regroupement (ou "binning") pour estimer l'erreur. Cette méthode consiste à regrouper les données par paires successives : les observables $S_1, S_2, \ldots, S_N$ sont transformées en une nouvelle séquence

$$\frac{S_1 + S_2}{2}, \frac{S_3 + S_4}{2}, \ldots, \frac{S_{N-1} + S_N}{2} \tag{6}$$

Cette procédure peut être itérée plusieurs fois. On observe généralement que l'erreur estimée augmente avec les itérations avant d'atteindre un plateau.

Q4. Implémentez cette stratégie de regroupement et analysez l'évolution de l'erreur estimée pour les deux valeurs de `stepsize` (optimale et 0.1). Vérifiez que le plateau obtenu correspond bien à l'erreur réelle de la chaîne de Markov.

Q5. Donnez une explication heuristique du comportement observé. Pourquoi l'erreur apparente augmente-t-elle d'abord avec les itérations avant d'atteindre un plateau ?

Q6. Modifions maintenant l'expérience pour que les points soient, à l'équilibre, deux fois plus fréquents dans la partie droite du carré que dans la partie gauche. Comment adapter l'algorithme de la **Q1**? Montrez qu'il est toujours possible d'estimer π avec cette nouvelle distribution.

Exercise 2 Calcul numérique d'intégrales

On considère la fonction $f(x) = 1 - e^{-x}$ définie sur l'intervalle $[0, 1]$. Bien que l'intégrale $\int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x$ puisse être calculée analytiquement, nous allons explorer différentes méthodes de calcul numérique.

Q1. La première approche est similaire à celle utilisée pour le calcul de π par Monte Carlo. On génère des points uniformément dans le rectangle $[0, 1] \times [0, 1 - e^{-1}] \subset \mathbb{R}^2$ et on détermine la fraction de points situés sous la courbe $f(x)$.

a) Montrez comment cette méthode permet d'estimer l'intégrale et son erreur statistique.

b) Implémentez cette méthode pour différentes valeurs de $N \in \{10^2, 10^3, 10^4, 10^5\}$ et comparez les résultats avec la valeur exacte.

Q2. On peut améliorer cette méthode en remarquant que $f(x) \leq x$ pour tout $x \in [0, 1]$.

a) En utilisant la méthode de la transformée inverse, montrez comment échantillonner selon la densité de probabilité $p_X(x) = 2x$ sur $[0, 1]$.

b) Démontrez que pour générer des points uniformément distribués sous la droite $y = x$, il suffit d'échantillonner x selon $p_X(x)$ puis y uniformément dans $[0, 2p_X(x)]$.

c) Utilisez cette méthode pour calculer à nouveau l'intégrale pour les mêmes valeurs de N. Expliquez pourquoi l'erreur statistique est réduite par rapport à la première méthode.

Q3. On peut encore améliorer l'estimation en utilisant une inegalité differente.

a) Démontrez que $f(x) \leq g(x) = (1 - e^{-1})\sqrt{x}$ pour $x \in [0, 1]$.

b) Montrez comment générer des nombres aléatoires selon la densité $p_X(x) = \frac{3}{2}\sqrt{x}$ sur $[0, 1]$ et déterminez la constante c telle que $g(x) = c p_X(x)$.

c) Utilisez cette approche pour obtenir une nouvelle estimation de l'intégrale. Comparez la variance avec les méthodes précédentes.

Q4. Cette méthode d'échantillonnage préférentiel peut être généralisée à des intégrales multidimensionnelles plus complexes. Considérons l'intégrale suivante:

$$I = \int \left|\cos\left(\sqrt{x^2 + y^4}\right)\right| \tanh\left(x^2 + y^2 + z^4\right) \frac{e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{2}}}{(2\pi)^{3/2}}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y\,\mathrm{d}z \tag{7}$$

a) Identifiez une densité de probabilité simple qui pourrait servir de fonction d'importance pour cette intégrale.

b) Écrivez l'estimateur correspondant et expliquez comment le mettre en œuvre numériquement.