Master Recherche IAC
Option 2
Cours Monte-Carlo

Aurélien Decelle
LRI

Jan 14th, 2015

Overview

Introduction

Echantillonnage

Méthodes statiques

Méthodes dynamiques: Monte-Carlo Markov Chain

Cours Monte-Carlo

Plan intro

- Comment, pourquoi
- Méthodes pour échantillonner
- Méthodes avancées

Belief propagation

- Definition
- Graphe aléatoire
- Belief Propagation

Pourquoi

Un cas simple

- Pour évaluer la qualité d'une hypothèse

$$Acc(h) = \int \ell(h(x), y) dP(x, y)$$

on a l'espérance (intégrale)
de la fonction de perte
$\ell(h(x), y)$, le coût de prédire $h(x)$ au lieu de y,
multiplié par la probabilité de (x, y).

Ce qu'on fait

- On approche l'intégrale par la somme sur des exemples (x_i, y_i)

$$\widehat{Acc(h)} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \ell(h(x_i), y_i)$$

Remarques générales

- On doit disposer d'une distribution ou d'une facon d'échantillonner les évènements ou les objets (par ex. les x_i, y_i)
- La méthode est assez mauvaise parce que l'erreur (la différence entre $\widehat{Acc(h)}$ et $Acc(h)$) décroit lentement.
- Mais quand les objets sont complexes, on n'a pas d'autre choix.

Références

- Cours Alan Sokal; plutot mathématiques;
- Robert Caselllla: tout ce que vous voulez savoir.
- Werner Krauth: Lecture on Monte-Carlo (exemples pédagogiques)
- Chris Bishop: Pattern Recognition and Machine Learning

Principe général et propriétés

On a une fonction f et une distribution π.
On s'intéresse à l'espérance de f selon π.

$$\mathbb{E}(f) = \int f(x)\pi(x)dx$$

On génére un ensemble de points x_i, tirés selon la distribution π:

$$I_M(f) = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} f(x_i)$$

Propriété de consistance (estimateur sans biais)
L'espérance de $I_M(f)$ (sur les tirages des x_i) est bien ce qu'on cherche, $\mathbb{E}(f)$.

$$\mathbb{E}[I_M(f)] = \mathbb{E}[f]$$

Principe général et propriétés, 2

Vitesse de convergence

$$\mathbb{E}[Var(I_M(f))] = \frac{1}{\sqrt{M}} Var(f)$$

La variance de l'estimateur dépend de la variance de la fonction f qui nous intéresse; et elle décroit comme $1/\sqrt{M}$.

Distribution de l'erreur: Gaussienne centrée normée

$$\frac{\mathbb{E}(f) - I_M(f)}{\sqrt{M} Var(f)} \sim \mathcal{N}(0, 1)$$

Exercice

Estimer le nombre π On tire des points dans $[0,1] \times [0,1]$. On estime la proportion qui tombe dans le cercle.
Cette proportion est égale à la surface du cercle centré en $(1/2, 1/2)$, de rayon $1/2$.
[C'est à dire ?
Faire l'exercice.]

Overview

Introduction

Echantillonnage

- Méthodes statiques
- Méthodes dynamiques: Monte-Carlo Markov Chain

Echantillonnage discret

Etant donné une distribution π

Définition de la cumulante (cumulative distribution probability)

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} \pi(y)dy$$

Exemple: π la distribution de la taille des gens, $x = 1.60$ metre, $F(x) =$ fraction des gens dont la taille est < 1.60.

Montrer que : $F(x)$ est croissante, entre 0 et 1.

Principe

On génère u selon la loi uniforme $U[0,1]$.

On prend ensuite x tel que $F(x) = u$. $\quad$ $\mathrm{x} = F^{-1}(u)$.

On montre que x ainsi tiré est distribué selon π.

Avantage

On peut estimer la cumulante empiriquement.

Exemple de la Gaussienne en dimension 2

$$\pi(x,y) = \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}}$$

Changement de coordonnée polaire: $(x,y) \to (\rho,\theta)$:

$$x = r\cos(\theta) \text{ et } y = r\sin(\theta)$$

$$\pi(x,y)dxdy = e^{-r^2/2} rdr \frac{\theta d\theta}{2\pi}$$

$$F(r) = -exp^{-r^2/2} \text{ et donc } r = F^{-1}(z) = \sqrt{2log(1-z)}$$

On tire z uniformément ds $[0,1]$ et θ dans $[0,2\pi]$, On en tire $(x,y) = (rcos\theta, rsin\theta) = (\sqrt{2log(1-z)}cos\theta, \sqrt{2log(1-z)}sin\theta)$.

Méthode de rejet

Connaitre π à une constante près (la normalisation n'est pas nécessaire).
Existe une distribution q tel que

$$\forall u, \pi(u) \leq kq(u)$$

et q est facile à échantillonner.

Algorithme

- On échantillonne x selon q;
- On échantillonne $u \sim U[0,1]$.
- On calcule $\rho = \frac{\pi(x)}{kq(x)}$
- Si $u < \rho$, on garde x; sinon on recommence.

$$Proba(accept) = \int q(z)\frac{\pi(z)}{kq(z)}dz = 1/k \int \pi(z)dz$$

Remarque

- Méthode très générale
- Mais si q ne colle pas bien avec π, beaucoup de rejet.
- La proba d'être acceptée est égale au rapport (Aire sous π)/(Aire sous kq)

Construire des distributions pour méthode de rejet

Cas 1
Si $log(\pi)$ a des dérivées décroissantes (fonction concave),
On fait des tangentes de $log(\pi)$.
Cas 2
Une distribution compliquée dans un intervalle: prendre q comme distribution uniforme.
Attention, il faut que π soit bornée

En grandes dimensions

$\pi = \mathcal{N}(0, \mathbb{1}_D \sigma_\pi)$
Si $q = \mathcal{N}(0, \mathbb{1}_D \sigma_q)$
Il faut $\sigma_q > \sigma_\pi$.
Il faut multiplier q par $k = (\sigma_q/\sigma_\pi)^D$
Attention, exemple : $\sigma_\pi = 1$ et $\sigma_q = 1.01$ alors $k \approx 20000$ et le taux de d'acceptation $\rho \approx 10^{-5}$

Importance Sampling

Comme la méthode de rejet, mais plus facile.
On se donne deux distributions π et q, avec le support de π inclus dans celui de q.

$$\pi(z) > 0 \Rightarrow q(z) > 0$$

Remarque

Une distribution π doit sommer à 1. Mais parfois calculer la constante de normalisation (Z_π) est trop dur. L'*importance sampling* permet de travailler même si on n'a pas les constantes de normalisation.

Principe

$$\int f(x)\pi(x)dx = \int f(x)\frac{\pi(x)}{q(x)}q(x)dx$$

Intérêt : on échantillonne selon q, et on pondére $f(x_i)$ par $\frac{\pi(x_i)}{q(x_i)}$

Importance sampling, 2

Inconvénient

si f est bornée par C,

$$var(I_M) \leq \frac{C^2}{M}\left(\int \frac{(\pi(x) - q(x))}{q(x)} dx + 1\right)$$

Importance sampling, 3

Si on connait seulement $\tilde{\pi} = \pi Z_\pi$ (la distribution normalisée) et $\tilde{q}$ (idem, q normalisée),

$$\int f(x)\pi(x)dx = \frac{Z_q}{Z_\pi}\int f(x)\frac{\tilde{\pi}}{\tilde{q}}q(x)dq = \frac{Z_q}{Z_\pi}\frac{1}{M}\sum f(x_i)\frac{\tilde{\pi}(x_i)}{\tilde{q}(x_i)}$$

On doit maintenant évaluer les constantes de normalisations :

$$\frac{Z_\pi}{Z_q} = \frac{1}{Z_q}\int \tilde{\pi}(x)dx = \int \frac{\tilde{\pi}(x)}{\tilde{q}(x)}q(x)dx$$

$$\frac{Z_\pi}{Z_q} = \frac{1}{M}\sum \frac{\tilde{\pi}(x_i)}{\tilde{q}(x_i)}$$

Si on connaitre q on remplace $\tilde{q}$ par q, et idem pour π.
Inconvenient : avec cette méthode on ne sait pas échantillonner π !!!

Overview

Chaine de Markov

Etats $\mathcal{S}$; Actions $\mathcal{A}$.

Propriété de Markov Ce qui se passe au temps t ne dépend que de l'état courant (pas de toute l'histoire). Pour tout évènement E,

$$P(E|s_t, s_{t-1}, ...s_0) = P(E|s_t)$$

Principe de MCMC

Créer un processus stochastique qui visite les états selon une distribution proportionnelle à π.

Ingrédients de MCMC

Transition entre les états

$$T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}') \text{ : tx de transition de } \mathcal{C} \text{ vers } \mathcal{C}'$$

Période d'initialisation

Le temps qu'il faut pour arriver dans les bons états en partant d'un endroit aléatoire.

Problème

On va générer des états aléatoires possiblement corrélés (ici, prendre des précautions).

Algorithme

x_τ: état courant, utilisé pour générer $x_{\tau+1}$.
On définit une probabilité de transition

$$q(y'|y) : \text{ proba de générer } y' \text{ quand on est ds } y$$

Dynamique de Métropolis

- Choisir un q symétrique: $q(y|y') = q(y'|y)$.
- Choisir un tx d'acceptation d'un mouvement:

$$a(x_{new}|x_\tau) = min(1, \frac{\pi(x_{new})}{\pi(x_\tau)})$$

- Générer x_{new} selon $q(x_{new}|x_\tau)$
- Si $\pi(x_{new})/\pi(x_\tau) > 1$, on accepte, $x_{\tau+1} = x_{new}$
- Sinon, si $\pi(x_{new})/\pi(x_\tau) < u \sim U[0,1]$, $x_{\tau+1} = x_{new}$, sinon $x_{\tau+1} = x_\tau$

Discussion

L'algorithme va passer plus de temps là où la distribution est haute: on accepte toujours x_{new} si la proba augmente $(\pi(x_{new})/\pi(x_T) > 1)$
On accepte de temps en temps si la proba diminue;
Image du Bishop.

Convergence

$$p_{gauche}(\mathcal{C}_{\tau+1}) = \sum_{\mathcal{C}'} T(\mathcal{C}_\tau \to \mathcal{C}_{\tau+1}) p_{droite}(\mathcal{C}_\tau)$$

On cherche la distribution stationnaire π de la chaine de Markov.

$$\pi(\mathcal{C}_{\tau+1}) = \sum_{\mathcal{C}'} T(\mathcal{C}_\tau \to \mathcal{C}_{\tau+1}) \pi(\mathcal{C}_\tau)$$

Condition suffisante : detailed balance

$$\pi(\mathcal{C}') T(\mathcal{C}' \to \mathcal{C}) = \pi(\mathcal{C}) T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}')$$

Demonstration: on somme sur $\mathcal{C}'$ dans le membre gauche, en se souvenant que $\sum_{\mathcal{C}'} T(\mathcal{C} \to \mathcal{C}') = 1$.

Autre analyse

Quand on a un processus de Markov, on peut lui associer une équation maîtresse : comment varie la chaîne de Markov.

$$\frac{\Delta P(\mathcal{C},t)}{\Delta t} = \sum_{\mathcal{C}'} \left[T(\mathcal{C}' \underset{gain}{\rightarrow} \mathcal{C}) P(\mathcal{C}',t) - T(\mathcal{C} \underset{perte}{\rightarrow} \mathcal{C}') P(\mathcal{C},t) \right]$$

(gain - perte).
Au temps long, la dérivée est 0.
On peut pour chaque $\mathcal{C}' \rightarrow$ gain - perte à 0 **bilan détaillé**
On peut, pour l'ensemble des $\mathcal{C}' \rightarrow$ gain - perte à 0 **bilan global**

Conditions de convergence

Irréductibilité

$$\forall(\mathcal{C},\mathcal{C}'), \exists n P(\mathcal{C}_{t+n} = \mathcal{C}' | \mathcal{C}_t = \mathcal{C}) > 0$$

Il existe un chemin de longueur n menant de $\mathcal{C}$ à $\mathcal{C}'$.

Distribution π stationnaire

$$\pi(c) = \sum T(c' \to c)\pi(c')$$

Du bilan détaillé à Métropolis

$$T(x \to y) = q(y|x)a(x \to y)$$

q: mouvement;
a proba d'acceptation.
On utilise le BD : $\pi(x)T(x \to y) = \pi(y)T(y \to x)$
Commen q symétrique

$$a(x \to y)/a(y \to x) = \pi(x)/\pi(y)$$

Le bilan détaillé est vérifié si l'on utilise

$$a(x \to y) = \min(1, \frac{\pi(y)}{\pi(x)}$$