Une Introduction aux méthodes particulaires en ingénierie stochastique

P. Del Moral

INRIA Centre Bordeaux-Sud Ouest

Journée de Proba./Stat. de Bordeaux, Octobre 2008

Outline

1. Introduction
2. Quelques problèmes fondamentaux
   - Traitement du signal & inférence bayesienne
   - Analyse d'événements rares
   - Régulation et contrôle de processus
3. Méthodes particulaires stochastiques
4. Quelques algorithmes de simulation
   - Filtrage "optimal" particulaire
   - Simulation d'événements rares
   - Optimisation globale & optimisation combinatoire
   - Calcul de volumes et de cardinaux

- **Physique mathématique et chimie moléculaire** ($\geq 1950's$) : Interprétations (micro-macro)scopiques ou techniques de simulation (quantum & diffusion Monte Carlo).
- **Biologie** ($\geq 1950's$): Dynamiques de population (branchements, naissances et morts, généalogies traits/espèces).
- **Sciences de l'ingénieur** ($\geq 1970's$): Méthodes d'exploration aléatoire, recuit simulé, apprentissage naturel, algorithmes génétiques, grilles/maillages adaptatifs.
- **Probabilités appliquées & inférence bayesienne** ($\geq 1990's$): méthodes de Monte Carlo par chaînes de Markov (en interaction), méthodes de Monte Carlo séquentielles, simulation de lois a posteriori complexes, interprétations probabilistes.
- **Mathematiques pures (**$\geq 1960's$ **méca. fluides,** $\geq 1990's$ **modèles discrets et à sauts intéractifs)**: Méthode de linéarisation stochastique d'équations intégro-différentielles et de processus à valeurs mesures non linéaires.

Le filtrage de processus stochastiques

- **Filtrage :** Signal-Observation (X, Y)

$$\text{Calcul-Simulation des} \quad \text{Lois}((X_0, \ldots, X_t) \mid (Y_0, \ldots, Y_t))$$

- $\supset$ ingénierie/physique/biologique/économique :
  - *Ingénierie :* Radar, Sonar, GPS, ...
  - *Physique :* capteurs de pression/température/...
  - *Finance :* actifs boursiers, portefeuilles, volatilités,...
  - *Statistique :* médecine, pharmaco, politique, éco-finances,...
- **Domaines "équivalents"** :
  - *Assimilation de données*
    [ANR avec Météo France, l'IRISA et le LMD ENS Paris].
  - *Chaines de Markov cachées.*
  - *Calcul de lois a posteriori (inf. bayesienne).*

Analyse d'événements rares

Processus stochastique formalisé $X \oplus$ Evt rare A :

$$\mathrm{Proba}(X \in A) \quad \& \quad \mathrm{Loi}((X_0, \ldots, X_t) \mid X \in A)$$

$\supset$ ingénierie/physique/biologique/économique :

- **Ingénierie :** surcharges de réseaux, pannes, durées de fonctionnement, Contrôle Qualité et Fiabilité (Dynamique).
  [ANR sur le "watermarking" avec l'IRISA].
- **Biologie :** Risques bactériologiques, épidémiologie
  [ANR avec l'ENST Paris Tech].
- **Physique :** polymères dirigés, particules $\in$ milieux absorbants, états fondamentaux d'opérateurs de Schroedinger.
- **Finance :** probabilités de défauts, ruines,...
- **Statistique :** queues de distributions, valeurs extrêmes,...

- Filtrage-Régulation : Signal-Obs. $(X, Y) \rightsquigarrow$ référence Y

$$X_t = F_t(X_{t-1}, W_t) \rightarrow \mathrm{Lois}((W_0, \ldots, W_t) \mid (Y_0, \ldots, Y_t))$$

Conséquences et extensions :

  - W les plus vraisemblables $\rightsquigarrow$ contrôles opt. pour suivre Y
  - Simulation de mesures de Gibbs associées à des potentiels V $\rightsquigarrow$ optimisation de coûts/performances/energies V

- Analyse d'événements rares (Exemple=confinement)

$$\mathrm{Loi}((X_0, \ldots, X_t) \mid X_0 \in A_0, \ldots, X_t \in A_t)$$

Conséquences :

  - Stratégies du processus $\in$ Evt rare $\Rightarrow$ Prédiction et contrôle.
  - $X_t = F_t(X_{t-1}, W_t) \Longrightarrow$ contrôles W tq $X_t \in$ Tube.

Algorithme stochastique de type génétique

- Prédiction=Proposition=Exploration.
- Correction=acceptation-rejet=selection=branchements. *[passerelles/sous-niveaux critiques, vraisemblance des états, adaptation des individus, etc.]*

$\Downarrow$ and $\Uparrow$

$$\left.\begin{array}{l} \mathrm{Lois}((X_0,\ldots,X_t) \mid (Y_0,\ldots,Y_t)) \\ \quad \& \\ \mathrm{Loi}((X_0,\ldots,X_t) \mid X \in \mathrm{Evt\ rare}) \end{array}\right\} \simeq$$ Mesures d'occupation d'arbres généalogiques

& $\quad \mathrm{Proba}(X \in \mathrm{Evt\ rare}) \simeq \prod$ proportions de reussites

Remarque importante : [contrôle de qualité]

$\boxed{\notin \text{"Meta-heuristique"} \rightsquigarrow \exists \text{ des fondations théoriques très précises!}}$

Le filtrage de processus stochastiques

- X_t**:=Signal=Processus stochastique**

ingénierie/physique/biologique/économique :

- Cibles non coopérative (militaire : missile, char, avion,...).
- Physiques (fluides : tornades, cyclones, modèles océano, pression/température/coeff de diffusivité,...).
- Financiers (actifs boursiers, portefeuilles, volatilités,...).
- Signaux (parole, codages/transmission informations,...)

Dynamiques et aléas :

- Equations d'évolution physiques (Ex. $\sum_i u_i \vec{F}_i = \vec{A}$)
- Perturbations et aléas :
  - Erreurs de modèles $\oplus$ Perturbations extérieures.
  - Contrôles et paramètres inconnus.
    $\rightsquigarrow$ lois a priori $\oplus$ (inconnues= réalisation de v.a.)

Modèles de Filtrage de processus stochastiques

- **Y_t=Observations partielles et bruitées de X_t :**

ingénierie/physique/biologique/économique :

- Ingénierie : Radar, Sonar, GPS, ...
- Physiques (capteurs de pression/température/...).
- Financiers (actifs boursiers, portefeuilles, volatilités,...).
- Statistique (données réelles : médecine, pharmaceutiques, politique, éco-finances,...).

Dynamiques et aléas :

- Observations partielles : mélanges, coordonnées partielles.
- Perturbations et aléas :
  - erreurs de mesures (bruits thermiques).
  - perturbations extérieures.
  - erreurs de modèle.

Objectifs

Calculer/Simuler/Estimer récursivement le flot de mesures

$$t \in \mathbb{R}_+ \quad \text{ou} \quad t = n \in \mathbb{N} \longrightarrow \eta_t = \mathrm{Loi}(X_t \mid Y_0, \ldots, Y_t)$$

Remarques

- Filtrage trajectoriel : $X_t = (X'_0, \ldots, X'_t) \in E_t$

$$\Updownarrow$$

$$\eta_t = \mathrm{Loi}((X'_0, \ldots, X'_t) \mid (Y_0, \ldots, Y_t)) = \mathrm{Loi}(X_t \mid Y_0, \ldots, Y_t)$$

Vocabulaire "équivalent" :

- Assimilation de données (météo).
- Chaines de Markov cachées (stat. fréquentiste).
- Lois a posteriori (a priori$=\mathrm{Loi}(X)$) (stat. bayesiennes).

L'heuristique du filtrage particulaire

Dynamique de population de N "individus"/particules" t.q.

$$(\widehat{\xi}_t^1, \ldots, \widehat{\xi}_t^N) \in E_t^N \rightsquigarrow \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\widehat{\xi}_t^i} = \mathrm{Loi}(X_t \mid (Y_0, \ldots, Y_t))$$

Méthode de simulation effective

- Prédiction $\rightsquigarrow$ simulation de N transitions locales du signal.
- Correction$\rightsquigarrow$ processus de naissance et mort (taille fixe N).
  - On tue les individus sur des sites peu vraisemblables.
  - On multiplie les individus sur des sites plus vraisemblables.

$\rightsquigarrow$ Mod. trajectoriels : $X_t = (X'_0, \ldots, X'_t)$ $\rightsquigarrow$ Arbre Généalogique

$$\lim_{N\to\infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_{\text{ligne ancestrale}_t(i)} = \mathrm{Loi}((X'_0, \ldots, X'_t) \mid (Y_0, \ldots, Y_t))$$

Analyse d'événements rares

2 Ingrédients

- 1 Processus Physique/biologique/economique : files d'attentes, réseau télécom, portefeuille, volatilité d'actifs, température, mouvements de fluides,...
- 1 fonction potentiel (type énergie ou indicatrice/restriction): dépassements de niveaux critiques, saturation, niveaux de propagations d'épidémies, dispersion de radioactivité, ruines,...

Objectifs

- Calcul des probabilités d'événements rares.
- Calculer les lois des trajectoires du processus évoluant en régime $\rightsquigarrow$ prédiction $\oplus$ contrôle.

L'heuristique des estimations particulaires

Flot de mesures à complexité croissante

- l'événement rare $=$ cascade d'événements intermédiaires (moins) rares (énergies ou niveaux $\uparrow$, passerelles physiques).
- Flot de lois conditionnelles

$$n \longrightarrow \eta_n = \text{Loi}(\text{processus} \mid \text{une série de } n \text{ évts intermédiaires} \downarrow)$$

- Les probabilités d'événements rares$=$ Cts de normalisation.

Méthode particulaire heuristique

(Simulation arbre de défauts de type généalogique $\oplus$ % réussites)

- Explorations/Propositions locales des espaces d'états.
- Branchements-Selection des individus $\in$ régimes critiques $\uparrow$.

4 Exemples de flots de mesures "cibles"

1. $\eta_n = \mathrm{Loi}((X_0, \ldots, X_n) \mid \forall 0 \leq p \leq n \quad X_p \in A_p)$
2. $\eta_n = \mathrm{Loi}_\pi((X_0, \ldots, X_n) \mid X_n = x_n)$.
3. $\eta_n = \mathrm{Loi}(X \mid X \text{ atteint le niveau } B_n \text{ avant } C)$
4. $\eta_n = \mathrm{Loi}((X_0, \ldots, X_n) \mid V(X_n) \geq a)$.

4 Heuristiques particulaires :

1. Transitions locales $\oplus$ Selection des individus $\in A_p$.
2. Transitions locales $\oplus$ Selection $G(x_1, x_2) = \frac{\pi(dx_2)K(x_2,dx_1)}{\pi(dx_1)M(x_1,dx_2)}$.
3. Branchements par sous niveaux $B_0 \supset B_1 \supset \ldots \supset B_n$.
4. Transitions locales $\oplus$ Sélection des transitions $\sim e^{\lambda\,[V(X_p)-V(X_{p-1})]}$.

1. Mesure de Boltzmann-Gibbs (avec $\beta_n \uparrow$) :

$$\eta_n(dx) = \frac{1}{Z_n}\, e^{-\beta_n V(x)}\, \lambda(dx) \;\sim_{N\uparrow\infty}\; \eta_n^N(dx) := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^N \delta_{\xi_n^i}(dx)$$

2. Méthodes de simulation des $(\xi_n^i)_{1\leq i\leq N}$:
   - Transitions MCMC mes. inv. $= \eta_n$ (**Mélangeurs-Shakers** : Metropolis, accept/rejet, Gibbs)
   - Selection des individus $\propto G_n(x) = e^{-(\beta_{n+1}-\beta_n)V(x)}$

3. Cte de normalisation :$\lambda\left(e^{-\beta_n V}\right) := Z_n = Z_0 \times \frac{Z_1}{Z_0} \times \ldots \times \frac{Z_n}{Z_{n-1}}$

$$\frac{Z_n}{Z_{n-1}} = \frac{\lambda\left(e^{-\beta_{n-1}V}\; e^{-(\beta_n-\beta_{n-1})V}\right)}{Z_{n-1}} \quad = \quad \eta_{n-1}\left(e^{-(\beta_n-\beta_{n-1})V}\right)$$

$$\sim_{N\uparrow\infty} \quad \eta_{n-1}^N\left(e^{-(\beta_n-\beta_{n-1})V}\right)$$

1. Restriction de mesures (avec $A_n \downarrow$) :

$$\eta_n(dx) = \frac{1}{Z_n}\, 1_{A_n}(x)\, \lambda(dx) \;\sim_{N\uparrow\infty}\; \eta_n^N(dx) := \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \delta_{\xi_n^i}(dx)$$

2. Méthodes de simulation des $(\xi_n^i)_{1\leq i\leq N}$:
   - Transitions MCMC mes. inv. $= \eta_n$ (**Mélangeurs-Shakers** : Metropolis, accept/rejet, Gibbs)
   - Selection des individus $\propto G_n(x) = 1_{A_{n+1}}(x)$

3. Cte de normalisation :

$$\lambda(A_n) := Z_n = Z_0 \times \frac{Z_1}{Z_0} \times \ldots \times \frac{Z_n}{Z_{n-1}}$$

et

$$\frac{Z_n}{Z_{n-1}} = \frac{\lambda(1_{A_n})}{Z_{n-1}} = \frac{\lambda(1_{A_n}\, 1_{A_{n-1}})}{Z_{n-1}} = \eta_{n-1}(A_n) \sim_{N\uparrow\infty} \eta_{n-1}^N(A_n)$$