INSTITUT NATIONAL
DE RECHERCHE
EN INFORMATIQUE
ET EN AUTOMATIQUE

INRIA

centre de recherche BORDEAUX - SUD-OUEST

MÉTHODES DE MONTE CARLO

Une Introduction avec Applications

P. Del Moral
Centre INRIA Bordeaux Sud-Ouest
& Institut de Mathématiques de Bordeaux
Université Bordeaux I, 351, cours de la Libération
33405 Talence, France

Objectifs du cours

La théorie des probabilités et des processus stochastiques est sans aucun doute l'un des plus important outils mathématiques des sciences modernes. Comme le soulignais James Clerk Maxwell dès 1850 :

"The actual science of logic is conversant at present only with things either certain, impossible or entirely doubtful, none of which fortunately we have to reason on. Therefore the true logic for this world is the calculus of Probabilities, which takes account of the magnitude of the probability which is, or ought to be, in a reasonable man's mind."

Le but de ce cours est de parcourir les principaux éléments de la modélisation stochastique, et de la simulation numérique. Ce voyage ne nécessite aucun bagage spécifique sur la théorie des processus stochastiques. Quelques éléments sur la théorie de systèmes dynamiques déterministes permettrons d'apprécier la beauté de certains paysages. En effet, d'un point de vue purement mathématique, la théorie des processus stochastiques est une extension naturelle de la théorie de systèmes dynamiques à des phénomènes aléatoires se déroulant dans le temps. Néanmoins, comme le souligne Ian Stewart dans son ouvrage [23], le mot grec *stochastikos* signifie "habile a viser", et "transmet ainsi l'idée de l'utilisation contemporaine des lois du hasard en vue d'avantages personnels". L'un des objectif de ces notes est de préciser ces idées sous des angles de vues mathématiques et pratiques.

Il est important de noter que la nature aléatoire ajoutée de ces systèmes dynamiques stochastiques provient de trois sources naturelles et distinctes :

Tout d'abord, les fluctuations aléatoires de certaines grandeurs physiques, biologiques, ou économiques telles la répartition de la chaleur, l'évolution de populations génétiques, l'évolution des prix des actions financières sont souvent le reflet d'un processus chaotique.

D'autre part, la plupart des processus aléatoires formalisés sont des modèles simplifiés ne rendant compte que d'une partie du phénomène étudié. Dans ce contexte, les erreurs de modèles, ou tout autre quantité influant sur son évolution (paramètres de contrôles, perturbations de mesures) peuvent être représentées par des variables aléatoires. Leur nature probabiliste est souvent dictée par une connaissance a priori du système.

Enfin, dans le cadre des algorithmes stochastiques, les composantes aléatoires du système permettent d'augmenter les capacités d'exploration et d'adaptation du modèle. À la différence de leurs homologues déterministes, ces méthodes de recherche aléatoire permettent d'explorer des espaces de grandes dimensions, tout en évitant certains pièges, tels des puits de minima locaux en optimisation globale.

Ces trois aspects sont développés sous des angles théoriques et pratiques, en insistant sur les fondations mathématiques, tout en illustrant chaque modèle par une variété d'applications issues de domaines scientifiques connexes. Nous soulignerons dès que possible les différentes expressions de ces modèles en physique, en biologie, ainsi que dans les sciences sociales, en mathématiques financières, et dans les sciences de l'ingénieur.

L'ingénierie stochastique est essentiellement consacrée à l'analyse de deux classes de modèles probabilistes :

- Les processus stochastiques formalisés représentant des évolutions dynamiques et aléatoires de systèmes techniques, physiques, biologiques, ou économiques.
- Les algorithmes d'exploration stochastique d'espaces de solutions complexes pour résoudre des problèmes d'estimation, d'optimisation et d'apprentissage.

Ces deux notions sont loin d'être sans rapport. En effet, la plupart des algorithmes stochastiques modernes sont fondés sur des mécanismes de recherche mimant des processus d'exploration et d'adaptation biologiques ou physiques. . En d'autres termes, ces algorithmes miment des processus d'évolution ou d'apprentissage dictés par des régles physiques ou issues de l'évolution naturelle :

- Les fonctions itérées aléatoires simulent l'élaboration naturelle et chaotique de formes symétriques complexes, telles les flocons de neige ou d'autres paysages fractals.
- L'algorithme de Robbins-Monro simule un processus d'apprentissage humain de recherche d'un dosage optimal, en observant les différents effets et réactions au produit.
- Le recuit simulé mime le refroidissement d'un métal vers un état solide stable et optimal.
- L'échantilloneur de Gibbs simule pas à pas les transitions locales de chaque composante d'un système physique conditionnelles aux autres composantes.
- Les algorithmes génétiques, et les arbres généalogiques correspondants, simulent l'évolution d'une population d'individus en adaptation dans un environnement suivant des mécanismes de mutation et de sélection.

Comme nous l'avons dit plus haut, les modèles stochastiques décrits dans cet ouvrage admettent des interprétations distinctes et variées, selon le domaine d'application considéré. Par exemple, les techniques d'exploration génétiques d'espaces complexes décrites plus haut font actuellement partie des techniques de résolution les plus avancées en statistique bayesienne, en traitement du signal, en analyse d'évènements rares, en combinatoire énumérative, en optimisation combinatoire, en mathématiques financières, ainsi qu'en physique et chimie quantique. Nous avons ici choisi de souligner leurs expressions biologiques ou physiques originelles, tout en illustrant leurs applications dans la résolution de problèmes d'estimation classiques des sciences de l'ingénieur. Ce catalogue d'application est loin d'être exhaustif, il reflète simplement certaines expressions classiques de ces modèles, ou certain goûts des auteurs.

Ces modèles probabilistes se formalisent mathématiquement par la donnée d'une chaîne de Markov. Leur convergence vers la solution du problème étudié s'exprime alors le plus souvent par des phénomènes de moyennisation asymptotique en temps long, ou par des principes de moyennes spatiales pour les algorithmes fondées sur des dynamiques de population. Ces deux propriétés probabilistes sont le fruit de lois des grands nombres, ou de propriétés ergodiques des systèmes. Ces deux notions seront examinées brièvement dans ce cours. Le lecteur désireux d'approfondir ces aspects théoriques peut consulter les deux ouvrages complémentaires consacrés à ces questions [4, 6], ainsi que les articles référencés dans ces deux livres.

Bibliographie

[1] C. Akerblom. Tracking Mobile Phones in Urban Areas. Thesis for the degree of Licenciate of engineering. Chalmers Goteborg University, September 2000.

[2] M. Barnsley, *Fractals everywhere*, San Diego, Academic Press (1988).

[3] D. Bohm, *La plénitude de l'Univers*, Seveyrat (1989).

[4] Bartoli N. et Del Moral P. *Simulation et Algorithmes Stochastiques*, Cépaduès éditions (2001).

[5] F. Cerou, P. Del Moral, A. Guyader. (2008). A non asymptotic variance theorem for unnormalized Feynman-Kac particle models. preprint hal-inria

[6] P. Del Moral (2004). `Feynman-Kac formulae. Genealogical and interacting particle systems`, Springer-Verlag : New York.

[7] P. Del Moral (1996). Non Linear Filtering : Interacting Particle Solution. Markov Processes and Related Fields, Volume 2 Number 4, 555–580.

[8] P. Del Moral,, A. Doucet, & A. Jasra (2006). `Sequential Monte Carlo samplers.` *J. R. Statist. Soc. B*, **68**, 411–436.

[9] P. Del Moral,, A. Doucet, & G. W. Peters (2006). `Sharp Propagations of Chaos Estimates for Feynman-Kac particle Models` *Probability Theory and its Applications SIAM*, **vol. 51, no. 3**.

[10] A. Doucet, N. de Freitas, and N. Gordon, editors. *Sequential Monte Carlo Methods in Pratice.* Statistics for engineering and Information Science. Springer, New York (2001).

[11] M. Field, M. Golubitsky, *La symétrie du chaos, à la recherche des liens entre mathématiques et nature*, InterÉditions, Paris (1993).

[12] T. Fitzgibbons, E. Nebot. Bearing Only SLAM using Colour-based feature Tracking. Proceedings 2002 Australian Conference on Robotics and Automation. Auckland.

[13] Gunnarsson, F., Nordlund, P.-J., and Gustafsson, F. (2002). Particle filters for positioning in wireless networks. In Proc. of EUSIPCO, Toulouse.

[14] Gustafsson, F., Gunnarsson, F., Bergman, N., Forssell, U., Jansson, J., Karlsson, R., and Nordlund, P.-J. (2002). Particle filters for positioning, navigation and tracking. IEEE Transactions on Signal Processing, 50(2).

[15] Hara T. and Slade G. (1992), Self-avoiding walks in five or more dimensions : I. The critical behaviour. *Communications in Mathematical Physics*, **147**, pp. 101-136

[16] Haight F.A., *Handbook of the Poisson distribution*, John Wiley and Sons, New York (1967).

[17] Musso, C. and Oudjane, N. (2000). Recent particle filter applied to terrain navigation. *In Proceedings of the 3rd International Conference on Information Fusion, Paris.*

[18] B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature.* W.H. Freeman & Co. (1982).

[19] G. Marsaglia, A. Zaman. Towards a universal random number generator. *Stat. Prob. Lett.*, 8, pp. 35-39 (1990).

[20] C. Jarzynski (1997). Equilibrium free energy differences from nonequilibrium measurements : a master equation approach, *Phys. Rev. E* 56(5), pp. 5018-5035.

[21] Kristijan Macek, Roland Philippsen, and Roland Siegwart. Path Following for Autonomous Vehicle Navigation based on Kinodynamic Control (2008). Journal of Computing and Information Technology, to appear.

[22] G. Marsaglia, A. Zaman. A new class of random number generators. *Ann. Appl. Prob.*, 1, pp. 462-480 (1991).

[23] Stewart I., *Dieu joue-t-il aux dès, les mathématiques du chaos*, Champs Flammarion (1992).

[24] Maskell, S., Rollason, M., Gordon, N. J., and Salmond, D. (2003). Efficient particle filtering for multiple target tracking with application to tracking in structured images. Image and Vision Computing, 21(10) :931–939.

[25] M. Rousset & G. Stoltz (2006). Equilibrium sampling from non-equilibrium dynamics. *J. Stat. Phys.*, **123**, 1251-1272.

[26] B. Sapoval (1997). Universalités et fractales. Jeux d'enfants ou délits d'initié. Flammarion Paris.

[27] Shiga, T. & Tanaka, H. (1985). Central limit theorem for a system of Markovian particles with mean field interaction, *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie verwandte Gebiete*, **69**, 439–459.

[28] Singer, R.A. Estimating Optimal Tracking Filter Performance for Manned Maneuvering Targets. IEEE Transactions on Aerospace and Electronic Systems, AES-6(4) :473-483, jul. 1970.