Cours 07
Introduction à la méthode de Monte-Carlo

On fait remonter la naissance de la méthode de Monte-Carlo au Comte de Buffon qui, en 1777, inventa une méthode de calcul du nombre π restée célèbre sous le nom de *méthode de l'aiguille de Buffon* qui est fondée sur la réalisation d'un grand nombre d'expériences répétées. Mais la vraie naissance de la méthode de Monte-Carlo est liée à l'utilisation des premiers ordinateurs à la fin des années 40. Cette méthode est aujourd'hui d'un usage très fréquent dans la plupart des domaines d'applications des mathématiques, par exemple pour l'estimation du temps de survie d'une bactérie en biologie ou pour le calcul du prix de certains produits financiers.

1 Simulation d'une loi de probabilité

Lorsqu'on réalise une expérience dont le résultat suit une loi de probabilité, c'est-à-dire une expérience dont on connait l'ensemble des issues possibles ainsi que la probabilité qu'elles se réalisent, on dit qu'on *simule la loi de probabilité.* Ainsi, s'il s'agit d'un loi de Bernoulli (qui peut prendre les deux valeurs 0 ou 1 avec les probabilités $(1-p)$ et p respectivement), simuler cette loi consiste à faire un tirage dont le résultat est soit 0, soit 1 sachant que la probabilité d'obtenir 1 est égale à p. De même, simuler une loi uniforme sur $[0,1]$, c'est tirer au hasard un nombre réel compris entre 0 et 1 de telle sorte que la probabilité que ce nombre appartienne à un sous intervalle $[a,b]$ de $[0,1]$ soit égale à la longueur $b-a$ de ce sous intervalle.

2 Loi des grands nombres

Pour calculer une valeur approchée de l'espérance μ d'une v.a. à partir d'un grand nombre de simulations de cette variable, on utilise l'idée suivante : les valeurs de cette variable obtenues par simulation se répartissant aléatoirement autour de μ (en supposant qu'il n'y a pas d'erreur systématique), leur moyenne fournira une valeur plus proche de μ car le fait de prendre la moyenne réduit la dispersion des résultats. C'est l'idée de la *loi des grands nombres :* si $X_1, X_2, \ldots, X_n$ est une suite de v.a. iid de loi X (suite de n tirages indépendants de la variable X), la moyenne arithmétique $\frac{1}{n}(X_1+X_2+\ldots+X_n)$ converge, quand n tend vers l'infini, vers l'espérance $\mu=\mathbb{E}(X)$. Selon ce théorème, on pourra donc, dans les applications, estimer l'espérance μ de X par la quantité $\frac{1}{n}(X_1+X_2+\ldots+X_n)$ pourvu que n soit suffisamment grand.

3 Estimation du nombre π

Ce n'est pas la méthode de l'aiguille de Buffon que nous avons choisi de présenter (pour les curieux, on peut en voir une jolie présentation sous forme d'une applet Java à l'URL
http ://www-sop.inria.fr/mefisto/java/tutorial1/).

La méthode que nous étudions est un peu plus simple du point de vue de la modélisation.

Supposons que nous simulions deux v.a. indépendantes X et Y de loi uniforme sur $[-1,1]$. Chaque tirage de ces deux v.a. fournit les coordonnées d'un point du carré $\{(x,y), -1 \le x, y \le 1\}$ de coté 2. On représente dans ce carré le disque inscrit de rayon 1 et on s'intéresse à la proportion de points tirés qui atteignent cette cible. On considère la v.a. Z qui à chaque tirage d'un point (X,Y) associe 1 lorsque $X^2+Y^2 \le 1$ et 0 sinon. C'est une variable de Bernoulli dont le paramètre $p = P(X^2+Y^2 \le 1)$ est estimé par la proportion de points atteignant la cible. Comme les points sont tirés uniformément dans le carré, l'idée est que cette proportion devrait être proche du rapport des aires du disque sur le carré, c'est-à-dire de

$$\frac{\pi R^2}{2^2} = \frac{\pi}{4}.$$

C'est le cas en effet si n est assez grand car chaque tirage d'un point (X,Y) correspond à un tirage de la v.a. de Bernoulli Z et que la proportion $\hat{p} = (Z_1+Z_2+\ldots+Z_n)/n$ est la moyenne arithmétique de ces tirages. Donc selon la loi des grands nombres, $\hat{p}$ permet d'estimer l'espérance de Z qui vaut $\frac{\pi}{4}$ et donc $4\hat{p}$ permet d'estimer π.

4 Propriétés de l'estimateur de π

Désignons par $\hat{\pi}$ la quantité

$$\hat{\pi} := 4\left(\frac{Z_1+Z_2+\ldots+Z_n}{n}\right).$$

Cette quantité varie à chaque simulation de n points (X,Y) et prend des valeurs proches de π. On dit que cette v.a. est un *estimateur* de π. En utilisant le fait que $Z_1+Z_2+\ldots+Z_n$ est une somme de v.a. de Bernoulli indépendantes et donc suit une loi Binomiale $\mathcal{B}(n, \frac{\pi}{4})$ dont l'espérance est $n\pi/4$ et l'écart type $\sqrt{n\frac{\pi}{4}(1-\frac{\pi}{4})}$, on peut calculer l'espérance m et l'écart type σ de l'estimateur $\hat{\pi}$. On a :

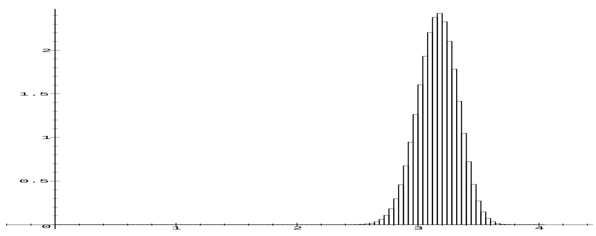
$$m = \mathbb{E}(\hat{\pi}) = \mathbb{E}\left(4\left(\frac{Z_1 + Z_2 + \ldots + Z_n}{n}\right)\right) = \frac{4}{n}\mathbb{E}(Z_1 + Z_2 + \ldots + Z_n) = \frac{4}{n}\frac{n\pi}{4} = \pi \simeq 3,14$$

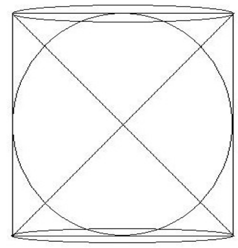
et de même

$$\sigma = \left|\frac{4}{n}\right|\sigma(Z_1 + Z_2 + \ldots + Z_n) = \frac{4}{n}\sqrt{n\frac{\pi}{4}(1-\frac{\pi}{4})} = \frac{\sqrt{\pi(4-\pi)}}{\sqrt{n}}(\simeq 0,052 \text{ lorsque } n = 1000).$$

On a représenté sur la figure ci-dessous l'histogramme de l'estimateur $\hat{\pi}$. On voit que sa forme se rapproche de la courbe en cloche dite *cloche de Gauss*, c'est-à-dire que sa loi est proche d'une loi normale (on reviendra sur ce point lors d'un prochain cours). Nous verrons que l'une des plus importantes propriétés de la loi normale $\mathcal{N}(m, \sigma)$ est qu'elle prend environs 95% de ses valeurs dans l'intervalle $I_{2\sigma} = [m - 2\sigma, m + 2\sigma]$ (et environs 68% de ses valeurs dans l'intervalle $I_\sigma = [m - \sigma, m + \sigma]$).

On en déduit que 95% des estimations de π trouvées par la méthode de Monte-Carlo proposée devraient appartenir à l'intervalle $I_{2\sigma} = [3,04 \,; 3,25]$ si $n = 1000$. Si l'on veut, avec cette méthode, obtenir une meilleur précision, c'est-à-dire une intervalle d'estimation plus étroit, il faut un estimateur $\hat{\pi}$ d'écart type σ plus petit, ce que l'on peut obtenir en augmentant le nombre de simulations : avec $n = 10000$, $\sigma \simeq 0,016$ et donc $I_{2\sigma} = [3,11 \,; 3,17]$ (ce qui fournit la première décimale exacte) et avec $n = 10^6$, les deux premières décimales seraient exactes dans 95% des cas. On voit ici l'une des difficultés d'application des méthodes de Monte-Carlo qui, souvent, nécessitent un très grand nombre de simulations pour obtenir une précision acceptable.





5 Un théorème d'Archimède

La figure de droite ci-dessus aurait été gravée à sa demande[1] sur la tombe d'Archimède et illustre un de ses théorèmes : *le volume du cylindre est égal à la somme des volumes de la boule et du cône inscrits dans ce cylindre.* Nous vérifions ce théorème au moyen d'une méthode de Monte-Carlo.

Voici la preuve analytique, dans le cas de la boule de centre $(0,0,0)$ et de rayon 1, effectuant ainsi un bond de près de deux millénaires dans les Mathématiques. L'équation de la boule est $x^2 + y^2 + z^2 \leq 1$, et le cône et le cylindre ont alors pour équation $x^2 + y^2 \leq z^2$ et $x^2 + y^2 \leq 1$, avec $-1 \leq z \leq 1$. Il suffit alors de montrer que les aires des sections, au niveau z, de ces trois solides satisfont la relation. L'aire du disque section de la boule, est $a = \pi(x^2 + y^2) = \pi(1 - z^2)$. L'aire du disque section du cône, est $b = \pi(x^2 + y^2) = \pi z^2$. Enfin l'aire du disque, section du cylindre, est $c = \pi 1^2 = \pi$ et on a donc bien $a + b = \pi(1 - z^2) + \pi z^2 = \pi = c$.

1. et réalisée sur ordre du général Marcellus, en repentance de l'assassinat d'Archimède par un de ses soldats, en 212 av. JC. Cette tombe aurait été retrouvée au milieu de ronces par la diligence de Cicéron, questeur en Sicile en 75 av. JC.