

Théorèmes de convergence pour l'intégration de Monte Carlo

Loïc Paulin

15 Novembre 2019

Plan

Discrépance

Définitions

Borne d'intégration

Séquences à basse discrédance

Transport Optimal

Définition

Borne d'intégration

Minimiser le Transport Optimal

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité

Définition

Borne d'intégration

Application

Integration numérique

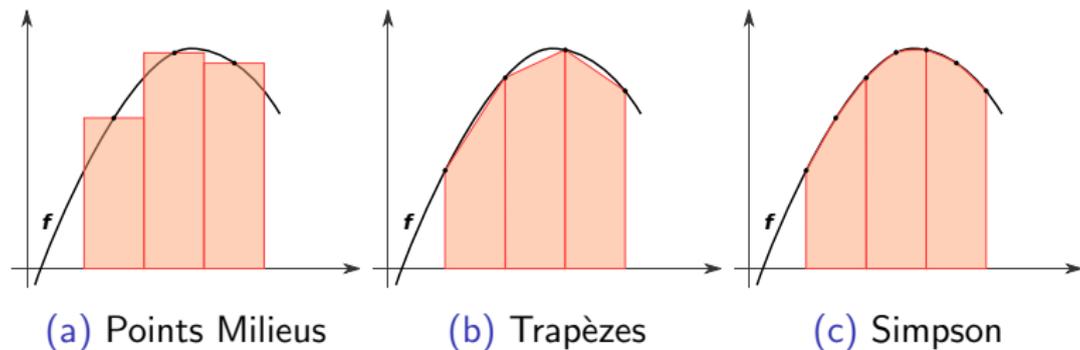


FIGURE – Méthodes numériques d'integration

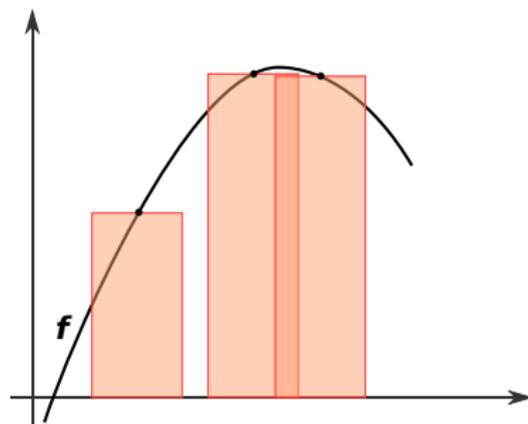
Intégration de Monte-Carlo

$$\int_{\Omega} f(x) dx = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i)$$

avec les x_i choisis stochastiquement

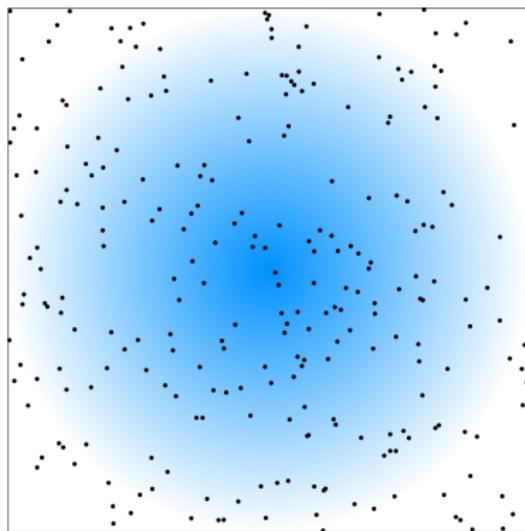
- ▶ Indépendant de la dimension
- ▶ Indépendant de la complexité du problème

Intégration de Monte-Carlo



$$\left| \int_{\Omega} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum f(x_i) \right| = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$$

Intégration de Monte-Carlo



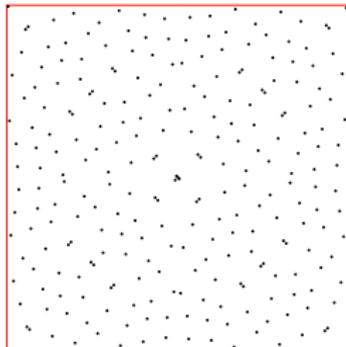
$$\left| \int_{\Omega} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum f(x_i) \right| = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$$

Intégration de Monte-Carlo

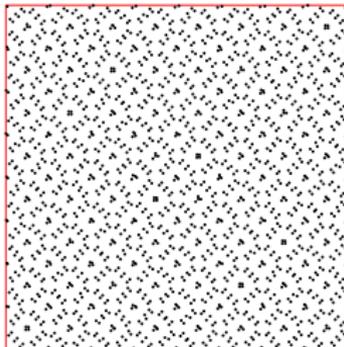
Peut-on mieux faire ?

Intuition : Plus Uniforme

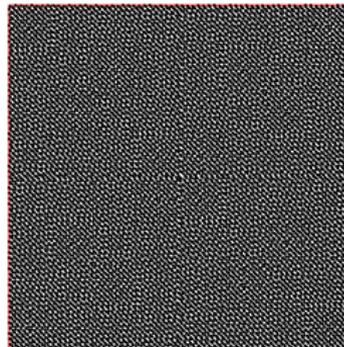
256 pts



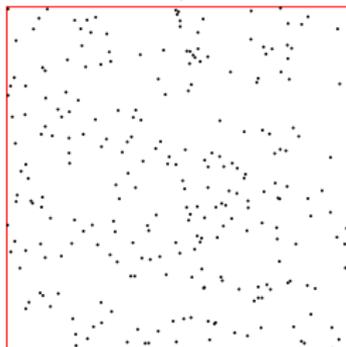
2048 pts



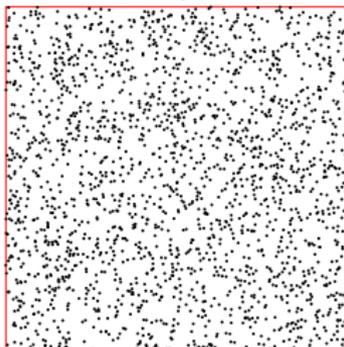
16384 pts



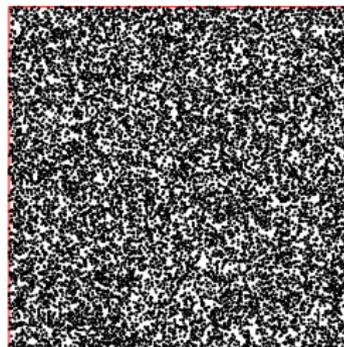
256 pts



2048 pts



16384 pts



Outline

Discrépance

- Définitions

- Borne d'intégration

- Séquences à basse discrédance

Transport Optimal

- Définition

- Borne d'intégration

- Minimiser le Transport Optimal

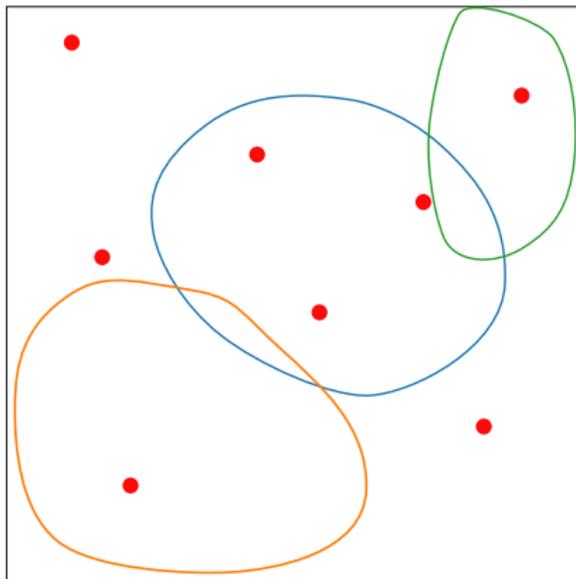
(\mathcal{M}, μ) -Uniformité

- Définition

- Borne d'intégration

- Application

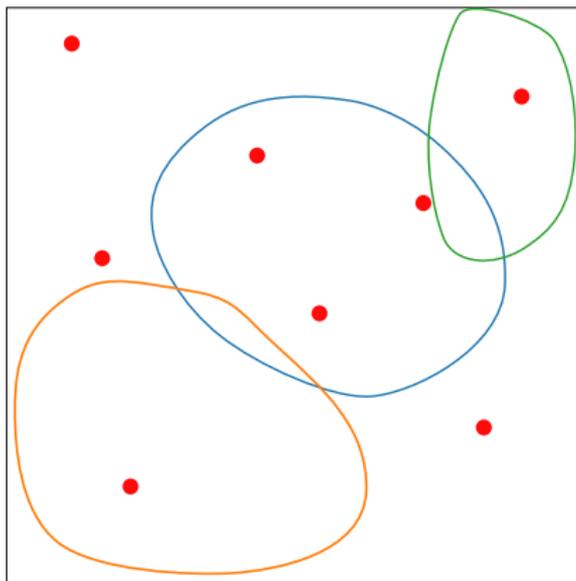
Discrépance [Nie92, Lem09]



Comparer la proportion de points espérés à la réalisation

- ▶ μ la distribution échantillonnée
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tirés dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

Discr ance [Nie92, Lem09]

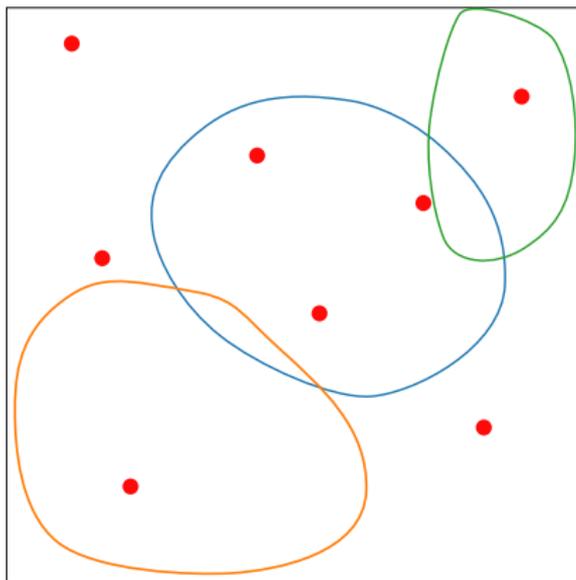


$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 1/8$$

Comparer la proportion de points esp r s   la r alisation

- ▶ μ la distribution  chantillonn e
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tir s dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

Discr pance [Nie92, Lem09]



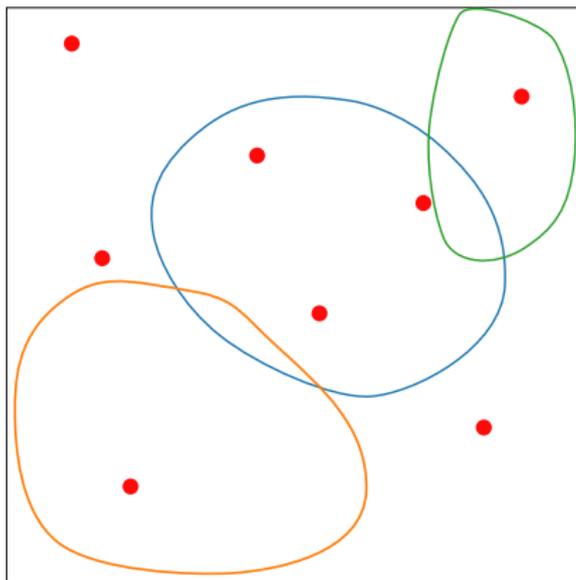
$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 1/8$$

$$\mu(I_2) = 1/4, \mathcal{P}(I_2) = 3/8$$

Comparer la proportion de points esp r s   la r alisation

- ▶ μ la distribution  chantillonn e
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tir s dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

Discr pance [Nie92, Lem09]



$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 1/8$$

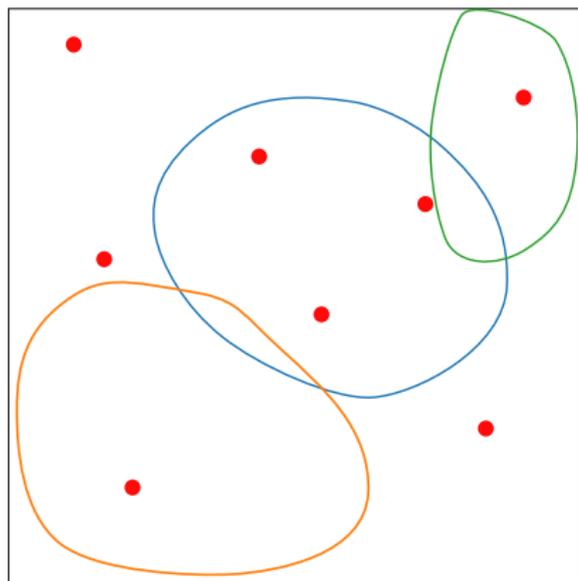
$$\mu(I_2) = 1/4, \mathcal{P}(I_2) = 3/8$$

$$\mu(I_3) = 1/4, \mathcal{P}(I_3) = 1/8$$

Comparer la proportion de points esp r s   la r alisation

- ▶ μ la distribution  chantillonn e
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tir s dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

Discr pance [Nie92, Lem09]



$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 1/8$$

$$\mu(I_2) = 1/4, \mathcal{P}(I_2) = 3/8$$

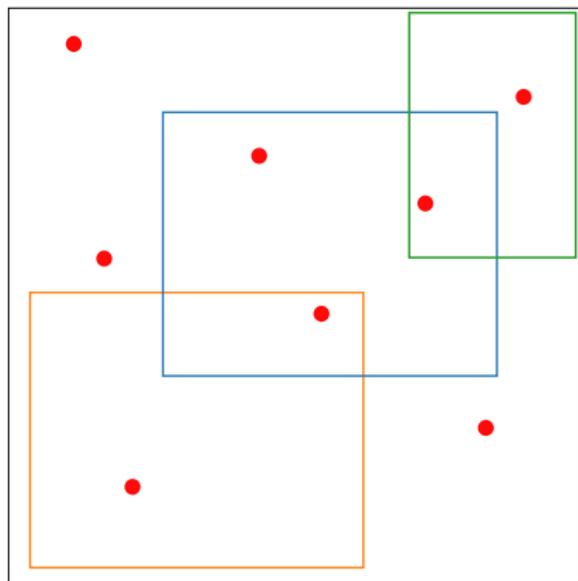
$$\mu(I_3) = 1/4, \mathcal{P}(I_3) = 1/8$$

Comparer la proportion de points esp r s   la r alisation

- ▶ μ la distribution  chantillonn e
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tir s dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

$$D(\mathcal{P}) = \sup_{I \in \text{Convexes}} \mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I)$$

Discr pance Extr me



Comparer la proportion de points esp r s   la r alisation

- ▶ μ la distribution  chantillonn e.
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tir s dans I .
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$
- ▶ $J(x, y) = \prod_{i=1}^d [x_i, y_i]$.

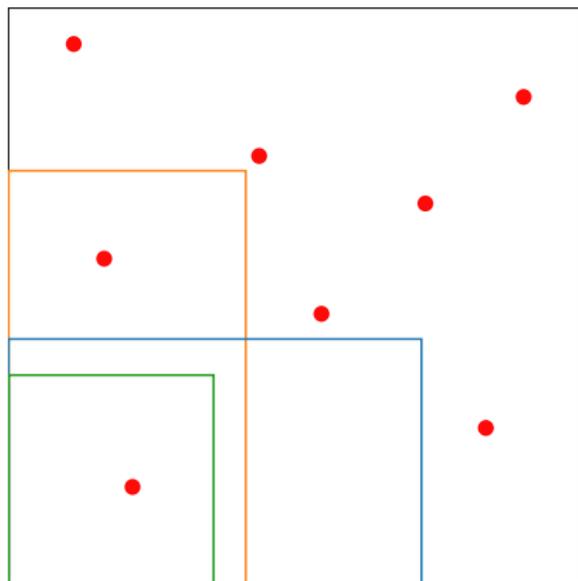
$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 2/8$$

$$\mu(I_2) = 1/4, \mathcal{P}(I_2) = 3/8$$

$$\mu(I_3) = 1/4, \mathcal{P}(I_3) = 2/8$$

$$D(\mathcal{P}) = \sup_{x, y \in [0,1]^d} \mathcal{R}_{\mathcal{P}}(J(x, y))$$

Discrépance Star



$$\mu(I_1) = 1/8, \mathcal{P}(I_1) = 1/8$$

$$\mu(I_2) = 1/4, \mathcal{P}(I_2) = 1/8$$

$$\mu(I_3) = 1/4, \mathcal{P}(I_3) = 2/8$$

Comparer la proportion de points espérés à la réalisation

- ▶ μ la distribution échantillonnée
- ▶ $\mathcal{P}(I)$ la proportion de points tirés dans I
- ▶ $\mathcal{R}_{\mathcal{P}}(I) = |\mu(I) - \mathcal{P}(I)|$

$$\mathcal{J}(x, y) = \prod_{i=1}^d [x_i, y_i].$$

$$D^*(\mathcal{P}) = \sup_{x \in [0,1]^d} R_{\mathcal{P}}(\mathcal{J}(0, x))$$

$$D^*(\mathcal{P}) \leq D(\mathcal{P}) \leq 2^{d-1} D^*(\mathcal{P})$$

Discr ance L2 [Hic98]

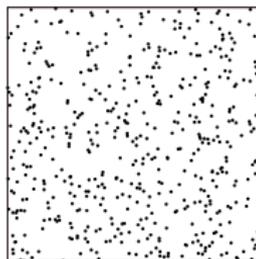
Approximation de la discr ance

$$T^*(P) = \left(\int_{[0,1]^d} (\mathcal{R}_P(J(0, v)))^2 dv \right)^{\frac{1}{2}}$$

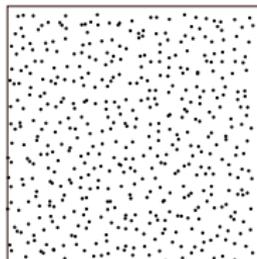
$$T^*(P)^2 = \frac{1}{n^2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \prod_{k=1}^d (1 - \max(x_{i,k}, x_{j,k}))$$
$$- \frac{2^{-s+1}}{n} \sum_{i=1}^n \prod_{k=1}^d (1 - u_{i,k}^2) + 3^{-d}$$

Algorithme en $O(n \log(n)^d)$ [Hei96]

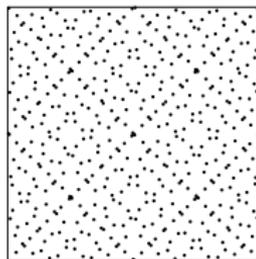
Exemples de discrédances



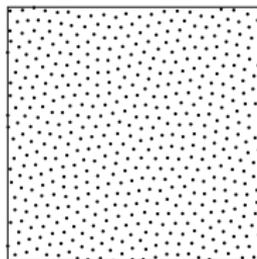
(a) Bruit blanc



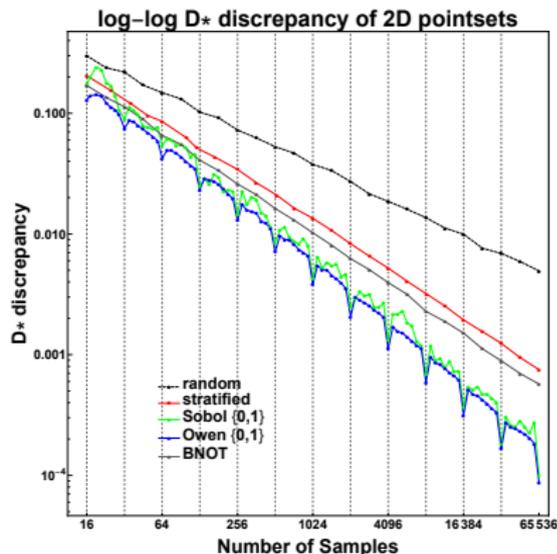
(b) Stratifié



(c) Sobol



(d) Bruit bleu



Théorème de Koksma-Hlawka [Kok42, Hla61]

Théorème

Soit $\mathcal{P} = \{x_1, \dots, x_n\}$. Si f est une fonction à variation bornée alors

$$\left| \int_{\Omega} f(x) dx - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \right| \leq V(f) * D^*(\mathcal{P})$$

- ▶ Meilleure borne possible par la discrepancy

Conjecture

$$D^*(\mathcal{P}) = O\left(\frac{\log(n)^{d-1}}{n}\right)$$

(Prouvé pour $d \leq 2$)

Variation au sens Hardy-Krause

Définition

$$V^{(d)}(f) = \sup_{P \in \mathcal{P}} \sum_{J \in P} |\Delta(f; J)|,$$

- ▶ \mathcal{P} l'ensemble des partitions P de $[0, 1)^d$
- ▶ P ensemble des $\{x_1, \dots, x_{n_p}\}$ tels que
 $\forall i \in \{1, \dots, n_p - 1\}, x_i \in [0, 1)^d$ et $x_i \leq x_{i+1}$
- ▶ $\Delta(f; J)$ la somme alternée de la fonction aux sommets de J

Variation au sens Hardy-Krause

$$V^{(d)}(f) = \sup_{P \in \mathcal{P}} \sum_{J \in P} |\Delta(f; J)|,$$

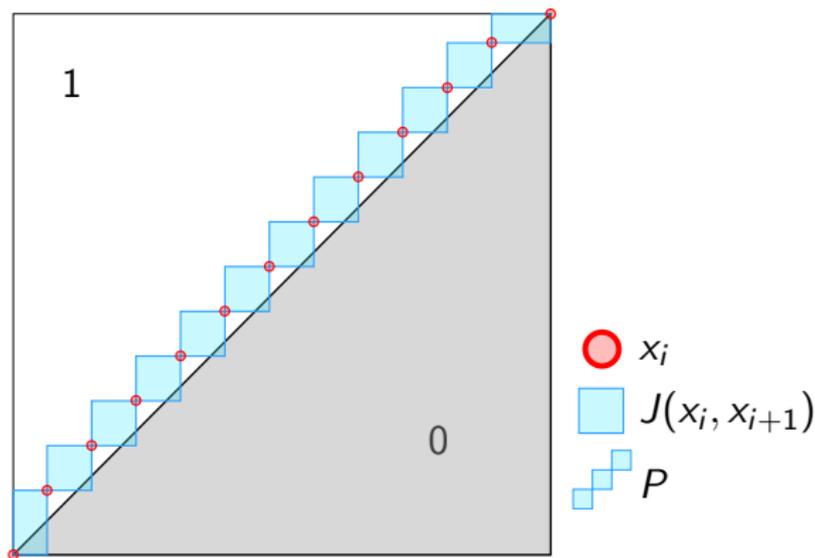


FIGURE – Exemple d'une discontinuité ayant une variation infinie

Variation Totale [BCGT13]

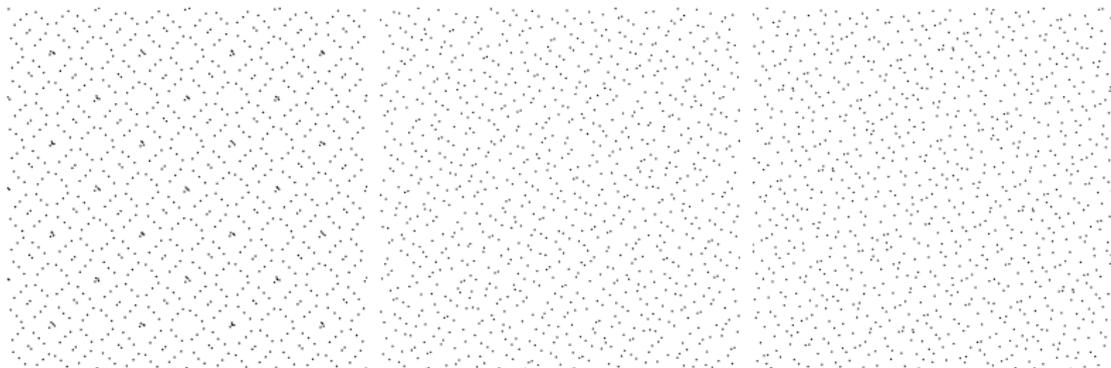
Définition

$$\mathcal{V}^{(d)}(f) = \sum_{\alpha \in \{0,1\}^d} 2^{d-\|\alpha\|_0} \int_{[0,1]^d} \left| \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right)^\alpha f(\mathbf{x}) \right|$$

- ▶ Considère les discontinuités
- ▶ Peut remplacer V dans la borne de Koksma-Hlawka

Séquences à basse discrépance

- ▶ Séquence = Ensemble "prolongeable" d'échantillons
- ▶ $D^*(P) = O\left(\frac{\log(n)^{d-1}}{n}\right)$
- ▶ différentes méthodes :

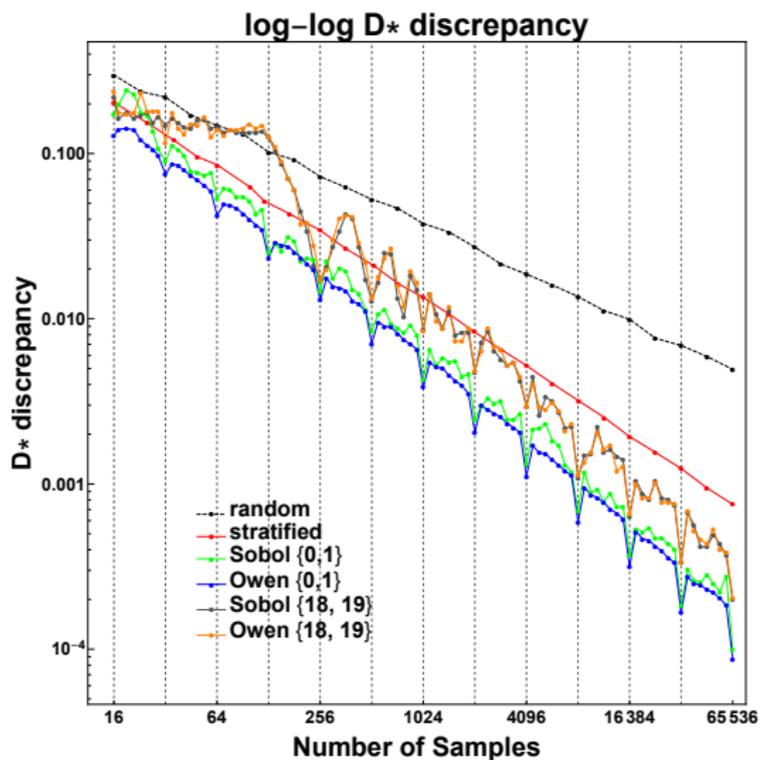


(a) Sobol

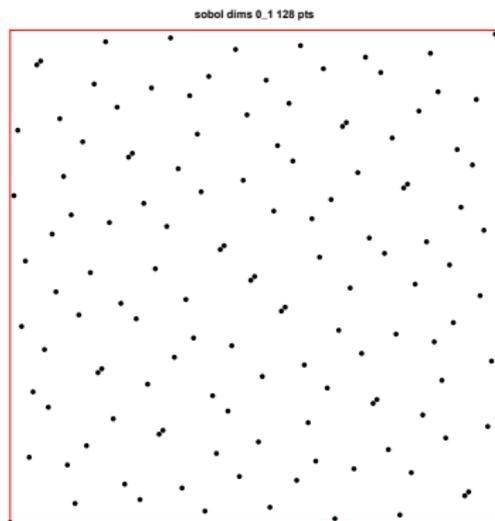
(b) Halton

(c) Niederreiter base 3

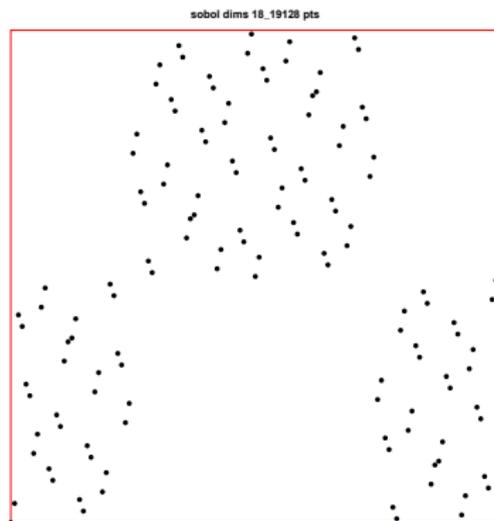
Détection de Qualité



Détection de Qualité



(a) Sobol



(b) Sobol dégénéré

Conclusion

Avantages :

- ▶ Calculable
- ▶ Minimisable
- ▶ Bonnes propriétés liées
- ▶ Borne applicable à une large famille d'intégrandes

Désavantages :

- ▶ Non isotrope
- ▶ Défauts des séquences sur certaines dimensions



Outline

Discrépance

Définitions

Borne d'intégration

Séquences à basse discrédance

Transport Optimal

Définition

Borne d'intégration

Minimiser le Transport Optimal

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité

Définition

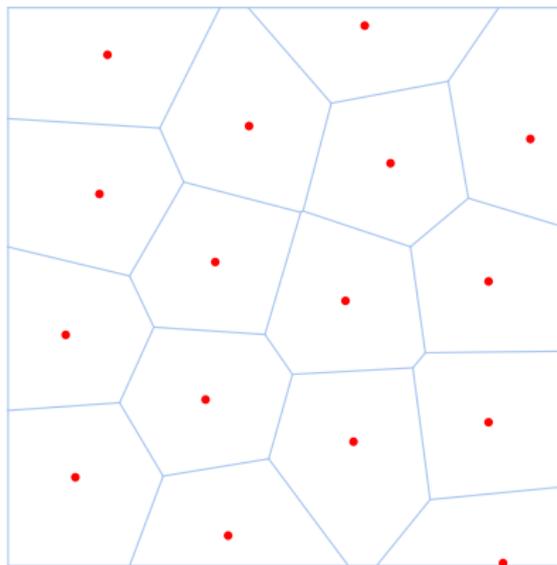
Borne d'intégration

Application

Transport Optimal

Idée :

Mesurer l'uniformité dans un sens plus intuitif



Transport Optimal Semi-Discret

Définition (Monge)

$$W(\mu, \nu) = \inf \left\{ \int_{\mathcal{X}} c(x, T(x)) d\mu(x) : T_*(\mu) = \nu \right\},$$

avec $c(x, T(x))$ le coût pour se déplacer de x à $T(x)$

Voir [HHMP19] pour les différents algorithmes pour le calculer

Transport Optimal Projectif

Définition [RPDB11]

$$\tilde{W}_p(X, Y) = \left(\int_{\theta \in \Omega} W_p(X_\theta, Y_\theta)^p d\theta \right)^{\frac{1}{p}}$$

where

$$X_\theta = \{\langle X_i, \theta \rangle\},$$

$$\Omega = \{\theta \in \mathbb{R}^d : \|\theta\| = 1\},$$

$W_p(X_\theta, Y_\theta)$ la distance de Wasserstein 1D entre X_θ et Y_θ

Mesure équivalente au transport optimal [Bon13]

Dualité de Kantorovich-Rubinstein

Soit

$$\|f\|_L = \sup \left\{ \frac{f(x) - f(y)}{\|x - y\|} : x, y \in \Omega; x \neq y \right\},$$

On a

$$W(\mu, \nu) = \sup \left\{ \int_{\Omega} f d\mu - \int_{\Omega} f d\nu : \|f\|_L \leq 1 \right\},$$

donc

$$\left| \int_{\Omega} f d\mu - \int_{\Omega} f d\nu \right| \leq \|f\|_L W(\mu, \nu),$$

et

$$\left| \int_{\Omega} f d\mu - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \right| \leq \|f\|_L W(\mu, \nu).$$

Dualité de Kantorovich-Rubinstein

Soit

$$\|f\|_L = \sup \left\{ \frac{f(x) - f(y)}{\|x - y\|} : x, y \in \Omega; x \neq y \right\},$$

On a

$$W(\mu, \nu) = \sup \left\{ \int_{\Omega} f d\mu - \int_{\Omega} f d\nu : \|f\|_L \leq 1 \right\},$$

donc

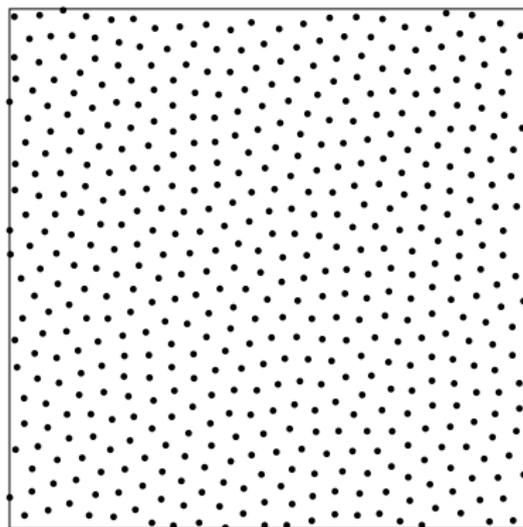
$$\left| \int_{\Omega} f d\mu - \int_{\Omega} f d\nu \right| \leq \|f\|_L W(\mu, \nu),$$

et

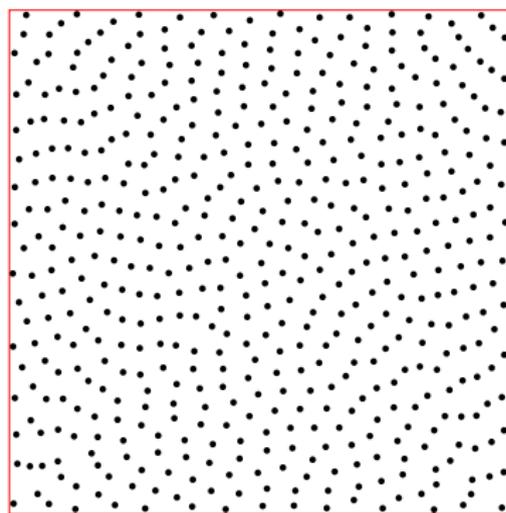
$$\left| \int_{\Omega} f d\mu - \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i) \right| \leq \|f\|_L W(\mu, \nu).$$

Minimiser le Transport Optimal

Descente de gradient



(a) BNOT[DGBOD12]
(Transport Optimal)



(b) SOTS (Transport Optimal
Projectif)

Conclusion

Avantages

- ▶ Mesure intuitive
- ▶ Échantillonnage préférentiel

Désavantages

- ▶ Plus coûteux
- ▶ Classe de fonctions plus restreinte

À faire

- ▶ Trouver la valeur minimale théorique en fonction de n



Outline

Discrépance

- Définitions

- Borne d'intégration

- Séquences à basse discrédance

Transport Optimal

- Définition

- Borne d'intégration

- Minimiser le Transport Optimal

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité

- Définition

- Borne d'intégration

- Application

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité [Nie03]

Intuition

Critère binaire d'uniformité proche de la discrédance.

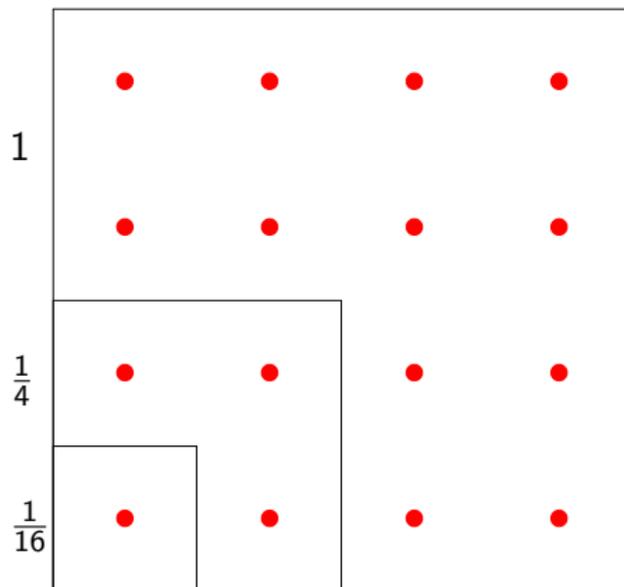


FIGURE – Exemple d'une réalisation (\mathcal{M}, μ) -uniforme

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité [Nie03]

Intuition

Critère binaire d'uniformité proche de la discrédance.

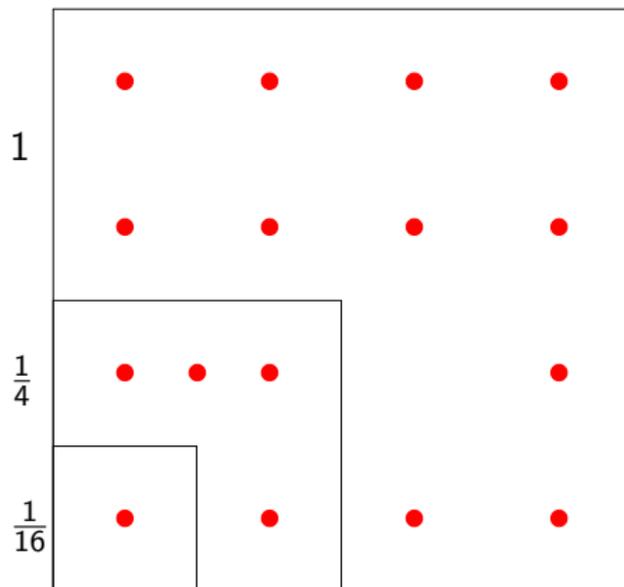


FIGURE – Exemple d'une réalisation non (\mathcal{M}, μ) -uniforme

(\mathcal{M}, μ) -Uniformité [Nie03]

Soit

- ▶ $(\Omega, \mathcal{B}, \mu)$ un espace de probabilité
- ▶ Ω notre domaine d'intégration
- ▶ \mathcal{B} une σ -algèbre de sous ensembles de Ω
- ▶ μ une mesure de probabilité définie sur \mathcal{B}
- ▶ \mathcal{M} un sous ensemble de \mathcal{B}
- ▶ $\mathcal{P} = \{x_1, \dots, x_n\}$ un ensemble de n points
- ▶ $\mathcal{P}(M)$ la proportion de points de \mathcal{P} dans M

Définition

\mathcal{P} est (\mathcal{M}, μ) -uniforme si $\forall M \in \mathcal{M}, \mathcal{P}(M) = \mu(M)$

Borne d'intégration

Théorème

Si \mathcal{M} est une partition de Ω et que \mathcal{P} est (\mathcal{M}, μ) -uniforme alors

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\mathbf{x}_n) - \int_X f d\mu \right| \leq \sum_{j=1}^{|\mathcal{M}|} \mu(M_j) (\sup_{M_j}(f) - \inf_{M_j}(f))$$

On définit $\delta(M) = \sup_{x,y \in M} d(x,y)$ et $\delta(\mathcal{M}) = \sup_{M \in \mathcal{M}} \delta(M)$

Théorème

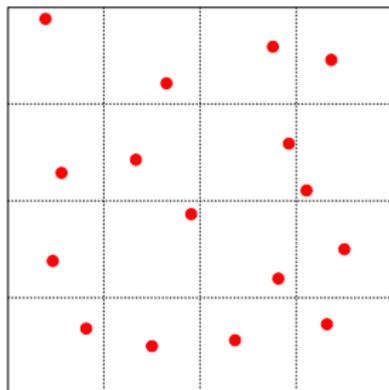
Si \mathcal{M} est une partition de Ω et que \mathcal{P} est (\mathcal{M}, μ) -uniforme alors

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N f(\mathbf{x}_n) - \int_X f d\mu \right| \leq \sup_{\substack{x,y \in X \\ d(x,y) \leq \delta(\mathcal{M})}} |f(x) - f(y)|$$

Exemple

Stratifié

Par définition (\mathcal{M}, μ) -uniforme avec \mathcal{M} l'ensemble des strates et μ la loi uniforme.



▶ $\delta(\mathcal{M}) = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$

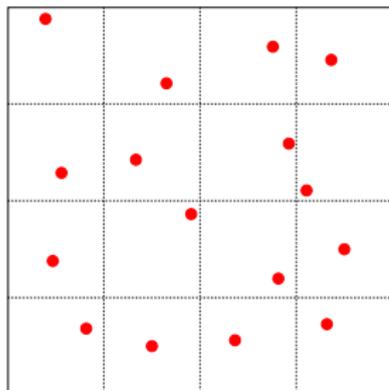
▶ Pour f Lipschitz,

$$\sup_{\substack{x, y \in X \\ d(x, y) \leq \delta(\mathcal{M})}} |f(x) - f(y)| = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right)$$

Exemple

Stratifié

Par définition (\mathcal{M}, μ) -uniforme avec \mathcal{M} l'ensemble des strates et μ la loi uniforme.



▶ $\delta(\mathcal{M}) = O\left(\frac{1}{\sqrt{d/n}}\right)$

▶ Pour f Lipschitz,

$$\sup_{\substack{x, y \in X \\ d(x, y) \leq \delta(\mathcal{M})}} |f(x) - f(y)| = O\left(\frac{1}{\sqrt{d/n}}\right)$$

Conclusion

Avantages

- ▶ Critère élégant
- ▶ Souplesse d'application

Désavantages

- ▶ Preuve à refaire pour chaque ensemble de point
- ▶ Borne très faible ?

À faire

- ▶ Étudier de la bibliographie plus récente pour trouver l'intérêt [Kel06, Kel13]

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

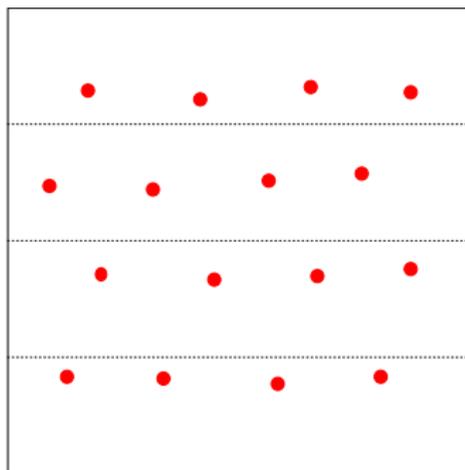


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

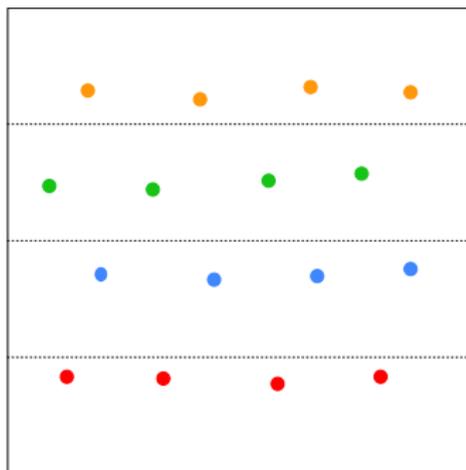


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

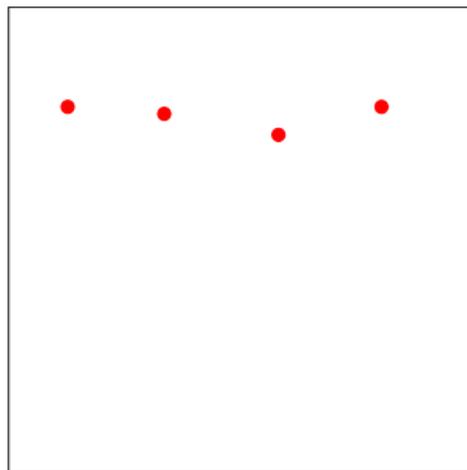


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

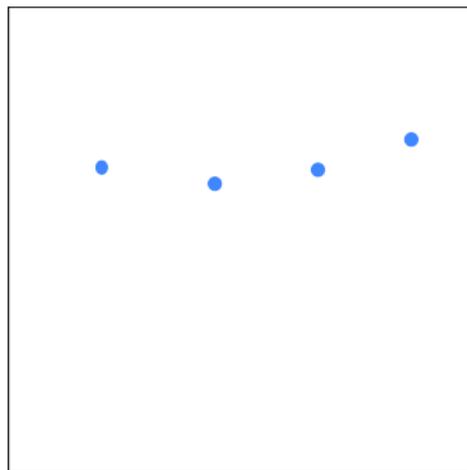


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

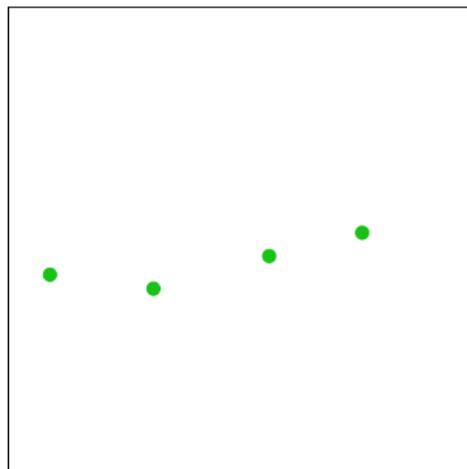


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

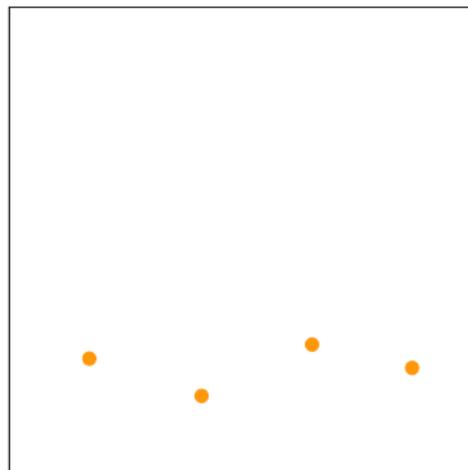


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

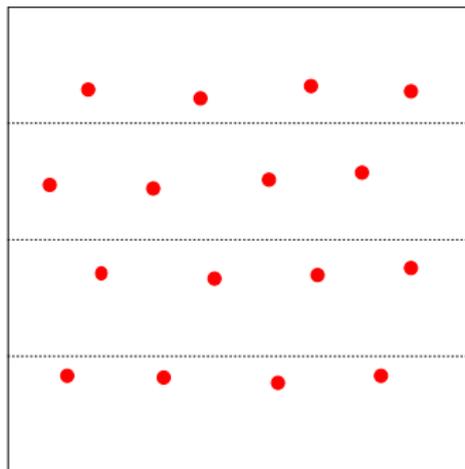


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Le mot de la fin

Les échantillons sont construits en respectant des propriétés qui sont le fondement de leur efficacité pour l'intégration.

Ces propriétés peuvent être détruite par les manipulations faites sur les échantillons.

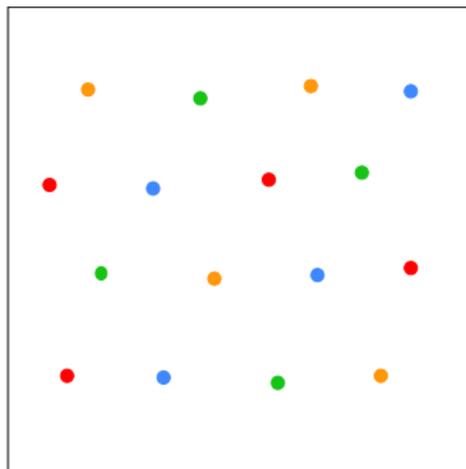


FIGURE – Exemple de mauvaise manipulation d'échantillons

Références I

-  Luca Brandolini, Leonardo Colzani, Giacomo Gigante, and Giancarlo Travaglini, *On the koksma–hlawka inequality*, *Journal of Complexity* **29** (2013), no. 2, 158–172.
-  Nicolas Bonnotte, *Unidimensional and evolution methods for optimal transportation*, Ph.D. thesis, Paris 11, 2013.
-  Fernando De Goes, Katherine Breeden, Victor Ostromoukhov, and Mathieu Desbrun, *Blue noise through optimal transport*, *ACM Transactions on Graphics (TOG)* **31** (2012), no. 6, 171.
-  Stefan Heinrich, *Efficient algorithms for computing the L_2 -discrepancy*, *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society* **65** (1996), no. 216, 1621–1633.
-  Agathe Herrou, Mathieu Heitz, Jocelyn Meyron, and Loïs Paulin, *(almost)-optimal transport*, <https://projet.liris.cnrs.fr/origami/math/>, 2019.
-  Fred Hickernell, *A generalized discrepancy and quadrature error bound*, *Mathematics of Computation of the American Mathematical Society* **67** (1998), no. 221, 299–322.

Références II

-  Edmund Hlawka, *Funktionen von beschränkter variatiou in der theorie der gleichverteilung*, Annali di Matematica Pura ed Applicata **54** (1961), no. 1, 325–333.
-  Alexander Keller, *Myths of computer graphics*, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2004, Springer, 2006, pp. 217–243.
-  _____, *Quasi-monte carlo image synthesis in a nutshell*, Monte Carlo and Quasi-Monte Carlo Methods 2012, Springer, 2013, pp. 213–249.
-  JF Koksma, *Een algemeene stelling uit de theorie der gelijkmatige verdeeling modulo 1*, Mathematica B (Zutphen) **11** (1942), no. 7-11, 43.
-  Christian Lemieux, *Monte carlo and quasi-monte carlo sampling*, Springer, New York, NY, USA, 2009.
-  Harald Niederreiter, *Random number generation and quasi-monte carlo methods*, vol. 63, Siam, 1992.
-  _____, *Error bounds for quasi-monte carlo integration with uniform point sets*, Journal of computational and applied mathematics **150** (2003), no. 2, 283–292.

Références III



Julien Rabin, Gabriel Peyré, Julie Delon, and Marc Bernot, *Wasserstein barycenter and its application to texture mixing*, International Conference on Scale Space and Variational Methods in Computer Vision, Springer, 2011, pp. 435–446.