Méthodes de Monte-Carlo

et algorithmes stochastiques – M2

Université Gustave Eiffel

Version de travail

Avant-propos

Ces notes sont une version de travail pour le cours de Master 2 *Méthodes de Monte-Carlo et algorithmes stochastiques*. Elles sont écrites dans un double objectif. D'une part, le cours doit rester mathématiquement sérieux : les estimateurs sont définis précisément, leurs biais et variances sont calculés, les résultats de convergence utilisés sont énoncés proprement, et les formules d'erreur sont justifiées. D'autre part, chaque notion doit être reliée à une question numérique concrète : calcul d'intégrale, simulation d'une loi, prix d'une option, estimation d'un remboursement moyen, contrôle d'une probabilité d'erreur.

Ces notes donnent davantage de détails que le strict minimum nécessaire pour appliquer les algorithmes. Les résultats fondamentaux comme la loi des grands nombres et le théorème central limite ne sont pas démontrés ici, car ils sont supposés connus. En revanche, on insiste sur leur usage concret : que signifie une approximation normale, comment construire un intervalle de confiance, comment dimensionner le nombre de simulations, et comment comparer deux estimateurs d'une même quantité.

Plan du cours

Chapitre 1. Moyennes de Monte-Carlo, convergence et intervalles de confiance. Écriture d'une quantité comme espérance, moyenne empirique, biais, variance, erreur quadratique, loi des grands nombres, théorème central limite, intervalles de confiance, choix du nombre de simulations, premiers exemples appliqués, simulation par inversion et acceptation-rejet.

Chapitre 2. Réduction de variance. Variables antithétiques, variables de contrôle, conditionnement, stratification, fonction d'importance, événements rares, efficacité variance-coût.

Chapitre 3. Espérances conditionnelles, régression et Longstaff–Schwartz. Espérance conditionnelle comme projection, régression empirique, programmation dynamique, arrêt optimal discret, options bermudéennes et américaines.

Chapitre 4. Suites à faible discrépance et algorithmes stochastiques. Quasi-Monte-Carlo, suites de Van der Corput, Halton et Sobol, discrépance, Robbins–Monro, Kiefer–Wolfowitz, recherche de zéro et optimisation bruitée.

Références principales

Ces notes s'appuient sur les références classiques du domaine : Lapeyre–Pardoux–Sentis pour le point de vue français et l'insistance sur la fiabilité des estimations, Gobet pour la structure "boîte à outils", estimation d'erreur et simulation, Glasserman pour les exemples financiers et la notion d'efficacité d'un estimateur, et Duflo pour l'introduction aux algorithmes stochastiques.

Table des matières

Plan du cours ii

Références principales ii

1 Moyennes de Monte-Carlo, convergence et intervalles de confiance 1
1.1 L'idée de Monte-Carlo : remplacer un calcul déterministe par une moyenne aléatoire 1
1.1.1 Probabilité, volume et moyenne empirique . . . 1
1.1.2 Quand Monte-Carlo est-il utile ? . . . 2
1.2 Écrire une quantité comme une espérance . . . 3
1.2.1 Intégration sur un cube . . . 3
1.2.2 Changement de densité . . . 3
1.2.3 Une même intégrale, plusieurs estimateurs . . . 4
1.3 Biais, variance et erreur quadratique . . . 6
1.3.1 Ce que l'on mesure réellement . . . 6
1.3.2 Cas de la moyenne empirique . . . 7
1.3.3 Erreur absolue, erreur relative et erreur standard relative . . . 7
1.4 Convergence et approximation normale . . . 9
1.4.1 Les deux résultats probabilistes utilisés . . . 9
1.4.2 Comprendre la normalisation du TCL . . . 9
1.4.3 Quantiles normaux et probabilités d'erreur . . . 10
1.4.4 Un contrôle non asymptotique : Chebyshev et Hoeffding . . . 10
1.5 Variance empirique et intervalles de confiance . . . 11
1.5.1 Estimer la variance inconnue . . . 11
1.5.2 Intervalle de confiance asymptotique . . . 12
1.5.3 Interprétation correcte d'un intervalle de confiance . . . 12
1.5.4 Choisir le nombre de simulations en pratique . . . 13
1.6 Transformation d'estimateurs et méthode delta . . . 14
1.7 Dimension, coût de calcul et fiabilité . . . 15
1.7.1 Pourquoi Monte-Carlo résiste à la dimension . . . 15
1.7.2 Fiabilité : fausse convergence et diagnostics quantitatifs . . . 17
1.8 Exemples appliqués . . . 19
1.8.1 Exemple appliqué : remboursement moyen d'un contrat d'assurance . . . 19
1.8.2 Exemple appliqué : probabilité de ruine sur un an . . . 21
1.8.3 Exemple appliqué : prix d'un call européen . . . 22
1.9 Simulation de variables aléatoires . . . 23
1.9.1 Méthode d'inversion . . . 24
1.9.2 Méthode d'acceptation–rejet . . . 25
1.9.3 Simulation uniforme dans un disque . . . 27
1.10 Ce qu'il faut retenir . . . 29

2 Réduction de variance 31
2.1 Pourquoi réduire la variance ? . . . 31

2.1.1 Variance, coût et précision . . . 32
2.1.2 Plan des méthodes . . . 33
2.2 Variables antithétiques . . . 33
2.2.1 Principe . . . 33
2.3 Variables de contrôle . . . 37
2.3.1 Principe . . . 37
2.3.2 Choix empirique du coefficient . . . 38
2.3.3 Plusieurs variables de contrôle . . . 41
2.3.4 Interprétation géométrique dans L^2 . . . 41
2.4 Conditionnement et formule de Rao–Blackwell . . . 42
2.4.1 Principe . . . 42
2.4.2 Conditionnement et estimateurs de Bernoulli . . . 44
2.5 Stratification . . . 45
2.5.1 Pourquoi stratifier ? . . . 45
2.5.2 Stratification proportionnelle . . . 46
2.5.3 Allocation optimale . . . 47
2.6 Échantillonnage préférentiel . . . 48
2.6.1 Changer la loi de simulation . . . 48
2.6.2 Densité optimale théorique . . . 49
2.6.3 Exemple central : $\mathbb{E}\left(e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}\right)$ . . . 50
2.6.4 Événements rares . . . 51
2.6.5 Erreur relative et événements rares . . . 52
2.6.6 Choisir le paramètre d'une translation gaussienne . . . 53
2.7 Synthèse et choix de méthode . . . 54
2.8 Compléments mathématiques pour aller plus loin . . . 54
2.8.1 Autonormalisation des poids . . . 55
2.8.2 Taille effective d'échantillon . . . 55

3 Espérances conditionnelles, régression et algorithme de Longstaff–Schwartz 57
3.1 Pourquoi les espérances conditionnelles apparaissent . . . 57
3.2 Espérance conditionnelle comme projection L^2 . . . 58
3.3 Approximation par projection sur un espace fini . . . 60
3.3.1 Régression empirique par moindres carrés . . . 61
3.3.2 Le choix des fonctions de base . . . 64
3.4 Quantification et approximation par cellules . . . 64
3.5 Arrêt optimal discret et programmation dynamique . . . 65
3.6 Algorithme de Longstaff–Schwartz . . . 67
3.6.1 Principe mathématique . . . 67
3.6.2 Politique d'exercice et estimation du prix . . . 68
3.6.3 Exemple détaillé : put bermudéen . . . 69
3.7 Erreurs et diagnostics . . . 70
3.7.1 Erreur de discrétisation temporelle . . . 70
3.7.2 Erreur d'approximation fonctionnelle . . . 70
3.7.3 Erreur statistique . . . 70
3.7.4 Erreur numérique . . . 71
3.8 Synthèse . . . 71

4 Suites à faible discrépance et algorithmes stochastiques 72
4.1 Pourquoi remplacer le hasard par des points déterministes ? . . . 72
4.2 Discrépance et équirépartition . . . 73
4.3 Inégalité de Koksma–Hlawka . . . 74
4.4 Suites de Van der Corput et de Halton . . . 76

4.5 Suites de Sobol et dimension effective 77
4.6 Randomisation des suites quasi-Monte-Carlo 79
4.7 Recherche de zéros bruitée : algorithme de Robbins–Monro 80
4.8 Un théorème de convergence projeté 81
4.9 Exemples de Robbins–Monro 82
4.9.1 Estimation récursive d'un quantile 82
4.9.2 Calibration bruitée d'un paramètre 83
4.10 Optimisation bruitée : algorithme de Kiefer–Wolfowitz 83
4.11 Applications de Kiefer–Wolfowitz 86
4.11.1 Réglage d'un paramètre d'importance sampling 86
4.11.2 Optimisation d'une politique simulée 87
4.12 Comparaison des méthodes 87
4.13 Synthèse 87

Chapitre 1

Moyennes de Monte-Carlo, convergence et intervalles de confiance

Mots-clés. Intégrale comme espérance ; moyenne empirique ; estimateur sans biais ; variance ; erreur quadratique moyenne ; loi des grands nombres ; théorème central limite ; approximation normale ; variance empirique ; intervalle de confiance ; demi-largeur d'erreur ; nombre de simulations ; méthode d'inversion ; acceptation-rejet.

Objectifs du chapitre

À l'issue de ce chapitre, on doit savoir :

1. transformer une intégrale ou une quantité probabiliste en espérance ;
2. construire l'estimateur de Monte-Carlo associé et calculer son biais et sa variance ;
3. utiliser la loi des grands nombres et le théorème central limite comme outils numériques ;
4. produire un intervalle de confiance et l'interpréter correctement ;
5. déterminer approximativement combien de simulations sont nécessaires pour une précision donnée ;
6. comprendre pourquoi une même quantité peut avoir plusieurs estimateurs Monte-Carlo, de qualités très différentes ;
7. simuler des lois usuelles à partir de variables uniformes, notamment par inversion et par acceptation–rejet, et justifier mathématiquement ces procédures.

1.1 L'idée de Monte-Carlo : remplacer un calcul déterministe par une moyenne aléatoire

1.1.1 Probabilité, volume et moyenne empirique

L'idée de base de Monte-Carlo est simple : lorsque l'on ne sait pas calculer directement une quantité déterministe, on essaie de l'écrire comme l'espérance d'une variable aléatoire que l'on sait simuler. On répète alors l'expérience un grand nombre de fois, puis on remplace l'espérance par la moyenne observée.

Le premier exemple à garder en tête est celui d'une aire. Soit $A \subset [0,1]^2$. Si U est uniforme sur $[0,1]^2$, alors

$$\mathbb{P}(U \in A) = \text{Aire}(A).$$

Ainsi, pour approximer l'aire de A, il suffit de tirer beaucoup de points uniformément dans le carré et de compter la proportion de points qui tombent dans A. C'est une manière de transformer un problème de géométrie en problème de probabilité.

Idée à retenir

La méthode de Monte-Carlo fait le chemin inverse de la théorie des probabilités. En probabilité, on calcule des probabilités et des espérances à partir d'intégrales. En Monte-Carlo, on utilise des simulations aléatoires pour approcher des intégrales, des probabilités ou des espérances.

Exemple 1.1.1: Calcul de π par tirage dans un carré

On tire $U_1, \dots, U_n$ indépendants uniformes dans le carré $[-1,1]^2$. On note

$$D = \left\{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 \leq 1\right\}.$$

Le carré a aire 4 et le disque a aire π. Donc

$$p = \mathbb{P}\left(U_1 \in D\right) = \frac{\pi}{4}.$$

Un estimateur naturel de p est

$$\widehat{p}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{U_k \in D\}}.$$

On en déduit un estimateur de π :

$$\widehat{\pi}_n = 4\widehat{p}_n.$$

Ici, chaque simulation produit une variable de Bernoulli : elle vaut 1 si le point tombe dans le disque, et 0 sinon. L'estimateur $\widehat{p}_n$ est donc simplement une fréquence empirique.

Ce premier exemple est volontairement très élémentaire, mais il contient déjà toutes les questions importantes du cours :

— pourquoi la méthode converge-t-elle ?

— à quelle vitesse converge-t-elle ?

— comment mesurer l'erreur lorsque l'on ne connaît pas la vraie valeur ?

— comment choisir n pour avoir une précision donnée ?

1.1.2 Quand Monte-Carlo est-il utile ?

En dimension 1, Monte-Carlo est rarement compétitif avec les méthodes déterministes classiques d'intégration numérique. Pour une fonction régulière sur un intervalle, la méthode des trapèzes ou la méthode de Simpson peuvent être beaucoup plus précises à coût égal. L'intérêt de Monte-Carlo apparaît lorsque :

1. la dimension est grande ;
2. le domaine d'intégration est compliqué ;
3. la quantité est naturellement probabiliste ;
4. on ne sait pas écrire l'intégrale explicitement, mais on sait simuler le mécanisme aléatoire sous-jacent ;
5. on veut obtenir en même temps une estimation et une mesure de son erreur.

Commentaire pratique

La méthode de Monte-Carlo converge lentement : l'erreur statistique est typiquement de l'ordre de $1/\sqrt{n}$. Cela signifie que diviser l'erreur par 2 demande environ 4 fois plus de simulations, et gagner une décimale demande environ 100 fois plus de simulations. En revanche, ce taux $1/\sqrt{n}$ ne dépend pas directement de la dimension de l'espace simulé.

1.2 Écrire une quantité comme une espérance

1.2.1 Intégration sur un cube

Commençons par le cas le plus simple. Soit $f\colon [0,1]^d \to \mathbb{R}$ mesurable et intégrable. On veut calculer

$$I = \int_{[0,1]^d} f(x)\ \mathrm{d}x.$$

Si U est uniforme sur $[0,1]^d$, alors

$$I = \mathbb{E}\left(f(U)\right).$$

En tirant $U_1, \ldots, U_n$ indépendants de même loi que U, on obtient l'estimateur

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(U_k).$$

Définition 1.2.1: Estimateur de Monte-Carlo élémentaire

Soit X une variable aléatoire telle que $\mathbb{E}\left(|g(X)|\right) < +\infty$. Pour estimer

$$I = \mathbb{E}\left(g(X)\right),$$

on simule $X_1, \ldots, X_n$ indépendantes de même loi que X, puis on pose

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} g(X_k).$$

On appelle $\widehat{I}_n$ l'estimateur de Monte-Carlo associé à la variable simulée $g(X)$.

L'estimateur dépend donc de deux choix :

— la variable aléatoire X que l'on sait simuler ;

— la fonction g telle que $I = \mathbb{E}\left(g(X)\right)$.

Une même intégrale peut souvent être écrite de plusieurs manières comme une espérance. Ces écritures donnent des estimateurs différents, qui ont la même limite mais pas la même variance.

1.2.2 Changement de densité

La forme la plus générale utile dans ce chapitre est la suivante. Soit p une densité de probabilité sur $\mathbb{R}^d$. Si X a pour densité p, alors

$$\mathbb{E}\left(g(X)\right) = \int_{\mathbb{R}^d} g(x)p(x)\ \mathrm{d}x.$$

Réciproquement, si l'on veut calculer une intégrale

$$I = \int_{\mathbb{R}^d} h(x)\ \mathrm{d}x,$$

et si $p(x) > 0$ sur l'ensemble où $h(x) \neq 0$, on peut écrire

$$I = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h(x)}{p(x)} p(x)\ \mathrm{d}x = \mathbb{E}\left(\frac{h(X)}{p(X)}\right).$$

Proposition 1.2.2: Principe du changement de densité

Soient $h\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ mesurable et p une densité de probabilité. On suppose que $p(x) > 0$ pour presque tout x tel que $h(x) \neq 0$, et que

$$\int_{\mathbb{R}^d} |h(x)| \, \mathrm{d}x < +\infty.$$

Si X a densité p, alors

$$I = \int_{\mathbb{R}^d} h(x) \, \mathrm{d}x = \mathbb{E}\left(\frac{h(X)}{p(X)}\right).$$

Lorsque la variable $h(X)/p(X)$ est de carré intégrable, l'estimateur de Monte-Carlo associé est

$$\widehat{I}_n^p = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \frac{h(X_k)}{p(X_k)}.$$

Démonstration. La formule est simplement la définition de l'espérance sous la loi de densité p :

$$\mathbb{E}\left(\frac{h(X)}{p(X)}\right) = \int_{\mathbb{R}^d} \frac{h(x)}{p(x)} p(x) \, \mathrm{d}x = \int_{\mathbb{R}^d} h(x) \, \mathrm{d}x.$$

□

Point de vigilance

Le choix de p ne change pas la valeur de I, mais il change la variance de l'estimateur. Un mauvais choix de p peut donner un estimateur inutilisable : les simulations existent, l'estimateur est théoriquement correct, mais la variance est tellement grande que le résultat numérique est instable.

1.2.3 Une même intégrale, plusieurs estimateurs

L'exemple suivant est fondamental pour comprendre la méthode. Il ne faut pas le voir comme un simple calcul d'intégrale, mais comme une première rencontre avec une idée centrale : *l'estimateur de Monte-Carlo n'est pas unique.*

Exemple 1.2.3: Deux estimateurs pour une même intégrale

On veut calculer

$$I = \int_0^1 \cos\left(x^3\right) e^{-x}\, \mathrm{d}x.$$

Première écriture : si $U \sim \mathcal{U}([0,1])$, alors

$$I = \mathbb{E}\left(\cos\left(U^3\right) e^{-U}\right).$$

L'estimateur correspondant est

$$\widehat{I}_n^{(1)} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \cos\left(U_k^3\right) e^{-U_k}.$$

Deuxième écriture : si $X \sim \mathcal{E}(1)$, c'est-à-dire si X a densité $x \mapsto e^{-x}\mathbf{1}_{\{x\geq 0\}}$, alors

$$I = \mathbb{E}\left(\cos\left(X^3\right)\mathbf{1}_{\{0\leq X\leq 1\}}\right).$$

L'estimateur correspondant est

$$\widehat{I}_n^{(2)} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \cos\left(X_k^3\right)\mathbf{1}_{\{0\leq X_k\leq 1\}}.$$

Les deux estimateurs convergent vers le même nombre I, mais les variables simulées ne sont pas les mêmes. Pour comparer les deux méthodes, on doit comparer

$$\mathrm{Var}\left(\cos\left(U^3\right) e^{-U}\right) \quad \text{et} \quad \mathrm{Var}\left(\cos\left(X^3\right)\mathbf{1}_{\{0\leq X\leq 1\}}\right).$$

C'est cette variance qui détermine la taille de l'erreur statistique.

Idée à retenir

Dans la première méthode, on tire toujours dans l'intervalle utile $[0,1]$, mais on garde le facteur e^{-U} dans la fonction. Dans la seconde méthode, le facteur e^{-x} est absorbé dans la loi exponentielle, mais certains tirages tombent au-delà de 1 et contribuent alors 0. Aucune des deux méthodes n'est automatiquement meilleure : il faut regarder la variance.

Exemple 1.2.4: Une intégrale sur $[0, +\infty)$

Considérons

$$I = \int_0^{+\infty} \sqrt{x} e^{-x} \, \mathrm{d}x.$$

Une première méthode consiste à reconnaître une loi exponentielle : si $X \sim \mathcal{E}(1)$, alors

$$I = \mathbb{E}\left(\sqrt{X}\right).$$

Une deuxième méthode consiste à utiliser une loi Gamma. Si Y suit la loi Gamma de paramètres $\alpha = 3/2$ et $\theta = 1$, sa densité est

$$p(y) = \frac{1}{\Gamma(3/2)} y^{1/2} e^{-y} \mathbf{1}_{\{y>0\}}.$$

Par conséquent,

$$I = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \mathbb{E}(1) = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2}.$$

Ici la deuxième méthode est dégénérée : si on sait simuler exactement selon la densité proportionnelle à l'intégrande, l'estimateur est constant et sa variance est nulle. En pratique, cette remarque annonce la méthode d'importance du chapitre 2 : la loi idéale est souvent inaccessible, mais elle indique dans quelle région il faut concentrer les tirages.

1.3 Biais, variance et erreur quadratique

1.3.1 Ce que l'on mesure réellement

Un algorithme de Monte-Carlo renvoie un nombre aléatoire. Avant de parler de convergence, il faut donc préciser ce que l'on veut dire par "bon estimateur". On veut qu'il soit proche de la quantité cible I. La distance à I peut être mesurée en moyenne, en variance, en probabilité, ou par un intervalle de confiance.

Définition 1.3.1: Biais, variance, erreur quadratique

Soit $\widehat{I}_n$ un estimateur de I. Son biais est

$$\mathrm{Biais}\left(\widehat{I}_n\right) = \mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right) - I.$$

Sa variance est

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right) = \mathbb{E}\left(\left(\widehat{I}_n - \mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right)\right)^2\right),$$

si cette quantité est finie. Son erreur quadratique moyenne, ou MSE, est

$$\mathrm{MSE}\left(\widehat{I}_n\right) = \mathbb{E}\left(\left(\widehat{I}_n - I\right)^2\right).$$

Proposition 1.3.2: Décomposition biais–variance

Si $\widehat{I}_n$ est de carré intégrable, alors

$$\mathrm{MSE}\left(\widehat{I}_n\right) = \mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right) + \left(\mathrm{Biais}\left(\widehat{I}_n\right)\right)^2.$$

Démonstration. On écrit

$$\widehat{I}_n - I = \left(\widehat{I}_n - \mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right)\right) + \left(\mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right) - I\right).$$

En élevant au carré puis en prenant l'espérance, le terme croisé disparaît car

$$\mathbb{E}\left(\widehat{I}_n - \mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right)\right) = 0.$$

On obtient le résultat. □

1.3.2 Cas de la moyenne empirique

Dans ce chapitre, l'estimateur est presque toujours une moyenne empirique. C'est le cas le plus favorable : il est sans biais et sa variance se calcule explicitement.

Proposition 1.3.3: Biais et variance d'une moyenne de Monte-Carlo

Soient $Y, Y_1, Y_2, \ldots$ des variables aléatoires réelles i.i.d. telles que $\mathbb{E}\left(Y^2\right) < +\infty$. On pose

$$I = \mathbb{E}\left(Y\right), \qquad \sigma^2 = \mathrm{Var}\left(Y\right), \qquad \widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k.$$

Alors

$$\mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right) = I, \qquad \mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{\sigma^2}{n}, \qquad \mathrm{MSE}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Démonstration. Par linéarité de l'espérance,

$$\mathbb{E}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathbb{E}\left(Y_k\right) = I.$$

Par indépendance,

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{1}{n^2}\sum_{k=1}^{n} \mathrm{Var}\left(Y_k\right) = \frac{\sigma^2}{n}.$$

Comme l'estimateur est sans biais, la MSE est égale à la variance. □

Idée à retenir

La variance de la moyenne est divisée par n, mais l'écart-type est seulement divisé par $\sqrt{n}$. C'est pourquoi l'erreur typique d'une méthode de Monte-Carlo est de l'ordre de $1/\sqrt{n}$, et non de l'ordre de $1/n$.

Exemple 1.3.4: Variance de l'estimateur de π

Dans l'exemple du disque, $Y = \mathbf{1}_{\{U \in D\}}$ est une Bernoulli de paramètre $p = \pi/4$. Donc

$$\mathbb{E}\left(Y\right) = p, \qquad \mathrm{Var}\left(Y\right) = p\left(1-p\right).$$

L'estimateur $\widehat{p}_n$ vérifie

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{p}_n\right) = \frac{p\left(1-p\right)}{n}.$$

Comme $\widehat{\pi}_n = 4\widehat{p}_n$, on a

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{\pi}_n\right) = 16\frac{p\left(1-p\right)}{n}.$$

La variance dépend de p, donc de π, qui est précisément inconnu. En pratique, on remplacera p par $\widehat{p}_n$, ou bien on utilisera la borne conservative $p\left(1-p\right) \leq 1/4$.

1.3.3 Erreur absolue, erreur relative et erreur standard relative

Il faut distinguer trois notions qui sont souvent confondues.

Erreur réalisée. Après une simulation, l'erreur absolue est

$$\left|\widehat{I}_n - I\right|.$$

Lorsque $I \neq 0$, l'*erreur relative réalisée* est

$$\frac{\left|\widehat{I}_n - I\right|}{|I|}.$$

Ces deux quantités dépendent de la valeur exacte I. Elles sont donc utiles pour analyser une méthode sur un exemple test où I est connu, mais elles ne sont généralement *pas observables* dans un problème réel : si l'on connaissait I, il n'y aurait précisément rien à estimer.

Échelle probabiliste de l'erreur. Si $\widehat{I}_n$ est sans biais, la taille quadratique typique de l'erreur est mesurée par

$$\sqrt{\mathbb{E}\left[\left(\widehat{I}_n - I\right)^2\right]} = \sqrt{\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right)}.$$

Pour une moyenne de Monte-Carlo,

$$\sqrt{\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right)} = \frac{\sigma}{\sqrt{n}}.$$

On appelle alors *erreur standard relative théorique*

$$\mathrm{RSE}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{\sqrt{\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_n\right)}}{|I|} = \frac{\sigma}{|I|\sqrt{n}}.$$

La variance apparaît donc ici parce que l'on ne parle plus de l'erreur réalisée $\left|\widehat{I}_n - I\right| / |I|$, mais de son *échelle de fluctuation typique*. Sous le TCL,

$$\frac{\widehat{I}_n - I}{I} \approx \frac{\sigma}{I\sqrt{n}} Z, \qquad Z \sim \mathcal{N}(0,1),$$

ce qui relie directement l'erreur relative réalisée à l'erreur standard relative.

En pratique, on remplace les quantités inconnues par leurs estimateurs et on utilise

$$\widehat{\mathrm{RSE}}_n = \frac{S_n}{\left|\widehat{I}_n\right|\sqrt{n}},$$

à condition que $\widehat{I}_n$ ne soit pas trop proche de zéro. La demi-largeur *relative* d'un intervalle normal de niveau $1-\alpha$ est alors approximativement

$$z_{1-\alpha/2}\,\widehat{\mathrm{RSE}}_n.$$

Point de vigilance

Pour une probabilité rare, une petite erreur absolue peut être trompeuse. Si $p = 10^{-6}$, l'estimateur nul a une erreur absolue 10^{-6}, mais une erreur relative réalisée de 100%. De plus, l'erreur standard relative de l'estimateur de Bernoulli vaut approximativement $1/\sqrt{np}$ lorsque p est petit. C'est l'une des raisons pour lesquelles l'échantillonnage préférentiel sera indispensable au chapitre 2.

1.4 Convergence et approximation normale

1.4.1 Les deux résultats probabilistes utilisés

On utilise ici la loi forte des grands nombres et le théorème central limite comme des résultats connus. On les rappelle sous la forme exacte dont on a besoin.

Théorème 1.4.1: Loi forte des grands nombres

Soient $Y, Y_1, Y_2, \dots$ des variables aléatoires réelles i.i.d. telles que $\mathbb{E}(|Y|) < +\infty$. Alors

$$\frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k \longrightarrow \mathbb{E}(Y) \qquad \text{presque sûrement.}$$

Théorème 1.4.2: Théorème central limite

Soient $Y, Y_1, Y_2, \dots$ des variables aléatoires réelles i.i.d. telles que $\mathbb{E}(Y^2) < +\infty$. On pose $I = \mathbb{E}(Y)$ et $\sigma^2 = \mathrm{Var}(Y)$. Si $\sigma^2 > 0$, alors

$$\sqrt{n}\,\frac{\widehat{I}_n - I}{\sigma} \Longrightarrow \mathcal{N}(0,1), \qquad \widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k.$$

Autrement dit,

$$\widehat{I}_n - I \approx \mathcal{N}\left(0, \frac{\sigma^2}{n}\right)$$

pour n grand.

Idée à retenir

La loi forte dit que la moyenne finit par être proche de la vraie espérance. Le TCL dit à quelle échelle elle fluctue autour de cette espérance : les fluctuations sont de taille $\sigma/\sqrt{n}$ et ont approximativement une forme gaussienne.

1.4.2 Comprendre la normalisation du TCL

La formule du TCL peut sembler abstraite. Décomposons-la. On part de l'erreur

$$\widehat{I}_n - I.$$

Sa variance est σ^2/n, donc son écart-type est $\sigma/\sqrt{n}$. Pour obtenir une quantité d'ordre 1, on divise donc par $\sigma/\sqrt{n}$, ce qui donne

$$\frac{\widehat{I}_n - I}{\sigma/\sqrt{n}} = \sqrt{n}\,\frac{\widehat{I}_n - I}{\sigma}.$$

Le TCL affirme que cette quantité ressemble à une normale centrée réduite lorsque n est grand.

Remarque 1.4.3: Notation pratique

Dans les applications, on écrit souvent

$$\widehat{I}_n \approx I + \frac{\sigma}{\sqrt{n}}Z, \qquad Z \sim \mathcal{N}(0,1).$$

Cette écriture n'est pas une égalité en loi exacte. C'est un raccourci pour dire que, pour n grand, la distribution de l'erreur est bien approchée par une normale centrée de variance σ^2/n.

1.4.3 Quantiles normaux et probabilités d'erreur

Soit $Z \sim \mathcal{N}(0,1)$. Les quantiles usuels sont :

Niveau central	$\mathbb{P}(\lvert Z\rvert \le z)$	z	Usage courant
90%	0.90	1.645	intervalle à 90%
95%	0.95	1.96	intervalle à 95%
99%	0.99	2.576	intervalle à 99%

La formule 1.96 vient donc de

$$\mathbb{P}(-1.96 \le Z \le 1.96) \simeq 0.95.$$

En utilisant l'approximation normale, on obtient

$$\mathbb{P}\left(\left|\widehat{I}_n - I\right| \le 1.96\frac{\sigma}{\sqrt{n}}\right) \simeq 0.95.$$

Exemple 1.4.4: Dimensionner n pour une précision donnée

On veut que l'erreur soit inférieure à $\varepsilon > 0$ avec probabilité environ $1-\alpha$. Si $z_{1-\alpha/2}$ désigne le quantile tel que

$$\mathbb{P}\left(|Z| \le z_{1-\alpha/2}\right) = 1-\alpha,$$

l'approximation normale donne la condition

$$z_{1-\alpha/2}\frac{\sigma}{\sqrt{n}} \le \varepsilon.$$

Il suffit donc de prendre

$$n \ge \left(\frac{z_{1-\alpha/2}\sigma}{\varepsilon}\right)^2.$$

Pour une précision $\varepsilon = 0.01$ au niveau 95%, cela donne

$$n \ge \left(\frac{1.96\sigma}{0.01}\right)^2.$$

Si $\sigma = 1$, on obtient environ 38416 simulations.

Point de vigilance

La formule précédente suppose que σ est connu. En général, il ne l'est pas. On effectue donc souvent une première simulation pilote pour estimer σ, puis on choisit n à partir de cette estimation.

1.4.4 Un contrôle non asymptotique : Chebyshev et Hoeffding

Le TCL donne une approximation très utile, mais asymptotique. Il est parfois utile de disposer d'une borne garantie pour tout n, même si elle est moins précise.

Proposition 1.4.5: Inégalité de Chebyshev appliquée à Monte-Carlo

Sous les hypothèses de la proposition 1.3.3, pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\mathbb{P}\left(\left|\widehat{I}_n - I\right| \ge \varepsilon\right) \le \frac{\sigma^2}{n\varepsilon^2}.$$

Démonstration. Il suffit d'appliquer l'inégalité de Chebyshev à la variable $\widehat{I}_n$, dont l'espérance est I et la variance est σ^2/n. □

Théorème 1.4.6: Inégalité de Hoeffding pour les variables bornées

Si $Y_1, \dots, Y_n$ sont i.i.d. et prennent leurs valeurs dans $[a, b]$, et si $I = \mathbb{E}(Y_1)$, alors pour tout $\varepsilon > 0$,

$$\mathbb{P}\left(\left|\widehat{I}_n - I\right| \geq \varepsilon\right) \leq 2\exp\left(-\frac{2n\varepsilon^2}{(b-a)^2}\right).$$

Remarque 1.4.7: Asymptotique ou non asymptotique ?

L'intervalle issu du TCL est souvent beaucoup plus fin, mais il est approximatif. Les inégalités de Chebyshev ou Hoeffding donnent des garanties valables pour tout n, mais souvent pessimistes. En pratique, on utilise très souvent l'intervalle normal, tout en gardant à l'esprit qu'il peut être mauvais pour des variables très asymétriques, très lourdes, ou pour des événements très rares.

1.5 Variance empirique et intervalles de confiance

1.5.1 Estimer la variance inconnue

Dans les formules précédentes, $\sigma^2 = \mathrm{Var}(Y)$ apparaît partout. Or, si l'on ne connaît pas $I = \mathbb{E}(Y)$, on ne connaît généralement pas σ^2 non plus. On l'estime donc à partir des simulations.

Définition 1.5.1: Variance empirique

Soient $Y_1, \dots, Y_n$ des observations réelles. On pose

$$\overline{Y}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k,$$

et

$$S_n^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n}\left(Y_k - \overline{Y}_n\right)^2.$$

La quantité S_n^2 est la variance empirique corrigée. La quantité

$$\mathrm{se}_n = \frac{S_n}{\sqrt{n}}$$

est appelée l'erreur standard estimée de la moyenne.

Proposition 1.5.2: Propriétés de la variance empirique

Si $Y_1, \dots, Y_n$ sont i.i.d. de carré intégrable et de variance σ^2, alors

$$\mathbb{E}\left(S_n^2\right) = \sigma^2.$$

De plus, sous des hypothèses usuelles, notamment $\mathbb{E}(Y^2) < +\infty$, on a

$$S_n^2 \longrightarrow \sigma^2 \qquad \text{presque sûrement.}$$

Démonstration. Pour l'absence de biais, on utilise l'identité

$$\sum_{k=1}^{n}\left(Y_k - \overline{Y}_n\right)^2 = \sum_{k=1}^{n}(Y_k - I)^2 - n\left(\overline{Y}_n - I\right)^2.$$

En prenant l'espérance,

$$\mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{n}(Y_k - I)^2\right) = n\sigma^2,$$

et

$$\mathbb{E}\left(n\left(\overline{Y}_n - I\right)^2\right) = n\,\mathrm{Var}\left(\overline{Y}_n\right) = \sigma^2.$$

Donc

$$\mathbb{E}\left(\sum_{k=1}^{n}\left(Y_k - \overline{Y}_n\right)^2\right) = (n-1)\,\sigma^2,$$

ce qui donne $\mathbb{E}\left(S_n^2\right) = \sigma^2$. La convergence presque sûre découle de la loi forte appliquée à Y_k et à Y_k^2. □

1.5.2 Intervalle de confiance asymptotique

En remplaçant σ par S_n dans le TCL, on obtient l'intervalle utilisé en pratique.

Théorème 1.5.3: TCL studentisé et intervalle de confiance

Soient $Y, Y_1, Y_2, \ldots$ i.i.d. avec $\mathbb{E}\left(Y^2\right) < +\infty$ et $\sigma^2 = \mathrm{Var}\left(Y\right) > 0$. Alors

$$\sqrt{n}\,\frac{\overline{Y}_n - I}{S_n} \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0,1\right).$$

Ainsi, pour n grand, un intervalle de confiance asymptotique de niveau $1-\alpha$ pour I est

$$\left[\overline{Y}_n - z_{1-\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}, \overline{Y}_n + z_{1-\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}\right].$$

En particulier, au niveau 95%, on utilise souvent

$$\overline{Y}_n \pm 1.96\frac{S_n}{\sqrt{n}}.$$

Démonstration. Le TCL donne

$$\sqrt{n}\,\frac{\overline{Y}_n - I}{\sigma} \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0,1\right).$$

Comme $S_n \to \sigma$ presque sûrement, on a $\sigma/S_n \to 1$ en probabilité. Le résultat découle du théorème de Slutsky. □

Commentaire pratique

Dans un rapport numérique, il ne suffit pas de donner $\overline{Y}_n$. Il faut donner au minimum n, l'estimation $\overline{Y}_n$, l'erreur standard $S_n/\sqrt{n}$, et l'intervalle de confiance. Sans erreur standard, un résultat Monte-Carlo est incomplet.

1.5.3 Interprétation correcte d'un intervalle de confiance

Un intervalle de confiance à 95% ne signifie pas que, conditionnellement aux simulations déjà faites, la probabilité que I appartienne à l'intervalle est 95%. La quantité I est fixe. L'intervalle est aléatoire parce qu'il dépend des simulations.

L'interprétation correcte est la suivante : si l'on répétait toute l'expérience de simulation un grand nombre de fois, alors environ 95% des intervalles construits par cette procédure contiendraient la vraie valeur I.

Exemple 1.5.4: Que signifie $\widehat{I}_n = 0.732 \pm 0.006$?

Supposons qu'une simulation donne

$$\overline{Y}_n = 0.732, \qquad 1.96\frac{S_n}{\sqrt{n}} = 0.006.$$

On écrit parfois

$$I \simeq 0.732 \pm 0.006 \qquad \text{au niveau } 95\%.$$

Cela signifie que l'intervalle

$$[0.726, 0.738]$$

est obtenu par une procédure qui couvre la vraie valeur environ 95% du temps lorsque n est grand. Cela ne signifie pas que toutes les valeurs de l'intervalle sont aussi plausibles, ni que l'erreur réelle est nécessairement inférieure à 0.006.

1.5.4 Choisir le nombre de simulations en pratique

On souhaite souvent obtenir une demi-largeur d'intervalle inférieure à ε, c'est-à-dire

$$z_{1-\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}} \leq \varepsilon.$$

Comme S_n n'est connu qu'après simulation, une procédure pratique est :

Étape 1. faire une simulation pilote avec n_0 tirages ;

Étape 2. calculer S_{n_0} ;

Étape 3. choisir

$$n = \left\lceil \left(\frac{z_{1-\alpha/2} S_{n_0}}{\varepsilon} \right)^2 \right\rceil ;$$

Étape 4. relancer une simulation avec ce nombre de tirages, ou compléter les tirages déjà effectués.

Algorithme 1.5.5: Procédure Monte-Carlo avec intervalle de confiance

Entrée : nombre de simulations n, niveau $1-\alpha$, fonction simulable $Y = g(X)$.

1. Simuler $Y_1, \ldots, Y_n$.

2. Calculer

$$\overline{Y}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k.$$

3. Calculer

$$S_n^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{k=1}^{n} \left(Y_k - \overline{Y}_n\right)^2.$$

4. Calculer la demi-largeur

$$\Delta_n = z_{1-\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}.$$

5. Retourner $\overline{Y}_n$ et l'intervalle

$$\left[\overline{Y}_n - \Delta_n, \overline{Y}_n + \Delta_n\right].$$

Point de vigilance

Lorsque les Y_k ont une distribution très asymétrique ou à queue lourde, la variance empirique peut être instable. Dans ce cas, un intervalle normal peut être trompeur pour des valeurs de n raisonnables. Il faut regarder les sorties numériques : histogramme des Y_k, présence de valeurs extrêmes, stabilité de S_n, répétitions indépendantes.

1.6 Transformation d'estimateurs et méthode delta

Dans plusieurs exemples, on estime d'abord une espérance θ, puis on applique une fonction φ. Par exemple, on estime $p = \pi/4$, puis on renvoie $4p$. Plus généralement, on peut vouloir estimer $\varphi(\theta)$.

Théorème 1.6.1: Méthode delta en dimension un

Soit $\widehat{\theta}_n$ un estimateur tel que

$$\sqrt{n}\left(\widehat{\theta}_n - \theta\right) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \tau^2\right).$$

Soit $\varphi\colon \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ dérivable en θ. Alors

$$\sqrt{n}\left(\varphi\left(\widehat{\theta}_n\right) - \varphi(\theta)\right) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \left(\varphi'(\theta)\right)^2 \tau^2\right).$$

Démonstration. L'hypothèse

$$\sqrt{n}\left(\widehat{\theta}_n - \theta\right) \Longrightarrow \mathcal{N}(0, \tau^2)$$

implique en particulier que $\sqrt{n}(\widehat{\theta}_n - \theta) = O_{\mathbb{P}}(1)$, donc que $\widehat{\theta}_n \to \theta$ en probabilité. Par différentiabilité de φ en θ, il existe une fonction $r(h) \to 0$ lorsque $h \to 0$ telle que

$$\varphi(\theta + h) - \varphi(\theta) = \varphi'(\theta)h + h\, r(h).$$

En prenant $h = \widehat{\theta}_n - \theta$ et en multipliant par $\sqrt{n}$,

$$\begin{aligned}\sqrt{n}\left(\varphi(\widehat{\theta}_n) - \varphi(\theta)\right) &= \varphi'(\theta)\sqrt{n}\left(\widehat{\theta}_n - \theta\right) \\ &\quad + \sqrt{n}\left(\widehat{\theta}_n - \theta\right) r\left(\widehat{\theta}_n - \theta\right).\end{aligned}$$

Le premier facteur du second terme est $O_{\mathbb{P}}(1)$, tandis que le second converge vers 0 en probabilité. Le produit est donc $o_{\mathbb{P}}(1)$. Le théorème de Slutsky donne alors

$$\sqrt{n}\left(\varphi(\widehat{\theta}_n) - \varphi(\theta)\right) \Longrightarrow \varphi'(\theta) Z, \qquad Z \sim \mathcal{N}(0, \tau^2),$$

ce qui est la conclusion annoncée. □

Exemple 1.6.2: Intervalle de confiance pour π

On a $\widehat{\pi}_n = 4\widehat{p}_n$. Ici $\varphi(p) = 4p$, donc $\varphi'(p) = 4$. Comme

$$\sqrt{n}\,(\widehat{p}_n - p) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, p\,(1-p)\right),$$

on obtient

$$\sqrt{n}\,(\widehat{\pi}_n - \pi) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, 16p\,(1-p)\right).$$

Un intervalle de confiance approché à 95% est donc

$$\widehat{\pi}_n \pm 1.96 \times 4\sqrt{\frac{\widehat{p}_n\,(1-\widehat{p}_n)}{n}}.$$

En utilisant la borne $p\,(1-p) \leq 1/4$, on obtient la demi-largeur conservative

$$1.96 \times 4\sqrt{\frac{1}{4n}} = \frac{3.92}{\sqrt{n}}.$$

Pour obtenir une demi-largeur au plus 0.01, cette borne donne

$$n \geq \left(\frac{3.92}{0.01}\right)^2 = 153664.$$

C'est beaucoup pour seulement deux décimales : cet exemple montre la lenteur de Monte-Carlo en dimension faible.

1.7 Dimension, coût de calcul et fiabilité

1.7.1 Pourquoi Monte-Carlo résiste à la dimension

Supposons que l'on veuille calculer

$$I_d = \int_{[0,1]^d} f(x)\ \mathrm{d}x.$$

La méthode de Monte-Carlo consiste à tirer $U_1, \ldots, U_n$ indépendants et uniformes sur $[0,1]^d$, puis à prendre

$$\widehat{I}_{n,d} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(U_k).$$

Si $\mathrm{Var}(f(U_1)) = \sigma_d^2 < +\infty$, alors

$$\mathrm{Var}(\widehat{I}_{n,d}) = \frac{\sigma_d^2}{n}, \qquad \mathrm{se}(\widehat{I}_{n,d}) = \frac{\sigma_d}{\sqrt{n}}.$$

Le taux statistique $n^{-1/2}$ ne contient pas explicitement la dimension d. Cela ne signifie pas que la dimension est sans effet : la constante σ_d, le coût de simulation d'un point de $\mathbb{R}^d$ et le coût d'évaluation de f peuvent tous croître avec d. Le point important est plus précis : *le nombre de points n'est pas forcé d'être le produit d'un nombre de points par direction.*

Pour comprendre le contraste avec une grille, il est utile de faire un calcul complet.

Proposition 1.7.1: Erreur d'une grille cartésienne pour une fonction lipschitzienne

Supposons que $f : [0,1]^d \to \mathbb{R}$ soit L-lipschitzienne pour la norme euclidienne :

$$|f(x) - f(y)| \leq L \|x - y\|_2 .$$

On découpe chaque coordonnée en m intervalles égaux, ce qui donne $n = m^d$ cubes, et on évalue f au centre x_j de chaque cube. L'approximation

$$Q_m(f) = \frac{1}{m^d} \sum_{j=1}^{m^d} f(x_j)$$

vérifie

$$|Q_m(f) - I_d| \leq \frac{L\sqrt{d}}{2m} = \frac{L\sqrt{d}}{2}\, n^{-1/d}.$$

Démonstration. Chaque petit cube a volume m^{-d} et côté $1/m$. Si x_j est son centre, tout point x de ce cube vérifie

$$\|x - x_j\|_2 \leq \frac{\sqrt{d}}{2m}.$$

Par l'hypothèse de Lipschitz,

$$|f(x) - f(x_j)| \leq \frac{L\sqrt{d}}{2m}.$$

En intégrant sur chaque cube puis en sommant les m^d contributions,

$$\begin{aligned} |I_d - Q_m(f)| &= \left| \sum_j \int_{Q_j} (f(x) - f(x_j)) \, \mathrm{d}x \right| \\ &\leq \sum_j \int_{Q_j} |f(x) - f(x_j)| \, \mathrm{d}x \\ &\leq m^d \times m^{-d} \times \frac{L\sqrt{d}}{2m} = \frac{L\sqrt{d}}{2m}. \end{aligned}$$

Comme $n = m^d$, on a $m = n^{1/d}$, d'où la dernière écriture. □

Cette borne met en évidence la *malédiction de la dimension*. Avec cette régularité minimale, une grille cartésienne a un taux $n^{-1/d}$. Pour obtenir une erreur au plus ε, il faut donc, au niveau de cette borne,

$$n \geq \left(\frac{L\sqrt{d}}{2\varepsilon} \right)^d .$$

Même avec des formules déterministes d'ordre plus élevé, le phénomène tensoriel demeure : si l'erreur en une dimension est de l'ordre de m^{-r}, une règle produit en dimension d conduit typiquement à une dépendance de type $n^{-r/d}$ lorsque $n = m^d$.

Exemple 1.7.2: Comparaison quantitative : grille contre Monte-Carlo

Prenons $d = 10$, une fonction $f : [0,1]^{10} \to [0,1]$ qui est 1-lipschitzienne, et visons une erreur $\varepsilon = 10^{-2}$.
Pour la grille précédente, la garantie déterministe exige

$$\frac{\sqrt{10}}{2m} \leq 10^{-2},$$

donc $m \geq 159$ points par direction. Le nombre total d'évaluations est alors

$$n_{\text{grille}} = 159^{10} \simeq 1.03 \times 10^{22}.$$

Pour Monte-Carlo, comme $0 \leq f(U) \leq 1$, l'inégalité de Hoeffding donne, pour tout n,

$$\mathbb{P}\left(\left|\widehat{I}_{n,10} - I_{10}\right| \geq 10^{-2}\right) \leq 2\exp\left(-2n \times 10^{-4}\right).$$

Pour rendre cette probabilité inférieure à 5%, il suffit que

$$n \geq \frac{\log 40}{2 \times 10^{-4}} \simeq 18445.$$

Les deux garanties ne sont pas de même nature : la grille fournit ici une borne déterministe uniforme sur toute la classe lipschitzienne considérée, tandis que Monte-Carlo fournit une garantie probabiliste. Le contraste numérique explique néanmoins pourquoi les grilles tensorielles deviennent inutilisables très rapidement lorsque d augmente.

Idée à retenir

Le message n'est pas que Monte-Carlo devient *meilleur pour toute fonction* dès que d est grand. Le message est que son taux statistique $n^{-1/2}$ ne se transforme pas en $n^{-1/d}$. La dimension se retrouve dans les constantes et dans le coût d'une simulation, mais pas sous la forme d'une explosion tensorielle m^d.

1.7.2 Fiabilité : fausse convergence et diagnostics quantitatifs

Une simulation Monte-Carlo peut donner visuellement l'impression que les résultats "se stabilisent" alors que l'erreur réelle reste grande. Il faut donc distinguer un théorème de convergence d'un diagnostic numérique à taille finie.

Si $Y_1, Y_2, \ldots$ sont i.i.d. avec $\mathbb{E}(Y^2) < \infty$, alors

$$\overline{Y}_n \longrightarrow I = \mathbb{E}(Y) \quad \text{et} \quad S_n^2 \longrightarrow \sigma^2 = \mathrm{Var}(Y) \qquad \text{p.s.}$$

Ces convergences donnent un sens asymptotique précis à la stabilisation. En revanche, observer que deux valeurs successives sont proches n'est jamais, à lui seul, une preuve que l'on est proche de I.

Contrôler la moyenne lorsque l'on double le nombre de tirages. Posons

$$A_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k, \qquad B_n = \frac{1}{n}\sum_{k=n+1}^{2n} Y_k.$$

Alors A_n et B_n sont indépendantes, de même moyenne I, et

$$\overline{Y}_{2n} = \frac{A_n + B_n}{2}.$$

Par conséquent,

$$\overline{Y}_{2n} - \overline{Y}_n = \frac{B_n - A_n}{2}, \qquad \mathrm{Var}\left(\overline{Y}_{2n} - \overline{Y}_n\right) = \frac{\sigma^2}{2n}.$$

Sous le TCL,

$$D_n = \frac{\overline{Y}_{2n} - \overline{Y}_n}{S_{2n}/\sqrt{2n}} \approx \mathcal{N}(0,1).$$

Ainsi, une variation de la moyenne de plusieurs erreurs standards lorsqu'on double n est un signal d'alerte. À l'inverse, une petite valeur de D_n est rassurante, mais ne constitue pas une garantie absolue : elle peut simplement signifier qu'aucune observation extrême n'est encore apparue.

Contrôler la variance empirique. Sous la seule hypothèse $\mathbb{E}(Y^2) < \infty$, on sait que $S_n^2 \to \sigma^2$ presque sûrement. Pour quantifier ses fluctuations, il faut davantage. Si

$$\mu_4 = \mathbb{E}\left[(Y - I)^4\right] < \infty,$$

alors

$$\sqrt{n}\left(S_n^2 - \sigma^2\right) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \mu_4 - \sigma^4\right).$$

Une grande valeur de μ_4 signifie donc que la variance empirique elle-même est difficile à estimer. Si le quatrième moment est infini, ce diagnostic asymptotique n'est plus disponible.

En pratique, on peut compléter le suivi des valeurs cumulées par des *répétitions indépendantes*. Si l'on lance B simulations indépendantes de taille n, avec moyennes $M_1, \ldots, M_B$, les M_b doivent fluctuer à l'échelle $\sigma/\sqrt{n}$. Une dispersion entre répétitions nettement supérieure aux erreurs standards annoncées révèle un problème de queue lourde, de dépendance, de bogue de simulation ou d'approximation normale inadéquate.

Exemple 1.7.3: Fausse impression de convergence avec une loi de Pareto

Soit Y de loi de Pareto de paramètre $\alpha = 3/2$ sur $[1, +\infty)$, donc

$$\mathbb{P}(Y > x) = x^{-3/2}, \qquad x \geq 1.$$

On a

$$\mathbb{E}(Y) = \frac{\alpha}{\alpha - 1} = 3,$$

mais $\mathbb{E}(Y^2) = +\infty$: la variance n'existe pas et le TCL usuel ne s'applique pas.
Avec $n = 10^4$ tirages, la probabilité de ne voir *aucune* observation supérieure à 1000 vaut

$$\mathbb{P}\left(\max_{1 \leq k \leq n} Y_k \leq 1000\right) = \left(1 - 1000^{-3/2}\right)^{10000} \simeq 0.73.$$

Dans près de trois simulations sur quatre, un échantillon de taille 10^4 ne voit donc même pas cette partie de la queue. Pourtant, une seule observation de taille 1000 modifie la moyenne d'environ $1000/10^4 = 0.1$, et une observation de taille 10^4 la modifie d'ordre 1. Une courbe de moyenne cumulée peut ainsi paraître plate pendant longtemps, puis faire un saut brutal.

Commentaire pratique

Un diagnostic raisonnable consiste à :

1. suivre $\overline{Y}_n$, S_n et $S_n/\sqrt{n}$ sur une grille géométrique de tailles $n, 2n, 4n, \ldots$;
2. comparer les changements de moyenne à l'échelle de l'erreur standard, par exemple via D_n ci-dessus ;
3. effectuer plusieurs répétitions indépendantes de la simulation complète ;
4. inspecter l'histogramme, les quantiles élevés et le maximum des Y_k ;
5. vérifier que l'erreur standard annoncée diminue approximativement comme $n^{-1/2}$ lorsque les hypothèses du TCL sont plausibles.

Le mot "stabilité" doit toujours être compris comme ce type de diagnostic quantifié, et non comme une simple impression visuelle.

1.8 Exemples appliqués

1.8.1 Exemple appliqué : remboursement moyen d'un contrat d'assurance

On modélise le montant annuel de sinistre d'un assuré par une variable aléatoire $L \geq 0$. Un contrat prévoit une franchise $d > 0$ et un plafond annuel $M > d$. Le remboursement de l'assureur est

$$R = \min\left((L-d)_+, M-d\right).$$

Il est utile de réécrire cette fonction sous une forme qui permettra des calculs :

$$R = (L-d)_+ - (L-M)_+.$$

En effet, les deux membres valent respectivement 0 si $L \leq d$, $L-d$ si $d < L < M$, et $M-d$ si $L \geq M$.

La prime pure est

$$I = \mathbb{E}(R).$$

Pour toute variable $L \geq 0$ et tout $a \geq 0$, la formule des queues donne

$$\mathbb{E}\left[(L-a)_+\right] = \int_a^{+\infty} \mathbb{P}(L > x)\, \mathrm{d}x.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned} I &= \mathbb{E}\left[(L-d)_+\right] - \mathbb{E}\left[(L-M)_+\right] \\ &= \int_d^M \mathbb{P}(L > x)\, \mathrm{d}x. \end{aligned}$$

Cette formule est exacte. Elle montre aussi pourquoi le calcul analytique peut être difficile : il faut connaître la fonction de survie de la perte agrégée L sur tout l'intervalle $[d, M]$.

Exemple 1.8.1: Modèle fréquence–sévérité

Supposons que

$$L = \sum_{j=1}^{N} Z_j,$$

où $N \sim \mathcal{P}(\lambda)$ est le nombre annuel de sinistres et où les sévérités Z_j sont i.i.d. lognormales, indépendantes de N. Écrivons

$$\log Z_1 \sim \mathcal{N}(\mu, \tau^2).$$

Alors

$$\mathbb{E}(Z_1) = e^{\mu+\tau^2/2}, \qquad \mathbb{E}(Z_1^2) = e^{2\mu+2\tau^2}.$$

Par conditionnement par N,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(L) &= \mathbb{E}(\mathbb{E}(L \mid N)) = \mathbb{E}(N)\mathbb{E}(Z_1) = \lambda e^{\mu+\tau^2/2},\\ \mathrm{Var}(L) &= \mathbb{E}(\mathrm{Var}(L \mid N)) + \mathrm{Var}(\mathbb{E}(L \mid N))\\ &= \lambda \,\mathrm{Var}(Z_1) + \lambda \mathbb{E}(Z_1)^2 = \lambda \mathbb{E}(Z_1^2) = \lambda e^{2\mu+2\tau^2}.\end{aligned}$$

Ces deux moments sont explicites, mais la loi de la somme composée L n'a pas, en général, de fonction de répartition fermée simple. La formule

$$I = \int_d^M \mathbb{P}(L > x)\, \mathrm{d}x$$

reste donc difficile à évaluer analytiquement.
La simulation est directe : pour chaque réplication k, on simule N_k, puis N_k sévérités et

$$L_k = \sum_{j=1}^{N_k} Z_{k,j}, \qquad R_k = \min\left((L_k - d)_+, M - d\right).$$

L'estimateur

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} R_k$$

est sans biais. Surtout, le plafond donne immédiatement

$$0 \le R \le M - d.$$

Par l'inégalité de Popoviciu,

$$\mathrm{Var}(R) \le \frac{(M-d)^2}{4},$$

donc

$$\mathrm{se}(\widehat{I}_n) = \frac{\sqrt{\mathrm{Var}(R)}}{\sqrt{n}} \le \frac{M-d}{2\sqrt{n}}.$$

Ainsi, même si L peut avoir une distribution très étalée, le remboursement plafonné possède toujours une variance finie et contrôlée.

Idée à retenir

Cet exemple montre exactement ce que Monte-Carlo achète : on remplace le calcul d'une loi composée et d'une intégrale de queue par une simulation du mécanisme économique lui-même. En contrepartie, on obtient une erreur statistique qu'il faut quantifier sur la variable effectivement moyennée, ici R, et non sur la perte brute L.

1.8.2 Exemple appliqué : probabilité de ruine sur un an

Soit L la perte annuelle d'un portefeuille et K le capital disponible. La probabilité de ruine sur un an est

$$p = \mathbb{P}(L > K) = \mathbb{E}\left(\mathbf{1}_{\{L>K\}}\right).$$

On simule $L_1, \dots, L_n$ et on pose

$$Y_k = \mathbf{1}_{\{L_k>K\}}.$$

Les Y_k sont i.i.d. de loi Bernoulli(p), et

$$\widehat{p}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k.$$

On a exactement

$$\mathbb{E}(\widehat{p}_n) = p, \qquad \mathrm{Var}(\widehat{p}_n) = \frac{p(1-p)}{n}.$$

La quantité

$$\frac{\sqrt{\mathrm{Var}(\widehat{p}_n)}}{p} = \sqrt{\frac{1-p}{np}}$$

est l'*erreur standard relative*, et non l'erreur relative réalisée $|\widehat{p}_n - p|/p$. Elle mesure l'échelle typique de cette dernière. Lorsque $p \ll 1$,

$$\mathrm{RSE}(\widehat{p}_n) \simeq \frac{1}{\sqrt{np}}.$$

Ainsi, pour viser une erreur standard relative de 10%, il faut approximativement

$$\frac{1}{\sqrt{np}} \leq 0.1 \quad \Longleftrightarrow \quad n \gtrsim \frac{100}{p}.$$

Pour $p = 10^{-5}$, cela représente environ 10^7 simulations. Pour 5%, il faut environ 4×10^7 simulations.

On peut également calculer la probabilité de ne voir *aucune* ruine. Le nombre

$$N_n = \sum_{k=1}^{n} Y_k$$

suit une loi binomiale $\mathcal{B}(n, p)$, donc

$$\mathbb{P}(N_n = 0) = (1-p)^n \simeq e^{-np}$$

lorsque p est petit. Si $p = 10^{-5}$ et $n = 10^6$, on a $np = 10$ et

$$\mathbb{P}(N_n = 0) \simeq e^{-10} \simeq 4.5 \times 10^{-5}.$$

Le risque de ne rien observer est déjà faible, mais le nombre moyen de ruines observées n'est que 10, et l'erreur standard relative reste

$$\frac{1}{\sqrt{10}} \simeq 31.6\%.$$

Voir l'événement quelques fois ne suffit donc pas à l'estimer précisément.

Point de vigilance

L'estimation naïve des probabilités rares est un problème structurel : à précision relative fixée, le coût croît comme $1/p$. Le programme peut aussi renvoyer 0, ce qui signifie seulement qu'aucun événement n'a été observé. Le chapitre 2 cherchera des estimateurs dont la variance relative reste contrôlée lorsque $p \to 0$.

1.8.3 Exemple appliqué : prix d'un call européen

On considère le modèle de Black–Scholes sous probabilité risque-neutre :

$$S_T = S_0 \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)T + \sigma\sqrt{T}\,Z\right), \qquad Z \sim \mathcal{N}(0,1).$$

Le prix à l'instant 0 d'un call européen de maturité T et de strike K est

$$C = e^{-rT}\mathbb{E}\left[(S_T - K)_+\right].$$

Posons

$$d_2 = \frac{\log(S_0/K) + (r - \sigma^2/2)T}{\sigma\sqrt{T}}, \qquad d_1 = d_2 + \sigma\sqrt{T},$$

et notons Φ la fonction de répartition de $\mathcal{N}(0,1)$. L'événement $\{S_T > K\}$ est équivalent à $\{Z > -d_2\}$, donc

$$\mathbb{P}(S_T > K) = \Phi(d_2).$$

De plus,

$$\mathbb{E}\left[S_T \mathbf{1}_{\{S_T > K\}}\right] = S_0 e^{(r-\sigma^2/2)T}\mathbb{E}\left[e^{\sigma\sqrt{T}Z}\mathbf{1}_{\{Z > -d_2\}}\right].$$

La complétion du carré donne, pour tout $a \in \mathbb{R}$,

$$e^{az}\frac{e^{-z^2/2}}{\sqrt{2\pi}} = e^{a^2/2}\frac{e^{-(z-a)^2/2}}{\sqrt{2\pi}},$$

donc

$$\mathbb{E}\left[e^{aZ}\mathbf{1}_{\{Z>b\}}\right] = e^{a^2/2}\Phi(a-b).$$

Avec $a = \sigma\sqrt{T}$ et $b = -d_2$, on obtient

$$\mathbb{E}\left[S_T \mathbf{1}_{\{S_T > K\}}\right] = S_0 e^{rT}\Phi(d_1).$$

Ainsi

$$\begin{aligned} C &= e^{-rT}\left(\mathbb{E}\left[S_T\mathbf{1}_{\{S_T>K\}}\right] - K\mathbb{P}(S_T > K)\right) \\ &= S_0\Phi(d_1) - Ke^{-rT}\Phi(d_2), \end{aligned}$$

ce qui fournit ici une valeur de référence exacte pour contrôler le code Monte-Carlo.

Pour la simulation, on tire $Z_1, \ldots, Z_n$, puis

$$S_T^{(k)} = S_0 \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)T + \sigma\sqrt{T}Z_k\right), \qquad Y_k = e^{-rT}(S_T^{(k)} - K)_+.$$

L'estimateur

$$\widehat{C}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k$$

est sans biais pour C.

On peut même calculer sa variance théorique. Plus généralement, pour $q > 0$,

$$\mathbb{E}\left[S_T^q \mathbf{1}_{\{S_T>K\}}\right] = S_0^q \exp\left(qrT + \frac{q(q-1)}{2}\sigma^2 T\right)\Phi\left(d_2 + q\sigma\sqrt{T}\right).$$

Pour $q = 2$,

$$\mathbb{E}(Y^2) = e^{-2rT}\Big[S_0^2 e^{2rT+\sigma^2 T}\Phi(d_2 + 2\sigma\sqrt{T}) - 2KS_0 e^{rT}\Phi(d_1) + K^2\Phi(d_2)\Big],$$

et

$$\mathrm{Var}(Y) = \mathbb{E}(Y^2) - C^2, \qquad \mathrm{Var}(\widehat{C}_n) = \frac{\mathrm{Var}(Y)}{n}.$$

En pratique, on remplace $\mathrm{Var}(Y)$ par la variance empirique S_n^2.

Exemple 1.8.2: Lecture numérique d'un prix Monte-Carlo

Supposons que l'on obtienne, avec $n = 100000$ simulations,

$$\widehat{C}_n = 10.46, \qquad S_n = 14.90.$$

L'erreur standard estimée est

$$\frac{S_n}{\sqrt{n}} = \frac{14.90}{\sqrt{100000}} \simeq 0.0471.$$

La demi-largeur à 95% est

$$1.96 \times 0.0471 \simeq 0.0923.$$

On annoncera donc

$$C \simeq 10.46 \pm 0.09 \qquad \text{au niveau } 95\%.$$

Si l'on veut une demi-largeur deux fois plus petite sans changer d'estimateur, il faut multiplier n approximativement par 4, puisque la demi-largeur est proportionnelle à $n^{-1/2}$.

Commentaire pratique

Dans cet exemple, la formule fermée de Black–Scholes existe : elle permet de vérifier le biais numérique et la couverture des intervalles de confiance. Pour un payoff dépendant de toute la trajectoire, la même construction Monte-Carlo reste valable alors que la formule fermée disparaît. C'est là que la méthode devient réellement utile.

1.9 Simulation de variables aléatoires

Le schéma de Monte-Carlo suppose que l'on sait produire des variables aléatoires de la loi désirée. Mathématiquement, on prend comme primitive une suite de variables indépendantes

$$U_1, U_2, \ldots \sim \mathcal{U}([0,1]).$$

Un algorithme de simulation consiste ensuite à transformer une ou plusieurs de ces variables uniformes pour obtenir une variable de loi cible. La qualité du générateur pseudo-aléatoire utilisé sur ordinateur est une question numérique distincte ; dans ce cours, on raisonne d'abord comme si les U_k étaient parfaitement indépendantes et uniformes.

Deux mécanismes fondamentaux sont étudiés ici :

— *l'inversion*, qui transforme directement une uniforme par la fonction quantile ;

— *l'acceptation–rejet*, qui propose une valeur sous une loi facile à simuler puis la conserve avec une probabilité choisie pour corriger la loi.

1.9.1 Méthode d'inversion

Théorème 1.9.1: Méthode d'inversion

Soit F une fonction de répartition sur $\mathbb{R}$. Pour $u \in (0,1)$, on définit l'inverse généralisée

$$F^{-1}(u) = \inf\{x \in \mathbb{R} : F(x) \geq u\}.$$

Si $U \sim \mathcal{U}([0,1])$, alors $X = F^{-1}(U)$ a pour fonction de répartition F.

La propriété clé est l'équivalence suivante, valable pour tout $u \in (0,1)$ et tout $x \in \mathbb{R}$:

$$F^{-1}(u) \leq x \quad \Longleftrightarrow \quad u \leq F(x). \tag{1.1}$$

C'est précisément cette équivalence qui remplace l'identité évidente $F^{-1}(u) \leq x \Leftrightarrow u \leq F(x)$ du cas strictement croissant et continu.

Démonstration. Fixons $u \in (0,1)$ et posons

$$A_u = \{y \in \mathbb{R} : F(y) \geq u\}.$$

Comme $F(y) \to 1$ lorsque $y \to +\infty$, l'ensemble A_u est non vide, et $F^{-1}(u) = \inf A_u$.

Si $u \leq F(x)$, alors $x \in A_u$, donc immédiatement

$$F^{-1}(u) = \inf A_u \leq x.$$

Réciproquement, supposons $F^{-1}(u) \leq x$. Si $x > F^{-1}(u)$, par définition de l'infimum il existe $y \in A_u$ tel que $y < x$. Comme F est croissante,

$$F(x) \geq F(y) \geq u.$$

Si $x = F^{-1}(u)$, on applique l'argument précédent à $x + 1/m$: pour tout $m \geq 1$,

$$F(x + 1/m) \geq u.$$

La continuité à droite d'une fonction de répartition donne alors

$$F(x) = \lim_{m \to \infty} F(x + 1/m) \geq u.$$

L'équivalence (1.1) est démontrée.

En prenant maintenant $u = U$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(F^{-1}(U) \leq x) &= \mathbb{P}(U \leq F(x)) \\ &= F(x), \end{aligned}$$

car $F(x) \in [0,1]$ et U est uniforme sur $[0,1]$. Ainsi $F^{-1}(U)$ a bien pour fonction de répartition F. □

Remarque 1.9.2: Le cas discret est inclus

Aucune continuité ni densité n'est requise. Si X prend les valeurs $x_1 < \cdots < x_m$ avec probabilités $p_1, \ldots, p_m$, et si

$$q_j = \sum_{i=1}^{j} p_i,$$

alors

$$F^{-1}(U) = x_j \quad \text{lorsque} \quad q_{j-1} < U \leq q_j.$$

En particulier, si $B \sim \text{Bernoulli}(p)$, on peut simuler

$$B = \mathbf{1}_{\{U \leq p\}}.$$

Ainsi, les simulations de Bernoulli utilisées à plusieurs reprises dans ce chapitre sont elles-mêmes obtenues à partir d'une uniforme.

Exemple 1.9.3: Simulation d'une exponentielle

Si $X \sim \mathcal{E}(\lambda)$, alors

$$F(x) = 1 - e^{-\lambda x}, \qquad x \geq 0.$$

Pour $u \in (0,1)$, l'équation $u = F(x)$ donne

$$\begin{aligned} u &= 1 - e^{-\lambda x}, \\ e^{-\lambda x} &= 1 - u, \\ x &= -\frac{1}{\lambda}\log(1-u). \end{aligned}$$

Comme $1 - U$ a la même loi que U, on peut utiliser la formule plus simple

$$X = -\frac{1}{\lambda}\log U.$$

Vérifions directement la loi obtenue. Pour $x \geq 0$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(-\frac{1}{\lambda}\log U \leq x\right) &= \mathbb{P}\left(\log U \geq -\lambda x\right) \\ &= \mathbb{P}\left(U \geq e^{-\lambda x}\right) \\ &= 1 - e^{-\lambda x} = F(x). \end{aligned}$$

Exemple 1.9.4: Simulation d'une Pareto

Pour $\alpha > 0$, la loi de Pareto sur $[1, +\infty)$ a densité

$$f(x) = \alpha x^{-\alpha-1}\mathbf{1}_{\{x \geq 1\}}.$$

Pour $x \geq 1$,

$$F(x) = \int_1^x \alpha t^{-\alpha-1}\,\mathrm{d}t = 1 - x^{-\alpha}.$$

L'équation $u = 1 - x^{-\alpha}$ donne

$$x = (1-u)^{-1/\alpha}.$$

Par conséquent,

$$X = (1-U)^{-1/\alpha}$$

suit la loi de Pareto. Comme $1 - U \overset{\mathcal{L}}{=} U$, on peut aussi utiliser $X = U^{-1/\alpha}$.

1.9.2 Méthode d'acceptation–rejet

La méthode d'inversion est particulièrement simple lorsque F^{-1} est calculable. Lorsqu'une densité cible f est connue mais difficile à inverser, on peut utiliser une densité de proposition g que l'on sait simuler. L'idée est de proposer $Y \sim g$, puis de conserver plus souvent les valeurs situées dans les régions où f/g est grand.

Théorème 1.9.5: Acceptation–rejet

Soient f et g deux densités de probabilité sur $\mathbb{R}^d$. On suppose qu'il existe $c \geq 1$ tel que

$$f(x) \leq cg(x) \qquad \text{pour tout } x.$$

En particulier, dès que $f(x) > 0$, on a nécessairement $g(x) > 0$. On répète indépendamment les étapes suivantes :

1. simuler Y de densité g ;
2. simuler $U \sim \mathcal{U}([0,1])$, indépendant de Y ;
3. accepter Y si
$$U \leq \frac{f(Y)}{cg(Y)}.$$

Alors la première valeur acceptée a pour densité f. La probabilité d'acceptation à chaque essai vaut $1/c$, et le nombre N d'essais nécessaires suit une loi géométrique de paramètre $1/c$, donc

$$\mathbb{E}(N) = c.$$

Démonstration. La condition $f \leq cg$ garantit que

$$0 \leq \frac{f(y)}{cg(y)} \leq 1$$

sur le support de f : il s'agit donc bien d'une probabilité d'acceptation.

Fixons un ensemble mesurable $A \subset \mathbb{R}^d$ et notons $\mathcal{A}$ l'événement "le tirage proposé est accepté". Dire qu'un essai *propose une valeur dans A et est accepté* signifie précisément l'événement

$$\{Y \in A\} \cap \mathcal{A} = \left\{ Y \in A,\ U \leq \frac{f(Y)}{cg(Y)} \right\}.$$

Conditionnellement à $Y = y$, la variable U reste uniforme et indépendante, donc

$$\mathbb{P}\left(\mathcal{A} \mid Y = y\right) = \frac{f(y)}{cg(y)}.$$

Par la formule de l'espérance conditionnelle,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(Y \in A, \mathcal{A}) &= \mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{Y \in A\}} \mathbb{P}(\mathcal{A} \mid Y)\right] \\
&= \mathbb{E}\left[\mathbf{1}_{\{Y \in A\}} \frac{f(Y)}{cg(Y)}\right] \\
&= \int_A \frac{f(y)}{cg(y)} g(y)\ \mathrm{d}y \\
&= \frac{1}{c} \int_A f(y)\ \mathrm{d}y.
\end{aligned}$$

En prenant $A = \mathbb{R}^d$,

$$\mathbb{P}(\mathcal{A}) = \frac{1}{c} \int_{\mathbb{R}^d} f(y)\ \mathrm{d}y = \frac{1}{c}.$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}
\mathbb{P}(Y \in A \mid \mathcal{A}) &= \frac{\mathbb{P}(Y \in A, \mathcal{A})}{\mathbb{P}(\mathcal{A})} \\
&= \int_A f(y)\ \mathrm{d}y.
\end{aligned}$$

La loi d'une proposition conditionnellement à son acceptation a donc la densité f. Comme les essais sont indépendants et recommencent jusqu'à la première acceptation, la première valeur acceptée possède cette même loi.

Enfin, chaque essai est un succès avec probabilité $1/c$, indépendamment des essais précédents. Ainsi

$$\mathbb{P}(N = k) = \left(1 - \frac{1}{c}\right)^{k-1} \frac{1}{c}, \qquad k \geq 1,$$

et $\mathbb{E}(N) = c$. □

Exemple 1.9.6: Simulation d'une demi-normale par rejet

On veut simuler la densité

$$f(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{-x^2/2} \mathbf{1}_{\{x \geq 0\}},$$

c'est-à-dire la loi de $|Z|$ lorsque $Z \sim \mathcal{N}(0, 1)$. On propose une loi exponentielle de paramètre $\lambda > 0$, de densité

$$g_\lambda(x) = \lambda e^{-\lambda x} \mathbf{1}_{\{x \geq 0\}}.$$

Pour $x \geq 0$,

$$\begin{aligned} \frac{f(x)}{g_\lambda(x)} &= \frac{1}{\lambda}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2} + \lambda x\right) \\ &= \frac{1}{\lambda}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{(x-\lambda)^2}{2} + \frac{\lambda^2}{2}\right). \end{aligned}$$

Le maximum est atteint en $x = \lambda$, d'où la plus petite constante admissible

$$c_\lambda = \frac{1}{\lambda}\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{\lambda^2/2}.$$

Minimiser le coût moyen revient à minimiser c_λ. Or

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} \log c_\lambda = -\frac{1}{\lambda} + \lambda,$$

qui s'annule uniquement en $\lambda = 1$, avec dérivée seconde $1 + 1/\lambda^2 > 0$. Ainsi

$$c_1 = \sqrt{\frac{2e}{\pi}} \simeq 1.315, \qquad \mathbb{P}(\text{acceptation}) = \frac{1}{c_1} = \sqrt{\frac{\pi}{2e}} \simeq 0.760.$$

Il faut donc en moyenne environ 1.315 propositions exponentielles par variable demi-normale acceptée.

Idée à retenir

Dans la méthode du rejet, la constante c est à la fois une constante de domination et un coût moyen. Trouver une majoration $f \leq cg$ ne suffit pas : une bonne loi de proposition doit rendre c proche de 1.

1.9.3 Simulation uniforme dans un disque

Notons

$$D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 \leq 1\}.$$

La loi uniforme sur D a densité

$$f_D(x, y) = \frac{1}{\pi} \mathbf{1}_{\{(x,y) \in D\}}.$$

Méthode 1 : rejet à partir du carré. On simule $Y = (Y_1, Y_2)$ uniformément sur $[-1,1]^2$, dont la densité vaut $1/4$, et on accepte si $Y \in D$. La probabilité d'acceptation est

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(Y \in D) &= \int_D \frac{1}{4}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \\ &= \frac{\mathrm{Aire}(D)}{\mathrm{Aire}([-1,1]^2)} \\ &= \frac{\pi}{4}.\end{aligned}$$

Si N désigne le nombre de propositions nécessaires, alors

$$N \sim \mathrm{Geom}\left(\frac{\pi}{4}\right), \qquad \mathbb{E}(N) = \frac{4}{\pi} \simeq 1.273.$$

La loi conditionnelle du point accepté est bien uniforme sur le disque : pour tout $A \subset D$ mesurable,

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(Y \in A \mid Y \in D) &= \frac{\mathbb{P}(Y \in A)}{\mathbb{P}(Y \in D)} \\ &= \frac{\mathrm{Aire}(A)/4}{\pi/4} \\ &= \frac{\mathrm{Aire}(A)}{\pi}.\end{aligned}$$

Méthode 2 : coordonnées polaires. Écrivons

$$X = (R\cos\Theta, R\sin\Theta), \qquad 0 \le R \le 1, \quad 0 \le \Theta < 2\pi.$$

Le changement de variables polaires a jacobien r, donc pour que X ait densité cartésienne constante $1/\pi$ sur D, la densité jointe de (R,Θ) doit être

$$f_{R,\Theta}(r,\theta) = \frac{r}{\pi} = \underbrace{2r}_{f_R(r)}\,\underbrace{\frac{1}{2\pi}}_{f_\Theta(\theta)}$$

pour $0 \le r \le 1$ et $0 \le \theta < 2\pi$. Ainsi R et Θ peuvent être choisis indépendants avec

$$\Theta \sim \mathcal{U}([0,2\pi]), \qquad f_R(r) = 2r\mathbf{1}_{\{0\le r\le 1\}}.$$

La fonction de répartition du rayon est

$$F_R(r) = \int_0^r 2s\,\mathrm{d}s = r^2, \qquad 0 \le r \le 1.$$

Par inversion, si $U \sim \mathcal{U}([0,1])$,

$$R = \sqrt{U}.$$

Avec U, V indépendantes uniformes sur $[0,1]$, une simulation uniforme directe dans le disque est donc

$$X = \left(\sqrt{U}\cos(2\pi V), \sqrt{U}\sin(2\pi V)\right).$$

Point de vigilance

Prendre $R \sim \mathcal{U}([0,1])$ serait incorrect. Dans ce cas $\mathbb{P}(R \le r) = r$, alors que pour un point uniforme dans le disque la proportion d'aire contenue dans le disque de rayon r vaut

$$\frac{\pi r^2}{\pi} = r^2.$$

La loi correcte du rayon doit donc satisfaire $\mathbb{P}(R \le r) = r^2$, ce qui donne la densité $2r$ et la représentation $R = \sqrt{U}$.

1.10 Ce qu'il faut retenir

Idée à retenir

Les fondements à retenir sont les suivants.

1. Une méthode de Monte-Carlo commence par une représentation

$$I = \mathbb{E}(Y).$$

   Le choix de la variable Y n'est pas unique et influence directement la variance.

2. L'estimateur de base est la moyenne empirique

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k.$$

   Si $Y \in L^1$, la loi forte donne $\widehat{I}_n \to I$ presque sûrement. Si $Y \in L^2$,

$$\mathrm{Var}(\widehat{I}_n) = \frac{\sigma^2}{n}$$

   et le TCL donne l'échelle d'erreur $\sigma/\sqrt{n}$.

3. En pratique, σ est inconnu. On l'estime par S_n, ce qui conduit à l'erreur standard $S_n/\sqrt{n}$ et à l'intervalle asymptotique

$$\widehat{I}_n \pm z_{1-\alpha/2}\frac{S_n}{\sqrt{n}}.$$

   Un résultat Monte-Carlo sans estimation d'erreur est incomplet.

4. Il faut distinguer l'erreur relative réalisée $\left|\widehat{I}_n - I\right| / |I|$ de l'erreur standard relative

$$\frac{\sqrt{\mathrm{Var}(\widehat{I}_n)}}{|I|}.$$

   La seconde utilise la variance parce qu'elle mesure l'échelle probabiliste des fluctuations de la première.

Idée à retenir

Trois messages numériques complètent ces fondements.

5. Le taux $n^{-1/2}$ est lent, mais il ne subit pas directement l'explosion tensorielle d'une grille cartésienne. Une grille avec m points par coordonnée utilise m^d points ; pour une fonction seulement lipschitzienne, l'erreur d'une règle simple est de l'ordre de $n^{-1/d}$, alors que l'erreur statistique Monte-Carlo reste de l'ordre de $n^{-1/2}$.

6. Une impression visuelle de "stabilité" ne suffit pas. Il faut comparer les changements de $\overline{Y}_n$ à leur erreur standard, suivre S_n, répéter indépendamment les simulations et inspecter les queues de la distribution simulée. Les variables à queue lourde peuvent produire une fausse impression de convergence.

7. La simulation d'une loi fait partie intégrante d'un algorithme de Monte-Carlo. À partir d'un générateur uniforme :

- l'inversion produit $X = F^{-1}(U)$, y compris pour des lois discrètes ;
- l'acceptation–rejet simule une densité f à partir d'une densité g telle que $f \leq cg$, avec probabilité d'acceptation $1/c$;
- des changements de coordonnées peuvent donner des simulateurs directs, comme $R = \sqrt{U}$, $\Theta = 2\pi V$ pour un point uniforme dans le disque.

8. Une même quantité peut admettre plusieurs représentations Monte-Carlo. Le bon estimateur est celui qui combine variance faible, coût raisonnable et simulation fiable. La réduction systématique de la variance sera l'objet du chapitre 2.

Commentaire pratique

Pour une étude numérique sérieuse, on indiquera au minimum

taille de l'échantillon + estimation + erreur standard + intervalle de confiance,

et, lorsque le problème est sensible aux queues de distribution, des diagnostics de répétabilité et de valeurs extrêmes.

Chapitre 2

Réduction de variance

Mots-clés. Variance d'un estimateur ; efficacité variance-coût ; variables antithétiques ; corrélation négative ; variables de contrôle ; régression linéaire ; conditionnement ; formule de Rao–Blackwell ; stratification ; allocation optimale ; échantillonnage préférentiel ; densité optimale ; événements rares ; vraisemblance relative.

Objectifs du chapitre

À l'issue de ce chapitre, on doit savoir :

1. expliquer pourquoi la vitesse brute en $1/\sqrt{n}$ impose de chercher de meilleurs estimateurs ;
2. comparer deux estimateurs sans biais par leur variance et, si nécessaire, par leur coût de calcul ;
3. construire et analyser des estimateurs antithétiques et des estimateurs avec variables de contrôle ;
4. utiliser le conditionnement et la stratification comme deux formes de "moyennisation intelligente" ;
5. écrire correctement un estimateur par échantillonnage préférentiel et calculer son poids de vraisemblance ;
6. reconnaître les situations où une méthode de réduction de variance est pertinente, et celles où elle ne l'est pas.

2.1 Pourquoi réduire la variance ?

Dans le chapitre 1, nous avons vu que si

$$I = \mathbb{E}(Y), \qquad Y \in L^2,$$

et si $Y_1, \dots, Y_n$ sont indépendantes et de même loi que Y, alors

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} Y_k$$

est sans biais et vérifie

$$\operatorname{Var}\left(\widehat{I}_n\right) = \frac{\operatorname{Var}(Y)}{n}.$$

Le théorème central limite donne l'approximation pratique

$$\widehat{I}_n - I \approx \mathcal{N}\left(0, \frac{\sigma^2}{n}\right), \qquad \sigma^2 = \operatorname{Var}(Y).$$

La demi-largeur d'un intervalle de confiance à 95% est donc approximativement

$$1.96\frac{\sigma}{\sqrt{n}}.$$

Idée à retenir

Si l'on ne change pas la variable simulée Y, la seule manière de diviser l'erreur par 10 consiste à multiplier le nombre de simulations par 100. La réduction de variance cherche une autre stratégie : remplacer Y par une autre variable aléatoire $\widetilde{Y}$ telle que

$$\mathbb{E}\left(\widetilde{Y}\right) = \mathbb{E}\left(Y\right), \qquad \mathrm{Var}\left(\widetilde{Y}\right) \ll \mathrm{Var}\left(Y\right).$$

On ne change pas la quantité calculée. On change la manière de la regarder.

2.1.1 Variance, coût et précision

Il faut distinguer deux questions. La première est mathématique : quelle est la variance d'un estimateur ? La seconde est numérique : combien coûte une simulation de cet estimateur ? Une méthode sophistiquée peut réduire la variance mais coûter plus cher. Il faut donc comparer les méthodes à budget de calcul comparable.

Proposition 2.1.1: Critère variance-coût

Supposons que deux méthodes produisent des estimateurs sans biais de la forme

$$\widehat{I}_n^{(j)} = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} Y_k^{(j)}, \qquad j \in \{1,2\},$$

avec $\mathbb{E}\left(Y^{(j)}\right) = I$, $\mathrm{Var}\left(Y^{(j)}\right) = \sigma_j^2$, et coût moyen $\tau_j > 0$ pour simuler une réalisation de $Y^{(j)}$. Pour un budget de calcul total T, la variance obtenue par la méthode j est approximativement

$$\frac{\sigma_j^2\tau_j}{T}.$$

À budget fixé, le critère naturel est donc le produit

$$\sigma_j^2\tau_j.$$

Démonstration. Avec un budget T, le nombre de simulations réalisables est approximativement

$$n_j \simeq \frac{T}{\tau_j}.$$

Comme la moyenne de n_j réalisations indépendantes de variance σ_j^2 a variance σ_j^2/n_j, on obtient

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}_{n_j}^{(j)}\right) \simeq \frac{\sigma_j^2}{T/\tau_j} = \frac{\sigma_j^2\tau_j}{T}.$$

L'erreur standard est donc approximativement

$$\sqrt{\frac{\sigma_j^2\tau_j}{T}}.$$

À budget T fixé, minimiser la variance ou l'erreur standard revient donc à minimiser le produit $\sigma_j^2\tau_j$. □

Définition 2.1.2: Efficacité relative à coût fixé

Pour deux méthodes 1 et 2, on appelle *efficacité relative* de la méthode 2 par rapport à la méthode 1 le rapport

$$\mathcal{E}_{2/1} = \frac{\sigma_1^2 \tau_1}{\sigma_2^2 \tau_2}.$$

Si $\mathcal{E}_{2/1} = 10$, la méthode 2 a, à temps de calcul égal, une variance dix fois plus faible. Sa demi-largeur d'intervalle de confiance est alors approximativement divisée par $\sqrt{10}$.

Exemple 2.1.3: Pourquoi la variance compte vraiment

Supposons que l'estimateur naïf ait variance 100, et que chaque simulation coûte une unité de temps. Une méthode de réduction de variance donne une variable de variance 4, mais chaque simulation coûte 3 unités de temps. À budget fixé, les produits variance-coût sont

$$100 \times 1 = 100, \qquad 4 \times 3 = 12.$$

La seconde méthode est donc environ 100/12, c'est-à-dire plus de 8 fois plus efficace. En termes de demi-largeur d'intervalle de confiance, le gain est de l'ordre de $\sqrt{100/12}$, soit presque un facteur 3.

2.1.2 Plan des méthodes

Les méthodes de ce chapitre reposent sur des idées différentes.

— Les *variables antithétiques* forcent deux simulations à fluctuer en sens opposé.

— Les *variables de contrôle* enlèvent une partie connue des fluctuations.

— Le *conditionnement* remplace une variable aléatoire bruitée par sa moyenne conditionnelle.

— La *stratification* impose de simuler dans toutes les régions importantes de l'espace.

— L'*échantillonnage préférentiel* change la loi de simulation pour tirer plus souvent dans les zones qui contribuent le plus à l'espérance.

Ces méthodes sont souvent combinées. Dans un vrai code de Monte-Carlo, on utilise rarement la méthode naïve si une structure du problème permet de faire mieux.

2.2 Variables antithétiques

2.2.1 Principe

Supposons que l'on veuille calculer

$$I = \mathbb{E}\left(f(U)\right), \qquad U \sim \mathcal{U}\left([0,1]\right).$$

L'estimateur naïf utilise $f(U)$. La méthode antithétique utilise simultanément U et $1-U$. Comme $1-U$ a la même loi que U, on conserve la bonne espérance :

$$\mathbb{E}\left(f(1-U)\right) = \mathbb{E}\left(f(U)\right) = I.$$

On remplace donc une observation par la paire

$$A = \frac{f(U) + f(1-U)}{2}.$$

Remarque 2.2.1: Formulation générale

La construction $U \mapsto 1-U$ n'est qu'un cas particulier. Si X a une loi μ et si une transformation mesurable T vérifie

$$T(X) \overset{\mathcal{L}}{=} X,$$

alors

$$A = \frac{f(X) + f(T(X))}{2}$$

est toujours sans biais pour $\mathbb{E}(f(X))$. Le gain dépend entièrement du signe et de l'amplitude de

$$\operatorname{Cov}\left(f(X), f(T(X))\right).$$

La symétrie $Z \mapsto -Z$ pour une loi normale centrée et la symétrie $U \mapsto 1-U$ pour une loi uniforme sont les deux exemples les plus fréquents.

Idée à retenir

Si f est croissante, alors lorsque U est grand, $f(U)$ est grand mais $f(1-U)$ est petit. Les deux termes se compensent. On ne diminue pas l'erreur en tirant des points plus nombreux, mais en arrangeant les tirages pour qu'ils se corrigent mutuellement.

Proposition 2.2.2: Variance d'une paire antithétique

Soient Y et Y' deux variables aléatoires de même loi, dans L^2. Posons

$$A = \frac{Y + Y'}{2}.$$

Alors

$$\mathbb{E}(A) = \mathbb{E}(Y)$$

et

$$\operatorname{Var}(A) = \frac{1}{2}\operatorname{Var}(Y) + \frac{1}{2}\operatorname{Cov}(Y, Y').$$

En particulier, à nombre de paires fixé, une covariance négative diminue la variance de la paire.

Démonstration. L'égalité des espérances est immédiate. Pour la variance,

$$\begin{aligned}
\operatorname{Var}(A) &= \frac{1}{4}\operatorname{Var}(Y + Y') \\
&= \frac{1}{4}\left(\operatorname{Var}(Y) + \operatorname{Var}(Y') + 2\operatorname{Cov}(Y, Y')\right) \\
&= \frac{1}{2}\operatorname{Var}(Y) + \frac{1}{2}\operatorname{Cov}(Y, Y'),
\end{aligned}$$

car Y et Y' ont même variance. □

Remarque 2.2.3: Comparaison équitable

Si l'on utilise m paires, on évalue deux fois la fonction par paire. Le nombre total d'évaluations est donc $2m$. L'estimateur antithétique est

$$\widehat{I}_m^{\text{anti}} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^{m} \frac{Y_k + Y_k'}{2}.$$

Sa variance vaut

$$\frac{1}{2m} \left(\text{Var}\left(Y\right) + \text{Cov}\left(Y, Y'\right) \right).$$

L'estimateur naïf avec le même nombre total $2m$ d'évaluations a variance $\text{Var}\left(Y\right)/(2m)$. La méthode antithétique améliore donc l'estimateur naïf précisément lorsque $\text{Cov}\left(Y, Y'\right) < 0$.

Proposition 2.2.4: Monotonie et covariance négative

Soit $U \sim \mathcal{U}\left([0,1]\right)$. Si $f\colon [0,1] \to \mathbb{R}$ est monotone et de carré intégrable, alors

$$\text{Cov}\left(f(U), f(1-U)\right) \leq 0.$$

Démonstration. On suppose f croissante, le cas décroissant étant identique. Soit V une copie indépendante de U. La fonction $u \mapsto f(u)$ est croissante et la fonction $u \mapsto f(1-u)$ est décroissante. On a donc presque sûrement

$$\left(f(U) - f(V)\right)\left(f(1-U) - f(1-V)\right) \leq 0.$$

En prenant l'espérance, on obtient

$$2\,\text{Cov}\left(f(U), f(1-U)\right) \leq 0,$$

ce qui donne le résultat. □

Exemple 2.2.5: Intégrale de e^x sur $[0,1]$

On veut calculer

$$I = \int_0^1 e^x \, \mathrm{d}x = e - 1.$$

L'estimateur naïf utilise $Y = e^U$, avec $U \sim \mathcal{U}([0,1])$. La variance de Y est

$$\begin{aligned} \mathrm{Var}(Y) &= \mathbb{E}\left(e^{2U}\right) - \mathbb{E}\left(e^U\right)^2 \\ &= \frac{e^2 - 1}{2} - (e-1)^2 . \end{aligned}$$

L'estimateur antithétique par paire utilise

$$A = \frac{e^U + e^{1-U}}{2}.$$

On vérifie que $\mathbb{E}(A) = e - 1$. De plus,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}\left(A^2\right) &= \frac{1}{4}\mathbb{E}\left(e^{2U} + e^{2(1-U)} + 2e\right) \\ &= \frac{1}{4}\left((e^2 - 1) + 2e\right). \end{aligned}$$

Ainsi

$$\mathrm{Var}(A) = \frac{e^2 - 1 + 2e}{4} - (e-1)^2 .$$

Numériquement,

$$\mathrm{Var}(Y) \simeq 0.24204, \qquad \mathrm{Var}(A) \simeq 0.0039125.$$

Une paire antithétique demande deux évaluations de la fonction. À coût égal à $2m$ évaluations, l'estimateur naïf fondé sur $2m$ tirages a variance

$$\frac{\mathrm{Var}(Y)}{2m} \simeq \frac{0.12102}{m},$$

tandis que l'estimateur antithétique fondé sur m paires a variance

$$\frac{\mathrm{Var}(A)}{m} \simeq \frac{0.0039125}{m}.$$

Le rapport des variances vaut donc environ

$$\frac{\mathrm{Var}(Y)/(2m)}{\mathrm{Var}(A)/m} = \frac{\mathrm{Var}(Y)}{2\,\mathrm{Var}(A)} \simeq 30.9.$$

À coût comparable, la demi-largeur d'un intervalle de confiance est donc divisée par environ $\sqrt{30.9} \simeq 5.56$. Ici la compensation est extrêmement efficace.

Exemple 2.2.6: Quand l'antithétique ne sert à rien

Considérons maintenant le problème apparemment naturel d'estimer

$$I = \mathbb{E}\left(\sqrt{|Z|}\right), \qquad Z \sim \mathcal{N}(0,1).$$

On pourrait penser à utiliser la paire Z et $-Z$. Mais ici

$$\sqrt{|-Z|} = \sqrt{|Z|}.$$

La paire antithétique est donc identique à la simulation initiale. Elle ne crée aucune compensation. Cet exemple est important : une méthode de réduction de variance n'est pas une recette automatique. Elle exploite une structure précise du problème.

Exemple 2.2.7: Application financière : call européen

Dans le modèle de Black–Scholes,

$$S_T = S_0 \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)T + \sigma\sqrt{T}Z\right), \qquad Z \sim \mathcal{N}(0,1).$$

Pour un call européen, le payoff actualisé est

$$Y = e^{-rT}(S_T - K)_+.$$

L'antithétique naturelle consiste à remplacer Z par $-Z$. On utilise donc

$$A = \frac{1}{2}(g(Z) + g(-Z)),$$

où

$$g(z) = e^{-rT}\left(S_0 \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)T + \sigma\sqrt{T}z\right) - K\right)_+.$$

Comme g est croissante en z, les deux termes $g(Z)$ et $g(-Z)$ ont tendance à se compenser. C'est l'une des méthodes de réduction de variance les plus faciles à implémenter dans un code de pricing.

2.3 Variables de contrôle

2.3.1 Principe

On veut calculer $I = \mathbb{E}(Y)$. On suppose que l'on dispose d'une variable C, simulée en même temps que Y, telle que $\mathbb{E}(C)$ soit connue exactement. Pour $\beta \in \mathbb{R}$, on définit

$$Y^\beta = Y - \beta(C - \mathbb{E}(C)).$$

Alors $\mathbb{E}\left(Y^\beta\right) = \mathbb{E}(Y)$. Le terme soustrait est centré ; il ne modifie pas la moyenne. En revanche, si C est corrélée avec Y, il peut absorber une partie des fluctuations de Y.

Idée à retenir

Une variable de contrôle joue le rôle d'un correcteur. Si une simulation donne une valeur de C plus grande que sa moyenne connue, et si Y est positivement corrélée avec C, on soupçonne que Y est aussi trop grand. On retranche donc une correction proportionnelle à $C - \mathbb{E}(C)$.

Proposition 2.3.1: Coefficient optimal de contrôle

Soient $Y, C \in L^2$, avec $\mathrm{Var}(C) > 0$, et supposons $\mathbb{E}(C)$ connue. Pour

$$Y^\beta = Y - \beta\left(C - \mathbb{E}(C)\right),$$

on a

$$\mathrm{Var}\left(Y^\beta\right) = \mathrm{Var}(Y) - 2\beta\,\mathrm{Cov}(Y, C) + \beta^2\,\mathrm{Var}(C).$$

La variance est minimale pour

$$\beta^\star = \frac{\mathrm{Cov}(Y, C)}{\mathrm{Var}(C)}.$$

La variance minimale vaut

$$\mathrm{Var}\left(Y^{\beta^\star}\right) = \mathrm{Var}(Y)\left(1 - \mathrm{Corr}(Y, C)^2\right).$$

Démonstration. La formule de variance suit de

$$\mathrm{Var}(Y - \beta C) = \mathrm{Var}(Y) - 2\beta\,\mathrm{Cov}(Y, C) + \beta^2\,\mathrm{Var}(C).$$

C'est un polynôme quadratique convexe en β. Son minimum est atteint lorsque

$$-2\,\mathrm{Cov}(Y, C) + 2\beta\,\mathrm{Var}(C) = 0,$$

d'où la valeur de $\beta^\star$. En remplaçant β par $\beta^\star$, on obtient

$$\mathrm{Var}\left(Y^{\beta^\star}\right) = \mathrm{Var}(Y) - \frac{\mathrm{Cov}(Y, C)^2}{\mathrm{Var}(C)}.$$

La dernière formule vient de la définition de la corrélation. □

Commentaire pratique

Le gain de variance est gouverné par $\mathrm{Corr}(Y, C)^2$. Une corrélation de 0.9 laisse seulement $1 - 0.9^2 = 19\%$ de la variance initiale. Une corrélation de 0.5 laisse 75% de la variance. La méthode est donc très efficace seulement si la variable de contrôle explique une grande partie des fluctuations.

2.3.2 Choix empirique du coefficient

Dans la pratique, $\mathrm{Cov}(Y, C)$ et $\mathrm{Var}(C)$ ne sont pas toujours connues. On les estime à partir des simulations. Étant donné des couples (Y_i, C_i), on pose

$$\widehat{\beta}_n = \frac{\sum_{i=1}^n \left(Y_i - \overline{Y}_n\right)\left(C_i - \overline{C}_n\right)}{\sum_{i=1}^n \left(C_i - \overline{C}_n\right)^2}.$$

L'estimateur contrôlé est alors

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{ctrl}} = \overline{Y}_n - \widehat{\beta}_n\left(\overline{C}_n - \mathbb{E}(C)\right).$$

Proposition 2.3.2: Coefficient empirique et variance asymptotique

Supposons $Y, C \in L^4$, $\mathrm{Var}(C) > 0$, et posons

$$\beta^\star = \frac{\mathrm{Cov}(Y, C)}{\mathrm{Var}(C)}.$$

Alors

$$\widehat{\beta}_n \longrightarrow \beta^\star \qquad \text{presque sûrement.}$$

De plus, si

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{ctrl}} = \overline{Y}_n - \widehat{\beta}_n(\overline{C}_n - \mathbb{E}C),$$

alors

$$\sqrt{n}\left(\widehat{I}_n^{\mathrm{ctrl}} - I\right) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \mathrm{Var}\left(Y^{\beta^\star}\right)\right).$$

Ainsi l'estimation de $\beta^\star$ sur le même échantillon ne détériore pas la variance asymptotique du contrôle optimal.

Démonstration. La loi forte appliquée à Y, C, YC et C^2 donne la convergence presque sûre de la covariance et de la variance empiriques. Comme $\mathrm{Var}(C) > 0$, le quotient converge vers $\beta^\star$.

Pour l'estimateur contrôlé, on écrit

$$\begin{aligned}\widehat{I}_n^{\mathrm{ctrl}} - I = \left(\overline{Y}_n - I\right) - \beta^\star\left(\overline{C}_n - \mathbb{E}C\right) \\ - \left(\widehat{\beta}_n - \beta^\star\right)\left(\overline{C}_n - \mathbb{E}C\right).\end{aligned}$$

Le premier terme est la moyenne de variables i.i.d. centrées

$$Y_i^{\beta^\star} - I = Y_i - I - \beta^\star(C_i - \mathbb{E}C),$$

et le TCL lui donne la limite normale annoncée. Sous les hypothèses de quatrième moment,

$$\widehat{\beta}_n - \beta^\star = O_{\mathbb{P}}(n^{-1/2}), \qquad \overline{C}_n - \mathbb{E}C = O_{\mathbb{P}}(n^{-1/2}),$$

donc leur produit est $O_{\mathbb{P}}(n^{-1}) = o_{\mathbb{P}}(n^{-1/2})$. Le terme supplémentaire disparaît après multiplication par $\sqrt{n}$, et Slutsky conclut. □

Remarque 2.3.3: Biais fini et échantillon pilote

Lorsque $\widehat{\beta}_n$ est estimé avec les mêmes simulations que celles utilisées dans $\widehat{I}_n^{\mathrm{ctrl}}$, l'estimateur n'est en général pas exactement sans biais à taille finie, même si son biais est d'ordre inférieur à l'erreur statistique sous des hypothèses régulières. Si l'absence de biais fini est importante, on peut estimer $\beta^\star$ sur un échantillon pilote indépendant, puis fixer ce coefficient sur l'échantillon utilisé pour l'estimation finale.

Exemple 2.3.4: Contrôle simple pour $\int_0^1 e^x \, \mathrm{d}x$

On veut estimer

$$I = \int_0^1 e^x \, \mathrm{d}x = \mathbb{E}\left(e^U\right), \qquad U \sim \mathcal{U}\left([0,1]\right).$$

On prend $Y = e^U$ et $C = U$, dont l'espérance est connue : $\mathbb{E}\left(U\right) = 1/2$. On calcule

$$\mathrm{Var}\left(U\right) = \frac{1}{12}$$

et

$$\begin{aligned}\mathrm{Cov}\left(e^U, U\right) &= \mathbb{E}\left(Ue^U\right) - \mathbb{E}\left(e^U\right)\mathbb{E}\left(U\right) \\ &= 1 - \frac{e-1}{2} = \frac{3-e}{2}.\end{aligned}$$

Le coefficient optimal est donc

$$\beta^\star = 6\left(3-e\right) \simeq 1.69031.$$

L'estimateur contrôlé utilise la variable

$$e^U - 6\left(3-e\right)\left(U - \frac{1}{2}\right).$$

Calculons maintenant le gain. On a

$$\mathrm{Var}(e^U) = \frac{e^2-1}{2} - (e-1)^2 \simeq 0.24204,$$

et

$$\mathrm{Corr}(e^U, U) = \frac{(3-e)/2}{\sqrt{\mathrm{Var}(e^U)/12}} \simeq 0.99183.$$

La variance optimale vaut donc

$$\mathrm{Var}(Y^{\beta^\star}) = \mathrm{Var}(Y)(1 - \mathrm{Corr}(Y,U)^2) \simeq 0.003940.$$

Le facteur de réduction de variance est environ $0.24204/0.003940 \simeq 61.4$. À nombre de simulations égal, l'erreur standard est donc divisée par $\sqrt{61.4} \simeq 7.84$.
L'idée géométrique est particulièrement claire ici : sur $[0,1]$, la fonction $u \mapsto e^u$ est très proche d'une fonction affine. Le contrôle par U retire précisément la meilleure composante affine centrée de e^U.

Exemple 2.3.5: Contrôle en finance : utiliser un prix connu

On veut estimer par Monte-Carlo le prix d'une option exotique dont le payoff actualisé est Y. Supposons que le payoff soit fortement corrélé avec celui d'un call européen standard C, de même sous-jacent, même maturité, et strike voisin. Le prix de ce call est connu par la formule de Black–Scholes, donc $\mathbb{E}(C)$ est connu.
On peut alors estimer $\mathbb{E}(Y)$ par

$$Y - \beta(C - \mathbb{E}(C)).$$

Cette technique est très utilisée en finance numérique. L'interprétation est simple : si une trajectoire donne un payoff de call européen exceptionnellement élevé, on corrige le payoff exotique dans le même sens, car une partie de cette fluctuation vient du même mouvement du sous-jacent.

2.3.3 Plusieurs variables de contrôle

On peut utiliser plusieurs contrôles $C_1, \dots, C_m$, d'espérances connues. Pour $\beta \in \mathbb{R}^m$, on pose

$$Y^\beta = Y - \sum_{j=1}^{m} \beta_j (C_j - \mathbb{E}(C_j)).$$

On note

$$\Sigma_C = (\mathrm{Cov}(C_i, C_j))_{1 \le i,j \le m}, \qquad c = (\mathrm{Cov}(Y, C_1), \dots, \mathrm{Cov}(Y, C_m))^T.$$

Proposition 2.3.6: Contrôle vectoriel

Si Σ_C est inversible, la variance de Y^β est minimale pour

$$\beta^\star = \Sigma_C^{-1} c.$$

La variance minimale vaut

$$\mathrm{Var}(Y) - c^T \Sigma_C^{-1} c.$$

Démonstration. On développe la variance :

$$\mathrm{Var}\left(Y^\beta\right) = \mathrm{Var}(Y) - 2\beta^T c + \beta^T \Sigma_C \beta.$$

Le gradient par rapport à β est $-2c + 2\Sigma_C \beta$. Il s'annule pour $\beta^\star = \Sigma_C^{-1} c$. La formule de variance minimale suit en remplaçant β par $\beta^\star$. □

2.3.4 Interprétation géométrique dans L^2

La méthode des variables de contrôle n'est pas seulement une astuce de calcul. Elle a une interprétation géométrique simple. On travaille dans l'espace de Hilbert L^2, avec le produit scalaire

$$\langle A, B \rangle = \mathbb{E}(AB).$$

Comme les constantes ne jouent aucun rôle pour la variance, on centre les variables :

$$Y_0 = Y - \mathbb{E}(Y), \qquad C_0 = C - \mathbb{E}(C).$$

Chercher le meilleur coefficient β revient à approcher Y_0 par un multiple de C_0. L'erreur résiduelle est

$$Y_0 - \beta C_0.$$

Le coefficient optimal est celui qui rend cette erreur orthogonale à C_0 :

$$\mathbb{E}\left((Y_0 - \beta^\star C_0)C_0\right) = 0.$$

On retrouve immédiatement

$$\beta^\star = \frac{\mathbb{E}\left(Y_0 C_0\right)}{\mathbb{E}\left(C_0^2\right)} = \frac{\mathrm{Cov}\left(Y, C\right)}{\mathrm{Var}\left(C\right)}.$$

Idée à retenir

Une variable de contrôle enlève la projection de Y sur une direction déjà connue. Après correction optimale, l'erreur restante est orthogonale au contrôle. C'est exactement la même géométrie que dans les moindres carrés.

Exemple 2.3.7: Contrôles polynomiaux

Pour une intégrale

$$I = \int_0^1 f(x)\,\mathrm{d}x = \mathbb{E}\left(f(U)\right), \qquad U \sim \mathcal{U}\left([0,1]\right),$$

on peut utiliser comme contrôles

$$C_1 = U, \qquad C_2 = U^2, \qquad C_3 = U^3,$$

car leurs espérances sont connues : $\mathbb{E}\left(U^j\right) = 1/(j+1)$. Cette méthode revient à retirer de $f(U)$ sa meilleure approximation polynomiale dans l'espace engendré par $1, U, U^2, U^3$. Elle est très efficace lorsque f est régulière et bien approchée par un polynôme de petit degré.

2.4 Conditionnement et formule de Rao–Blackwell

2.4.1 Principe

Le conditionnement est probablement la méthode de réduction de variance la plus fondamentale. On part d'un estimateur Y de moyenne I, puis on remplace Y par une espérance conditionnelle $\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)$, lorsque celle-ci est calculable ou facile à approximer. La moyenne reste la même, mais la variance diminue.

Pour $Y \in L^2$, on définit la variance conditionnelle par

$$\mathrm{Var}(Y \mid \mathcal{G}) = \mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G})\right)^2 \mid \mathcal{G}\right] = \mathbb{E}(Y^2 \mid \mathcal{G}) - \mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G})^2.$$

C'est une variable aléatoire $\mathcal{G}$-mesurable : sa valeur dépend de l'information connue. Sa moyenne

$$\mathbb{E}\left[\mathrm{Var}(Y \mid \mathcal{G})\right]$$

mesure la part moyenne de variance qui subsiste à l'intérieur des classes d'information décrites par $\mathcal{G}$.

Idée à retenir

Une variable aléatoire contient deux types de fluctuations : celles qui restent visibles une fois que l'information $\mathcal{G}$ est connue, et celles qui sont seulement du bruit à l'intérieur de chaque situation décrite par $\mathcal{G}$. Remplacer Y par $\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)$, c'est enlever le bruit interne.

Théorème 2.4.1: Rao–Blackwell

Soit $Y \in L^2$ et soit $\mathcal{G}$ une sous-tribu. Alors

$$\mathbb{E}\left(\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right) = \mathbb{E}\left(Y\right)$$

et

$$\mathrm{Var}\left(\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right) \leq \mathrm{Var}\left(Y\right).$$

Plus précisément,

$$\mathrm{Var}\left(Y\right) = \mathrm{Var}\left(\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right) + \mathbb{E}\left(\mathrm{Var}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right).$$

Le gain de variance est donc exactement

$$\mathrm{Var}(Y) - \mathrm{Var}\left(\mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G})\right) = \mathbb{E}\left[\mathrm{Var}(Y \mid \mathcal{G})\right] \geq 0.$$

Il est strict dès qu'il reste, avec probabilité positive, une variabilité non nulle de Y conditionnellement à $\mathcal{G}$.

Démonstration. La première égalité est la propriété de tour de l'espérance conditionnelle. Pour la variance, on écrit

$$Y - \mathbb{E}\left(Y\right) = \left(Y - \mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right) + \left(\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right) - \mathbb{E}\left(Y\right)\right).$$

Les deux termes sont orthogonaux dans L^2. En effet,

$$\mathbb{E}\left(\left(Y - \mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right)\right)\left(\mathbb{E}\left(Y \mid \mathcal{G}\right) - \mathbb{E}\left(Y\right)\right)\right) = 0,$$

car le second facteur est $\mathcal{G}$-mesurable et l'espérance conditionnelle du premier sachant $\mathcal{G}$ est nulle. L'identité de variance suit par Pythagore dans L^2. □

Exemple 2.4.2: Remplacer une indicatrice par une probabilité conditionnelle

Supposons que l'on veuille estimer

$$p = \mathbb{P}\left(X + \varepsilon > a\right),$$

où X est simulée, $\varepsilon \sim \mathcal{N}\left(0, \sigma^2\right)$ est indépendante de X, et $a \in \mathbb{R}$. L'estimateur naïf simule X et ε, puis utilise

$$Y = \mathbf{1}_{\{X+\varepsilon>a\}}.$$

Conditionnellement à X, on connaît la probabilité de l'événement :

$$\mathbb{E}\left(Y \mid X\right) = \mathbb{P}\left(\varepsilon > a - X \mid X\right) = \overline{\Phi}\left(\frac{a - X}{\sigma}\right),$$

où $\overline{\Phi} = 1 - \Phi$. On peut donc estimer p par la moyenne de

$$\overline{\Phi}\left(\frac{a - X}{\sigma}\right),$$

sans simuler ε. On a remplacé une variable de Bernoulli, très bruitée, par une probabilité conditionnelle lisse.

Exemple 2.4.3: Application assurance : nombre de sinistres connu

Dans un modèle collectif, le montant total annuel des sinistres est

$$S = \sum_{i=1}^{N} X_i,$$

où N est le nombre de sinistres et X_i les montants individuels. On veut estimer $\mathbb{E}(S)$. L'estimateur naïf simule N, puis tous les montants X_i. Mais si $\mathbb{E}(X_1) = m$ est connue, alors

$$\mathbb{E}(S \mid N) = Nm.$$

Pour estimer $\mathbb{E}(S)$, il suffit donc de simuler N et de moyenner Nm. Toute la variabilité due aux montants individuels a été intégrée analytiquement. Pour une quantité plus complexe, comme $\mathbb{E}((S-d)_+)$, le conditionnement total n'est pas toujours possible, mais le même principe guide de nombreux algorithmes.

2.4.2 Conditionnement et estimateurs de Bernoulli

Une situation fréquente est l'estimation d'une probabilité

$$p = \mathbb{P}(A) = \mathbb{E}(\mathbf{1}_A).$$

L'estimateur naïf est une moyenne de variables de Bernoulli. Il est simple, mais souvent très bruité. Si l'événement A dépend de deux sources d'aléa (X, Z), et si l'on sait calculer

$$p(X) = \mathbb{P}(A \mid X),$$

alors Rao–Blackwell remplace $\mathbf{1}_A$ par $p(X)$. En effet,

$$\mathbb{E}(\mathbf{1}_A \mid X) = p(X).$$

Conditionnellement à X, la variable $\mathbf{1}_A$ est une Bernoulli de paramètre $p(X)$, donc

$$\mathrm{Var}(\mathbf{1}_A \mid X) = p(X)(1-p(X)).$$

La formule de variance totale donne alors

$$\mathrm{Var}(\mathbf{1}_A) = \mathrm{Var}(p(X)) + \mathbb{E}[p(X)(1-p(X))],$$

d'où

$$\mathrm{Var}(p(X)) = p(1-p) - \mathbb{E}[p(X)(1-p(X))], \qquad p = \mathbb{P}(A).$$

Le gain est donc exactement la moyenne de la variance Bernoulli qui a été intégrée analytiquement. Si $p(X)$ est souvent proche de 0 ou 1, cette variance conditionnelle est faible et le gain est modéré ; si $p(X)$ prend souvent des valeurs intermédiaires, le gain peut être très important.

Exemple 2.4.4: Probabilité de défaut avec facteur commun

Dans un modèle de risque de crédit simplifié, on peut écrire le rendement latent d'une entreprise sous la forme

$$R = \sqrt{\rho} M + \sqrt{1-\rho}\, \varepsilon,$$

où M est un facteur macroéconomique commun, $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0,1)$ est un bruit idiosyncratique, et $0 < \rho < 1$. Le défaut se produit si $R < a$. L'estimateur naïf simule M et ε, puis l'indicatrice $\mathbf{1}_{\{R<a\}}$. Conditionnellement à M, on a

$$\mathbb{P}(R < a \mid M) = \Phi\left(\frac{a - \sqrt{\rho} M}{\sqrt{1-\rho}}\right).$$

On peut donc simuler seulement M et moyenner cette probabilité conditionnelle. Le gain peut être très important lorsque l'événement est rare.

2.5 Stratification

2.5.1 Pourquoi stratifier ?

Dans une simulation naïve, il peut arriver que certaines régions importantes soient mal explorées. Par exemple, si l'on tire n points uniformes sur $[0,1]$, rien ne garantit qu'il y aura exactement le bon nombre de points dans chaque sous-intervalle. La stratification impose cette exploration.

On suppose que X suit une loi μ, que $Y = h(X)$, et que l'espace est découpé en strates disjointes

$$A_1, \dots, A_K, \qquad \bigcup_{k=1}^{K} A_k = E.$$

On note

$$p_k = \mathbb{P}(X \in A_k), \qquad I_k = \mathbb{E}(h(X) \mid X \in A_k).$$

Alors

$$I = \mathbb{E}(h(X)) = \sum_{k=1}^{K} p_k I_k.$$

Définition 2.5.1: Estimateur stratifié

Pour chaque strate A_k, on simule n_k variables indépendantes de loi conditionnelle $\mathcal{L}(X \mid X \in A_k)$, notées $X_{k,1}, \dots, X_{k,n_k}$. L'estimateur stratifié est

$$\widehat{I}^{\text{strat}} = \sum_{k=1}^{K} p_k \left(\frac{1}{n_k} \sum_{i=1}^{n_k} h(X_{k,i})\right).$$

Proposition 2.5.2: Biais et variance de l'estimateur stratifié

On pose

$$\sigma_k^2 = \mathrm{Var}\left(h(X) \mid X \in A_k\right).$$

Alors $\widehat{I}^{\mathrm{strat}}$ est sans biais et

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}^{\mathrm{strat}}\right) = \sum_{k=1}^{K} \frac{p_k^2 \sigma_k^2}{n_k}.$$

Démonstration. Dans chaque strate, la moyenne empirique est sans biais pour I_k. Donc

$$\mathbb{E}\left(\widehat{I}^{\mathrm{strat}}\right) = \sum_{k=1}^{K} p_k I_k = I.$$

Les simulations des strates étant indépendantes, la variance est la somme des variances :

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}^{\mathrm{strat}}\right) = \sum_{k=1}^{K} p_k^2 \frac{\sigma_k^2}{n_k}.$$

□

2.5.2 Stratification proportionnelle

Le choix le plus simple consiste à prendre

$$n_k \simeq n p_k.$$

On parle d'allocation proportionnelle. Dans ce cas,

$$\mathrm{Var}\left(\widehat{I}^{\mathrm{strat}}\right) \simeq \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{K} p_k \sigma_k^2.$$

Or la formule de variance totale donne

$$\mathrm{Var}\left(Y\right) = \sum_{k=1}^{K} p_k \sigma_k^2 + \sum_{k=1}^{K} p_k \left(I_k - I\right)^2.$$

Donc

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{K} p_k \sigma_k^2 \leq \frac{\mathrm{Var}\left(Y\right)}{n}.$$

Idée à retenir

La stratification proportionnelle supprime les fluctuations dues au nombre aléatoire de points tombant dans chaque strate. Elle ne garde que les fluctuations internes à chaque strate. Elle est d'autant plus efficace que les moyennes I_k varient fortement d'une strate à l'autre.

Exemple 2.5.3: Gain exact pour l'intégrale de x sur $[0,1]$

Considérons

$$I = \int_0^1 x \, \mathrm{d}x = \frac{1}{2}.$$

L'estimateur naïf utilise $U \sim \mathcal{U}([0,1])$. Comme $\mathrm{Var}(U) = 1/12$, la moyenne de n tirages a variance

$$\frac{1}{12n}.$$

Découpons maintenant $[0,1]$ en K intervalles de longueur $1/K$, et supposons pour simplifier que K divise n. On place exactement n/K tirages dans chaque strate. Dans une strate, une uniforme sur un intervalle de longueur $1/K$ a variance

$$\sigma_k^2 = \frac{1}{12K^2}.$$

Comme $p_k = 1/K$ et $n_k = n/K$, la formule de variance donne

$$\begin{aligned}\mathrm{Var}\left(\widehat{I}^{\mathrm{strat}}\right) &= \sum_{k=1}^{K} \frac{p_k^2 \sigma_k^2}{n_k} \\ &= K \, \frac{(1/K)^2 (1/(12K^2))}{n/K} = \frac{1}{12nK^2}.\end{aligned}$$

La variance est donc divisée exactement par K^2. Avec $K = 10$, la stratification produit ici, à nombre total de tirages identique, une variance cent fois plus faible et une erreur standard dix fois plus petite.
Ce gain spectaculaire vient du fait que la fonction $x \mapsto x$ varie très peu à l'intérieur de chaque petite strate, tandis que la variation entre strates est entièrement traitée de façon déterministe par les poids p_k.

2.5.3 Allocation optimale

Si les variances conditionnelles σ_k^2 sont très différentes, il est préférable de mettre plus de tirages dans les strates les plus variables.

Proposition 2.5.4: Allocation optimale de Neyman

On fixe $n_1 + \cdots + n_K = n$, en négligeant les contraintes d'intégralité. La variance stratifiée

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{p_k^2 \sigma_k^2}{n_k}$$

est minimale pour

$$n_k = n \frac{p_k \sigma_k}{\sum_{j=1}^{K} p_j \sigma_j}.$$

La variance minimale vaut

$$\frac{1}{n} \left(\sum_{k=1}^{K} p_k \sigma_k \right)^2.$$

Démonstration. On minimise

$$\sum_{k=1}^{K} \frac{p_k^2 \sigma_k^2}{n_k}$$

sous la contrainte $\sum_k n_k = n$. La condition de Lagrange donne

$$-\frac{p_k^2 \sigma_k^2}{n_k^2} + \lambda = 0,$$

donc n_k est proportionnel à $p_k \sigma_k$. La normalisation $\sum_k n_k = n$ donne la formule annoncée. La variance minimale s'obtient en remplaçant n_k par cette valeur. □

Exemple 2.5.5: Stratification de $[0,1]$

On veut estimer

$$I = \int_0^1 e^{-x^2} \, \mathrm{d}x.$$

La méthode naïve tire $U \sim \mathcal{U}([0,1])$ et moyenne e^{-U^2}. La stratification uniforme découpe $[0,1]$ en K intervalles

$$A_k = \left[\frac{k-1}{K}, \frac{k}{K} \right].$$

Dans chaque strate, on tire uniformément des points et on pondère par $1/K$. L'intérêt est que chaque portion de l'intervalle est représentée. Si $f(x) = e^{-x^2}$ varie plus vite près de 1 que près de 0, une stratification non uniforme peut encore améliorer la méthode en mettant davantage de strates là où la fonction varie le plus.

Commentaire pratique

En pratique, les σ_k sont rarement connus. Une procédure standard est :

1. faire un petit échantillon pilote dans chaque strate ;
2. estimer les σ_k ;
3. choisir les n_k proportionnellement à $p_k \widehat{\sigma}_k$;
4. lancer la simulation principale.

Cette procédure apparaîtra naturellement dans les exercices numériques.

2.6 Échantillonnage préférentiel

2.6.1 Changer la loi de simulation

L'échantillonnage préférentiel, ou *importance sampling*, est une méthode essentielle lorsque la contribution principale à une espérance vient d'une région peu visitée par la loi naturelle.

On veut calculer

$$I = \mathbb{E}_p \left(h(X) \right) = \int h(x) p(x) \, \mathrm{d}x,$$

où p est la densité naturelle. On choisit une autre densité q, plus favorable à la simulation, telle que

$$q(x) > 0 \qquad \text{dès que } h(x)p(x) \neq 0.$$

Cette condition de support est indispensable : aucune région qui contribue à l'intégrale ne doit devenir impossible sous la loi de simulation. Alors

$$I = \int h(x) \frac{p(x)}{q(x)} q(x) \, \mathrm{d}x = \mathbb{E}_q \left(h(X) \frac{p(X)}{q(X)} \right).$$

Le facteur

$$L(X) = \frac{p(X)}{q(X)}$$

est appelé poids d'importance ou rapport de vraisemblance.

Idée à retenir

On tire les points avec une loi q qui visite plus souvent les zones importantes. Mais comme on a changé la loi de tirage, il faut corriger chaque observation par le poids p/q. Le poids dit : “combien ce point aurait-il pesé sous la loi originale ?”

Proposition 2.6.1: Estimateur par importance sampling

Soient $X_1, \dots, X_n$ i.i.d. de densité q. Si

$$\mathbb{E}_q\left(h(X)^2 \frac{p(X)^2}{q(X)^2}\right) < +\infty,$$

alors

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{IS}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} h(X_i)\frac{p(X_i)}{q(X_i)}$$

est sans biais pour I, et sa variance vaut

$$\frac{1}{n}\left(\int h(x)^2 \frac{p(x)^2}{q(x)}\,\mathrm{d}x - I^2\right).$$

Démonstration. L'absence de biais vient du changement de densité :

$$\mathbb{E}_q\left(h(X)\frac{p(X)}{q(X)}\right) = \int h(x)\frac{p(x)}{q(x)}q(x)\,\mathrm{d}x = I.$$

La formule de variance est la variance d'une moyenne indépendante, avec

$$\mathbb{E}_q\left(h(X)^2\frac{p(X)^2}{q(X)^2}\right) = \int h(x)^2\frac{p(x)^2}{q(x)}\,\mathrm{d}x.$$

□

2.6.2 Densité optimale théorique

Proposition 2.6.2: Densité optimale

On cherche à minimiser le second moment

$$\int h(x)^2\frac{p(x)^2}{q(x)}\,\mathrm{d}x$$

parmi les densités q. Une densité optimale est

$$q^\star(x) = \frac{|h(x)|\,p(x)}{\int |h(u)|\,p(u)\,\mathrm{d}u}.$$

Si $h \geq 0$, alors

$$q^\star(x) = \frac{h(x)p(x)}{I}$$

et l'estimateur correspondant a variance nulle.

Démonstration. Par l'inégalité de Cauchy–Schwarz,

$$\left(\int |h(x)|\,p(x)\,\mathrm{d}x\right)^2 = \left(\int \frac{|h(x)|\,p(x)}{\sqrt{q(x)}}\sqrt{q(x)}\,\mathrm{d}x\right)^2 \leq \int h(x)^2\frac{p(x)^2}{q(x)}\,\mathrm{d}x.$$

L'égalité a lieu lorsque q est proportionnelle à $|h|\,p$. Si $h \geq 0$, alors sous $q^\star$,

$$h(X)\frac{p(X)}{q^\star(X)} = I$$

presque sûrement, donc la variance est nulle. □

Remarque 2.6.3: Pourquoi la densité optimale ne suffit pas

La densité optimale dépend en général de I, la quantité que l'on cherche précisément à calculer. Elle n'est donc pas directement utilisable. Mais elle donne une indication fondamentale : une bonne densité d'importance doit être grande là où $|h|\,p$ est grand.

2.6.3 Exemple central : $\mathbb{E}\left(e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}\right)$

L'exemple suivant est particulièrement instructif. Soit

$$X \sim \mathcal{N}(0,1), \qquad I_\beta = \mathbb{E}\left(e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}\right),$$

avec par exemple $\beta = 5$. On a

$$I_\beta = e^{\beta^2/2}\Phi(\beta),$$

car

$$e^{\beta x}\frac{e^{-x^2/2}}{\sqrt{2\pi}} = e^{\beta^2/2}\frac{e^{-(x-\beta)^2/2}}{\sqrt{2\pi}}.$$

Exemple 2.6.4: Variance de la méthode naïve

L'estimateur naïf utilise

$$Y = e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}.$$

Son second moment est

$$\mathbb{E}\left(Y^2\right) = \mathbb{E}\left(e^{2\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}\right) = e^{2\beta^2}\Phi(2\beta).$$

Donc

$$\mathrm{Var}\,(Y) = e^{2\beta^2}\Phi(2\beta) - e^{\beta^2}\Phi(\beta)^2.$$

Pour $\beta = 5$, on a

$$I_5 = e^{25/2}\Phi(5) \simeq 2.68337 \times 10^5,$$

et

$$\mathrm{Var}(Y) = e^{50}\Phi(10) - e^{25}\Phi(5)^2 \simeq 5.18 \times 10^{21}.$$

L'écart-type d'une seule observation est donc de l'ordre de 7.2×10^{10}, immensément plus grand que la moyenne elle-même. Le problème vient du fait que e^{5X} prend des valeurs énormes dans la queue droite de la normale, une région très peu visitée par la simulation naïve. La moyenne est mathématiquement bien définie, mais numériquement elle est dominée par des contributions très rares et très grandes.

Exemple 2.6.5: Échantillonnage préférentiel par translation gaussienne

On simule maintenant X sous la loi $\mathcal{N}(\mu, 1)$, de densité q_μ. La densité naturelle est $p = \varphi$, densité de $\mathcal{N}(0, 1)$. Le rapport de vraisemblance est

$$\frac{p(x)}{q_\mu(x)} = \exp\left(-\mu x + \frac{\mu^2}{2}\right).$$

L'estimateur devient

$$e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}} \exp\left(-\mu X + \frac{\mu^2}{2}\right), \qquad X \sim \mathcal{N}(\mu, 1).$$

Le choix $\mu = \beta$ est naturel : il recentre les simulations autour de la zone où l'intégrande $e^{\beta x}\varphi(x)$ est maximal. Pour $\mu = \beta$, l'estimateur se simplifie en

$$Z_\beta = e^{\beta^2/2}\mathbf{1}_{\{X>0\}}, \qquad X \sim \mathcal{N}(\beta, 1).$$

Comme $\mathbb{P}_{\mathcal{N}(\beta,1)}(X > 0) = \Phi(\beta)$, on retrouve bien

$$\mathbb{E}(Z_\beta) = e^{\beta^2/2}\Phi(\beta) = I_\beta.$$

Sa variance vaut exactement

$$\mathrm{Var}(Z_\beta) = e^{\beta^2}\Phi(\beta)(1 - \Phi(\beta)).$$

Pour $\beta = 5$, elle vaut environ 2.06×10^4, à comparer à 5.18×10^{21} pour la méthode naïve. Le rapport des variances est d'environ 2.5×10^{17}. Cet exemple extrême montre qu'un changement de loi bien choisi ne fournit pas seulement un petit gain de constante : il peut changer complètement la faisabilité numérique du problème.

2.6.4 Événements rares

Exemple 2.6.6: Probabilité rare pour une loi exponentielle

Soit $X \sim \mathcal{E}(1)$. On veut calculer

$$p_\ell = \mathbb{P}\left(X \in [\ell, \ell+1]\right) = e^{-\ell}\left(1 - e^{-1}\right).$$

L'estimateur naïf est une Bernoulli :

$$Y = \mathbf{1}_{\{X \in [\ell, \ell+1]\}}.$$

Sa variance est

$$p_\ell\left(1 - p_\ell\right).$$

Lorsque ℓ est grand, l'événement est très rare : la plupart des simulations valent 0. Une méthode d'importance consiste à tirer directement $U \sim \mathcal{U}\left([\ell, \ell+1]\right)$. Comme la densité de U vaut 1 sur l'intervalle, on écrit

$$p_\ell = \int_\ell^{\ell+1} e^{-x}\,\mathrm{d}x = \mathbb{E}\left(e^{-U}\right).$$

Le nouvel estimateur ne produit jamais de zéro : toutes les simulations sont dans la région utile. Sa variance est

$$\int_\ell^{\ell+1} e^{-2x}\,\mathrm{d}x - p_\ell^2 = e^{-2\ell}\left(\frac{1 - e^{-2}}{2} - \left(1 - e^{-1}\right)^2\right).$$

La variance naïve est d'ordre $e^{-\ell}$, tandis que la variance préférentielle est d'ordre $e^{-2\ell}$, c'est-à-dire du même ordre que p_ℓ^2. Plus précisément, en posant $a = 1 - e^{-1}$, on a $p_\ell = ae^{-\ell}$ et

$$\frac{\mathrm{Var}(e^{-U})}{p_\ell^2} = \frac{\frac{1-e^{-2}}{2} - a^2}{a^2} \simeq 0.08198,$$

indépendamment de ℓ. La difficulté ne se dégrade donc pas lorsque l'événement devient plus rare. C'est précisément le sens de la notion d'erreur relative bornée introduite ci-dessous.

2.6.5 Erreur relative et événements rares

Pour un événement rare, l'erreur absolue n'est pas le seul critère pertinent. Si p est très petit, une erreur de 10^{-4} peut être énorme ou négligeable selon que $p = 10^{-5}$ ou $p = 10^{-1}$. On regarde donc souvent l'erreur relative.

Définition 2.6.7: Variance relative

Soit $\widehat{p}_n$ un estimateur sans biais de $p > 0$. Sa variance relative est

$$\frac{\mathrm{Var}\left(\widehat{p}_n\right)}{p^2}.$$

Pour une moyenne de n simulations indépendantes, elle est de la forme

$$\frac{1}{n}\frac{\mathrm{Var}\left(Y\right)}{p^2}.$$

Remarque 2.6.8: De la variance relative à l'erreur relative

La variance relative n'est pas l'erreur relative réalisée $|\widehat{p}_n - p|/p$. Elle mesure l'échelle quadratique de cette erreur. En effet,

$$\mathbb{E}\left[\left(\frac{\widehat{p}_n - p}{p}\right)^2\right] = \frac{\mathrm{Var}(\widehat{p}_n)}{p^2}$$

pour un estimateur sans biais. Sous un TCL,

$$\frac{\widehat{p}_n - p}{p} \approx \mathcal{N}\left(0, \frac{\mathrm{Var}(Y)}{np^2}\right).$$

La racine carrée de la variance relative est donc l'analogue de l'erreur standard relative étudiée au chapitre 1.

Exemple 2.6.9: Pourquoi le naïf échoue pour un événement rare

Pour estimer $p = \mathbb{P}(A)$, l'estimateur naïf utilise $Y = \mathbf{1}_A$. On a

$$\mathrm{Var}(Y) = p(1-p).$$

La variance relative d'une simulation est donc

$$\frac{p(1-p)}{p^2} = \frac{1-p}{p} \simeq \frac{1}{p}$$

lorsque p est petit. Si $p = 10^{-6}$, il faut typiquement un nombre de simulations de l'ordre du million seulement pour voir l'événement quelques fois. Ce n'est pas une question de constante : c'est un défaut structurel de la méthode naïve.

Définition 2.6.10: Erreur relative bornée

Considérons une famille de probabilités rares $p_\ell \to 0$ et une famille d'estimateurs sans biais Y_ℓ. On dit que la méthode a une erreur relative bornée si

$$\sup_\ell \frac{\mathrm{Var}(Y_\ell)}{p_\ell^2} < +\infty.$$

Cela signifie que le nombre de simulations nécessaire pour obtenir une précision relative donnée ne diverge pas quand l'événement devient rare.

Dans l'exemple exponentiel précédent, la méthode par tirage uniforme sur $[\ell, \ell+1]$ a une variance d'ordre $e^{-2\ell}$, tandis que p_ℓ^2 est aussi d'ordre $e^{-2\ell}$. Elle possède donc une erreur relative bornée. La méthode naïve, elle, a une variance d'ordre $e^{-\ell}$, et sa variance relative diverge comme e^{ℓ}.

2.6.6 Choisir le paramètre d'une translation gaussienne

Dans un problème gaussien, une famille de lois d'importance très utilisée est la translation

$$q_\mu = \mathcal{N}(\mu, 1).$$

Le paramètre μ doit déplacer les tirages vers la région qui contribue le plus à l'intégrale. Dans l'exemple

$$I_\beta = \mathbb{E}\left(e^{\beta X}\mathbf{1}_{\{X>0\}}\right),$$

l'intégrande non normalisé est

$$e^{\beta x}\varphi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\beta x - \frac{x^2}{2}\right).$$

La fonction $x \mapsto \beta x - x^2/2$ est maximale en $x = \beta$. Cela explique le choix $\mu = \beta$. Cette règle simple est un cas particulier d'une idée générale : centrer la loi d'importance près du maximum de l'intégrande dominant.

Point de vigilance

Un mauvais choix de loi d'importance peut augmenter la variance, voire la rendre infinie. Il ne suffit pas de tirer ailleurs : il faut tirer dans les régions qui contribuent à l'intégrale, avec des poids qui restent raisonnables.

2.7 Synthèse et choix de méthode

Le tableau suivant résume les principales méthodes du chapitre.

Méthode	Idée	Situation favorable
Antithétique	Coupler deux tirages de même loi avec corrélation négative	Fonction monotone, symétrie naturelle comme U et $1-U$ ou Z et $-Z$
Contrôle	Soustraire une fluctuation centrée dont l'espérance est connue	Variable auxiliaire fortement corrélée avec la quantité à estimer
Conditionnement	Remplacer une variable bruitée par son espérance conditionnelle	Une partie du hasard peut être intégrée analytiquement
Stratification	Imposer une exploration équilibrée des régions de l'espace	Les moyennes conditionnelles varient beaucoup selon les régions
Importance sampling	Changer la loi de simulation et corriger par un poids	Événements rares, queues de distribution, intégrande concentrée

Table 2.1 – Résumé des méthodes de réduction de variance.

Commentaire pratique

Une bonne procédure numérique est souvent la suivante :

1. commencer par un estimateur naïf et mesurer sa variance empirique ;
2. identifier pourquoi il fluctue : queue rare, variable auxiliaire disponible, symétrie, hétérogénéité des régions ;
3. choisir une méthode adaptée à cette cause ;
4. comparer les demi-largeurs d'intervalles de confiance à temps de calcul comparable ;
5. vérifier que la méthode reste stable lorsque les paramètres changent.

2.8 Compléments mathématiques pour aller plus loin

Les deux compléments suivants précisent des points utiles pour l'analyse numérique des estimateurs et pour les applications avancées. Le premier clarifie ce que l'on entend par efficacité lorsque deux estimateurs n'ont pas le même coût de calcul. Le second explique pourquoi la réduction de variance ne doit pas seulement être évaluée qualitativement, mais aussi à travers l'erreur quadratique moyenne et la précision effectivement obtenue à budget fixé.

2.8.1 Autonormalisation des poids

Supposons que $X_i \sim q$, et posons $W(x) = p(x)/q(x)$. Si p est une densité normalisée, alors $\mathbb{E}_q(W) = 1$ et

$$I = \mathbb{E}_p(h) = \mathbb{E}_q(Wh).$$

L'estimateur standard est la moyenne de $W_i h(X_i)$. Lorsque la densité cible n'est connue qu'à une constante multiplicative près, on utilise souvent le rapport

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{SN}} = \frac{\sum_{i=1}^n W_i h(X_i)}{\sum_{i=1}^n W_i}.$$

La constante multiplicative inconnue se simplifie entre numérateur et dénominateur.

Proposition 2.8.1: Asymptotique de l'estimateur autonormalisé

Supposons

$$\mathbb{E}_q\left[W^2(h-I)^2\right] < +\infty.$$

Alors

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{SN}} \longrightarrow I \qquad \text{presque sûrement,}$$

et

$$\sqrt{n}\left(\widehat{I}_n^{\mathrm{SN}} - I\right) \Longrightarrow \mathcal{N}\left(0, \mathrm{Var}_q\left(W(h-I)\right)\right).$$

Démonstration. Par la loi forte,

$$\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i h(X_i) \longrightarrow I, \qquad \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i \longrightarrow 1.$$

Le quotient converge donc vers I. Pour le TCL, on écrit exactement

$$\widehat{I}_n^{\mathrm{SN}} - I = \frac{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i(h(X_i)-I)}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^n W_i}.$$

Le numérateur satisfait un TCL centré car $\mathbb{E}_q[W(h-I)] = 0$, tandis que le dénominateur converge vers 1. Le théorème de Slutsky donne le résultat. □

Point de vigilance

L'autonormalisation n'est pas une réduction de variance automatique. L'estimateur est en général biaisé à taille finie, et des poids très déséquilibrés peuvent au contraire rendre le rapport instable. Son intérêt principal est de permettre l'utilisation de densités cibles connues seulement à une constante près.

2.8.2 Taille effective d'échantillon

Une difficulté pratique en importance sampling est la dégénérescence des poids : quelques simulations peuvent porter presque toute la masse. En posant

$$\widetilde{w}_i = \frac{w_i}{\sum_{j=1}^n w_j},$$

on définit le diagnostic

$$\mathrm{ESS} = \frac{1}{\sum_{i=1}^n \widetilde{w}_i^2} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n w_i\right)^2}{\sum_{i=1}^n w_i^2}.$$

Comme $\sum_i \widetilde{w}_i = 1$ et $\widetilde{w}_i \geq 0$, on a toujours

$$1 \leq \mathrm{ESS} \leq n.$$

L'égalité ESS $= n$ a lieu lorsque tous les poids sont égaux ; si un seul poids vaut pratiquement 1 après normalisation, l'ESS est proche de 1.

Proposition 2.8.2: Limite asymptotique de l'ESS

Si les poids W_i sont i.i.d., positifs, avec $0 < \mathbb{E}(W) < \infty$ et $\mathbb{E}(W^2) < \infty$, alors

$$\frac{\mathrm{ESS}}{n} \longrightarrow \frac{\mathbb{E}(W)^2}{\mathbb{E}(W^2)} = \frac{1}{1 + \mathrm{CV}(W)^2} \qquad \text{presque sûrement,}$$

où $\mathrm{CV}(W)^2 = \mathrm{Var}(W)/\mathbb{E}(W)^2$.

Démonstration. On écrit

$$\frac{\mathrm{ESS}}{n} = \frac{\left(\frac{1}{n}\sum_i W_i\right)^2}{\frac{1}{n}\sum_i W_i^2}.$$

La loi forte donne la convergence du numérateur vers $\mathbb{E}(W)^2$ et du dénominateur vers $\mathbb{E}(W^2)$. La seconde identité vient de $\mathbb{E}(W^2) = \mathrm{Var}(W) + \mathbb{E}(W)^2$. □

L'ESS doit rester un diagnostic, et non être interprété comme un nombre exact de tirages indépendants équivalents. Il ne tient pas compte directement de la fonction h : une loi d'importance peut avoir des poids relativement dispersés tout en donnant une bonne variance pour une fonction précise, ou inversement.

Idée à retenir

La réduction de variance est une manière d'utiliser l'information disponible sur le problème. Une symétrie donne une variable antithétique. Une quantité connue donne une variable de contrôle. Une partie intégrable analytiquement donne un conditionnement. Une géométrie en régions donne une stratification. Une rareté donne un changement de loi.

Chapitre 3

Espérances conditionnelles, régression et algorithme de Longstaff–Schwartz

Dans les deux premiers chapitres, une quantité numérique était ramenée à une espérance non conditionnelle : on simulait des variables aléatoires indépendantes, puis on moyennait les valeurs obtenues. Cette stratégie est déjà très puissante, mais elle ne suffit plus dès que la décision dépend d'une information observée en cours de route.

Un exemple typique est celui d'une option exerçable avant maturité. À une date donnée, il faut comparer deux quantités : le gain immédiat si l'on exerce, et la valeur d'attente si l'on conserve l'option. La seconde quantité est une espérance conditionnelle : elle dépend de l'état courant du marché. Dans d'autres applications, la même difficulté apparaît lorsque l'on veut prédire un coût futur à partir d'une information partielle, approximer une fonction de décision, ou résoudre une équation de programmation dynamique.

Ce chapitre explique comment passer de la moyenne de Monte-Carlo à l'approximation de fonctions d'espérance conditionnelle. L'idée centrale est la suivante : une espérance conditionnelle est une projection dans un espace de Hilbert. Les méthodes de régression ne sont donc pas seulement des outils statistiques pratiques ; elles sont aussi une manière naturelle d'approximer cette projection. L'algorithme de Longstaff–Schwartz applique cette idée à l'arrêt optimal discret.

Objectifs du chapitre

Les objectifs du chapitre sont les suivants :

1. comprendre l'espérance conditionnelle comme meilleure approximation quadratique ;
2. construire une approximation par régression dans un espace de fonctions choisi ;
3. distinguer erreur d'approximation, erreur statistique et erreur numérique ;
4. formuler la programmation dynamique d'un problème d'arrêt optimal discret ;
5. dériver l'algorithme de Longstaff–Schwartz et en comprendre les limites pratiques.

3.1 Pourquoi les espérances conditionnelles apparaissent

Considérons une variable aléatoire réelle Y que l'on veut prédire à partir d'une information observable X. Si X représente par exemple le prix d'un actif aujourd'hui et Y un gain futur, alors l'objet pertinent n'est pas seulement $\mathbb{E}(Y)$, mais la fonction

$$x \longmapsto \mathbb{E}\left(Y \mid X = x\right).$$

Cette fonction donne, pour chaque état possible x, la meilleure prédiction moyenne du gain futur.

Dans un calcul de Monte-Carlo standard, on estime un nombre. Dans les problèmes de décision, on doit souvent estimer une fonction. Cette différence change la nature du problème. Une moyenne empirique donne directement un estimateur de $\mathbb{E}(Y)$. En revanche, une espérance conditionnelle

demande de regrouper les simulations selon les valeurs de X, ou d'utiliser une approximation fonctionnelle de la dépendance entre Y et X.

Idée à retenir

Une espérance conditionnelle est une moyenne locale. Elle répond à la question : parmi les trajectoires simulées qui ressemblent à l'état courant x, quelle est la valeur moyenne de la quantité future Y ? La difficulté est que, si X est continu, on ne revoit presque jamais exactement deux fois le même état. La régression remplace donc la notion de "même état" par une approximation fonctionnelle.

Exemple 3.1.1: Prix d'assurance dépendant d'un profil

Une compagnie d'assurance cherche à estimer le coût annuel moyen Y d'un assuré à partir d'un vecteur de caractéristiques X, par exemple l'âge, le bonus-malus, le type de véhicule et la zone géographique. Le tarif pur associé au profil x est

$$m(x) = \mathbb{E}\left(Y \mid X = x\right).$$

Le calcul de $\mathbb{E}(Y)$ donne seulement le coût moyen sur l'ensemble du portefeuille. Pour tarifer un nouveau contrat, il faut une estimation de la fonction m. Une méthode de régression consiste à chercher une approximation de $m(x)$ sous la forme d'une combinaison de variables explicatives et de transformations de ces variables.

Exemple 3.1.2: Exercice anticipé d'une option

Pour une option de vente de payoff $(K-S_t)_+$, si le prix actuel est très faible, l'exercice immédiat peut être avantageux. Si le prix actuel est proche du strike, attendre peut conserver une valeur importante. À une date d'exercice t_k, il faut comparer

$$(K - S_{t_k})_+ \quad \text{et} \quad \mathbb{E}\left(\text{gain futur optimal} \mid S_{t_k}\right).$$

La seconde quantité est la valeur de continuation. L'algorithme de Longstaff–Schwartz consiste précisément à approximer cette valeur de continuation par régression sur des trajectoires simulées.

3.2 Espérance conditionnelle comme projection L^2

On fixe un espace de probabilité $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbb{P})$. Avant de parler de projection, rappelons la définition probabiliste.

Définition 3.2.1: Espérance conditionnelle

Soit $Y \in L^1$ et soit $\mathcal{G} \subset \mathcal{F}$ une sous-tribu. Une variable Z est une version de $\mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G})$ si

1. Z est $\mathcal{G}$-mesurable ;
2. $Z \in L^1$;
3. pour tout $A \in \mathcal{G}$,
$$\mathbb{E}\left[Z\mathbf{1}_A\right] = \mathbb{E}\left[Y\mathbf{1}_A\right].$$

Deux versions sont égales presque sûrement.

Lorsque $Y \in L^2$, on a également $\mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G}) \in L^2$ par l'inégalité de Jensen conditionnelle. En outre, l'identité précédente s'étend de $\mathbf{1}_A$ à toute variable $Z \in L^2(\mathcal{G})$:

$$\mathbb{E}\left[YZ\right] = \mathbb{E}\left[\mathbb{E}(Y \mid \mathcal{G})Z\right].$$

On l'obtient d'abord pour les fonctions simples $\mathcal{G}$-mesurables, puis par approximation dans L^2.

Soit maintenant X une variable aléatoire à valeurs dans $\mathbb{R}^d$, et soit $Y \in L^2(\Omega)$. On note $\sigma(X)$ la tribu engendrée par X. L'espace

$$L^2\left(\sigma(X)\right) = \left\{ Z \in L^2(\Omega) : Z \text{ est } \sigma(X)\text{-mesurable} \right\}$$

est un sous-espace fermé de $L^2(\Omega)$.

Lemme 3.2.2: Fermeture de $L^2(\mathcal{G})$

Pour toute sous-tribu $\mathcal{G} \subset \mathcal{F}$, l'ensemble $L^2(\mathcal{G})$ est un sous-espace fermé de $L^2(\mathcal{F})$.

Démonstration. Soit $(Z_n) \subset L^2(\mathcal{G})$ telle que $Z_n \to Z$ dans L^2. On peut extraire une sous-suite (Z_{n_k}) qui converge presque sûrement vers Z. Chaque Z_{n_k} est $\mathcal{G}$-mesurable et une limite presque sûre de variables $\mathcal{G}$-mesurables est encore $\mathcal{G}$-mesurable, après modification éventuelle sur un ensemble négligeable. Ainsi $Z \in L^2(\mathcal{G})$. Le sous-espace est donc fermé. □

Comme $L^2(\sigma(X))$ est un sous-espace fermé de l'espace de Hilbert $L^2(\Omega)$, le théorème de projection orthogonale garantit l'existence et l'unicité d'un meilleur approximant quadratique. L'espérance conditionnelle $\mathbb{E}(Y \mid X)$ est précisément cette projection.

Théorème 3.2.3: Caractérisation projective de l'espérance conditionnelle

Soit $Y \in L^2(\Omega)$. La variable $\mathbb{E}(Y \mid X)$ est l'unique élément de $L^2(\sigma(X))$ tel que

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid X)\right) Z\right] = 0 \qquad \text{pour tout } Z \in L^2\left(\sigma(X)\right).$$

Elle vérifie en outre

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid X)\right)^2\right] = \min_{Z \in L^2(\sigma(X))} \mathbb{E}\left[(Y - Z)^2\right].$$

Démonstration. D'après la définition rappelée ci-dessus et son extension aux variables L^2 $\sigma(X)$-mesurables,

$$\mathbb{E}\left[\mathbb{E}(Y \mid X) Z\right] = \mathbb{E}(YZ) \qquad \text{pour tout } Z \in L^2\left(\sigma(X)\right).$$

En retranchant le membre de gauche, on obtient

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid X)\right) Z\right] = 0,$$

ce qui est exactement l'orthogonalité du résidu à tout le sous-espace $L^2(\sigma(X))$. Pour tout $Z \in L^2(\sigma(X))$, on écrit

$$Y - Z = \left(Y - \mathbb{E}(Y \mid X)\right) + \left(\mathbb{E}(Y \mid X) - Z\right).$$

Les deux termes du membre de droite sont orthogonaux dans L^2, donc

$$\mathbb{E}\left[(Y - Z)^2\right] = \mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid X)\right)^2\right] + \mathbb{E}\left[\left(\mathbb{E}(Y \mid X) - Z\right)^2\right].$$

Le minimum est donc atteint pour $Z = \mathbb{E}(Y \mid X)$, et l'unicité vient du fait que le dernier terme est nul seulement si $Z = \mathbb{E}(Y \mid X)$ dans L^2. □

Remarque 3.2.4: Fonction de régression

Comme $\mathbb{E}(Y \mid X)$ est $\sigma(X)$-mesurable, il existe une fonction mesurable $m\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ telle que

$$\mathbb{E}(Y \mid X) = m(X) \qquad \text{p.s.}$$

La fonction m est appelée fonction de régression de Y sur X. Elle est définie seulement presque partout pour la loi de X.

La caractérisation précédente donne une interprétation géométrique très utile. La variable Y se décompose sous la forme

$$Y = m(X) + \eta, \qquad \mathbb{E}(\eta \mid X) = 0.$$

La partie $m(X)$ est l'information prédictible à partir de X, tandis que η est le bruit résiduel non expliqué par X.

Exemple 3.2.5: Cas gaussien linéaire

Soit (X, Y) un vecteur gaussien centré de dimension deux, avec

$$\mathrm{Var}(X) = \sigma_X^2, \qquad \mathrm{Var}(Y) = \sigma_Y^2, \qquad \mathrm{Cov}(X, Y) = \rho\sigma_X\sigma_Y.$$

Posons

$$a = \frac{\mathrm{Cov}(X, Y)}{\mathrm{Var}(X)}, \qquad \eta = Y - aX.$$

Alors

$$\mathrm{Cov}(\eta, X) = \mathrm{Cov}(Y, X) - a\,\mathrm{Var}(X) = 0.$$

Comme (X, Y) est gaussien, (X, η) est également gaussien. Pour un vecteur gaussien, covariance nulle implique indépendance ; ainsi η est indépendante de X, et $\mathbb{E}(\eta \mid X) = \mathbb{E}(\eta) = 0$. On en déduit

$$\mathbb{E}(Y \mid X) = aX = \frac{\mathrm{Cov}(X, Y)}{\mathrm{Var}(X)} X = \rho\frac{\sigma_Y}{\sigma_X} X.$$

Dans ce cas, la meilleure prédiction quadratique parmi toutes les fonctions de X est déjà linéaire. Cette propriété est spécifique au cadre gaussien. En général, l'espérance conditionnelle n'est pas une fonction linéaire.

3.3 Approximation par projection sur un espace fini

En général, la fonction $m(x) = \mathbb{E}(Y \mid X = x)$ n'est pas connue. Une première idée consiste à choisir un espace de fonctions simple, de dimension finie, et à chercher dans cet espace la meilleure approximation quadratique de m.

Soient $\varphi_1, \ldots, \varphi_p\colon \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ des fonctions mesurables telles que $\mathbb{E}(\varphi_j(X)^2) < \infty$. On pose

$$\Phi = \left\{ x \mapsto \sum_{j=1}^{p} a_j \varphi_j(x) : a_1, \ldots, a_p \in \mathbb{R} \right\}.$$

On cherche donc une approximation de m sous la forme

$$m_p(x) = a_1\varphi_1(x) + \cdots + a_p\varphi_p(x).$$

Idée à retenir

Le choix des fonctions de base encode ce que l'on croit savoir de la forme de la fonction de continuation ou de prédiction. Des polynômes décrivent une dépendance globale et régulière. Des indicatrices de cellules décrivent une approximation par morceaux. Des fonctions locales capturent des effets différents selon les régions de l'espace d'état.

Une identité fondamentale explique pourquoi il suffit d'approximer la fonction de régression $m(X) = \mathbb{E}(Y \mid X)$. Pour toute fonction mesurable g telle que $g(X) \in L^2$,

$$\mathbb{E}\left[(Y - g(X))^2\right] = \mathbb{E}\left[(Y - m(X))^2\right] + \mathbb{E}\left[(m(X) - g(X))^2\right].$$

En effet, le terme croisé est nul car $Y - m(X)$ est orthogonal à toute fonction de X. Le premier terme est irréductible : c'est le bruit conditionnel. Le second est l'erreur d'approximation de la fonction de régression.

Proposition 3.3.1: Projection sur un espace engendré par des fonctions de base

On suppose que la matrice de Gram

$$G = \mathbb{E}\left[\varphi(X)\varphi(X)^T\right], \qquad \varphi(X) = (\varphi_1(X), \dots, \varphi_p(X))^T,$$

est inversible. Alors l'unique minimiseur de

$$a \longmapsto \mathbb{E}\left[\left(Y - a^T\varphi(X)\right)^2\right]$$

est donné par

$$a^\star = G^{-1}b, \qquad b = \mathbb{E}\left[Y\varphi(X)\right].$$

Il est caractérisé par les équations normales

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - (a^\star)^T\varphi(X)\right)\varphi_j(X)\right] = 0, \qquad j = 1, \dots, p.$$

Démonstration. On développe

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - a^T\varphi(X)\right)^2\right] = \mathbb{E}(Y^2) - 2a^T\mathbb{E}\left[Y\varphi(X)\right] + a^T\mathbb{E}\left[\varphi(X)\varphi(X)^T\right]a.$$

La fonction à minimiser est quadratique. Comme G est définie positive, le minimiseur est unique et annule le gradient, ce qui donne $Ga = b$. Les équations normales ne sont que la forme composante de l'orthogonalité entre le résidu et l'espace engendré par les fonctions de base. □

Remarque 3.3.2: Deux sources d'erreur

La projection sur Φ remplace la fonction m par la meilleure approximation disponible dans Φ. Cette étape crée une erreur d'approximation. En pratique, les coefficients $a^\star$ ne sont pas connus et sont estimés à partir d'un échantillon simulé. Cette seconde étape crée une erreur statistique. Augmenter la richesse de Φ diminue souvent la première erreur, mais augmente la seconde et peut rendre le problème numériquement instable.

3.3.1 Régression empirique par moindres carrés

On suppose maintenant que l'on dispose d'un échantillon

$$(X_i, Y_i)_{1 \le i \le n}$$

distribué comme (X, Y). La version empirique du problème de projection consiste à minimiser

$$Q_n(a) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\Big(Y_i - a^T\varphi(X_i)\Big)^2.$$

En posant la matrice de plan

$$A = (\varphi_j(X_i))_{1\le i\le n,\ 1\le j\le p}$$

et le vecteur $Y = (Y_1, \dots, Y_n)^T$, on obtient le problème usuel de moindres carrés

$$\min_{a\in\mathbb{R}^p} \|Y - Aa\|_2^2.$$

Si A^TA est inversible, la solution est

$$\widehat{a}_n = \left(A^TA\right)^{-1} A^TY.$$

La fonction estimée est alors

$$\widehat{m}_n(x) = \widehat{a}_n^T\varphi(x).$$

Proposition 3.3.3: Convergence des coefficients pour une base fixée

On suppose que p est fixé, que $\mathbb{E}(Y^2) < \infty$, que $\mathbb{E}(\varphi_j(X)^2) < \infty$, et que la matrice $G = \mathbb{E}(\varphi(X)\varphi(X)^T)$ est inversible. Alors, dès que l'échantillon est i.i.d.,

$$\widehat{a}_n \longrightarrow a^\star \qquad \text{en probabilité.}$$

Démonstration. Par la loi des grands nombres,

$$\frac{1}{n}A^TA = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\varphi(X_i)\varphi(X_i)^T \longrightarrow G$$

et

$$\frac{1}{n}A^TY = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}Y_i\varphi(X_i) \longrightarrow b$$

en probabilité. L'inversion matricielle est continue sur l'ensemble des matrices inversibles. Comme G est inversible, on obtient

$$\widehat{a}_n = \left(\frac{1}{n}A^TA\right)^{-1}\frac{1}{n}A^TY \longrightarrow G^{-1}b = a^\star.$$

□

Proposition 3.3.4: TCL pour les coefficients de régression

Sous les hypothèses précédentes, supposons de plus

$$\mathbb{E}\left[\|\varphi(X)\|^4\right] < +\infty, \qquad \mathbb{E}(Y^4) < +\infty.$$

Posons

$$\varepsilon = Y - (a^\star)^T\varphi(X), \qquad \Omega = \mathbb{E}\left[\varepsilon^2\varphi(X)\varphi(X)^T\right].$$

Alors

$$\sqrt{n}\,(\widehat{a}_n - a^\star) \Longrightarrow \mathcal{N}_p\left(0, G^{-1}\Omega G^{-1}\right).$$

Démonstration. Les équations normales empiriques donnent

$$\frac{1}{n} A^T A(\widehat{a}_n - a^\star) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \varphi(X_i)\varepsilon_i.$$

Par définition de $a^\star$, $\mathbb{E}[\varphi(X)\varepsilon] = 0$. Le TCL multivarié donne donc

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^{n} \varphi(X_i)\varepsilon_i \Longrightarrow \mathcal{N}_p(0, \Omega).$$

Par ailleurs, $n^{-1}A^T A \to G$ en probabilité. L'inversion est continue au voisinage de la matrice inversible G, et Slutsky donne le résultat. □

Cette formule montre explicitement que l'erreur statistique est de taille $n^{-1/2}$ pour une base de dimension fixée. Elle montre aussi pourquoi un mauvais conditionnement de G amplifie fortement la variance des coefficients.

Point de vigilance

La formule $\widehat{a}_n = (A^T A)^{-1} A^T Y$ est mathématiquement simple, mais elle n'est pas toujours la meilleure manière de calculer les coefficients. Si les colonnes de A sont presque colinéaires, la matrice $A^T A$ est mal conditionnée. Numériquement, il vaut souvent mieux utiliser une décomposition QR ou une décomposition en valeurs singulières.

Exemple 3.3.5: Régression polynomiale simple

Soit $X \sim \mathcal{U}([-1, 1])$ et

$$Y = \sin(\pi X) + \eta,$$

où η est un bruit centré indépendant de X. Alors

$$\mathbb{E}(Y \mid X) = \sin(\pi X).$$

Si l'on choisit la base $(1, x, x^2)$, la symétrie permet déjà de calculer la projection population. La fonction $\sin(\pi x)$ est impaire, tandis que 1 et x^2 sont paires ; leurs produits ont donc moyenne nulle sur $[-1, 1]$. Seul le coefficient de x subsiste. Comme

$$\mathbb{E}(X^2) = \frac{1}{3}$$

et

$$\mathbb{E}\left[X \sin(\pi X)\right] = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} x \sin(\pi x)\,\mathrm{d}x = \int_{0}^{1} x \sin(\pi x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\pi},$$

on obtient

$$a_1^\star = 0, \qquad a_2^\star = \frac{1/\pi}{1/3} = \frac{3}{\pi}, \qquad a_3^\star = 0.$$

La meilleure approximation quadratique dans $\mathrm{Vect}(1, x, x^2)$ est donc simplement

$$m_2(x) = \frac{3}{\pi} x.$$

Cet exemple distingue nettement l'erreur d'approximation — la droite $3x/\pi$ n'est pas $\sin(\pi x)$ — de l'erreur statistique due à l'estimation de ses coefficients. Si l'on enrichit la base avec $x^3, x^4, \ldots$, l'erreur d'approximation peut diminuer, mais l'estimation demande davantage de données et devient plus sensible au bruit et au conditionnement numérique.

3.3.2 Le choix des fonctions de base

Le choix de Φ est un point central. Il n'existe pas de base universelle. Le bon choix dépend de la régularité de la fonction à approximer, de la dimension de l'état, du nombre de simulations et de l'objectif numérique.

Les bases polynomiales sont simples et efficaces en petite dimension. Les fonctions indicatrices de cellules permettent une approximation par morceaux et sont proches de la quantification. Les bases locales, comme les splines ou les fonctions polynomiales par morceaux, donnent une bonne flexibilité lorsque la fonction change de comportement selon les régions de l'espace.

Commentaire pratique

Dans les applications de type Longstaff–Schwartz, on utilise souvent peu de fonctions de base. Pour une option put dans le modèle de Black–Scholes à une dimension, la base

$$1, \qquad S, \qquad S^2$$

constitue déjà un premier choix naturel. Pour des problèmes plus complexes, il faut enrichir la base, mais le risque de sur-apprentissage augmente rapidement.

3.4 Quantification et approximation par cellules

La régression n'est pas la seule manière d'approximer une espérance conditionnelle. Une autre approche consiste à remplacer la variable X par une version discrétisée $\widehat{X}$, qui ne prend qu'un nombre fini de valeurs. On peut alors approximer $\mathbb{E}(Y \mid X)$ par $\mathbb{E}(Y \mid \widehat{X})$.

Soit $C_1, \dots, C_K$ une partition mesurable de l'espace d'état. On définit

$$\widehat{X} = \sum_{k=1}^{K} x_k \mathbf{1}_{\{X \in C_k\}},$$

où x_k est un représentant de la cellule C_k. Alors

$$\mathbb{E}(Y \mid \widehat{X}) = \sum_{k=1}^{K} \mathbb{E}\left(Y \mid X \in C_k\right) \mathbf{1}_{\{X \in C_k\}}.$$

Cette formule transforme une espérance conditionnelle continue en un ensemble fini de moyennes conditionnelles.

Idée à retenir

La quantification remplace la question “quelle est la valeur moyenne future pour exactement cet état ?” par “quelle est la valeur moyenne future pour les états appartenant à la même cellule ?”. C'est une méthode très intuitive, mais elle souffre rapidement de la dimension : le nombre de cellules nécessaires croît très vite lorsque d augmente.

Proposition 3.4.1: Quantification comme projection

Soit $\widehat{X}$ une variable aléatoire finie telle que $\sigma(\widehat{X}) \subset \sigma(X)$. Alors

$$\mathbb{E}(Y \mid \widehat{X})$$

est la projection orthogonale de Y sur $L^2(\sigma(\widehat{X}))$. De plus,

$$\mathbb{E}\left[\left(Y - \mathbb{E}(Y \mid \widehat{X})\right)^2\right] \geq \mathbb{E}\left[(Y - \mathbb{E}(Y \mid X))^2\right].$$

Démonstration. La première assertion est la caractérisation projective appliquée à la tribu $\sigma(\widehat{X})$. Comme $L^2(\sigma(\widehat{X})) \subset L^2(\sigma(X))$, minimiser sur le petit espace ne peut pas donner une erreur plus faible que minimiser sur le grand espace. □

La différence avec le conditionnement complet se mesure exactement par une identité de Pythagore. Comme $\sigma(\widehat{X}) \subset \sigma(X)$,

$$\mathbb{E}(Y \mid \widehat{X}) = \mathbb{E}\left(\mathbb{E}(Y \mid X) \mid \widehat{X}\right).$$

Par conséquent,

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\left[(Y - \mathbb{E}(Y \mid \widehat{X}))^2\right] &= \mathbb{E}\left[(Y - \mathbb{E}(Y \mid X))^2\right] \\ &\quad + \mathbb{E}\left[(\mathbb{E}(Y \mid X) - \mathbb{E}(Y \mid \widehat{X}))^2\right].\end{aligned}$$

Le second terme est précisément le surcroît d'erreur introduit par la discrétisation de l'état.

Exemple 3.4.2: Approximation par classes de prix

Dans un modèle à un actif, on peut découper l'axe des prix en intervalles

$$[0, 80),\ [80, 90),\ [90, 100),\ [100, 110),\ [110, +\infty).$$

La valeur de continuation est alors approximée par une constante sur chaque intervalle. Cette méthode est facile à expliquer et à implémenter, mais elle crée des discontinuités artificielles et devient vite peu efficace si l'état contient plusieurs actifs ou plusieurs facteurs de risque.

3.5 Arrêt optimal discret et programmation dynamique

On passe maintenant au problème qui motive l'algorithme de Longstaff–Schwartz. Soit $(\mathcal{F}_k)_{0 \leq k \leq m}$ une filtration représentant l'information disponible aux dates $t_0 < \cdots < t_m$. On considère un processus de récompense intégrable $(H_k)_{0 \leq k \leq m}$, adapté à cette filtration. Si l'on s'arrête à la date k, on reçoit H_k.

Pour $k \in \{0, \ldots, m\}$, notons $\mathcal{T}_k$ l'ensemble des temps d'arrêt τ à valeurs dans $\{k, \ldots, m\}$. La valeur optimale conditionnelle à la date k est

$$V_k = \operatorname*{ess\,sup}_{\tau \in \mathcal{T}_k} \mathbb{E}\left[H_\tau \mid \mathcal{F}_k\right].$$

Le supremum essentiel est nécessaire parce que les quantités comparées sont elles-mêmes des variables aléatoires $\mathcal{F}_k$-mesurables.

Théorème 3.5.1: Enveloppe de Snell et programmation dynamique

On définit récursivement

$$V_m = H_m,$$

puis, pour $k = m-1, \dots, 0$,

$$C_k = \mathbb{E}\left[V_{k+1} \mid \mathcal{F}_k\right], \qquad V_k = \max(H_k, C_k).$$

Alors

$$V_k = \operatorname*{ess\,sup}_{\tau \in \mathcal{T}_k} \mathbb{E}\left[H_\tau \mid \mathcal{F}_k\right].$$

En particulier, le temps d'arrêt

$$\tau_k^\star = \inf\{j \geq k : H_j \geq C_j\}$$

— avec la convention $C_m = -\infty$ — est optimal à partir de la date k.

Démonstration. La preuve se fait par récurrence rétrograde. À la date finale, $\mathcal{T}_m = \{m\}$, donc $V_m = H_m$.

Supposons le résultat vrai à la date $k+1$. Prenons $\tau \in \mathcal{T}_k$. Sur l'événement $\{\tau = k\}$, le gain est H_k. Sur $\{\tau > k\}$, le temps τ appartient à $\mathcal{T}_{k+1}$, donc, par l'hypothèse de récurrence,

$$\mathbb{E}(H_\tau \mid \mathcal{F}_{k+1}) \leq V_{k+1}.$$

En reprenant l'espérance conditionnelle sachant $\mathcal{F}_k$,

$$\mathbb{E}(H_\tau \mid \mathcal{F}_k) \leq H_k \mathbf{1}_{\{\tau=k\}} + C_k \mathbf{1}_{\{\tau>k\}} \leq \max(H_k, C_k) = V_k.$$

Ainsi V_k majore la valeur de toute stratégie admissible.

Réciproquement, si $H_k \geq C_k$, on s'arrête immédiatement et l'on obtient $V_k = H_k$. Si $H_k < C_k$, on continue une étape puis on suit une stratégie optimale à partir de $k+1$, ce qui donne la valeur C_k. La règle $\tau_k^\star$ réalise donc V_k, ce qui achève la récurrence. □

Dans le cadre markovien du cours, on prend $H_k = h_k(X_k)$ pour une chaîne de Markov (X_k). La propriété de Markov implique alors l'existence de fonctions déterministes v_k et c_k telles que

$$V_k = v_k(X_k), \qquad C_k = c_k(X_k),$$

et

$$c_k(x) = \mathbb{E}\left[v_{k+1}(X_{k+1}) \mid X_k = x\right], \qquad v_k(x) = \max\left(h_k(x), c_k(x)\right).$$

C'est cette fonction de continuation c_k qu'il faudra approximer numériquement.

Idée à retenir

Le point difficile n'est pas le maximum. Le point difficile est le calcul de la valeur de continuation $C_k(x)$. Elle est une espérance conditionnelle d'une quantité future qui dépend elle-même de décisions optimales futures. C'est pourquoi l'algorithme procède en arrière dans le temps.

Exemple 3.5.2: Put bermudéen dans Black–Scholes

On considère un actif (S_t) suivant, sous la probabilité risque-neutre,

$$S_{t_{k+1}} = S_{t_k} \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)\Delta t + \sigma\sqrt{\Delta t} Z_{k+1}\right),$$

où les Z_k sont i.i.d. de loi $\mathcal{N}(0,1)$. Pour éviter toute ambiguïté d'actualisation, on exprime ici les valeurs en unités monétaires de la date courante t_k. Le gain d'exercice immédiat est

$$h_k(s) = (K-s)_+.$$

La récurrence de programmation dynamique est alors

$$v_m(s) = (K-s)_+,$$

et, pour $k < m$,

$$c_k(s) = e^{-r\Delta t}\mathbb{E}\left[v_{k+1}(S_{t_{k+1}}) \mid S_{t_k} = s\right], \qquad v_k(s) = \max\left((K-s)_+, c_k(s)\right).$$

Le facteur $e^{-r\Delta t}$ transforme la valeur future à t_{k+1} en valeur à t_k. On pourrait de façon équivalente actualiser tous les cashflows à la date 0 dès le départ ; il faut seulement ne pas mélanger les deux conventions.
La fonction c_k n'a généralement pas de formule fermée. L'algorithme de Longstaff–Schwartz consiste à l'approximer par régression sur des trajectoires simulées.

3.6 Algorithme de Longstaff–Schwartz

L'algorithme de Longstaff–Schwartz est une méthode de Monte-Carlo par régression pour les problèmes d'arrêt optimal en temps discret. Il repose sur une observation simple : si l'on connaît approximativement la valeur de continuation $C_k(x)$, alors on peut décider s'il faut exercer ou continuer en comparant $h_k(x)$ et $C_k(x)$. La valeur de continuation étant une espérance conditionnelle, on l'approxime par moindres carrés.

3.6.1 Principe mathématique

On choisit, pour chaque date t_k, un espace de fonctions

$$\Phi_k = \mathrm{Vect}\left(\varphi_{k,1}, \ldots, \varphi_{k,p_k}\right).$$

Idéalement, on voudrait approcher

$$C_k(x) = \mathbb{E}\left[V_{k+1}(X_{k+1}) \mid X_k = x\right]$$

par sa projection dans Φ_k. Dans la pratique, V_{k+1} est elle-même remplacée par une approximation construite aux dates ultérieures.

Pour un échantillon de trajectoires $(X_0^{(i)}, \ldots, X_m^{(i)})_{1\le i\le n}$, on procède en arrière. À la date k, les réponses de régression sont les cashflows futurs obtenus en suivant la stratégie déjà construite à partir des dates $k+1, \ldots, m$. Les variables explicatives sont les états $X_k^{(i)}$.

À la date t_k, il faut être précis sur la variable réponse de la régression. Pour chaque trajectoire i, supposons qu'une politique ait déjà été construite aux dates $k+1, \ldots, m$, et notons $\tau_{k+1}^{(i)}$ la date d'exercice future produite par cette politique. Le cashflow futur, ramené à la date t_k, est

$$Y_k^{(i)} = e^{-r\left(t_{\tau_{k+1}^{(i)}} - t_k\right)} h_{\tau_{k+1}^{(i)}}\left(X_{\tau_{k+1}^{(i)}}^{(i)}\right).$$

Conditionnellement à $X_k = x$, l'espérance de ce cashflow est la valeur de continuation de la politique future déjà construite. La régression de $Y_k^{(i)}$ sur des fonctions de $X_k^{(i)}$ approxime donc exactement l'objet dont on a besoin pour décider à la date k.

Algorithme 3.6.1: Longstaff–Schwartz, version détaillée

1. Simuler n trajectoires indépendantes $(X_0^{(i)}, \dots, X_m^{(i)})$.
2. À la date finale, fixer $\tau^{(i)} = m$ et le cashflow $H^{(i)} = h_m(X_m^{(i)})$.
3. Pour $k = m-1, \dots, 1$:
   - **a.** pour chaque trajectoire, ramener à t_k le cashflow futur actuellement retenu,
   $$Y_k^{(i)} = e^{-r(t_{\tau^{(i)}} - t_k)} H^{(i)};$$
   - **b.** choisir les trajectoires utilisées pour la régression — souvent celles dans la monnaie, $h_k(X_k^{(i)}) > 0$;
   - **c.** calculer par moindres carrés les coefficients $\widehat{a}_k$ dans
   $$Y_k^{(i)} \approx \widehat{a}_k^T \varphi_k(X_k^{(i)}),$$
   et poser $\widehat{c}_k(x) = \widehat{a}_k^T \varphi_k(x)$;
   - **d.** si
   $$h_k(X_k^{(i)}) \geq \widehat{c}_k(X_k^{(i)}),$$
   remplacer $\tau^{(i)}$ par k et $H^{(i)}$ par $h_k(X_k^{(i)})$; sinon conserver le cashflow futur.
4. La politique obtenue est la règle "exercer lorsque $h_k(x) \geq \widehat{c}_k(x)$". Pour obtenir une estimation propre de sa valeur, l'évaluer de préférence sur un second échantillon indépendant de trajectoires.

Le rôle de la régression est donc strictement local : à chaque date, elle approxime une espérance conditionnelle de cashflow futur. La boucle rétrograde est nécessaire parce que le cashflow utilisé comme réponse dépend des décisions déjà construites aux dates ultérieures.

Remarque 3.6.2: Actualisation

Deux conventions sont possibles.

1. *Valeurs courantes :* les payoffs h_k sont exprimés à la date t_k et chaque cashflow futur est multiplié par le facteur $e^{-r(t_j - t_k)}$ lorsqu'il est comparé à un exercice à t_k.
2. *Valeurs actualisées à l'origine :* on remplace dès le départ h_k par $e^{-rt_k} h_k$. La récurrence ne contient alors plus de facteur d'actualisation supplémentaire.

Les deux formulations sont exactement équivalentes. Une erreur fréquente consiste à actualiser deux fois, ou au contraire à oublier un facteur en mélangeant les conventions.

3.6.2 Politique d'exercice et estimation du prix

Une approximation $\widehat{C}_k$ de la valeur de continuation définit une règle d'arrêt

$$\widehat{\tau} = \inf \left\{ k : h_k(X_k) \geq \widehat{C}_k(X_k) \right\}.$$

Si cette règle est évaluée sur un échantillon indépendant, l'estimateur

$$\widehat{V}_N^{\text{test}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} e^{-rt_{\widehat{\tau}^{(i)}}} h_{\widehat{\tau}^{(i)}} \left(X_{\widehat{\tau}^{(i)}}^{(i)} \right)$$

— ici écrit en valeur à la date 0 — est une moyenne Monte-Carlo ordinaire. Conditionnellement à l'échantillon d'apprentissage, la politique $\widehat{\tau}$ est fixée ; l'estimateur est donc sans biais pour la valeur de cette politique et un TCL standard s'applique. On peut ainsi produire une erreur standard et un intervalle de confiance sur l'échantillon de test.

Cette valeur de politique est inférieure ou égale à la valeur optimale, puisque $\widehat{\tau}$ n'est qu'une stratégie admissible parmi toutes les stratégies possibles.

Proposition 3.6.3: Évaluation d'une politique d'arrêt

Soit τ un temps d'arrêt à valeurs dans $\{0, 1, \dots, m\}$. Alors

$$\mathbb{E}\left[h_\tau(X_\tau) \mid X_0\right] \leq \sup_\theta \mathbb{E}\left[h_\theta(X_\theta) \mid X_0\right].$$

En particulier, toute politique d'exercice construite par approximation fournit, lorsqu'elle est évaluée sans réutiliser les mêmes erreurs de régression, une borne inférieure de la valeur optimale.

Démonstration. La quantité de droite est le supremum de $\mathbb{E}(h_\theta(X_\theta) \mid X_0)$ sur l'ensemble des temps d'arrêt admissibles. Comme τ appartient à cet ensemble, l'inégalité est immédiate. □

Proposition 3.6.4: Évaluation sur un échantillon indépendant

Soit $\mathcal{D}_{\text{train}}$ l'échantillon utilisé pour construire une politique aléatoire $\widehat{\tau}$. Conditionnellement à $\mathcal{D}_{\text{train}}$, soient $G_1, \dots, G_N$ les gains actualisés obtenus en appliquant cette politique à N trajectoires de test indépendantes. Alors

$$\mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} G_i \,\middle|\, \mathcal{D}_{\text{train}}\right] = V(\widehat{\tau}),$$

et

$$\operatorname{Var}\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} G_i \,\middle|\, \mathcal{D}_{\text{train}}\right) = \frac{\operatorname{Var}(G_1 \mid \mathcal{D}_{\text{train}})}{N}.$$

Sous une hypothèse de carré intégrable, le TCL conditionnel donne donc l'intervalle de confiance habituel pour $V(\widehat{\tau})$.

Démonstration. Conditionnellement aux données d'apprentissage, la règle $\widehat{\tau}$ est une fonction déterministe de la trajectoire. Les trajectoires de test sont i.i.d., donc les gains G_i sont i.i.d. conditionnellement à $\mathcal{D}_{\text{train}}$. Les deux formules sont alors celles d'une moyenne empirique ordinaire. □

Point de vigilance

Il faut distinguer deux opérations : construire une règle d'exercice et évaluer cette règle. Si les mêmes trajectoires servent aux deux opérations, l'estimation peut être optimiste ou difficile à interpréter. Une pratique robuste consiste à apprendre la règle sur un premier échantillon, puis à l'évaluer sur un second échantillon indépendant.

3.6.3 Exemple détaillé : put bermudéen

On considère un put bermudéen dans Black–Scholes. Les trajectoires sont simulées selon

$$S_{k+1}^{(i)} = S_k^{(i)} \exp\left(\left(r - \frac{\sigma^2}{2}\right)\Delta t + \sigma\sqrt{\Delta t}\, Z_{k+1}^{(i)}\right).$$

À une date k, on cherche à approximer

$$C_k(s) = \mathbb{E}\left[e^{-r\Delta t} V_{k+1}(S_{k+1}) \mid S_k = s\right]$$

si l'on travaille en valeurs à la date t_k. Un choix simple de base est

$$\varphi_1(s) = 1, \qquad \varphi_2(s) = s, \qquad \varphi_3(s) = s^2.$$

La régression donne donc une approximation

$$\widehat{C}_k(s) = \widehat{a}_{k,1} + \widehat{a}_{k,2} s + \widehat{a}_{k,3} s^2.$$

La règle d'exercice approchée est

$$(K - s)_+ \geq \widehat{C}_k(s).$$

Lorsque s est très faible, le payoff immédiat est élevé et l'exercice devient souvent optimal. Lorsque s est proche de K, la convexité du payoff et la volatilité future donnent une valeur d'attente qui peut rendre la continuation préférable.

Idée à retenir

La régression ne cherche pas à approximer le payoff immédiat, qui est connu exactement. Elle cherche à approximer la valeur d'attente, c'est-à-dire le prix de l'information future et de la possibilité d'exercer plus tard. C'est cette fonction qui détermine la frontière entre exercice et continuation.

3.7 Erreurs et diagnostics

L'algorithme de Longstaff–Schwartz combine plusieurs approximations. Il est important de les distinguer.

3.7.1 Erreur de discrétisation temporelle

Une option américaine peut être exercée à tout instant, alors qu'un modèle bermudéen n'autorise l'exercice qu'à un nombre fini de dates. Plus les dates d'exercice sont nombreuses, plus le problème bermudéen se rapproche du problème américain. Cette approximation est indépendante de l'erreur de Monte-Carlo.

3.7.2 Erreur d'approximation fonctionnelle

Même avec une infinité de trajectoires, la régression dans un espace Φ_k ne donne que la meilleure approximation de la valeur de continuation dans cet espace. Si la base est trop pauvre, la frontière d'exercice sera mal représentée.

3.7.3 Erreur statistique

Avec un nombre fini de trajectoires, les coefficients de régression fluctuent. Pour une base de dimension fixée et une matrice de Gram bien conditionnée, la section 3.3 montre que

$$\widehat{a}_k - a_k^\star = O_{\mathbb{P}}(n^{-1/2}).$$

Mais cette erreur ne reste pas locale : une approximation imparfaite à la date $k+1$ modifie les cashflows futurs utilisés comme réponses de régression à la date k. L'erreur se propage donc en arrière dans le temps.

Il faut aussi distinguer erreur de valeur et erreur de décision. La décision dépend du signe de

$$h_k(x) - c_k(x).$$

Si $\widehat{c}_k$ est proche de c_k, une mauvaise décision ne peut se produire que lorsque x est proche de la frontière d'exercice, c'est-à-dire lorsque $|h_k(x) - c_k(x)|$ est du même ordre que l'erreur de régression. Ainsi une petite erreur quadratique sur c_k peut être presque sans effet si peu de trajectoires sont proches de la frontière ; elle peut au contraire modifier beaucoup de décisions si la distribution de X_k concentre de la masse près de cette frontière.

3.7.4 Erreur numérique

Les matrices de régression peuvent être mal conditionnées, surtout lorsque les fonctions de base sont fortement corrélées. Les polynômes de degré élevé peuvent provoquer ce phénomène. Des bases orthogonales ou des méthodes numériques plus stables peuvent améliorer la situation.

Commentaire pratique

Plusieurs diagnostics simples sont utiles :

1. comparer le prix obtenu au prix européen correspondant, qui donne une borne inférieure naturelle pour un put sans dividendes dans les modèles usuels ;
2. augmenter le nombre de trajectoires et vérifier la stabilité des résultats ;
3. comparer plusieurs bases de régression ;
4. évaluer la politique sur un échantillon indépendant ;
5. inspecter les décisions d'exercice en fonction de l'état pour vérifier qu'elles sont économiquement plausibles.

3.8 Synthèse

Le passage de Monte-Carlo classique à Longstaff–Schwartz repose sur une chaîne d'idées cohérente :

1. une espérance conditionnelle est une projection L^2 ;
2. une projection infinie-dimensionnelle peut être remplacée par une projection sur un espace de fonctions choisi ;
3. cette projection peut être estimée par moindres carrés sur des trajectoires simulées ;
4. la programmation dynamique transforme un problème d'arrêt optimal en une suite de calculs d'espérances conditionnelles ;
5. Longstaff–Schwartz remplace ces espérances conditionnelles par des régressions empiriques effectuées en remontant le temps.

Idée à retenir

Le Monte-Carlo standard estime un nombre. La régression Monte-Carlo estime une fonction. L'arrêt optimal utilise cette fonction pour prendre des décisions. La difficulté n'est donc pas seulement de réduire l'erreur statistique, mais de construire une approximation fonctionnelle suffisamment bonne pour que les décisions induites soient pertinentes.

Chapitre 4

Suites à faible discrépance et algorithmes stochastiques

Les chapitres précédents ont présenté deux façons d'améliorer une méthode de Monte-Carlo. La première consiste à mieux contrôler l'erreur statistique d'une moyenne empirique. La seconde consiste à réduire sa variance en exploitant la structure du problème. Ce chapitre présente deux autres idées, de nature différente.

La première idée consiste à remplacer les points aléatoires par des points déterministes beaucoup mieux répartis dans le cube. On obtient les méthodes de quasi-Monte-Carlo. Elles ne réduisent pas la variance d'un estimateur aléatoire : elles changent la nature même de l'approximation. Au lieu d'utiliser le hasard pour remplir le cube, on construit une suite de points qui couvre l'espace aussi régulièrement que possible.

La seconde idée concerne les situations où la quantité cherchée n'est pas seulement une espérance, mais la solution d'une équation ou d'un problème d'optimisation dont les valeurs ne sont accessibles qu'avec bruit. Dans ce cas, on ne veut pas seulement estimer un nombre fixe : on veut déplacer progressivement un paramètre dans la bonne direction malgré des observations bruitées. C'est le rôle des algorithmes de Robbins–Monro et de Kiefer–Wolfowitz.

Objectifs du chapitre

Dans ce chapitre, on étudie deux familles de méthodes :

1. les méthodes de quasi-Monte-Carlo, fondées sur des suites déterministes à faible discrépance ;
2. les algorithmes stochastiques récursifs, qui permettent de résoudre des équations ou d'optimiser des fonctions observées avec bruit.

Les deux thèmes sont reliés par une même question : comment utiliser des simulations de façon plus structurée qu'une simple moyenne empirique ?

4.1 Pourquoi remplacer le hasard par des points déterministes ?

Considérons une intégrale

$$I = \int_{[0,1]^d} f(u)\,\mathrm{d}u.$$

La méthode de Monte-Carlo classique utilise des variables aléatoires indépendantes uniformes $U_1, \dots, U_n$ et l'estimateur

$$\widehat{I}_n = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(U_k).$$

Cette méthode est robuste, facile à analyser, et fournit des intervalles de confiance. Mais elle présente un défaut visible dès que l'on représente les points U_k dans le carré unité : les points

indépendants créent naturellement des amas et des trous. Ces irrégularités ne sont pas des erreurs du générateur : elles sont une conséquence du hasard.

Pour une intégrale, les amas et les trous sont indésirables. Si une région du cube est trop représentée, elle reçoit trop de poids ; si une autre région est mal représentée, sa contribution est sous-évaluée. L'idée du quasi-Monte-Carlo est donc simple : remplacer les points aléatoires par une suite déterministe conçue pour remplir le cube de façon plus homogène.

Idée à retenir

Monte-Carlo tire des points indépendants. Cette indépendance est utile pour les théorèmes limites, mais elle ne garantit pas une bonne répartition géométrique à taille finie. Le quasi-Monte-Carlo abandonne l'indépendance pour obtenir une meilleure couverture de l'espace. On perd alors les intervalles de confiance immédiats, mais on peut gagner beaucoup en précision numérique.

4.2 Discrépance et équirépartition

La bonne répartition d'une suite de points se mesure en comparant les fréquences empiriques observées dans certains sous-ensembles du cube avec leurs volumes de Lebesgue. La notion la plus classique utilise les rectangles ancrés en l'origine.

Définition 4.2.1: Discrépance à l'origine

Soient $x_1, \dots, x_n \in [0,1]^d$. Pour $t = (t_1, \dots, t_d) \in [0,1]^d$, on pose, avec la convention usuelle des rectangles demi-ouverts,

$$[0,t) = [0,t_1) \times \cdots \times [0,t_d).$$

Le choix fermé ou demi-ouvert ne change pas la philosophie de la notion, mais la convention demi-ouverte évite les ambiguïtés lorsque des points se trouvent exactement sur le bord d'un rectangle. La discrépance à l'origine de $x_1, \dots, x_n$ est

$$D_n^*(x_1, \dots, x_n) = \sup_{t \in [0,1]^d} \left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{x_k \in [0,t)\}} - \prod_{j=1}^{d} t_j \right|.$$

Une suite $(x_n)_{n \geq 1}$ est dite équirépartie dans $[0,1]^d$ si

$$D_n^*(x_1, \dots, x_n) \longrightarrow 0.$$

Cette définition compare deux quantités. La première est la proportion de points parmi $x_1, \dots, x_n$ qui tombent dans le rectangle $[0,t]$. La seconde est le volume de ce rectangle. Si les points sont bien répartis, ces deux quantités doivent être proches simultanément pour tous les rectangles ancrés.

Remarque 4.2.2: Pourquoi seulement les rectangles ancrés ?

Les rectangles $[0,t]$ ne forment pas tous les sous-ensembles possibles du cube. Cependant, ils suffisent à mesurer une forme forte et exploitable d'uniformité. En dimension 1, ils correspondent aux intervalles $[0,t]$, et la discrépance mesure exactement l'écart uniforme entre la fonction de répartition empirique des points et la fonction de répartition de la loi uniforme.

Exemple 4.2.3: Discrépance en dimension un

En dimension 1, si $x_1, \dots, x_n \in [0,1]$, alors

$$D_n^*(x_1, \dots, x_n) = \sup_{t \in [0,1]} |F_n(t) - t|,$$

où

$$F_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{x_k \leq t\}}$$

est la fonction de répartition empirique des points. Ainsi, en dimension 1, la discrépance est la distance de Kolmogorov entre la mesure empirique des points et la loi uniforme sur $[0,1]$.

La notion de discrépance permet de formuler précisément ce que l'on attend d'une suite quasi-Monte-Carlo. Une suite indépendante uniforme est équirépartie presque sûrement, mais sa discrépance typique décroît moins vite que celle des meilleures suites déterministes. Les suites dites à faible discrépance sont construites, pour une dimension d fixée, de manière à satisfaire des bornes du type

$$D_n^* \leq C_d \frac{(\log n)^d}{n}$$

pour les suites classiques. Pour certains ensembles finis de n points, on obtient même des puissances logarithmiques légèrement meilleures. Ce qu'il faut retenir ici est surtout le facteur principal $1/n$, bien plus rapide que l'échelle probabiliste $1/\sqrt{n}$ du Monte-Carlo, au prix d'une constante et d'un facteur logarithmique dépendant de la dimension. Cette borne doit être interprétée avec prudence : le facteur $(\log n)^d$ peut devenir très grand lorsque d augmente. Les bonnes performances observées en pratique reposent souvent sur une dimension effective plus faible que la dimension nominale.

4.3 Inégalité de Koksma–Hlawka

La discrépance mesure la qualité géométrique des points. Il reste à relier cette qualité géométrique à l'erreur d'intégration. C'est le rôle de l'inégalité de Koksma–Hlawka.

Théorème 4.3.1: Inégalité de Koksma–Hlawka

Soit $f \colon [0,1]^d \to \mathbb{R}$ une fonction à variation bornée au sens de Hardy–Krause. On note $V_{HK}(f)$ sa variation de Hardy–Krause. Alors, pour tous $x_1, \dots, x_n \in [0,1]^d$,

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(x_k) - \int_{[0,1]^d} f(u)\, \mathrm{d}u \right| \leq V_{HK}(f) D_n^*(x_1, \dots, x_n).$$

La notion de variation de Hardy–Krause est multidimensionnelle et technique. Deux cas permettent néanmoins de comprendre le théorème.

En dimension 1, $V_{HK}(f)$ est simplement la variation totale de f. Si f est absolument continue,

$$V(f) = \int_0^1 |f'(u)|\, \mathrm{d}u.$$

Pour des fonctions suffisamment régulières en dimension d, la variation de Hardy–Krause s'exprime comme une somme d'intégrales de valeurs absolues de dérivées partielles mixtes sur les faces du cube. Le théorème impose donc une régularité bien plus forte qu'une simple intégrabilité.

Proposition 4.3.2: Koksma en dimension un

Soit f absolument continue sur $[0,1]$. Pour des points $x_1, \dots, x_n$, posons

$$F_n(t) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} \mathbf{1}_{\{x_k < t\}}.$$

Alors

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(x_k) - \int_0^1 f(u)\,\mathrm{d}u = -\int_0^1 (F_n(u) - u)\, f'(u)\,\mathrm{d}u,$$

et donc

$$\left| \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(x_k) - \int_0^1 f \right| \le D_n^* \int_0^1 |f'(u)|\,\mathrm{d}u.$$

Démonstration. La mesure empirique $n^{-1}\sum_k \delta_{x_k}$ a pour fonction de répartition F_n. Une intégration par parties au sens de Stieltjes donne

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(x_k) = f(1) - \int_0^1 F_n(u) f'(u)\,\mathrm{d}u,$$

tandis que l'intégration par parties ordinaire donne

$$\int_0^1 f(u)\,\mathrm{d}u = f(1) - \int_0^1 u f'(u)\,\mathrm{d}u.$$

La soustraction fournit l'identité, puis

$$\left| \int_0^1 (F_n(u) - u) f'(u)\,\mathrm{d}u \right| \le \sup_u |F_n(u) - u| \int_0^1 |f'(u)|\,\mathrm{d}u.$$

□

Cette preuve en dimension un fait apparaître très clairement le mécanisme de Koksma–Hlawka : l'erreur d'intégration est le produit d'un défaut géométrique des points et d'une mesure d'oscillation de la fonction.

Cette inégalité montre que l'erreur d'une méthode quasi-Monte-Carlo se décompose en deux facteurs. Le premier, $V_{HK}(f)$, dépend de la régularité et de l'oscillation de la fonction intégrée. Le second, D_n^*, dépend seulement des points utilisés. La philosophie est donc très différente de celle du Monte-Carlo classique : au lieu d'un théorème limite probabiliste, on obtient une majoration déterministe.

Point de vigilance

L'inégalité de Koksma–Hlawka est fondamentale, mais elle n'est presque jamais utilisée telle quelle pour calculer une borne numérique fiable. En pratique, la variation $V_{HK}(f)$ est difficile à évaluer et la borne est souvent très pessimiste. Son intérêt principal est conceptuel : elle explique pourquoi une faible discrépance peut conduire à une bonne intégration numérique.

Exemple 4.3.3: Comparaison qualitative avec Monte-Carlo

Pour une fonction suffisamment régulière en dimension fixée, une suite à faible discrépance donne une borne d'erreur de l'ordre

$$\frac{(\log n)^d}{n}.$$

Le Monte-Carlo classique donne une erreur typique de l'ordre $n^{-1/2}$. Pour d petit ou modéré, le quasi-Monte-Carlo peut donc être beaucoup plus précis. En grande dimension, le terme logarithmique peut devenir pénalisant, sauf si la fonction dépend effectivement de peu de directions importantes.

4.4 Suites de Van der Corput et de Halton

Les suites à faible discrépance les plus simples sont construites par inversion des chiffres dans une base entière.

Définition 4.4.1: Fonction radicale inverse

Soit $b \geq 2$ un entier. Tout entier $k \geq 0$ s'écrit de façon unique

$$k = a_0 + a_1 b + \cdots + a_m b^m, \qquad 0 \leq a_j \leq b-1.$$

La fonction radicale inverse en base b est définie par

$$\phi_b(k) = \frac{a_0}{b} + \frac{a_1}{b^2} + \cdots + \frac{a_m}{b^{m+1}}.$$

La suite $(\phi_b(k))_{k \geq 0}$ est appelée suite de Van der Corput en base b.

L'opération est très concrète : on écrit l'entier k en base b, puis on lit ses chiffres après la virgule dans l'ordre inverse.

Exemple 4.4.2: Premiers termes en base 2

En base 2, on obtient

$$\begin{aligned}
0 &= (0)_2, & \phi_2(0) &= 0,\\
1 &= (1)_2, & \phi_2(1) &= \frac{1}{2},\\
2 &= (10)_2, & \phi_2(2) &= \frac{1}{4},\\
3 &= (11)_2, & \phi_2(3) &= \frac{3}{4},\\
4 &= (100)_2, & \phi_2(4) &= \frac{1}{8}.
\end{aligned}$$

Les premiers points sont donc

$$0,\quad \frac{1}{2},\quad \frac{1}{4},\quad \frac{3}{4},\quad \frac{1}{8},\quad \frac{5}{8},\quad \frac{3}{8},\quad \frac{7}{8},\ldots$$

La suite insère progressivement des points au milieu des intervalles encore peu occupés. C'est cette propriété qui donne une répartition beaucoup plus régulière que des tirages indépendants.

Proposition 4.4.3: Répartition dyadique exacte de Van der Corput

Pour $n = 2^m$, l'ensemble des n premiers points de la suite de Van der Corput en base 2 est exactement

$$\left\{ \frac{j}{2^m} : j = 0, \dots, 2^m - 1 \right\},$$

à permutation près. En particulier,

$$D_{2^m}^* \le \frac{1}{2^m} = \frac{1}{n}.$$

Démonstration. Pour $0 \le k < 2^m$, écrivons

$$k = a_0 + a_1 2 + \cdots + a_{m-1} 2^{m-1}, \qquad a_j \in \{0, 1\}.$$

Alors

$$\phi_2(k) = \frac{a_0}{2} + \frac{a_1}{2^2} + \cdots + \frac{a_{m-1}}{2^m} = \frac{j}{2^m},$$

où j est l'entier dont l'écriture binaire est obtenue en renversant les m chiffres de k. Le renversement des chiffres est une permutation de $\{0, \dots, 2^m - 1\}$, d'où la première assertion. Une grille $\{j/n\}_{j=0}^{n-1}$ a discrépance à l'origine au plus $1/n$. □

Définition 4.4.4: Suite de Halton

Soient $b_1, \dots, b_d$ des entiers deux à deux premiers, en général les d premiers nombres premiers. La suite de Halton associée est définie par

$$x_k = \left(\phi_{b_1}(k), \dots, \phi_{b_d}(k) \right), \qquad k \ge 0.$$

En dimension 2, on prend typiquement les bases 2 et 3. La première coordonnée répartit les points selon une structure dyadique, la seconde selon une structure ternaire. L'utilisation de bases premières entre elles évite que les coordonnées se synchronisent trop fortement.

Commentaire pratique

Les suites de Halton sont simples et efficaces en petite dimension. En dimension plus élevée, les grandes bases peuvent créer des corrélations indésirables entre coordonnées. C'est l'une des raisons pour lesquelles les suites de Sobol sont souvent préférées dans les applications numériques de dimension moyenne ou grande.

4.5 Suites de Sobol et dimension effective

Les suites de Sobol sont des suites à faible discrépance construites en base 2. Leur construction complète utilise des polynômes primitifs sur le corps à deux éléments et des nombres directeurs. On ne détaille pas ici toute l'algèbre de la construction, mais il est important de comprendre leur rôle pratique.

Une façon mathématiquement propre de voir leur construction est celle des *suites digitales*. Écrivons l'entier k en base 2,

$$k = \sum_{r \ge 0} a_r 2^r, \qquad a_r \in \{0, 1\},$$

et notons $a = (a_0, a_1, \dots)^T$. Pour chaque coordonnée j, on choisit une matrice binaire infinie C_j sur le corps $\mathbb{F}_2$. On forme

$$y^{(j)} = C_j a \pmod 2,$$

puis

$$x_k^{(j)} = \sum_{r \ge 1} y_r^{(j)} 2^{-r}.$$

Le point $x_k = (x_k^{(1)}, \dots, x_k^{(d)})$ est le k-ième point de la suite digitale. Les suites de Sobol correspondent à des choix particuliers des matrices C_j, construits à partir de polynômes primitifs et de nombres directeurs afin d'obtenir de bonnes propriétés d'équirépartition. Cette formulation permet de comprendre pourquoi les opérations binaires, et notamment les randomisations digitales, sont naturelles pour Sobol.

Les suites de Sobol sont conçues pour produire des projections de bonne qualité sur les premières coordonnées et sur de nombreuses combinaisons de coordonnées. Elles sont donc très utilisées en finance, en ingénierie de l'incertitude et en intégration numérique multidimensionnelle.

Idée à retenir

Une intégrale peut avoir une dimension nominale élevée sans être réellement difficile dans toutes les directions. Par exemple, une option asiatique discrétisée sur 50 dates dépend de 50 variables normales, mais certaines combinaisons de ces variables expliquent beaucoup plus de variabilité que les autres. Le quasi-Monte-Carlo est particulièrement efficace lorsque la fonction a une faible dimension effective.

Pour rendre cette notion précise, on utilise la décomposition ANOVA. Pour $f \in L^2([0,1]^d)$, il existe une décomposition orthogonale

$$f(x) = \sum_{u \subset \{1,\dots,d\}} f_u(x_u),$$

où $f_\varnothing = \int f$, chaque f_u ne dépend que des coordonnées indexées par u, et

$$\int_0^1 f_u(x_u)\,\mathrm{d}x_j = 0 \qquad \text{pour tout } j \in u.$$

L'orthogonalité donne

$$\mathrm{Var}(f(U)) = \sum_{u \neq \varnothing} \sigma_u^2, \qquad \sigma_u^2 = \int f_u(x_u)^2\,\mathrm{d}x_u.$$

Définition 4.5.1: Dimensions effectives ANOVA

Fixons $\varepsilon \in (0,1)$.

— La *dimension effective de troncature* est le plus petit s tel que

$$\sum_{\varnothing \neq u \subset \{1,\dots,s\}} \sigma_u^2 \geq (1-\varepsilon)\,\mathrm{Var}(f(U)).$$

Elle est faible lorsque les premières coordonnées expliquent presque toute la variance.

— La *dimension effective de superposition* est le plus petit s tel que

$$\sum_{1 \leq |u| \leq s} \sigma_u^2 \geq (1-\varepsilon)\,\mathrm{Var}(f(U)).$$

Elle est faible lorsque les interactions d'ordre élevé entre coordonnées sont négligeables.

Cette idée explique pourquoi les suites de Sobol peuvent fonctionner dans des problèmes qui, sur le papier, semblent trop dimensionnels pour l'inégalité de Koksma–Hlawka. Le facteur $(\log n)^d$ est une borne de pire cas en dimension nominale. Si l'essentiel de la variance est porté par quelques coordonnées ou par des interactions de faible ordre, la difficulté effective peut être beaucoup plus petite.

4.6 Randomisation des suites quasi-Monte-Carlo

Une méthode quasi-Monte-Carlo déterministe ne fournit pas directement d'intervalle de confiance. Si l'on calcule

$$Q_n(f) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k),$$

on obtient un nombre, mais pas une variance empirique comparable à celle de Monte-Carlo. Pour retrouver une estimation statistique de l'erreur, on randomise la suite tout en conservant sa bonne répartition.

Définition 4.6.1: Décalage aléatoire modulo un

Soient $x_1, \dots, x_n \in [0,1]^d$ et soit $\Delta \sim \mathcal{U}([0,1]^d)$. On définit

$$x_k^{\Delta} = \{x_k + \Delta\}, \qquad k = 1, \dots, n,$$

où les accolades désignent la partie fractionnaire coordonnée par coordonnée. L'estimateur quasi-Monte-Carlo randomisé par décalage est

$$Q_n^{\Delta}(f) = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} f(x_k^{\Delta}).$$

Proposition 4.6.2: Non-biais du décalage aléatoire

Si $f \in L^1([0,1]^d)$, alors

$$\mathbb{E}\left[Q_n^{\Delta}(f)\right] = \int_{[0,1]^d} f(u)\,\mathrm{d}u.$$

Démonstration. Pour chaque k, la variable $\{x_k + \Delta\}$ est uniforme sur $[0,1]^d$. Par invariance de la mesure de Lebesgue par translation modulo 1,

$$\mathbb{E}\left[f\left(\{x_k + \Delta\}\right)\right] = \int_{[0,1]^d} f(u)\,\mathrm{d}u.$$

En moyennant sur $k = 1, \dots, n$, on obtient le résultat. □

En pratique, on utilise souvent plusieurs randomisations indépendantes $\Delta_1, \dots, \Delta_R$, puis on calcule

$$Q_{n,r} = Q_n^{\Delta_r}(f), \qquad r = 1, \dots, R.$$

Les $Q_{n,r}$ sont alors indépendants et de même espérance I. On pose

$$\overline{Q}_R = \frac{1}{R}\sum_{r=1}^{R} Q_{n,r}, \qquad S_R^2 = \frac{1}{R-1}\sum_{r=1}^{R}(Q_{n,r} - \overline{Q}_R)^2.$$

Si R est modéré, on utilise naturellement l'intervalle de type Student

$$\overline{Q}_R \pm t_{R-1,1-\alpha/2}\frac{S_R}{\sqrt{R}}.$$

L'indépendance pertinente pour cet intervalle est celle des *randomisations*, pas celle des n points au sein d'une même randomisation. Le nombre R est en général beaucoup plus petit que n, par exemple $R = 20$ ou $R = 30$.

Le décalage modulo 1 est surtout un modèle pédagogique simple. Pour des suites digitales comme Sobol, on utilise souvent des randomisations digitales qui préservent plus finement les propriétés de la construction. Le principe statistique reste le même : chaque randomisation doit être marginalement uniforme et les randomisations doivent être indépendantes entre elles.

Commentaire pratique

Le quasi-Monte-Carlo randomisé combine deux avantages. À l'intérieur de chaque randomisation, les points restent très réguliers. Entre les randomisations, on retrouve une structure probabiliste permettant d'estimer l'erreur. Il faut toutefois bien distinguer les deux tailles d'échantillon : n est le nombre de points par suite, et R est le nombre de randomisations indépendantes.

4.7 Recherche de zéros bruitée : algorithme de Robbins–Monro

On passe maintenant à un autre type de problème. Supposons que l'on cherche $\theta_* \in \mathbb{R}$ tel que

$$F(\theta_*) = a,$$

où F est une fonction monotone, mais que l'on ne peut pas calculer $F(\theta)$ exactement. On peut seulement observer une variable aléatoire $Y(\theta)$ telle que

$$\mathbb{E}\left[Y(\theta)\right] = F(\theta).$$

Une approche naïve consisterait, pour chaque valeur de θ, à estimer $F(\theta)$ par une grande moyenne Monte-Carlo, puis à utiliser une méthode déterministe de recherche de zéro. Cette approche est souvent coûteuse. Robbins–Monro propose une idée plus efficace : utiliser une seule observation bruitée à chaque étape et corriger progressivement le paramètre.

Idée à retenir

L'algorithme de Robbins–Monro est une méthode de descente bruitée vers un niveau cible. Si l'observation est en moyenne trop grande, on déplace le paramètre dans le sens qui réduit la valeur moyenne ; si elle est trop petite, on le déplace dans l'autre sens. Les pas diminuent afin que le bruit soit progressivement amorti.

Définition 4.7.1: Algorithme de Robbins–Monro

Soit $(\gamma_n)_{n\geq 1}$ une suite de pas positifs. L'algorithme de Robbins–Monro pour résoudre $F(\theta) = a$ est

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1}\left(Y_{n+1}(\theta_n) - a\right), \qquad n \geq 0,$$

où, conditionnellement au passé, $Y_{n+1}(\theta_n)$ est une observation bruitée de moyenne $F(\theta_n)$.

Le choix des pas est essentiel. Les conditions classiques sont

$$\sum_{n\geq 1} \gamma_n = +\infty, \qquad \sum_{n\geq 1} \gamma_n^2 < +\infty.$$

La première condition impose que l'algorithme continue à pouvoir se déplacer sur une distance totale arbitrairement grande. La seconde condition assure que l'effet cumulé du bruit de martingale reste fini.

Exemple 4.7.2: Pas de la forme puissance

Pour $\gamma_n = \gamma_0 n^{-\alpha}$, les deux conditions précédentes sont satisfaites si et seulement si

$$\frac{1}{2} < \alpha \leq 1.$$

Le choix $\alpha = 1$ est classique. Des valeurs $\alpha < 1$ donnent des pas qui décroissent plus lentement, ce qui peut améliorer la phase initiale mais augmenter les fluctuations asymptotiques.

4.8 Un théorème de convergence projeté

Pour obtenir un énoncé propre sans hypothèses techniques excessives, on introduit une projection sur un intervalle compact $K = [A, B]$. On note $\Pi_K(x) = \min(B, \max(A, x))$. La projection empêche les itérés de partir vers des valeurs absurdes sous l'effet d'observations extrêmes.

Théorème 4.8.1: Convergence d'un Robbins–Monro projeté

Soit $K = [A, B] \subset \mathbb{R}$ et soit $\theta_* \in K$. On suppose que $F \colon K \to \mathbb{R}$ est continue et vérifie

$$(\theta - \theta_*)\,(F(\theta) - a) > 0, \qquad \theta \in K, \quad \theta \neq \theta_*.$$

Soit $(\mathcal{F}_n)_{n\geq 0}$ une filtration. On suppose que

$$\mathbb{E}\left[Y_{n+1} \mid \mathcal{F}_n\right] = F(\theta_n)$$

et qu'il existe une constante $C < +\infty$ telle que

$$\mathbb{E}\left[(Y_{n+1} - a)^2 \mid \mathcal{F}_n\right] \leq C$$

presque sûrement. On définit

$$\theta_{n+1} = \Pi_K\left(\theta_n - \gamma_{n+1}(Y_{n+1} - a)\right),$$

où (γ_n) vérifie

$$\sum_{n\geq 1} \gamma_n = +\infty, \qquad \sum_{n\geq 1} \gamma_n^2 < +\infty.$$

Alors

$$\theta_n \longrightarrow \theta_*$$

presque sûrement.

Démonstration. La projection sur un intervalle fermé est 1-lipschitzienne et fixe θ_*. Donc

$$\begin{aligned} |\theta_{n+1} - \theta_*|^2 &\leq |\theta_n - \gamma_{n+1}(Y_{n+1} - a) - \theta_*|^2 \\ &= |\theta_n - \theta_*|^2 - 2\gamma_{n+1}(\theta_n - \theta_*)(Y_{n+1} - a) + \gamma_{n+1}^2 (Y_{n+1} - a)^2. \end{aligned}$$

En prenant l'espérance conditionnelle sachant $\mathcal{F}_n$, on obtient

$$\mathbb{E}\left[|\theta_{n+1} - \theta_*|^2 \mid \mathcal{F}_n\right] \leq |\theta_n - \theta_*|^2 - 2\gamma_{n+1} h(\theta_n) + C\gamma_{n+1}^2,$$

où

$$h(\theta) = (\theta - \theta_*)\,(F(\theta) - a).$$

Le lemme de Robbins–Siegmund implique que $|\theta_n - \theta_*|^2$ converge presque sûrement vers une limite $L \geq 0$ et que

$$\sum_{n\geq 0} \gamma_{n+1} h(\theta_n) < +\infty$$

presque sûrement. Supposons par l'absurde que $L > 0$ sur une trajectoire. Pour n assez grand,

$$|\theta_n - \theta_*| \geq \frac{\sqrt{L}}{2}.$$

Par continuité de h, compacité de K et stricte positivité de h hors de θ_*, il existe alors $c_L > 0$ tel que $h(\theta_n) \geq c_L$ pour tout n assez grand. On aurait donc

$$\sum_{n} \gamma_{n+1} h(\theta_n) \geq c_L \sum_{n} \gamma_{n+1} = +\infty,$$

contradiction. Ainsi $L = 0$, donc $\theta_n \to \theta_*$ presque sûrement. □

Remarque 4.8.2: Interprétation par équation différentielle

En remplaçant l'observation bruitée par sa moyenne, l'algorithme ressemble à

$$\theta_{n+1} - \theta_n \simeq -\gamma_{n+1}\,(F(\theta_n) - a)\,.$$

Il s'agit d'une discrétisation à pas décroissant de l'équation différentielle

$$\dot{\theta}(t) = -\,(F(\theta(t)) - a)\,.$$

La condition de monotonie du théorème signifie que θ_* est un point stable de cette dynamique déterministe.

Proposition 4.8.3: Cas linéaire : vitesse quadratique moyenne

Supposons

$$Y_{n+1}(\theta) = a + \lambda(\theta - \theta_*) + \xi_{n+1}, \qquad \lambda > 0,$$

où (ξ_n) sont i.i.d., centrées, de variance σ_ξ^2, et prenons $\gamma_n = c/n$. En notant $e_n = \theta_n - \theta_*$, on a

$$e_{n+1} = \left(1 - \frac{c\lambda}{n+1}\right) e_n - \frac{c}{n+1}\xi_{n+1}.$$

Si $2c\lambda > 1$, alors

$$n\mathbb{E}(e_n^2) \longrightarrow \frac{c^2\sigma_\xi^2}{2c\lambda - 1}.$$

Cette constante est minimale pour $c = 1/\lambda$, auquel cas la limite vaut σ_ξ^2/λ^2.

Démonstration. Comme ξ_{n+1} est centrée et indépendante du passé,

$$\mathbb{E}(e_{n+1}^2) = \left(1 - \frac{c\lambda}{n+1}\right)^2 \mathbb{E}(e_n^2) + \frac{c^2\sigma_\xi^2}{(n+1)^2}.$$

Si l'on cherche un comportement $\mathbb{E}(e_n^2) \sim K/n$, l'identification des termes d'ordre n^{-2} donne

$$K = (1 - 2c\lambda)K + c^2\sigma_\xi^2 + K,$$

c'est-à-dire

$$K = \frac{c^2\sigma_\xi^2}{2c\lambda - 1}.$$

Une preuve complète s'obtient en étudiant la récurrence sur $n\mathbb{E}(e_n^2)$. La condition $2c\lambda > 1$ est précisément celle qui rend la constante finie. La dérivation par rapport à c montre que le minimum est atteint en $c = 1/\lambda$. □

Cette proposition met en évidence un phénomène important : la convergence presque sûre impose surtout des conditions de sommabilité sur les pas, mais la *vitesse* dépend finement de leur constante multiplicative.

4.9 Exemples de Robbins–Monro

4.9.1 Estimation récursive d'un quantile

Soit X une variable réelle de fonction de répartition G. On veut calculer le quantile d'ordre $\alpha \in (0,1)$, c'est-à-dire une solution de

$$G(q_\alpha) = \alpha.$$

Si l'on sait simuler X, on peut utiliser

$$Y(q) = \mathbf{1}_{\{X \le q\}}, \qquad \mathbb{E}[Y(q)] = G(q).$$

L'algorithme de Robbins–Monro devient

$$q_{n+1} = q_n - \gamma_{n+1} \left(\mathbf{1}_{\{X_{n+1} \le q_n\}} - \alpha \right).$$

Si $q_n < q_\alpha$, alors $G(q_n) < \alpha$. L'incrément moyen vaut

$$-\gamma_{n+1}(G(q_n) - \alpha) > 0,$$

et l'algorithme pousse donc q_n vers le haut. Si $q_n > q_\alpha$, le signe est inversé et l'algorithme le pousse vers le bas.

Au voisinage du quantile, si G possède une densité g continue avec $g(q_\alpha) > 0$, alors

$$G(q) - \alpha = g(q_\alpha)(q - q_\alpha) + o(|q - q_\alpha|).$$

Le problème est donc localement du type linéaire précédent avec $\lambda = g(q_\alpha)$. Le bruit d'observation au point exact q_α est la Bernoulli centrée

$$\mathbf{1}_{\{X \le q_\alpha\}} - \alpha,$$

de variance $\alpha(1-\alpha)$. Cela explique à la fois la vitesse en $n^{-1/2}$ des fluctuations finales et l'importance de la pente $g(q_\alpha)$: un quantile situé dans une zone de faible densité est numériquement plus difficile à localiser.

Commentaire pratique

Cette méthode est particulièrement intéressante lorsque les données arrivent en flux. Il n'est pas nécessaire de stocker toutes les observations ni de trier un grand échantillon. Le quantile est mis à jour récursivement à chaque nouvelle observation.

4.9.2 Calibration bruitée d'un paramètre

Supposons que l'on dispose d'un modèle dépendant d'un paramètre θ, et que l'on cherche à résoudre

$$P(\theta) = P^{\mathrm{obs}},$$

où $P(\theta)$ est un prix calculable seulement par simulation. Pour chaque θ, on observe un payoff simulé $H(\theta, U)$ tel que

$$\mathbb{E}[H(\theta, U)] = P(\theta).$$

On peut alors utiliser

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} \left(H(\theta_n, U_{n+1}) - P^{\mathrm{obs}} \right),$$

avec éventuellement une projection sur un intervalle admissible. Lorsque P est monotone et que le niveau observé est atteignable, cet algorithme ajuste progressivement le paramètre dans la bonne direction.

4.10 Optimisation bruitée : algorithme de Kiefer–Wolfowitz

Robbins–Monro résout une équation $F(\theta) = a$ lorsque l'on sait observer une version bruitée de $F(\theta)$. Kiefer–Wolfowitz traite un problème différent : on veut maximiser une fonction moyenne

$$M(\theta) = \mathbb{E}[m(\theta, U)],$$

mais on ne connaît pas son gradient. On peut seulement observer des valeurs bruitées $m(\theta, U)$. L'idée consiste à estimer le gradient par différences finies aléatoires.

Définition 4.10.1: Algorithme de Kiefer–Wolfowitz

En dimension 1, pour maximiser M, l'algorithme de Kiefer–Wolfowitz prend la forme

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \gamma_{n+1} \frac{m(\theta_n + c_n, U_{n+1}^+) - m(\theta_n - c_n, U_{n+1}^-)}{2c_n},$$

où $\gamma_n > 0$ est le pas de l'algorithme et $c_n > 0$ est le pas de différences finies, avec $c_n \to 0$.

Conditionnellement à θ_n, l'espérance du quotient de différences finies est

$$\frac{M(\theta_n + c_n) - M(\theta_n - c_n)}{2c_n},$$

qui approxime $M'(\theta_n)$ lorsque c_n est petit. On obtient donc une descente de gradient stochastique, ou plus exactement une montée de gradient stochastique si l'on maximise.

Idée à retenir

Kiefer–Wolfowitz remplace une dérivée inconnue par une différence de deux observations bruitées. Si la valeur observée à droite est plus grande que celle à gauche, l'algorithme augmente le paramètre ; si elle est plus petite, il le diminue. Le pas c_n doit tendre vers zéro pour réduire le biais de différence finie, mais pas trop vite pour ne pas amplifier excessivement le bruit.

Proposition 4.10.2: Ordres de biais et de variance

Supposons que $m(\theta, U) = M(\theta) + \xi(\theta, U)$, où $\mathbb{E}[\xi(\theta, U)] = 0$, et que M soit trois fois dérivable. Alors

$$\frac{M(\theta + c) - M(\theta - c)}{2c} = M'(\theta) + O(c^2)$$

lorsque $c \to 0$. Si les bruits aux deux points sont indépendants et de variance bornée, la variance de l'estimateur par différences finies est de l'ordre de c^{-2}. Plus précisément, si

$$\mathrm{Var}(\xi(\theta + c, U^+)) \le \sigma^2, \qquad \mathrm{Var}(\xi(\theta - c, U^-)) \le \sigma^2,$$

alors

$$\mathrm{Var}\left(\frac{\xi(\theta + c, U^+) - \xi(\theta - c, U^-)}{2c} \right) \le \frac{\sigma^2}{2c^2}.$$

Démonstration. La formule de Taylor donne

$$M(\theta + c) = M(\theta) + cM'(\theta) + \frac{c^2}{2} M''(\theta) + \frac{c^3}{6} M^{(3)}(\theta) + O(c^4),$$
$$M(\theta - c) = M(\theta) - cM'(\theta) + \frac{c^2}{2} M''(\theta) - \frac{c^3}{6} M^{(3)}(\theta) + O(c^4).$$

En soustrayant puis en divisant par $2c$, on obtient un biais d'ordre c^2. Pour la variance, la différence des deux bruits est divisée par $2c$, ce qui donne un ordre c^{-2} lorsque les variances des bruits sont bornées. □

Remarque 4.10.3: Variables aléatoires communes

Il n'est pas obligatoire d'utiliser deux bruits indépendants U^+ et U^-. Si le modèle permet d'utiliser la même variable aléatoire U dans

$$m(\theta + c, U) - m(\theta - c, U),$$

les deux observations sont souvent fortement corrélées positivement et leur différence est beaucoup moins bruitée. On parle de *common random numbers*. Mathématiquement,

$$\mathrm{Var}(\xi_+ - \xi_-) = \mathrm{Var}(\xi_+) + \mathrm{Var}(\xi_-) - 2\,\mathrm{Cov}(\xi_+, \xi_-).$$

Une covariance positive réduit donc directement la variance de l'estimateur de gradient. Cette technique est particulièrement utile lorsque les trajectoires simulées dépendent continûment du paramètre θ.

Cette proposition met en évidence le compromis fondamental. Un petit c_n réduit le biais de dérivation numérique, mais amplifie le bruit. Les conditions usuelles imposent donc à c_n de tendre vers zéro lentement.

Exemple 4.10.4: Choix typique des pas

Un choix classique est

$$\gamma_n = \frac{\gamma_0}{n}, \qquad c_n = \frac{c_0}{n^\beta}, \qquad 0 < \beta < \frac{1}{2}.$$

Alors

$$\sum_{n\geq 1} \gamma_n = +\infty, \qquad \sum_{n\geq 1} \frac{\gamma_n^2}{c_n^2} < +\infty, \qquad \sum_{n\geq 1} \gamma_n c_n^2 < +\infty.$$

La deuxième condition contrôle le bruit amplifié par $1/c_n$, tandis que la troisième contrôle le biais de différence finie.

Théorème 4.10.5: Convergence d'un Kiefer–Wolfowitz projeté

Soit $K = [A, B]$ et supposons que $M \in C^3(K)$ possède un unique maximiseur intérieur θ_*, avec

$$(\theta - \theta_*)M'(\theta) < 0 \qquad \text{pour } \theta \neq \theta_*.$$

Supposons que les observations bruitées soient de la forme

$$m(\theta, U) = M(\theta) + \xi(\theta, U), \qquad \mathbb{E}[\xi(\theta, U)] = 0,$$

avec variances uniformément bornées. Considérons l'algorithme projeté

$$\theta_{n+1} = \Pi_K\left(\theta_n + \gamma_{n+1}\widehat{g}_{n+1}\right),$$

où $\widehat{g}_{n+1}$ est la différence finie centrée de pas c_n. Si

$$c_n \to 0, \qquad \sum_n \gamma_n = +\infty, \qquad \sum_n \frac{\gamma_n^2}{c_n^2} < +\infty, \qquad \sum_n \gamma_n c_n^2 < +\infty,$$

alors, sous les hypothèses précédentes,

$$\theta_n \longrightarrow \theta_* \qquad \text{presque sûrement.}$$

Démonstration. Conditionnellement au passé, on peut décomposer l'estimateur de gradient sous la forme

$$\widehat{g}_{n+1} = M'(\theta_n) + b_n + \zeta_{n+1},$$

où, par le développement de Taylor symétrique,

$$|b_n| \leq C c_n^2,$$

et où ζ_{n+1} est un bruit de martingale de variance conditionnelle d'ordre au plus C/c_n^2. La condition

$$\sum_n \gamma_n c_n^2 < \infty$$

rend l'effet cumulé du biais sommable, tandis que

$$\sum_n \frac{\gamma_n^2}{c_n^2} < \infty$$

contrôle l'énergie cumulée du bruit. En appliquant au carré de la distance $|\theta_n - \theta_*|^2$ le même argument de supermartingale que pour Robbins–Monro, le terme déterministe principal est

$$2\gamma_{n+1}(\theta_n - \theta_*)M'(\theta_n),$$

qui est strictement négatif hors de θ_*. Les termes de biais et de variance sont sommables grâce aux conditions ci-dessus. Le lemme de Robbins–Siegmund donne alors la convergence de la distance et la sommabilité du terme de dérive. Comme $\sum \gamma_n = \infty$, la seule limite possible est θ_*. □

4.11 Applications de Kiefer–Wolfowitz

4.11.1 Réglage d'un paramètre d'importance sampling

Dans une méthode d'échantillonnage préférentiel, un paramètre θ peut contrôler la loi de simulation. On obtient une famille d'estimateurs $Z(\theta)$ sans biais pour la même quantité, mais avec des variances différentes. Un objectif naturel est de minimiser

$$M(\theta) = \mathbb{E}[Z(\theta)^2],$$

car $\mathrm{Var}(Z(\theta)) = M(\theta) - I^2$. Si l'on sait simuler $Z(\theta)$, alors $Z(\theta)^2$ est une observation bruitée de $M(\theta)$. On peut donc utiliser Kiefer–Wolfowitz pour chercher le paramètre qui minimise la variance.

Pour une minimisation, on change le signe de l'algorithme :

$$\theta_{n+1} = \theta_n - \gamma_{n+1} \frac{Z(\theta_n + c_n, U_{n+1}^+)^2 - Z(\theta_n - c_n, U_{n+1}^-)^2}{2c_n}.$$

Idée à retenir

La réduction de variance étudiée au chapitre précédent laisse souvent un paramètre à choisir : décalage d'une loi normale, intensité d'une loi exponentielle, taille des strates, coefficients approchés. Les algorithmes stochastiques fournissent un mécanisme adaptatif pour ajuster ces paramètres à partir des simulations elles-mêmes.

4.11.2 Optimisation d'une politique simulée

Dans de nombreux problèmes de décision, une politique dépend d'un paramètre θ, et sa performance moyenne s'écrit

$$J(\theta) = \mathbb{E}[R(\theta, U)].$$

Lorsque la dérivée de J est inaccessible, mais que l'on peut simuler la récompense $R(\theta, U)$, Kiefer–Wolfowitz donne une première méthode d'optimisation. Cette approche est simple mais peut devenir coûteuse en grande dimension, car une approximation du gradient coordonnée par coordonnée demande plusieurs simulations par itération.

4.12 Comparaison des méthodes

Les deux parties de ce chapitre répondent à des problèmes différents. Le quasi-Monte-Carlo améliore le calcul d'une intégrale lorsque l'on peut choisir les points de simulation dans un cube. Les algorithmes stochastiques traitent des problèmes récursifs de recherche de zéros ou d'optimisation sous bruit.

Méthode	Objet principal	Point clé
Monte-Carlo classique	Estimer une espérance	Erreur statistique en $n^{-1/2}$ et intervalles de confiance
Quasi-Monte-Carlo	Intégrer sur un cube	Remplacer le hasard par des points géométriquement réguliers
Quasi-Monte-Carlo randomisé	Intégrer avec estimation d'erreur	Randomiser sans détruire la régularité des points
Robbins–Monro	Résoudre une équation bruitée	Utiliser une observation par itération avec pas décroissant
Kiefer–Wolfowitz	Optimiser une fonction bruitée sans gradient	Estimer le gradient par différences finies bruitées

4.13 Synthèse

Les suites à faible discrépance montrent que le hasard n'est pas toujours indispensable pour faire de l'intégration numérique. Lorsque l'on peut représenter le problème comme une intégrale sur $[0,1]^d$, des points déterministes bien répartis peuvent fournir une précision bien supérieure à celle d'un échantillon indépendant de même taille. La randomisation permet ensuite de retrouver une estimation statistique de l'erreur.

Les algorithmes de Robbins–Monro et de Kiefer–Wolfowitz répondent à une autre limitation du Monte-Carlo élémentaire : dans beaucoup d'applications, l'espérance à calculer dépend d'un paramètre qu'il faut lui-même ajuster. Robbins–Monro ajuste ce paramètre pour atteindre un niveau cible. Kiefer–Wolfowitz l'ajuste pour optimiser une performance moyenne lorsque le gradient est inaccessible.

Idée à retenir

Le Monte-Carlo élémentaire transforme des simulations en moyenne. La réduction de variance transforme une moyenne en meilleur estimateur. Le quasi-Monte-Carlo transforme le choix des points. Les algorithmes stochastiques transforment les simulations en une dynamique d'apprentissage sur un paramètre. Ces quatre idées forment la boîte à outils de base des méthodes de simulation modernes.