

FEUILLE DE TRAVAUX PRATIQUES # 5

Exercice 1 *Urne d'Ehrenfest*

Soit $d \geq 2$ un entier pair. On considère la chaîne de Markov associée à l'urne d'Ehrenfest, i.e. la chaîne de Markov sur $E = \{0, 1, \dots, d\}$ de matrice de transition

$$Q = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{1}{d} & 0 & \frac{d-1}{d} & 0 & \dots & \vdots \\ 0 & \frac{2}{d} & 0 & \frac{d-2}{d} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \dots & 0 & \frac{d-1}{d} & 0 & \frac{1}{d} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

1. Comment saisir la matrice Q en **Scilab** sans faire de boucle ? On pourra consulter l'aide de la commande **diag**.
2. En utilisant la fonction prédéfinie **grand(n, 'markov', Q, 1)**, écrire un programme qui génère et trace une trajectoire de cette chaîne.
3. La chaîne est-elle irréductible ? apériodique ? Pour $\varepsilon \in [0, 1]$, on pose $Q_\varepsilon := (1 - \varepsilon)Q + \varepsilon I$. Que dire de la période de la chaîne associée à Q_ε ?
4. Vérifier numériquement que la loi binomiale $\mathcal{B}(d, 1/2)$ satisfait l'équation $\pi Q = \pi$.
5. On note $T_\ell := \inf\{n \geq 1, X_n = \ell\}$. En prenant $d = 10$, comparer par simulation les quantités $\mathbb{E}_\ell(T_\ell)$ et $\pi(\{\ell\})$.
6. Toujours dans le cas $d = 10$, illustrer le théorème ergodique par simulation i.e. illustrer le fait que, pour $\ell \in \{0, \dots, d\}$, presque sûrement, lorsque n tend vers l'infini :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \mathbb{1}_{X_k=\ell} \longrightarrow \pi(\{\ell\}).$$

Exercice 2 *La méthode MCMC et l'algorithme de Metropolis*

Soit E un espace d'états fini et π une probabilité sur E . Étant donnée une fonction f sur E , on souhaite calculer la quantité

$$\pi(f) = \int_E f(x) d\pi(x).$$

Il peut arriver (et c'est souvent le cas) que l'espace d'états E soit "très gros" et que les réels $\pi(x)$ ne soient pas explicitement calculables (on n'arrive pas à exprimer la constante de renormalisation) ou soient trop proches de 0¹. Pour calculer $\pi(f)$, on peut alors se dire qu'il faudrait mettre en place une méthode de Monte-Carlo. Mais alors, il faut disposer d'un algorithme générant des variables aléatoires distribuées selon la loi π sans disposer vraiment de la dite loi ! La méthode de Monte Carlo via les chaînes de Markov (MCMC) consiste à construire une chaîne de Markov

1. voir l'exemple du modèle d'Ising plus loin.

$(X_n)_{n \geq 0}$ sur E dont les probabilités de transition sont très simples et qui admet la loi π comme mesure invariante. Si l'on parvient à construire une telle chaîne, le théorème ergodique assure que, lorsque n tend vers l'infini :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(X_k) \longrightarrow \pi(f).$$

Considérons une matrice de transition \tilde{Q} sur E telle que, $\tilde{Q}(x, y) > 0 \Rightarrow \tilde{Q}(y, x) > 0$ pour tout $x, y \in E$. Pour $x \neq y$, on pose alors

$$R(x, y) = \begin{cases} 1 \wedge \left(\frac{\pi(y)\tilde{Q}(y,x)}{\pi(x)\tilde{Q}(x,y)} \right) & \text{si } \tilde{Q}(x, y) \neq 0 \\ 0 & \text{sinon,} \end{cases}$$

et l'on définit une matrice de transition Q via les formules :

$$Q(x, y) = \tilde{Q}(x, y)R(x, y) \text{ pour } x \neq y, \quad Q(x, x) = 1 - \sum_{y \neq x} Q(x, y).$$

Remarquons que dans le calcul de la matrice de transition Q , seuls interviennent les rapports $\pi(y)/\pi(x)$ de sorte que l'on a pas besoin de se soucier des facteurs de renormalisation. On peut montrer que si $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$, alors la matrice Q est réversible par rapport à π . On peut aussi montrer que, si \tilde{Q} est irréductible apériodique, alors Q est aussi irréductible et apériodique.

Application : On considère le modèle d'Ising en dimension deux. On se donne ainsi une boîte finie $\Lambda = \{0, \dots, N\}^2$ de \mathbb{Z}^2 , et à tout $i \in \Lambda$, on associe un spin $\sigma_i \in \{-1, 1\}$. L'ensemble des configurations i.e. l'espace d'états associé au modèle est donc $E = \{-1, +1\}^\Lambda$ de cardinal $2^{(N+1)^2}$. On se donne ensuite la fonction H (comme Hamiltonien) sur E , qui à toute configuration σ associe une énergie $H(\sigma) := -\sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j$ et on définit la mesure de Gibbs sur E de température $\beta > 0$ de la façon suivante :

$$\forall \sigma \in E, \quad \pi_\beta(\sigma) := \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H(\sigma)}, \quad \text{où } Z_\beta = \sum_{\sigma \in E} e^{-\beta H(\sigma)}.$$

On est typiquement dans une situation où le calcul de π_β demande de faire une somme (énorme dès que N est de l'ordre de 10) de termes extrêmement petits (dès que $H(\sigma)$ ou β sont grands).

1. Commenter l'algorithme suivant :

$$\text{Étape } n+1 : \begin{cases} - \text{ choisir } \sigma' \text{ avec la loi } \tilde{Q}(X_n, \cdot) \\ - \text{ tirer un nombre } U \text{ uniformément au hasard dans } [0, 1] \\ - \text{ si } U < R(X_n, \sigma') \text{ alors } X_{n+1} = \sigma', \text{ sinon } X_{n+1} = X_n. \end{cases}$$

2. Implémenter l'algorithme de Metropolis en considérant la matrice $\tilde{Q}(\sigma, \sigma')$ telle que $\tilde{Q}(\sigma, \cdot)$ est la loi uniforme sur les configurations qui diffèrent de σ d'au plus un spin.
3. Représenter graphiquement une configuration de spins (par exemple à l'aide de la commande `Matplot`).
4. a. Estimer la magnétisation moyenne du modèle, i.e.

$$\pi_\beta \left(\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i \right),$$

pour $\beta = 1$.

- b. Estimer la magnétisation moyenne du modèle en fonction de β .