Feuille de travaux pratiques # 6

Exercice 1 *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

$$\mathbb{E}_\pi[f] = \int_E f(x)d\pi(x) = \sum_{x\in E} f(x)\pi(x).$$

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 ou soient trop petits [1]. Pour calculer $\mathbb{E}_\pi[f]$, 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 $(X_n)_{n\geq 0}$ 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 :

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

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

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

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

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

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.

1. Montrer que si $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in E$, alors la matrice Q est réversible par rapport à π.
2. Montrer que si $\widetilde{Q}$ est irréductible apériodique, alors Q est aussi irréductible et apériodique.
3. Interpréter et commenter l'algorithme suivant :

$$\begin{array}{rl} \text{étape } 0 : & \text{- initialiser } X_0 \\ \text{étape } n+1 : & \left\{ \begin{array}{l} \text{- choisir } y \text{ avec la loi } \widetilde{Q}(X_n, .) \\ \text{- tirer un nombre } U \text{ uniformément au hasard dans } [0,1] \\ \text{- si } U < R(X_n, y) \text{ alors } X_{n+1} = y, \text{ sinon } X_{n+1} = X_n. \end{array} \right. \end{array}$$

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

Application : On considère le modèle d'Ising en dimension deux. On se donne ainsi une boîte finie $\Lambda = [|0, n|]^2$ du réseau $\mathbb{Z}^2$ 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 :

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

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

1. Implémenter l'algorithme de Metropolis en considérant la matrice $\widetilde{Q}(\sigma, \sigma')$ telle que $\widetilde{Q}(\sigma, \cdot)$ est la loi uniforme sur les configurations qui diffèrent de σ d'au plus un spin.
2. Représenter graphiquement une configration de spins à l'aide de la commande `Matplot`.
3. Estimer la magnétisation moyenne du modèle i.e. $\mathbb{E}_{\pi_\beta}[\frac{1}{|\Lambda|} \sum_{i \in \Lambda} \sigma_i]$ en fonction de β.

Exercice 2 *Marche aléatoire à boucles effacées*
Voici un algorithme qui à partir d'une réalisation de la marche aléatoire simple $(S_0, S_1, \ldots, S_n)$ en dimension deux, fournit son analogue à boucles effacées :

$$\begin{cases} \text{on initialise } i_0 = \max\{i, \ S_i = S_0\}, \\ \text{puis tant que } S_{i_j} \neq S_n, \text{ on pose} \\ \qquad\quad i_{j+1} = \max\{i, S_i = S_{i_j}\} + 1, \\ \text{enfin, on pose } J = \min\{j, S_{i_j} = S_n\}. \end{cases}$$

La marche à boucles effacées est alors donnée par $LE(S) := (S_{i_0}, S_{i_1}, \ldots, S_{i_J})$.

1. Écrire une fonction `marche2(n)` qui étant donné l'entier n renvoie les coordonnées d'une marche aléatoire symétrique en dimension deux, issue de zéro et de longueur n.
2. Écrire une procédure qui, à partir d'une réalisation de la fonction `marche2`, renvoie lez coordonnées de la marche à boucles effacées correspondante.
3. Représenter sur une même figure une réalisation de la marche aléatoire simple et de sa version à boucles effacées.
4. Que peut-on dire de la longueur de la trajectoire à boucles effacées comparée à celle de la trajectoire initiale ? À partir des procédures ci-dessus, tracer une trajectoire de la marche aléatoire à boucles effacées (on note N la longueur de la trajectoire) ainsi que les cercles de rayon $\sqrt{N}$ et $N^{4/5}$ centrés en l'origine. Quel est le cercle qui semble le mieux approcher la distance typique entre l'origine et la fin de la marche ?

   On montre que pour une marche à boucles effacées, la distance typique est bien de l'ordre de $N^{4/5}$, contrairement au cas d'une marche simple où elle est de l'ordre $\sqrt{N}$. La limite d'échelle de la marche à boucles effacées n'est pas le mouvement brownien mais un autre processus appelée SLE (pour Schramm-Loewner-Evolution) d'indice 2.