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 $E = \{0, 1, \ldots, d\}$ de matrice de transition

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

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 irreductible ? 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 $\ell \in \{0, \ldots, d\}$, presque sûrement, lorsque n tend vers l'infini :

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

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 0 [1]. 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 $\widetilde{Q}$ 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. 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 $\widetilde{Q}$ 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 $\Lambda=\{0,\ldots N\}^2$ 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 :

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

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 :

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

2. Implémenter l'algorithme de Metropolis en considérant la matrice $\widetilde{Q}(\sigma,\sigma')$ telle que $\widetilde{Q}(\sigma,\cdot)$ est la loi uniforme sur les configurations qui diffèrent de σ d'au plus un spin.
3. Représenter graphiquement une configration 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.