

À rendre au plus tard le 5 Décembre
sous forme de fichier attaché par email (rapport + programmes)

I : écrire un programme qui affiche le résultat aléatoire du lancer de 3 pièces successives P_i (résultats possibles 1 ou -1) selon que :

- a) les lancers sont iid et les pièces équilibrées;
- b) les lancers sont iid mais l'équilibrage des pièces est donné par le vecteur $p = (\mathbb{P}(P_1 = 1), \mathbb{P}(P_2 = 1), \mathbb{P}(P_3 = 1))$, donnée d'entrée du programme;
- c) les lancers sont indépendants, la loi des lancers conjoints est décrite comme donnée d'entrée du programme.

II : modèle d'Ising unidimensionnel : on se donne abstraitement N pièces, ou plutôt *spins* $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_N)$, prenant les valeurs $+1$ ou -1 . Une configuration de spins est la donnée d'un $\omega \in \{\pm 1\}^N$. L'énergie $E(\omega)$ associée à la configuration ω est donnée par

$$E(\omega) = \sum_{i,j=1}^N S_{i,j} \omega_i \omega_j + \sum_{i=1}^N h_i \omega_i.$$

Les $S_{i,j}$ sont les coefficients de couplage et les h_i représentent l'effet d'un champ magnétique. On note $\beta = 1/kT$ où T désigne la température (absolue) et k la constante de Boltzmann. Alors on définit une probabilité sur l'ensemble des configurations $\Omega = \{\pm 1\}^N$ par

$$\mathbb{P}(\{\omega\}) = \frac{e^{-\beta E(\omega)}}{\sum_{\tilde{\omega} \in \Omega} e^{-\beta E(\tilde{\omega})}}, \quad Z = \sum_{\tilde{\omega} \in \Omega} e^{-\beta E(\tilde{\omega})}$$

désignant la fonction de partition. Pour $N = 3$, voici six types d'interactions S classiques :

Indépendant $S = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Champ moyen $S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$	Alignement voisin le plus proche $S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
Anti-alignement voisin le plus proche $S = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Alignement voisin le plus proche Conditions périodiques $S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	Anti-alignement Conditions périodiques $S = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

a) En prenant $h = 0$ et $\beta = 1$, décrire les lois associées \mathbb{P}_S sur Ω ($N = 3$) pour les trois premières valeurs de S (faire un petit programme matlab avec données d'entre S , h et β).

On se propose de tirer aléatoirement suivant P_S un échantillon $(\omega^{(1)}, \dots, \omega^{(M)})$. On note ${}_j\omega$, $j = 1, \dots, 2^N$ l'ensemble des configurations possibles, et on note $Q({}_j\omega)$ la fréquence observée dans l'échantillon de l'apparition de la configuration ${}_j\omega$. La loi des grands nombres nous dit que chaque $Q({}_j\omega)$ converge vers $\mathbb{P}_S({}_j\omega)$ lorsque $M \rightarrow \infty$. Lorsque N est grand (par exemple 100), il y a $2^{100} \sim 10^{69}$ configurations possibles, soit environ le nombre de protons de l'univers! On se

heurté donc à une barrière de modélisation. Pour calculer la fonction de partition, c'est la même barrière qui se dresse.

Donc si on veut simuler un tirage aléatoire d'une configuration, il faut absolument éviter de calculer Z . Il faudrait un algorithme qui n'utilise que le calcul de

$$\mathbb{P}^*(\omega) = e^{-\beta E(\omega)}.$$

On utilise pour cela l'algorithme d'**Hastings Metropolis** :

.....
Détails sur l'algorithme d'Hastings-Metropolis

On se donne E un ensemble fini (qui sera très grand) et ν une loi de probabilités sur E telle que $\nu(\{e\}) > 0$ pour chaque $e \in E$. On cherche à construire une chaîne de Markov homogène réversible de matrice irréductible aperiodique P telle que ν soit la loi invariante de la chaîne.

Soit R un noyau de transition arbitraire sur E . Alors la formule

$$\begin{cases} P_{x,y} = R_{x,y} \wedge \left(\frac{\nu(y)}{\nu(x)} R_{y,x} \right), & x \neq y \\ P_{x,x} = 1 - \sum_{y \neq x} P_{x,y} \end{cases}$$

définit une matrice de transition P telle que pour tous $x, y \in E$, $\nu(x)P_{x,y} = \nu(y)P_{y,x}$. L'irréductibilité de R n'est pas suffisante pour garantir celle de P , qui requiert que pour $x \neq y$, il existe $n \geq 1$ et $x_0, \dots, x_n \in E$ tels que $x_0 = x$, $x_n = y$ et $R_{x_{k-1}, x_k} \wedge R_{x_k, x_{k+1}} > 0$ pour chaque k .

Pour ce faire, on choisit un graphe non orienté G sur E tel que l'on puisse aller avec G d'un point à un autre dans E , par un chemin fini, et on choisit R telle que

$$R_{x,y} > 0 \Leftrightarrow x \leftrightarrow_G y.$$

Il existe deux choix classiques de R une fois que G a été choisi :

• **L'échantillonneur de Gibbs** : on pose

$$R_{x,y} = \left(\sum_{z \leftrightarrow_G x} \nu(z) \right)^{-1} \nu(y) \text{ si } x \leftrightarrow_G y.$$

• **L'algorithme de Metropolis** : on pose

$$R_{x,y} = (n_x)^{-1} \text{ où } n_x = \#\{y : x \leftrightarrow_G y\}.$$

L'idée dans les deux cas est de choisir G de sorte que n_x soit faible par rapport à $\#E$.

On initialise la chaîne $(X_n)_{n \geq 0}$ de noyau P , puis étant donné $X_n = x$, on tire selon la loi de transition R $Y_n = y$ (avec donc nécessairement $x \leftrightarrow_G y$), puis indépendamment de Y_n on tire une variable de loi uniforme U_n , et alors on pose

$$\begin{cases} X_{n+1} = Y_n & \text{si } U_n < 1 \wedge \frac{\nu(y)R_{y,x}}{\nu(x)R_{x,y}}, \\ X_{n+1} = X_n & \text{sinon.} \end{cases}$$

Alors $(X_n)_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov de loi initiale \mathbb{P}_{X_0} et de seule loi invariante ν .

.....
 Voici donc la procédure à suivre :

- d'abord on sélectionne un état initial ω : ce peut être tous les spins en bas, tous en haut, ou choisir au hasard chaque spin indépendamment des autres.
- ensuite on choisit un site $j \in \{1, \dots, n\}$ au hasard (uniformément) et on transforme ω_j en $-\omega_j$, ce qui crée la nouvelle configuration $\tilde{\omega}$.
- on calcule $\Delta E = E(\tilde{\omega}) - E(\omega)$. On accepte l'évolution vers $\tilde{\omega}$ avec probabilité $\min\{1, e^{-\Delta E}\}$.

On itère ensuite la procédure précédente. Dans le choix du site j , on a le choix entre le faire au hasard ou alors les choisir les uns après les autres successivement de 1 à n , puis recommencer un certain nombre de fois. Pour appliquer l'algorithme du cours il s'agit ici de choisir une matrice de proposition R qui va proposer des $\tilde{\omega}$ différents seulement en un site de ω .

On peut aussi consacrer une période d'itération de l'algorithme appelée *préchauffage* qui consiste à faire un certain nombre d'itérations initiales avant de lancer les tirages au sort destinés à simuler la loi \mathbb{P}_S .

Quand ensuite on itère l'algorithme on simule la mesure de Gibbs. Plus la période de chauffe est longue et plus la mesure initiale de la chaîne est proche de la mesure ν à simuler.

b) Programmer cet algorithme pour β et N comme données d'entrée, ainsi que M et une entrée définissant le temps de chauffe (on précisera le graphe non orienté G et la matrice de proposition R).

c) Choisir une énumération de Ω pour mettons $N = 10$ et utiliser l'algorithme précédent pour tracer la fonction de répartition empirique pour une chauffe donnée, pour deux valeurs de M , et $\beta = 1/100$, $\beta = 1$ et $\beta = 100$. Qu'observez vous?

III : Simulation parfaite: voici une procédure pour simuler la loi de certaines chaînes de Markov.

.....

Détails sur la Simulation parfaite

On se donne une matrice de transition $P : E \times E \rightarrow [0, 1]$ telle que $\beta(P) := \sum_{y \in E} \inf_{x \in E} P_{x,y} > 0$, autrement dit un état est accessible par tous les autres si E est fini. Clairement $\beta(P) \leq 1$ et on peut définir une proba ν sur E par

$$\nu(y) = \frac{\inf_{x \in E} P_{x,y}}{\beta(P)}, \quad y \in E.$$

La condition $\beta(P) > 0$ entraîne l'existence d'une unique classe récurrente et donc P possède une unique mesure invariante, que nous noterons μ . On choisit $F : E \times [0, 1] \rightarrow E$ telle que si U est de loi $\mathcal{U}([0, 1])$, $\mathbb{P}(F(x, U) = y) = P_{x,y}$, $x, y \in E$. Alors si X_0 est à valeurs dans E et si $(U_n)_{n \geq 1}$ est iid de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ indépendante de X_0 , $(X_n)_{n \geq 0}$ définie par

$$X_n = F(X_{n-1}, U_n), \quad n \geq 1$$

est Markov homogène de matrice de transition P .

• Construction de F : on suppose $E = \{1, \dots, N\}$, on définit $\ell : \{0\} \cup E \rightarrow [0, \beta(P)]$ par

$$\ell(0) = 0, \quad \ell(y) = \ell(y-1) + \inf_{x \in E} P_{x,y}, \quad 1 \leq y \leq N.$$

On note $J(y) = [\ell(y-1), \ell(y)]$. Ensuite on définit $k : E \times (\{0\} \cup E) \rightarrow [\beta(P), 1]$ par

$$k(x, 0) = \beta(P), \quad k(x, y) = k(x, y-1) + P_{x,y} - \inf_{z \in E} P_{z,y}, \quad 1 \leq y \leq N.$$

Enfin on pose $K(x, y) = [k(x, y-1), k(x, y)]$ et

$$I(x, y) = J(y) \cup K(x, y).$$

On a $\lambda_1(I(x, y)) = P_{x,y}$ et donc le choix de

$$F(x, u) = \sum_{y \in E} y \mathbf{1}_{\{u \in I(x, y)\}}, \quad 1 \leq x \leq N, u \in [0, 1]$$

convient.

• Simulation de μ : on pose $T = \inf\{n \geq 1 : U_n \leq \beta(P)\}$: alors T suit une loi géométrique (discrète) de paramètre $\beta(P)$ et X_T a pour loi μ . Pour simuler μ on va procéder comme suit :

♠ : soit $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ iid de loi $\mathcal{U}([0, 1])$ et posons $N_k = \mathbf{1}_{\{U_k < \beta(P)\}}$, $\tau(n) = \max\{k \leq n : U_k < \beta(P)\}$. Remarquer que $N_{\tau(k)+1} = \dots = N_k = 0$.

♣ : poser $X_k = \sum_{y \in E} y \mathbf{1}_{\{U_k \in J(y)\}}$ si $N_k = 1$, et si $N_k = 0$, on définit $X_{\tau(k)}$ par la formule précédente et on pose ensuite par récurrence

$$X_{\tau(k)+1} = F(X_{\tau(k)}, U_{\tau(k)+1}), \dots, X_k = F(X_{k-1}, U_k).$$

◇ : simuler $U_0, U_{-1}, \dots, U_{\tau(0)}$, et calculer $X_{\tau(0)}$.

♡ : calculer $X_{\tau(0)+1}, \dots, X_{-1}$, et enfin X_0 , qui a pour loi μ .

.....

a) Choisir une matrice de transition telle que $\beta(P) > 0$ et simuler sa loi par la méthode proposée.

b) Simuler une loi de Poisson de paramètre λ arrêtée à n ($\mathbb{P}(X = k) = \lambda^k e^{-\lambda} / k!$ si $k \leq n$, $\mathbb{P}(X > n) = 1 - \mathbb{P}(X \leq n)$, $X \in \{0, \dots, n, \xi\}$ où ξ est un symbole désignant $\{x > n\}$).