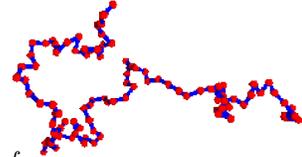


Chaînes auto-évitantes et Polymères



Responsable du projet: Pierre Del Moral pierre.del-moral@inria.fr

**Présentation** : Les chaînes auto-évitantes sont des modèles probabilistes d'actualité permettant d'analyser numériquement des chaînes de polymères et la formation de macro-molécules dans des solvants. Ce projet offre une introduction à ces modèles stochastiques par le biais de la simulation numérique sur une exemple académique.

On note  $V_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ ,  $V_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}$ ,  $V_3 = \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}$ , et  $V_4 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$  les quatre vecteurs unité de  $\mathbb{Z}^2$ . On considère une suite de v.a. uniformes  $(I_n)_{n \geq 0}$  sur  $\{1, 2, 3, 4\}$ . Une marche aléatoire simple sur  $\mathbb{Z}^2$ , partant de l'origine  $X_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  est définie par la suite aléatoire suivante

$$X_{n+1} = X_n + V_{I_n}$$

Les trajectoires de longueur  $n$  de la marche aléatoire sont données par des séquences de points  $(x_0, \dots, x_n) \in (\mathbb{Z}^2)^{n+1}$  tels que  $x_{p+1} \in x_p + \{V_1, V_2, V_3, V_4\}$ , pour tout  $0 \leq p < n$ . On notera  $\mathcal{T}_n$  l'ensemble de ces trajectoires,  $\mathcal{X}_n = (X_0, \dots, X_n)$  une trajectoire aléatoire, et  $G_n$  la suite de fonctions sur  $(\mathbb{Z}^2)^{n+1}$  définie par

$$G_n(x_0, \dots, x_n) = 1_{\mathbb{Z}^2 - \{x_0, \dots, x_{n-1}\}}(x_n)$$

Vérifier que

$$\forall (x_0, \dots, x_n) \in \mathcal{T}_n \quad \mathbb{P}((X_0, \dots, X_n) = (x_0, \dots, x_n)) = 2^{-2n}$$

On note  $A_n \subset \mathcal{T}_n$  le sous ensemble formée par les trajectoires  $(x_0, \dots, x_n)$  sans intersections, en ce sens où  $x_p \neq x_q$ , pour tout couple d'indices distincts  $0 \leq p < q \leq n$ . Pour toute fonction  $f_n$  sur  $(\mathbb{Z}^2)^{n+1}$  Vérifier que les formules suivantes

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(f_n(\mathcal{X}_n) \mid \mathcal{X}_n \in A_n) &= \mathbb{E} \left( f_n(\mathcal{X}_n) \prod_{1 \leq p \leq n} G_p(\mathcal{X}_p) \right) / \mathbb{E} \left( \prod_{1 \leq p \leq n} G_p(\mathcal{X}_p) \right) \\ \mathbb{P}(\mathcal{X}_n \in A_n) &= \mathbb{E} \left( \prod_{1 \leq p \leq n} G_p(\mathcal{X}_p) \right) = 2^{-2n} \times \text{Card}(A_n) \end{aligned}$$

où  $|A_n|$  désigne le cardinal de l'ensemble  $A_n$ . Le calcul exact de  $a(n) = \text{Card}(A_n)$  est un problème de combinatoire complexe. Nous supposerons que ce

dernier à la forme suivante  $a(n) = n^b e^{nc} (1 + o(1))$ . L'objectif de cette étude est d'estimer numériquement la constante de connectivité  $c$ .

Vérifier les inégalités suivantes  $|A_{p+q}| \leq |A_p| |A_q|$ ,  $2^n \leq |A_n| \leq 4 \cdot 3^n$ , et en conclure que  $c = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |A_n| \in [\log 2, \log 3]$ .

**Simulation :** Pour simuler et compter des trajectoires sans intersections, nous utiliserons une méthode d'acceptation-rejet universelle couplée à des mécanismes de recyclage. Cet algorithme consiste à simuler une population de  $N$  trajectoires de longueur croissante. Les  $N$  trajectoires sont initialisées à l'origine. Au temps  $n$ , nous avons  $N$  trajectoires  $\mathcal{X}_n^i$ ,  $1 \leq i \leq N$ , de longueur  $n$ .

Si toutes les trajectoires sont telles que  $G_n(\mathcal{X}_n^i) = 0$ , l'algorithme s'arrête, et l'on note  $T$  le temps d'arrêt de l'algorithme. Dans le cas contraire, on note  $P_n^N = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} G_n(\mathcal{X}_n^i)$  la proportion des trajectoires sans intersections. Puis on effectue les deux opérations suivantes :

- Pour chacun des indices  $1 \leq i \leq N$ , on effectue une première étape d'acceptation-rejet avec recyclage :

1. Si  $G_n(\mathcal{X}_n^i) = 1$ , on accepte la trajectoire et l'on pose  $\widehat{\mathcal{X}}_n^i = \mathcal{X}_n^i$ .
2. Si  $G_n(\mathcal{X}_n^i) = 0$ , on rejette la trajectoire et l'on pose  $\widehat{\mathcal{X}}_n^i = \widetilde{\mathcal{X}}_n^i$ ; où  $\widetilde{\mathcal{X}}_n^i$  désigne une trajectoire sans intersection choisie au hasard (parmi les  $N \times P_n^N$  trajectoires  $\mathcal{X}_n^j$  telles que  $G_n(\mathcal{X}_n^j) = 1$ ).

A la fin de cette étape nous obtenons  $N$  trajectoires de longueur  $n$

$$\widehat{\mathcal{X}}_n^i = (\widehat{\mathcal{X}}_{0,n}^i, \widehat{\mathcal{X}}_{1,n}^i, \dots, \widehat{\mathcal{X}}_{n,n}^i) \quad 1 \leq i \leq N$$

- Pour chacun des indices  $1 \leq i \leq N$ , on effectue une seconde étape d'extension des trajectoires

$$\mathcal{X}_{n+1}^i = \left( \widehat{\mathcal{X}}_n^i, \widehat{\mathcal{X}}_{n,n}^i + V_{I_{n+1}^i} \right)$$

où  $(I_n^i)_{1 \leq i \leq N}$  désignent  $N$  copies indépendantes de la variable  $I_n$ .

A la fin de cette étape nous obtenons  $N$  trajectoires de longueur  $(n+1)$

$$\mathcal{X}_{n+1}^i = (\mathcal{X}_{0,n+1}^i, \mathcal{X}_{1,n+1}^i, \dots, \mathcal{X}_{n+1,n+1}^i) \quad 1 \leq i \leq N$$

On itère ces deux étapes à chaque itération de l'algorithme. Simuler cet algorithme, et le comparer avec l'algorithme classique d'acceptation-rejet. Simuler des trajectoires conditionnelles, et estimer la constante de connectivité  $c$  en utilisant les approximations suivantes :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Loi}(\widehat{\mathcal{X}}_n^1 | T > n) = \text{Loi}(\mathcal{X}_n | \mathcal{X}_n \in A_n) \quad \text{et} \quad \lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{1 \leq p \leq n} P_p^N = \mathbb{P}(\mathcal{X}_n \in A_n)$$

## References

- [1] N. BARTOLI, P. DEL MORAL. *Simulations et Algorithmes Stochastiques* Cépaduès Édition. (2001).