



ELSEVIER

Contents lists available at ScienceDirect

C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I

www.sciencedirect.com



Physique mathématique/Économie mathématique

## Un algorithme dérivé de l'algorithme de Metropolis

*An algorithm derived from the Metropolis algorithm*

Bernard Schnetzler

IFSTTAR – LICIT, 25, avenue François-Mitterrand, case 24, 69 675 Bron cedex, France

## I N F O A R T I C L E

*Historique de l'article :*

Reçu le 30 juin 2015

Accepté le 4 octobre 2017

Disponible sur Internet le 16 octobre 2017

Présenté par le comité de rédaction

## R É S U M É

La physique statistique et la modélisation stochastique en économie partagent les mêmes bases mathématiques, données par la distribution de Gibbs, mais les systèmes présentent des caractéristiques très différentes. Un système économique type peut ainsi être décrit par une statistique de Bose–Einstein avec un petit nombre d'états non dégénérés et une « température » infinitésimale ; il se trouve ainsi dans des conditions où l'approximation de la configuration la plus probable devient invalide. Par conséquent, le calcul de la solution exacte nécessite le recours à un algorithme de Metropolis, qui estime une distribution de Gibbs. On propose ici un algorithme infiniment plus efficace. Sur des petits systèmes pour lesquels la distribution moyenne sur l'ensemble canonique peut être établie, on compare cette distribution aux solutions calculées.

© 2017 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Cet article est publié en Open Access sous licence CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

## A B S T R A C T

Statistical physics and stochastic modelling in economic sciences share the same mathematical bases given by the Gibbs distribution, but system characteristics are different. For instance, an economic system can be described by a Bose–Einstein statistics with few non-degenerate states and an infinitesimal “temperature”; under such conditions, the approximation of the most probable configuration is invalid. Therefore, the calculus of the exact solution needs using a Metropolis algorithm, which estimates a Gibbs distribution. This paper presents a much more efficient algorithm. For small systems, the exact distribution on the canonical set can be computed, and then this distribution is compared to the solutions of the old and new algorithms.

© 2017 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Cet article est publié en Open Access sous licence CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

**1. Introduction**

La distribution du modèle logit multinomial [3,4] employée en économie est connue comme la distribution de Gibbs en physique, depuis 1902. Elle est utilisée, dans le premier cas, pour la modélisation stochastique d'un choix individuel [2], basé

Adresse e-mail : [bernard.schnetzler@ifsttar.fr](mailto:bernard.schnetzler@ifsttar.fr).

<https://doi.org/10.1016/j.crma.2017.10.002>

1631-073X/© 2017 Académie des sciences. Publié par Elsevier Masson SAS. Cet article est publié en Open Access sous licence CC BY-NC-ND (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

sur la maximisation de l'utilité ou la minimisation du coût ; elle est utilisée, dans le second cas, pour calculer le minimum d'énergie d'un système. La modélisation en physique correspond ainsi au cas du calcul d'un optimum collectif en économie. Si les bases mathématiques sont identiques, les caractéristiques des systèmes sont cependant très différentes en physique et en économie. On ne retient ici que le faible nombre d'états, l'absence de dégénérescence des états, les faibles populations et les « faibles températures » qui font que l'approximation de Boltzmann, qui fonde la physique statistique, devient fautive. Cette introduction se poursuit donc par la démonstration de cette affirmation.

On note  $\Omega$  l'ensemble des choix d'un individu, correspondant à l'ensemble *microcanonique* en physique. On note  $S$  une population de  $N$  individus. On note  $\mathcal{E}$  l'ensemble des configurations de choix possibles pour les  $N$  individus, correspondant à l'ensemble *canonique* en physique. Une configuration  $X$  est donc décrite par une répartition  $\{N_i(X)\}$  avec un coût  $U_X = \sum_i N_i(X)u_i$  en l'absence d'interactions. Dans le cadre d'une modélisation stochastique, la distribution des configurations suit une loi de Gibbs :

$$\Pi_K = \frac{W_K \exp(-\beta U_K)}{\sum_{X \in \mathcal{E}} W_X \exp(-\beta U_X)}$$

où les *probabilités thermodynamiques*  $W_X$  dépendent de la statistique employée. Par définition de la distribution de Gibbs, le coût effectif, analogue à l'énergie libre en physique, associé à un optimum collectif s'écrit :

$$F = U + \beta^{-1} \sum_{X \in \mathcal{E}} \Pi_X \ln \Pi_X - \beta^{-1} \sum_{X \in \mathcal{E}} \Pi_X \ln W_X$$

L'économiste est surtout intéressé par la distribution qui donne les parts de marché, laquelle est la répartition moyenne :

$$\Pi_i = \sum_{X \in \mathcal{E}} \Pi_X \frac{N_i(X)}{N} \quad (1)$$

L'approximation de Boltzmann repose, premièrement, sur les valeurs astronomiques des valeurs des probabilités thermodynamiques  $W = N! / \prod_i N_i!$  pour la statistique de Maxwell-Boltzmann (MB) et, deuxièmement, sur les faibles fluctuations autour de la configuration la plus probable. Il est alors possible de se limiter à la configuration  $\{N_i(K)\}$  la plus probable pour estimer  $\Pi_i$ . En posant  $\Pi_K = 1$  on obtient la formule  $F = U - \beta^{-1} \ln W_K$ . Il existe ici une grande différence entre la statistique MB et les statistiques quantiques : en présence de dégénérescences, la probabilité thermodynamique s'écrit  $W = \prod_i g_i^{N_i} N! / N_i!$  dans le premier cas et  $W = \prod_i (g_i + N_i - 1)! / (g_i - 1)! N_i!$  pour la statistique de Bose-Einstein (BE). L'approximation de Boltzmann est ainsi valide pour la statistique BE quand  $g_i \gg 1$ , mais, pour des températures infinitésimales, les dégénérescences  $g_i$  sont de l'ordre de l'unité. Or, si  $W_K = 1$ , la formule de Boltzmann donne  $F = U$ , alors que la solution exacte est :

$$F = U + \beta^{-1} \sum_X \Pi_X \ln \Pi_X$$

En fait, dans un tel cas, l'approximation évacue complètement le caractère stochastique du modèle. Comme on ne peut utiliser les distributions établies sur cette approximation, une solution est le recours à l'algorithme de Metropolis qui permet d'estimer une distribution de Gibbs. On notera que les statistiques quantiques sont des distributions de Gibbs sur l'ensemble canonique : ce n'est que la définition de l'ensemble canonique qui est particulière.

La présente note est divisée en deux parties. La première section décrit l'algorithme de Metropolis et expose ses défauts. Un algorithme en est ensuite dérivé en deux étapes. La première étape produit un algorithme de Metropolis adapté aux individus indiscernables. La seconde étape dérive un algorithme qui produit la *distribution d'équilibre*. Il est particulièrement adapté aux systèmes économiques de petites dimensions. La seconde partie du papier applique cet algorithme aux statistiques de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac, à des températures infinitésimales.

## 2. Un dérivé de l'algorithme de Metropolis

L'algorithme de Metropolis [5,1] est une méthode de Markov pour des lois stationnaires appliquée à l'estimation d'une distribution de Gibbs. Il repose sur deux principes. Le premier est le critère du même nom, qui permet de déterminer à chaque itération la probabilité de transition d'une configuration à l'autre. On suppose un ensemble de configurations  $\mathcal{E}$  réparties suivant une distribution de Gibbs, dont la *fonction de répartition* est :

$$Z = \sum_{X \in \mathcal{E}} W_X \exp(-\beta U_X)$$

où  $W_X$  est la probabilité thermodynamique de la statistique de Maxwell-Boltzmann. La probabilité de passer d'une configuration  $I$  à une configuration  $K$  est donnée par le critère de Metropolis :

$$\Pi_{I \rightarrow K} = \begin{cases} 1 & \text{quand } U_K - U_I \leq 0 \\ \exp(-\beta\{U_K - U_I\}) & \text{quand } U_K - U_I > 0 \end{cases}$$

Ce critère ne pose aucun problème, et il ne sera pas discuté. Le second principe est relatif à l'échantillonnage des configurations et plus particulièrement au problème posé par l'immensité de l'espace des configurations. Pour faire face à ce problème de taille de l'espace des configurations, en premier lieu, l'algorithme de Metropolis fait l'hypothèse de symétries du système telles qu'un échantillonnage uniforme dans un sous-ensemble de cet espace est représentatif de cet espace tout entier. Ensuite, comme même ce sous-espace est d'une taille trop importante, l'originalité de l'algorithme est une méthode, dépendante de la probabilité thermodynamique de la statistique MB, permettant d'explorer uniformément ce sous-espace sans avoir à générer au préalable toutes ses configurations : on passe d'une configuration à l'autre en sélectionnant aléatoirement un individu, puis en sélectionnant aléatoirement un nouvel état pour cet individu. Cet algorithme présente deux défauts :

- en pratique, l'échantillonnage est biaisé parce qu'il réalise une marche aléatoire autour de la configuration la plus probable et, par conséquent, il produit la distribution la plus probable ;
- le temps de calcul est excessivement long ; en théorie, l'algorithme est censé établir une statistique sur  $\mathcal{E}$ , c'est-à-dire le parcourir plusieurs fois en totalité, alors qu'une unique génération de  $\mathcal{E}$  suffirait à calculer la fonction de partition !

L'intérêt de l'algorithme de Metropolis est que la fonction d'état  $U_K$  peut être arbitrairement complexe, généralement à cause d'interactions au sein de la population. À l'opposé, l'algorithme qui va être dérivé impose une contrainte sur la définition de la fonction d'état  $U_K$  : celle-ci ne peut dépendre que de la répartition  $\{N_i(K)\}$  et non de l'identité des individus de la population. Un exemple de ce type d'interactions se présente dans le domaine du trafic automobile, où l'utilité  $u_i$  d'une voie  $i$  sur une autoroute dépend de la vitesse  $v_i(\rho_i)$  sur cette voie, qui dépend elle-même de la densité  $\rho_i$  sur cette voie. À l'opposé, en physique, on peut avoir des individus statistiquement différents parce qu'ils sont décrits par des coordonnées  $(x, y, z)$  et que l'énergie dépend d'un champ local  $h_K(x, y, z)$ , qui est fonction de la configuration. On ne traite pas ce type de systèmes.

### 2.1. Adaptation de l'algorithme au cas d'individus indiscernables

La technique d'échantillonnage de Metropolis dépend de l'expression de la probabilité thermodynamique de la statistique de Maxwell-Boltzmann. Pour pouvoir appliquer cette technique dans le cas de la statistique de Bose-Einstein, dont la probabilité thermodynamique s'écrit :

$$W_K = \prod_i \frac{(N_i(K) + g_i - 1)!}{N_i(K)!(g_i - 1)!},$$

il suffit simplement de faire réapparaître l'expression de la probabilité thermodynamique de la statistique de Maxwell-Boltzmann en repoussant les autres termes dans la fonction de coût :

$$Z = \sum_{K \in \mathcal{E}} \frac{N!}{\prod_i N_i!} \exp\left(-\beta \left\{ \sum_i N_i u_i - \beta^{-1} \ln \frac{(N_i + g_i - 1)!}{(g_i - 1)!} \right\} - \ln N!\right)$$

Si on ne s'intéresse qu'aux répartitions, on retire les termes constants et on obtient :

$$Z = \sum_{K \in \mathcal{E}} \frac{N!}{\prod_i N_i!} \exp\left(-\beta \left\{ \sum_i N_i u_i - \beta^{-1} \ln(N_i + g_i - 1)! \right\}\right)$$

Le caractère significatif de l'échantillonnage étant indépendant de la définition de la fonction de coût du système, on n'a plus qu'à appliquer le critère de Metropolis en tenant compte de cette nouvelle fonction. Ainsi, considérant une configuration initiale  $I$  et une configuration finale  $K$ , quand un individu passe d'un état  $i$  à un état  $k$ , la différence de coût entre les deux configurations est :

$$\Delta U_{I \rightarrow K} = \{u_k - u_i\} + \beta^{-1} \{-\ln(N_k(I) + g_k) + \ln(N_i(I) + g_i - 1)\} \quad (2)$$

L'asymétrie de la formule ci-dessus n'est qu'apparente, car l'état final étant une configuration  $K$ , il faudrait substituer  $N_k(I)$  par  $N_k(K) - 1$ .

La statistique de Fermi-Dirac est celle d'une population d'individus indiscernables avec un principe d'exclusion interdisant à deux individus de se trouver dans le même état. La probabilité thermodynamique s'écrit :

$$W_K = \prod_i \frac{g_i!}{N_i(K)!(g_i - N_i(K))!}$$

Tout comme pour la statistique de Bose-Einstein, on peut réécrire la fonction de partition en retirant les termes constants qui n'ont aucune influence sur la répartition. On obtient alors :

$$\sum_{K \in \mathcal{E}} \exp\left(-\beta \left\{ \sum_i N_i u_i + \beta^{-1} \ln(g_i - N_i)! \right\}\right)$$

Considérant une configuration initiale  $I$  et une configuration finale  $K$ , quand un individu passe d'un état  $i$  à un état  $k$ , la différence de coût entre les deux configurations est :

$$\Delta U_{I \rightarrow K} = \{u_k - u_i\} + \beta^{-1} \{-\ln(g_k - N_k(I)) + \ln(g_i - N_i(I) + 1)\} \quad (3)$$

Le problème posé par la statistique de Fermi–Dirac (FD) est le principe d'exclusion, lequel est indépendant du concept de discernabilité/indiscernabilité. Pour simplifier le raisonnement, on considère le cas  $g_i = 1$ . Au cours de l'échantillonnage, le problème se pose au moment de la sélection aléatoire d'un nouvel état  $i$  pour l'individu  $n$  sélectionné. Si ce nouvel état est déjà occupé par un autre individu, il est impossible de l'attribuer à l'individu  $n$ . Pour un système simple où les individus sont statistiquement identiques, il importe peu que ce soit un individu  $n$  ou  $m$  qui soit dans l'état  $i$ , et l'essai est simplement annulé. Cette annulation est légitime, car on a généré une configuration qui n'appartient pas à l'ensemble  $\mathcal{E}$ . Le problème se pose quand les individus cessent d'être statistiquement identiques, car le simple rejet rendrait l'échantillonnage non uniforme, mais on ne s'intéresse pas à ce type de systèmes.

## 2.2. Dérivation d'un nouvel algorithme

L'algorithme de Metropolis entrant dans la catégorie des méthodes MCMC (*Monte Carlo Markov Chain*), le principe est d'éliminer l'aspect Monte-Carlo pour ne conserver que la chaîne de Markov. On reformule l'algorithme en substituant les sélections aléatoires d'un individu et d'un état par une description probabiliste. Le processus de Markov s'écrit alors :

$$\forall i : N_i(t + \delta t) = N_i(t) + \frac{1}{N} \left\{ \sum_{k \neq i} N_k(t) A_{k \rightarrow i} - \sum_{k \neq i} N_i(t) A_{i \rightarrow k} \right\}$$

où les probabilités de transition  $A_{i \rightarrow k}$  sont données par le critère de Metropolis. Pour la statistique de Bose–Einstein, les différences d'énergie entre les états sont données par l'Eq. (2). Ce nouveau processus de Markov atteint l'équilibre quand  $N_i(t + \delta t) = N_i(t)$ . On exprime ci-dessous la condition d'équilibre pour le niveau fondamental. Si on suppose que le niveau fondamental, noté 0, est tel que  $\forall k : \Delta U_{k \rightarrow 0} \leq 0$  alors d'après le critère de Metropolis  $\forall k : A_{k \rightarrow 0} = 1$ . L'équilibre est défini par l'équation :

$$0 = \sum_{k \neq 0} N_k(t) A_{k \rightarrow 0} - \sum_{k \neq 0} N_0(t) A_{0 \rightarrow k} = (N - N_0(t)) - \sum_{k \neq 0} N_0(t) A_{0 \rightarrow k}$$

ou encore :

$$N_0(t) = \frac{N}{1 + \sum_{k \neq 0} A_{0 \rightarrow k}} \quad (4)$$

Les transitions  $A_{0 \rightarrow k}$  sont déterminées par l'Eq. (2) exprimant le critère de Metropolis pour la statistique de Bose–Einstein. D'après les Eqs. (2), (4), l'équilibre pour le niveau fondamental est donc donné par l'expression :

$$\Pi_0 = \frac{(g_0 + N_0 - 1) \exp(-\beta u_0)}{(g_0 + N_0 - 1) \exp(-\beta u_0) + \sum_{k \neq 0} (g_k + N_k) \exp(-\beta u_k)} \quad (5)$$

où le facteur  $-1$  joue un rôle crucial. Cette Eq. (5) exprime une condition d'équilibre, puisque la variable  $N_0$  apparaît à droite et à gauche du signe égal. Si la condition  $\forall i : (g_i - 1) \gg 1$  est satisfaite, l'équilibre est donné par l'expression :

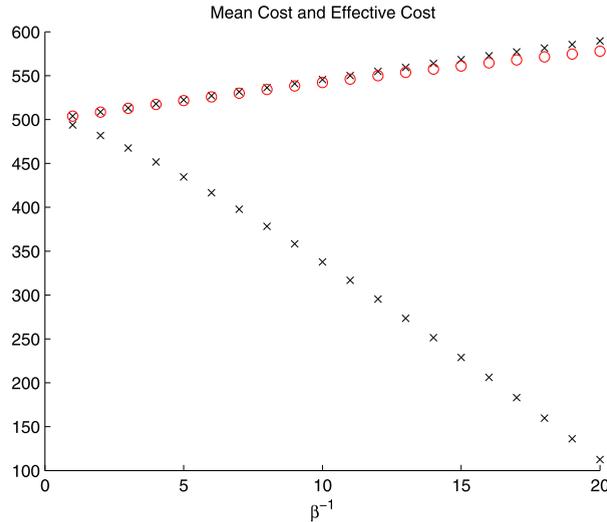
$$\Pi_i \cong \frac{(g_i + N_i) \exp(-\beta u_i)}{\sum_k (g_k + N_k) \exp(-\beta u_k)} \quad (6)$$

qui est en fait une formulation alternative de la distribution de Bose–Einstein :

$$N_i = \frac{g_i}{\exp(\beta u_i - \nu) - 1} \Leftrightarrow N_i = (g_i + N_i) \exp(-\beta u_i) \exp(\nu)$$

À la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ) et aux hautes températures, il y a donc une équivalence entre la distribution d'équilibre et la distribution la plus probable. Cela n'est pas vrai pour les systèmes économiques de petites dimensions à basse température.

D'une manière générale, l'Eq. (6) est une approximation acceptable de la distribution d'équilibre. Le calcul des  $\Pi_i$  en utilisant en entrée les valeurs  $N_i$  de la répartition moyenne est exact à 1 % (données de la Fig. 1). En revanche, le fait que l'Eq. (6) soit une quasi-identité est trompeur. Ainsi, avec les mêmes données, l'estimation du paramètre  $\nu = \beta u_i + \ln((1 + N_i)/N_i)$  à partir des répartitions moyennes conduit à trois valeurs  $\nu_i$  distinctes.



**Fig. 1.** Coût moyen et coût effectif dans une statistique de Bose–Einstein. La figure décrit le calcul de l’optimum collectif pour une population de 500 individus indiscernables pouvant se répartir sur trois états, de valeur respectives 1, 1.5 et 2. L’unité pour  $\beta^{-1}$  est 2.3145. (1°) Cercles rouges, solution de BE ; le coût effectif est identique au coût moyen ! (2°) Croix noires, calcul de la solution exacte en générant toutes les solutions de l’ensemble  $\mathcal{E}$ .

Pour de petits systèmes, il est possible de comparer la distribution moyenne, la distribution la plus probable et la distribution d’équilibre. La Figure 1 illustre le genre de scénarios économiques rencontrés. Les résultats illustrent la légère dérive de l’estimation du coût moyen par rapport à la solution exacte. Cette erreur de 2% pour la valeur maximale de  $\beta^{-1}$  cache cependant un écart beaucoup plus important sur les répartitions : l’erreur relative de la répartition sur l’état médian (on a un système à trois états) est de l’ordre de 20%.

La mise en œuvre pratique de l’algorithme alternatif nécessite une adaptation de la formulation théorique. Premièrement, quand les  $A_{k \rightarrow i}$  sont l’exacte transcription du critère de Metropolis, il est nécessaire d’opérer une division par  $|\Omega|$  pour les transformer en probabilités. Deuxièmement, la division par  $N$ , qui équivaut à ne faire changer d’état qu’un seul individu, est supprimée ; c’est à cette condition que l’on obtient un algorithme efficace. On obtient finalement le schéma :

$$N_i(t + \delta t) = N_i(t) + \frac{1}{|\Omega|} \left\{ \sum_{k \neq i} N_k(t) A_{k \rightarrow i} - \sum_{k \neq i} N_i(t) A_{i \rightarrow k} \right\}$$

La mise en œuvre est légèrement différente pour la statistique FD. Premièrement, à la différence du cas de la statistique BE, le facteur  $N$  doit impérativement être conservé. L’algorithme alternatif est sensible à ces paramétrages, lesquels doivent beaucoup à l’empirisme. Deuxièmement, le principe d’exclusion nécessite le respect des contraintes  $\forall i : N_i(t + \delta t) < g_i$ . Le schéma s’écrit alors :

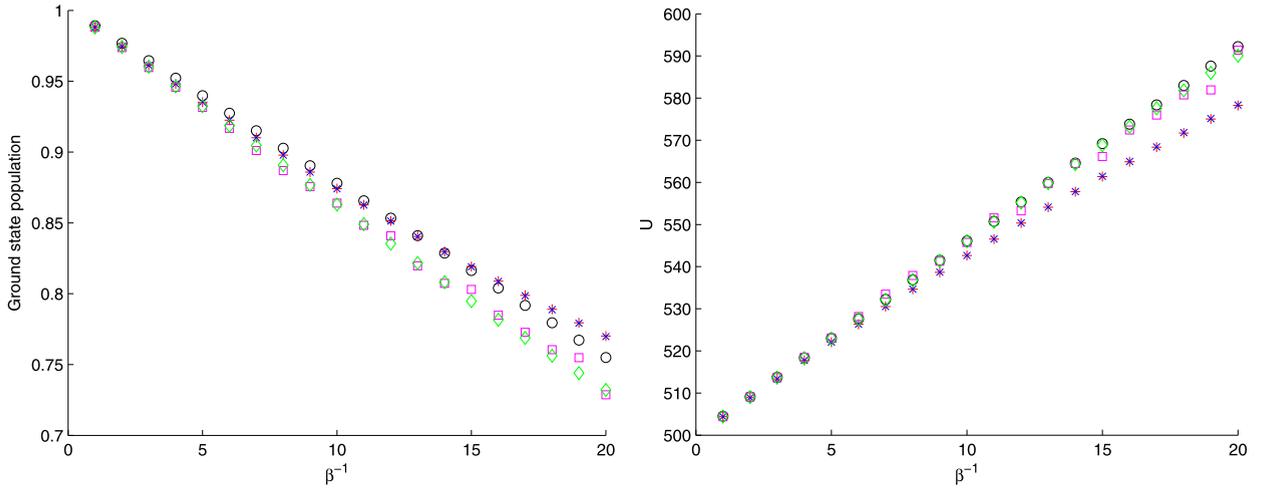
$$N_i(t + \delta t) = N_i(t) + \frac{1}{N \times |\Omega| \times r} \left\{ \sum_{k \neq i} N_k(t) A_{k \rightarrow i} - \sum_{k \neq i} N_i(t) A_{i \rightarrow k} \right\}$$

Au début de chaque itération, le paramètre  $r$  vaut 1 ; tant que l’itération ne peut être validée à cause des contraintes à respecter, le calcul est repris avec une valeur doublée du paramètre  $r$ .

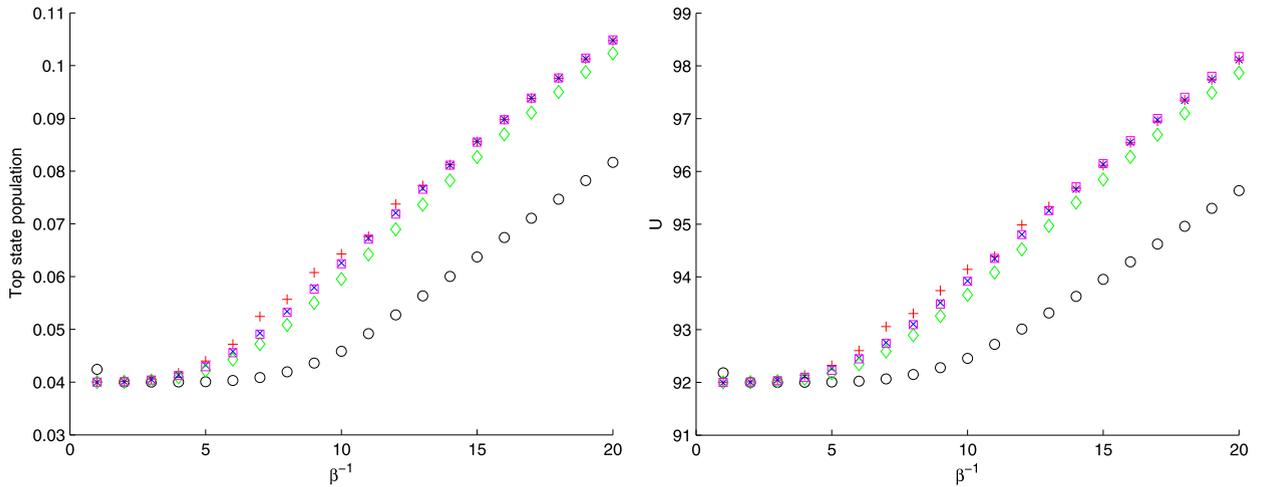
Cet algorithme alternatif peut être mis en œuvre avec une matrice  $A$  déterminée par les Eqs. (2)–(3). Il peut aussi être mis en œuvre avec une matrice dont les probabilités de transition sont déterminées par les expressions des distributions des statistiques quantiques  $\Pi_{BE}$  ou  $\Pi_{FD}$  : le facteur  $\pm 1$  disparaît alors des Eqs. (2)–(3). Dans le premier cas, l’algorithme converge vers la distribution d’équilibre du système  $\Pi_{EQ}$  ; dans le second cas, il converge vers la distribution la plus probable  $\Pi_{BE(2)}$  ou  $\Pi_{FD(2)}$ .

### 3. Mise en œuvre et conclusion

Pour de petits systèmes, la solution exacte peut être calculée sur l’ensemble canonique : on note  $\Pi_{\mathcal{E}}$  la distribution exacte donnée par l’Eq. (1). On résume brièvement la comparaison des différentes distributions. (1°) Dans tous les cas, on observe une identité entre la distribution la plus probable produite par l’algorithme alternatif ( $\Pi_{BE(2)}$  ou  $\Pi_{FD(2)}$ ) et les distributions  $\Pi_{BE}$  ou  $\Pi_{FD}$ . (2°) La distribution d’équilibre  $\Pi_{EQ}$  est plus proche de la solution exacte  $\Pi_{\mathcal{E}}$  dans le cas de la statistique BE, tandis que la distribution la plus probable  $\Pi_{FD(2)}$  est plus proche de  $\Pi_{\mathcal{E}}$  dans le cas de la statistique de FD. Les divergences entre  $\Pi_{\mathcal{E}}$ , d’une part, et  $\Pi_{EQ}$  et  $\Pi_{BE(2)}$  ou  $\Pi_{FD(2)}$ , d’autre part, sont surtout visibles sur les distributions (et aussi sur la chaleur spécifique) et, dans le cas de la statistique de Bose–Einstein, sont quasiment invisibles sur le coût moyen. Ces proximités, observées sur quelques exemples n’ont évidemment pas une validité générale.



**Fig. 2.** Statistique de Bose–Einstein. Les paramètres de simulation sont identiques à ceux de la première figure. Algorithme de Metropolis :  $5 \cdot 10^7$  itérations. Algorithme alternatif : 600 itérations. (1) Croix rouge,  $\Pi_{BE(2)}$ . (2) Rond noir,  $\Pi_{EQ}$ . (3) Signe plus bleu,  $\Pi_{BE}$ . (4) Diamant vert,  $\Pi_{E}$ . (5) Carré magenta,  $\Pi_M$ .



**Fig. 3.** Statistique de Fermi–Dirac. Taille de la population : 50 individus. Cinq états de valeurs [1, 1.5, 2, 2.5, 4] et de dégénérescences [12, 12, 12, 12, 12]. Nombre total de configurations : 1001. Valeur maximale des probabilités thermodynamiques :  $\sim 10^9$ . Algorithme de Metropolis :  $5 \cdot 10^7$  itérations. Algorithme alternatif : 4000 itérations. (1) Croix rouge,  $\Pi_{FD(2)}$ . (2) Rond noir,  $\Pi_{EQ}$ . (3) Signe plus bleu,  $\Pi_{FD}$ . (4) Diamant vert,  $\Pi_{E}$ . (5) Carré magenta,  $\Pi_M$ .

Pour l’algorithme de Metropolis et l’algorithme alternatif, le nombre d’itérations est indicatif pour de multiples raisons : il dépend de l’état initial, de la température et de la présence d’un test d’arrêt.

Les premières simulations (voir Fig. 2) sont réalisées sur la statistique BE avec les données de la première figure. Le nombre total de configurations est donné par  $(G + N - 1)! / (G - 1)! N!$  avec  $G = \sum g_i$  ; il vaut 125 751. On effectue quatre observations principales :

- une identité entre  $\Pi_{BE(2)}$  et  $\Pi_{BE}$  ;
- une plus grande proximité entre la distribution d’équilibre  $\Pi_{EQ}$  et la solution exacte  $\Pi_E$  qu’entre  $\Pi_{BE(2)}$  et  $\Pi_E$  ; la divergence entre  $\Pi_{BE(2)}$  et  $\Pi_E$  n’est pas visible sur l’estimation du coût moyen ;
- la distribution  $\Pi_M$  produite par l’algorithme de Metropolis converge vers  $\Pi_E$  avec un nombre d’itérations  $5 \cdot 10^7$  par point de mesure pour 125 751 configurations ; des résultats non présentés montrent une convergence vers  $\Pi_{BE}$  pour un nombre d’itérations égal à  $10^6$  ;
- l’algorithme alternatif est ici  $10^6$  fois plus rapide que l’algorithme de Metropolis ; ce rapport va en diminuant avec le nombre d’états  $n$  car la taille de la matrice  $A$  est en  $O(n^2)$ .

Les secondes simulations (voir Fig. 3) sont réalisées sur la statistique FD. En choisissant une très faible population, on a choisi les pires conditions de convergence, tant pour la précision des résultats que pour le temps de calcul. On effectue quatre observations principales :

- une quasi-identité entre  $\Pi_{\text{FD}(2)}$  et  $\Pi_{\text{FD}}$  ; des résultats non présentés avec  $N = 200$  montrent une identité quasiment parfaite ;
- une plus grande proximité entre  $\Pi_{\text{FD}(2)}$  et  $\Pi_{\mathcal{E}}$  qu'entre  $\Pi_{\text{EQ}}$  et  $\Pi_{\mathcal{E}}$  ;
- on a confirmation du biais de la méthode d'échantillonnage de l'algorithme de Metropolis, qui converge vers  $\Pi_{\text{FD}}$ , dont les  $5 \cdot 10^7$  itérations par point de mesure sont à comparer à  $W_K \sim 10^9$  ;
- l'algorithme alternatif est ici  $10^4$  fois plus rapide que l'algorithme de Metropolis.

## Références

- [1] W.K. Hastings, Monte Carlo sampling methods using Markov chains and their applications, *Biometrika* 57 (1) (1970) 97–109.
- [2] R.D. Luce, *Individual Choice Behavior: A Theoretical Analysis*, Wiley, New York, 1959.
- [3] D. McFadden, Conditional logit analysis of qualitative choice behavior, in: P. Zarembka (Ed.), *Frontiers in Econometrics*, 1974, pp. 105–142.
- [4] D. McFadden, Econometric models for probabilistic choice among products, *J. Bus.* 53 (1980) 13–29.
- [5] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, *J. Chem. Phys.* 21 (1953) 1087.