



UNITÉ DE MATHÉMATIQUES PURES ET APPLIQUÉES - LYON

Modèle d'Ising

Auteur :
Laura GAY

Responsable :
Marielle SIMON

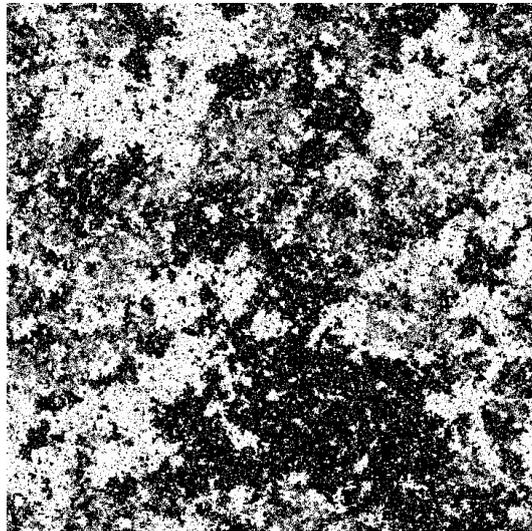


FIGURE 1 – Exemple de configuration,
Source : [4]

Table des matières

1	Présentation du modèle	4
2	Première étude	7
2.1	Energie et autres fonctions	7
2.2	Etats d'équilibre	8
3	Etude avec champ magnétique	9
3.1	En dimension quelconque	9
3.2	En dimension 1	11
4	Etude sans champ magnétique	16
4.1	En dimension quelconque	16
4.1.1	Cas de la température infinie i.e. $\beta \sim 0$	16
4.1.2	Cas de la température nulle i.e. $\beta \rightarrow \infty$	17
4.2	En dimension 1	18
4.2.1	Etude en modèle classique	18
4.2.2	Approximation en champ moyen : Modèle de Curie-Weiss	21
5	Simulations : Méthode MCMC et algorithme de Metropolis-Hastings	23
5.1	Théorie de l'algorithme	23
5.2	Construction de $(X_n)_{n \geq 0}$	24

Introduction

L'objectif de ce stage est l'étude de l'article *The Ising model* de Sacha FRIEDLY et Yvan VELENIK [1] dans le but de comprendre et de réaliser des simulations sur le modèle d'ISING.

Le modèle d'ISING est un modèle fréquemment utilisé pour tester de nouvelles idées et méthodes en physique statistique. Afin de représenter les atomes qui composent un matériau magnétique, on fixe trois hypothèses :

- chaque atome a un moment magnétique appelé spin. Pour simplifier, les spins n'auront que deux orientations possibles : haut (on dira que le spin est $+1$) ou bas (-1) ;
- les spins ont tendance à s'aligner avec leurs voisins ;
- initialement, ils sont orientés aléatoirement.

Le but est de montrer l'existence d'une transition de phase dans ce modèle.

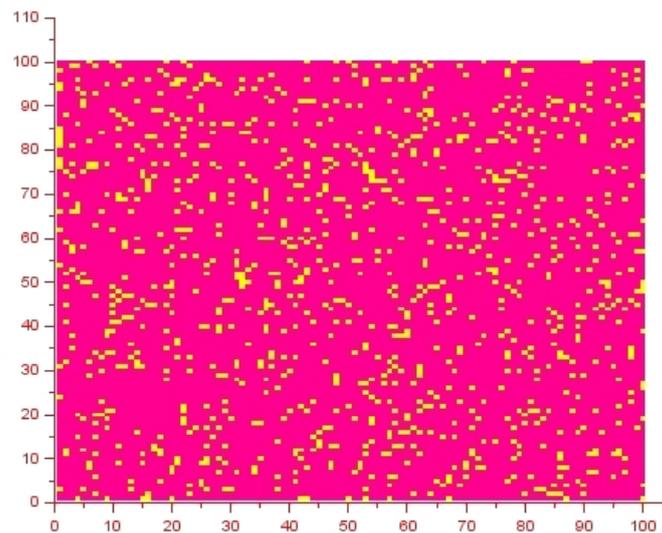


FIGURE 2 – Un exemple de configuration en dimension 2. En rose les spins $+1$ et en jaune les -1

Par sa simplicité, le modèle d'ISING est très utilisé pour comprendre la configuration dans l'espace d'un matériau magnétique.

Ce rapport débute avec la présentation du modèle classique avec une première étude. Nous introduisons ensuite des fonctions particulières. Nous les étudions pour déduire un comportement de la configuration lorsqu'un champ magnétique intervient ou lorsqu'on ôte ce champ. Enfin, la dernière partie est consacrée à la modélisation et détaille les méthodes algorithmiques utilisées lors des simulations.

Il va de soi que mes premiers et plus vifs remerciements s'adressent à Marielle Simon, ma maîtresse de stage qui m'a fait découvrir ce domaine des mathématiques appliquées à la physique que je ne connaissais pas. Elle a su mettre en avant toute sa pédagogie au service de mon apprentissage. Je tiens à remercier également Ramla Abdellatif pour tous les échanges que j'ai pu avoir en sa compagnie et celle de Marielle notamment sur la vie d'une "matheuse". Mes remerciements s'adressent aussi à Sébastien Martineau pour son aide sur Scilab ainsi qu'à tous les doctorants du laboratoire qui m'ont fait découvrir de l'intérieur le déroulement d'une thèse.

1 Présentation du modèle

Ce modèle a été introduit par Ernest ISING au début du vingtième siècle alors qu'il était étudiant en thèse sous la direction de Wilhelm LENZ. Le problème posé par ce dernier était l'étude du cas particulier d'une chaîne linéaire d'un matériau (dimension 1) de moments magnétiques, ayant chacun deux valeurs possibles "haut" et "bas", et reliés par des interactions entre plus proches voisins. Le modèle est alors devenu célèbre et connu comme le modèle d'Ising.

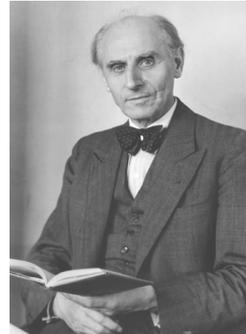
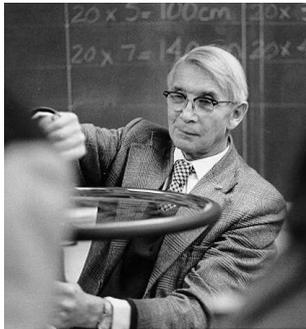
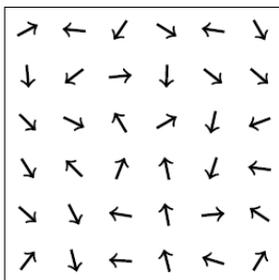


FIGURE 3 – Ising (gauche) et Lenz (droite),
Source : [5] et [6]

On effectue ici une première approche "physique" du modèle.

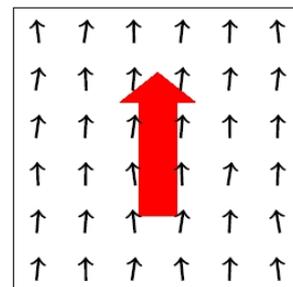
Par expérience, on sait que lorsqu'on impose un champ magnétique extérieur, les spins vont s'aligner avec ce champ et obtenir globalement la même direction.

Voici la situation illustrée en dimension 2 :



On part d'une situation quelconque, où tous les spins (flèches) sont orientés aléatoirement,

Source : [1]



L'ajout d'un champ magnétique extérieur (rouge ici) entraîne l'alignement des spins,

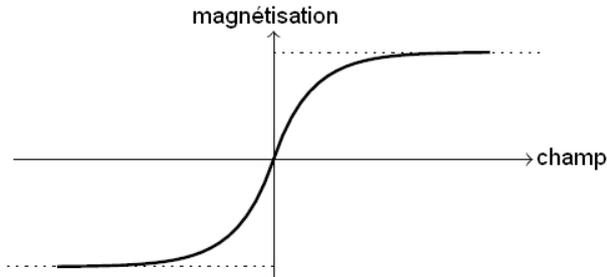
Source : [1]

Que se passe-t-il si l'on diminue peu à peu l'intensité de ce champ magnétique ?

Deux situations sont observées :

paramagnétisme = désordre

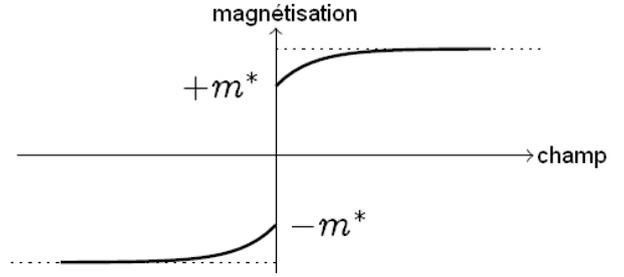
se produit lorsqu'il n'y a pas (ou peu) d'interaction entre les spins



La magnétisation tend vers 0 lorsque le champ diminue,
D'après [1]

ferromagnétisme = ordre approximatif

se produit lorsqu'il y a une interaction suffisante entre les spins pour maintenir l'ordre, on parle de *magnétisation spontanée*



La magnétisation ne s'approche pas de 0 car la majorité des spins sont dans la même direction,
D'après : [1]

La position des spins dépend dans ce modèle de deux paramètres : l'interaction entre eux et la présence ou non d'un champ magnétique extérieur.

Pour modéliser le matériau, on identifie la configuration d'atomes à un réseau, un graphe où les particules sont situées aux noeuds. Ici, dans un souci de simplification du modèle, on ne considèrera que des "boîtes" incluses dans le réseau \mathbb{Z}^n , $n \in \mathbb{N}$.

Définition 1 La **boîte** de taille N sur \mathbb{Z}^n , $n \in \mathbb{N}$ est

$$V_N = \{(x_1, \dots, x_n) \in \mathbb{Z}^n / \forall k \in \{1, \dots, n\}, 0 \leq x_k \leq N\}$$

On se concentre sur l'étude du modèle dans les boîtes V_N , puis le comportement à la limite thermodynamique quand N tend vers l'infini.

Définition 2 Deux points i et j de \mathbb{Z}^n sont dits **voisins** si $\|i - j\|_1 = 1$. On note $i \sim j$.

On considère donc le graphe formé de V_N où chaque paire de voisins est reliée par une arête. Cette arête représente l'interaction entre deux particules.



FIGURE 4 – Boîte en dimension 1,
Source : [1]

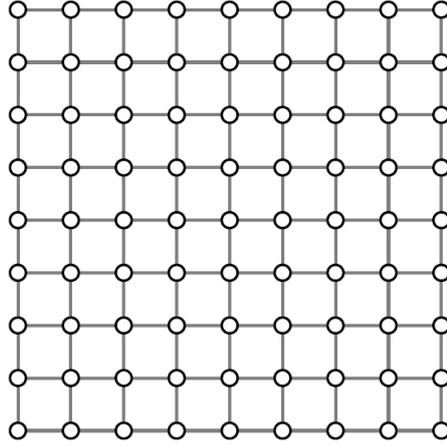


FIGURE 5 – Boîte en dimension 2,
Source : [1]

Chaque sommet du graphe admet un spin de valeur ± 1 et ainsi une configuration du graphe est donnée par $\omega \in \Omega_N = \{\pm 1\}^{V_N}$. A chaque point i de V_N , on associe son spin σ_i , qui vaut ± 1 et qui dépend de la configuration ω dans laquelle on se situe.

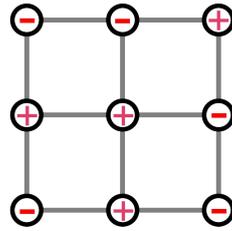


FIGURE 6 – Exemple de configuration pour une boîte de taille 3 en dimension 2

Pour la suite, on définit deux configurations particulières :

Définition 3 La configuration de V_N où tous les spins ont pour valeur $+1$ est appelée ω^+ . Celle où tous les spins ont pour valeur -1 est appelée ω^- .

Définition 4 On définit la [magnétisation totale](#), fonction sur Ω_N :

$$\begin{aligned} \Omega_N &\longrightarrow \{-V_N, \dots, V_N\} \\ M_N &\longmapsto \sum_{i \in V_N} \sigma_i \end{aligned}$$

et la [densité de magnétisation](#) :

$$m_N = \frac{M_N}{|V_N|} = \frac{M_N}{|N^n|}$$

La densité de magnétisation est la proportion de spins $+1$ auquel on soustrait la proportion de spins -1 . Ainsi, si la densité de magnétisation est égale à 1, on est dans la configuration ω^+ . A l'inverse, si la densité de magnétisation est -1 , on est dans la configuration ω^- .

2 Première étude

2.1 Energie et autres fonctions

Comme amorcé plus haut, les spins ont tendance à s'aligner avec leurs voisins. Pour simplifier, on suppose que l'interaction entre les spins ne se fait qu'entre plus proches voisins. De plus, l'énergie d'une paire (i, j) de voisins est minimale lorsque les voisins i et j s'alignent sur le même spin.

Pour modéliser cet effet, on suppose que la contribution de la paire à l'énergie totale est $-\beta\sigma_i\sigma_j$ avec $\beta > 0$, représentant la force d'interaction entre deux spins (supposée identique pour toutes les particules). Cette quantité d'énergie est donc bien positive et augmente l'énergie si les spins sont différents alors que, si les spins sont alignés, elle est négative et diminue l'énergie.

Définition 5 On appelle **température** $\beta^{-1} > 0$.

On a également remarqué que les spins interagissent avec le champ magnétique extérieur. Pour modéliser cet effet, on dit que la contribution de cette interaction pour le spin i est $-h\sigma_i$ avec $h \in \mathbb{R}$ représentant le champ et supposé constant ici.

Définition 6 L'**énergie totale** (ou Hamiltonien) pour une configuration ω donnée est donc

$$\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega) = -\beta \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in V_N} \sigma_i \quad \omega \in \Omega_N$$

A l'équilibre, on connaît la probabilité que le système se trouve dans une certaine configuration :

Définition 7 Cette probabilité est la **mesure de Gibbs** (ou distribution de Gibbs) :

$$\mu_{N,\beta,h}(\omega) = \frac{1}{Z_{N,\beta,h}} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \quad \omega \in \Omega_N$$

où $Z_{N,\beta,h} = \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega))$ est la **fonction de partition**.

Comme l'espace Ω_N est fini, cette probabilité est discrète. Elle favorise les états où l'énergie est petite : c'est la mesure naturelle qui apparaît en physique statistique notamment dans les modèles où une certaine quantité (ici l'énergie) joue un rôle particulier.

Définition 8 Soit f une fonction de Ω_N dans \mathbb{R} . On note

$$\langle f \rangle_{N,\beta,h} = \sum_{\omega \in \Omega_N} f(\omega) \mu_{N,\beta,h}(\omega)$$

Il s'agit de l'espérance de f sous la mesure de Gibbs $\mathbb{E}_{\mu_{N,\beta,h}}[f]$.

Lien avec l'analyse :

On se ramène au produit scalaire usuel défini pour a et b deux fonctions de Ω_N à valeurs réelles par :

$$(a|b) = \int_{\omega \in \Omega_N} a(\omega)b(\omega) d\mu_{N,\beta,h}(\omega)$$

et on note $\| \cdot \|$ la norme associée. Avec cette définition, on remarque que $\langle ab \rangle_{N,\beta,h} = (a|b)$ donc que

$$\langle a^2 \rangle_{N,\beta,h} = \| \sqrt{a} \|^2$$

L'inégalité de Cauchy-Schwarz donne $(a|b) \leq \|a\| \|b\|$ et se traduit donc ici par

$$\langle ab \rangle_{N,\beta,h} \leq \|a\| \|b\|$$

Lorsque $h = 0$, seul le coefficient β intervient. Dans ce cas, on renomme les fonctions définies plus haut par $\mathcal{H}_{N,\beta}$, $\mu_{N,\beta}$, $Z_{N,\beta}$ et $\langle \cdot \rangle_{N,\beta}$.

2.2 Etats d'équilibre

Les états d'équilibre sont, par définition, ceux qui minimisent l'énergie \mathcal{H} .

Proposition 1 En l'absence de champ extérieur, les deux configurations ω^+ et ω^- sont les seuls états d'équilibre. Si le champ extérieur est positif (resp. négatif), la configuration ω^+ (resp. ω^-) est le seul état d'équilibre.

Démonstration : On effectue la démonstration pour la configuration ω^+ et $h \geq 0$, le principe étant le même pour la configuration ω^- et $h \leq 0$.

• $h = 0$

Soit ω une configuration différente de ω^+ ou ω^- . Il existe donc au moins une paire de voisins $\{i_0, j_0\}$ telle que $\sigma_{i_0}(\omega) \neq \sigma_{j_0}(\omega)$. Comme, alors $-\sigma_{i_0}(\omega)\sigma_{j_0}(\omega) = 1$, on a :

$$\mathcal{H}_{N,\beta}(\omega) - \mathcal{H}_{N,\beta}(\omega^+) = \beta \sum_{i \sim j} (1 - \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega)) \geq 2\beta \geq 0$$

• $h > 0$

Soit ω une configuration différente de ω^+ ou ω^- . Avec les notations précédentes, on a toujours,

$$\beta \sum_{i \sim j} (1 - \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega)) \geq 0$$

Donc :

$$\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega) - \mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega^+) = \beta \sum_{i \sim j} (1 - \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega)) + h \sum_{i \in V_N} (1 - \sigma_i(\omega)) \geq 0$$

□

3 Etude avec champ magnétique

Dans ce paragraphe, on impose un champ $h \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, ce qui nous permet de ne considérer qu'un état stable (**Proposition 1**).

3.1 En dimension quelconque

On introduit quatre nouvelles quantités :

Définition 9 La **pression** est définie, quand cette limite existe, par

$$\psi : (\beta, h) \mapsto \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log Z_{N,\beta,h}$$

La plupart du temps, β sera fixé et on notera $\psi_\beta(h)$ au lieu de $\psi(\beta, h)$.

Définition 10 La **densité de magnétisation moyenne** est définie, quand cette limite existe, par

$$m_\beta : h \in \mathbb{R} \mapsto \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \frac{M_N}{|V_N|} \rangle_{N,\beta,h}$$

Définition 11 La **fonction génératrice des moments** est définie par

$$t \in \mathbb{R} \mapsto \langle e^{tM_N} \rangle_{N,\beta}$$

Elle est bien définie sur \mathbb{R} car l'espérance que cette fonction définie est bien finie. En effet, l'espace de travail est fini et ainsi les sommes et la mesure de probabilité considérées le sont également.

Définition 12 La **fonction génératrice des moments logarithmique** est définie, quand cette limite existe, par

$$\Lambda_\beta : h \in \mathbb{R} \mapsto \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}$$

Bien qu'il est clair que les fonctions ψ_β , m_β et Λ_β existent en 0, il n'est pas évident qu'elles sont définies sur \mathbb{R} ou au moins sur un voisinage de 0. Toutes les propositions énoncées dans la suite seront donc toujours et uniquement valables sur leurs domaines de définition : respectivement \mathcal{D}_{ψ_β} , \mathcal{D}_{m_β} et $\mathcal{D}_{\Lambda_\beta}$.

Proposition 2 Sous de bonnes conditions de dérivabilité et continuité, et pour h dans $\mathcal{D}_{\psi_\beta} \cap \mathcal{D}_{m_\beta}$, on a,

$$\frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h} = m_\beta(h)$$

Démonstration : D'abord, on calcule $\frac{\partial Z_{N,\beta,h}}{\partial h}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial Z_{N,\beta,h}}{\partial h} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_N} M_N \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ &= \sum_{\omega \in \Omega_N} M_N \mu_{N,\beta,h}(\omega) Z_{N,\beta,h} \\ &= Z_{N,\beta,h} \langle M_N \rangle_{N,\beta,h} \end{aligned}$$

Donc :

$$\begin{aligned}\frac{\partial Z_{N,\beta,h}}{\partial h} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \frac{\partial Z_{N,\beta,h}}{\partial h} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|N|} \langle M_N \rangle_{N,\beta,h} \\ &= m_\beta(h)\end{aligned}$$

□

Proposition 3 On a :

$$\left. \frac{d \langle e^{tM_N} \rangle_{N,\beta}}{dt} \right|_{t=0} = \langle M_N \rangle_{N,\beta}$$

Démonstration : On calcule :

$$\frac{d \langle e^{tM_N} \rangle_{N,\beta}}{dt} = \sum_{\omega \in \Omega_N} M_N(\omega) e^{tM_N(\omega)} \mu_{N,\beta}(\omega)$$

Donc :

$$\left. \frac{d \langle e^{tM_N} \rangle_{N,\beta}}{dt} \right|_{t=0} = \sum_{\omega \in \Omega_N} M_N(\omega) \mu_{N,\beta}(\omega) = \langle M_N \rangle_{N,\beta}$$

□

Proposition 4 On a, pour tout h dans $\mathcal{D}_{\psi_\beta} \cap \mathcal{D}_{\Lambda_\beta}$:

$$\Lambda_\beta(h) = \psi_\beta(h) - \psi_\beta(0)$$

Démonstration : On rappelle déjà les expressions des différentes fonctions utiles ici :

$$\begin{aligned}\forall \omega \in \Omega_N, \quad \mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega) &= -\beta \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_{i \in V_N} \sigma_i \\ \mu_{N,\beta,h}(\omega) &= \frac{1}{Z_{N,\beta,h}} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ Z_{N,\beta,h} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ \langle f \rangle_{N,\beta,h} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} f(\omega) \mu_{N,\beta,h}(\omega)\end{aligned}$$

Ensuite, on calcule la moyenne :

$$\begin{aligned}\forall h \in \mathbb{R}, \quad \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(hM_N(\omega)) \frac{1}{Z_{N,\beta}} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta}(\omega)) \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta}} \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(hM_N(\omega)) \exp(\beta \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j) \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta}} \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(-\mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ &= \frac{1}{Z_{N,\beta}} Z_{N,\beta,h}\end{aligned}$$

Ce faisant, on peut conclure :

$$\begin{aligned}\Lambda_\beta(h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \frac{Z_{N,\beta,h}}{Z_{N,\beta}} \\ &= \psi_\beta(h) - \psi_\beta(0)\end{aligned}$$

□

Proposition 5 Sur $\mathcal{D}_{\Lambda_\beta}$, la fonction Λ_β est convexe.

Démonstration : On calcule la dérivée seconde et on trouve :

$\forall h \in \mathbb{R}$,

$$\begin{aligned}\frac{d^2 \Lambda_\beta(h)}{dh^2} &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \frac{\langle M_N^2 e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} - \langle M_N e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}^2}{\langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}^2} \\ (\text{Cauchy-Schwarz}) &\geq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \frac{\langle M_N^2 e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} - \left\| M_N \sqrt{e^{hM_N}} \right\|^2 \left\| \sqrt{e^{hM_N}} \right\|^2}{\langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}^2} \\ &\geq \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \frac{\langle M_N^2 e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} - \langle M_N^2 e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}}{\langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}^2} \\ &\geq 0\end{aligned}$$

grâce au lien avec l'analyse effectué en 2.

□

3.2 En dimension 1

On se limite ici au cas de la dimension 1 où $\Omega_N = \{\pm 1\}^N$.

Théorème 6 Pour tout $\beta \geq 0$, $\mathcal{D}_{\psi_\beta} = \mathbb{R}$ et pour tout h dans \mathbb{R} ,

$$\psi_\beta(h) = \log \left(e^\beta \text{ch}(h) + \sqrt{e^{2\beta} \text{ch}^2(h) - 2\text{sh}(2\beta)} \right)$$

De plus, ψ_β est convexe.

Voici son allure :

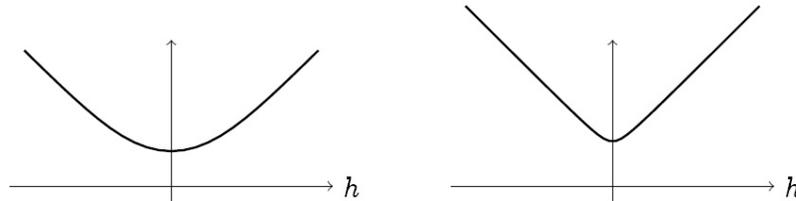


FIGURE 7 – Graphes de la pression ψ_β pour $\beta = 0,8$ (gauche) et $\beta = 2$ (droite),

Source : [1]

On intuite que lorsque $\beta \rightarrow \infty$ la fonction n'est plus différentiable en 0. Cela sera vérifié dans la **Proposition 9** par discontinuité de m_β .

Démonstration : Cette démonstration s'effectue en 3 étapes :

Etape 1 : Montrer que l'on peut se ramener à une condition au bord périodique.

Etape 2 : Calculer $Z_{N,\beta,h}$.

Etape 3 : En déduire $\psi_\beta(h)$.

Etape 1 : La boîte que l'on considère ici est de dimension 1. Elle est donc, comme nous l'avons vu en première partie, de ce type :

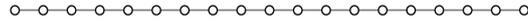


FIGURE 8 – V_{19} en dimension 1,
Source : [1]

Pour simplifier le calcul, nous allons travailler sur le tore associé à cette boîte. Il est obtenu en rajoutant une condition au bord périodique : la première particule est voisine avec la dernière, nous rajoutons donc une arête entre les deux. Ce nouvel espace de travail est noté T_N . On notera les quantités sur ce tore avec un tilde.

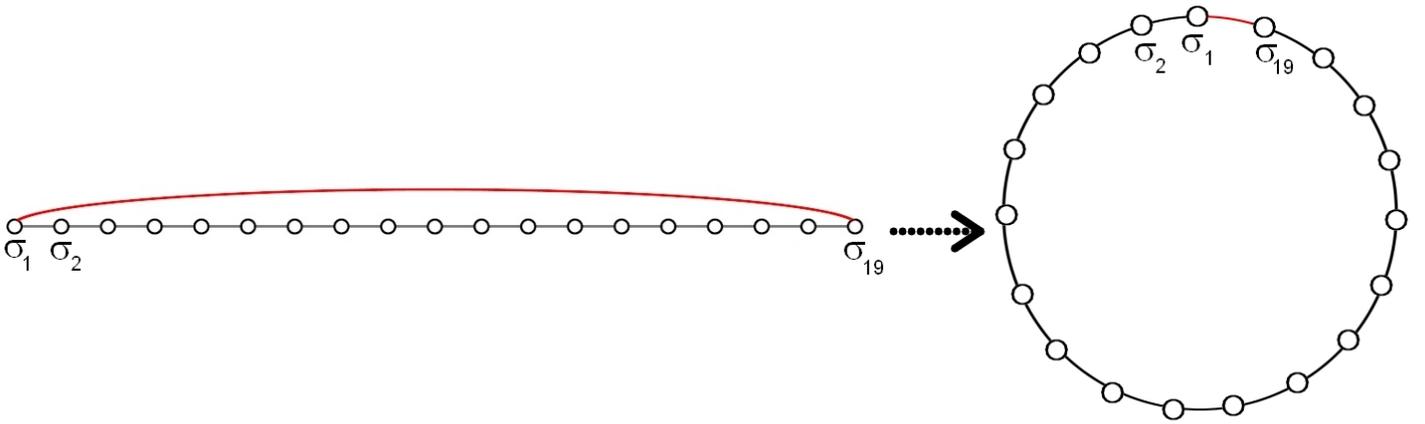


FIGURE 9 – Représentation de T_{19} ,
Source : D'après [1]

Ce rajout d'arête ne change en rien la configuration ω dans Ω_N qui n'indique que la valeur des spins aux positions. On a, pour cette configuration ω :

$$-\beta \leq \mathcal{H}_{N,\beta,h}(\omega) - \tilde{\mathcal{H}}_{N,\beta,h}(\omega) \leq \beta$$

donc :

$$e^{-\beta} \tilde{Z}_{N,\beta,h} \leq Z_{N,\beta,h} \leq e^{\beta} \tilde{Z}_{N,\beta,h}$$

Comme de plus $|V_N| = |T_N|$, on a, quand cette limite existe :

$$\forall \beta > 0, \forall h \in \mathbb{R}, \quad \psi_\beta(h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log Z_{N,\beta,h} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \tilde{Z}_{N,\beta,h}$$

Etape 2 : Travailler avec cette condition au bord périodique va permettre de simplifier les calculs en se ramenant à des calculs matriciels. On définit $\sigma_0 = \sigma_N$.

En dimension 1, les seuls voisins de i sont $i - 1$ et $i + 1$. Donc les seules paires de voisins sont les $(i - 1, i)$, i allant de 1 à N . On peut donc réécrire l'énergie d'une configuration ω :

$$\tilde{\mathcal{H}}_{N,\beta,h}(\omega) = -\beta \sum_{i \in T_N} \sigma_{i-1} \sigma_i - h \sum_{i \in T_N} \sigma_i = - \sum_{i \in T_N} (\beta \sigma_{i-1} \sigma_i + h \sigma_i)$$

On a donc

$$\begin{aligned} \tilde{Z}_{N,\beta,h} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} \exp(-\tilde{\mathcal{H}}_{N,\beta,h}(\omega)) \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \exp \left(\sum_{i \in T_N} (\beta \sigma_{i-1} \sigma_i + h \sigma_i) \right) \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{i=1}^N \exp(\beta \sigma_{i-1} \sigma_i + h \sigma_i) \\ &= \sum_{\sigma_1 = \pm 1} \cdots \sum_{\sigma_N = \pm 1} \prod_{i=1}^N A_{\sigma_{i-1}, \sigma_i} \end{aligned}$$

où
$$\begin{cases} A_{+,+} = e^{\beta+h} \\ A_{+,-} = e^{-\beta+h} \\ A_{-,+} = e^{-\beta-h} \\ A_{-,-} = e^{\beta-h} \end{cases}$$

En posant $A = \begin{pmatrix} A_{+,+} & A_{+,-} \\ A_{-,+} & A_{-,-} \end{pmatrix}$, on remarque :

$$\tilde{Z}_{N,\beta,h} = \sum_{\sigma_1 = \pm 1} (A^N)_{\sigma_1, \sigma_1} = \text{tr}(A^N)$$

On cherche donc les valeurs propres de A . On trouve :

$$\chi_A(X) = X^2 - 2e^\beta \text{ch}(h)X + 2\text{sh}(2\beta)$$

Comme $\beta > 0$ et h appartient à \mathbb{R} , cela donne deux valeurs propres :

$$\rho_{\pm} = e^\beta \text{ch}(h) \pm \sqrt{e^{2\beta} \text{ch}^2(h) - 2\text{sh}(2\beta)} \geq 0$$

et

$$\rho_+ > \rho_-$$

En notant

$$D = \begin{pmatrix} \rho_+ & 0 \\ 0 & \rho_- \end{pmatrix}$$

on a :

$$\tilde{Z}_{N,\beta,h} = \text{tr}(A^N) = \text{tr}(D^N) = \rho_+^N + \rho_-^N = \rho_+^N \left(1 + \left(\frac{\rho_-}{\rho_+} \right)^N \right)$$

Finalement, la limite existe et :

$$\begin{aligned} \forall \beta > 0, \forall h \in \mathbb{R}, \quad \psi_\beta(h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \tilde{Z}_{N,\beta,h} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \left[\rho_+^N \left(1 + \left(\frac{\rho_-}{\rho_+} \right)^N \right) \right] \\ &= \rho_+ \\ &= e^\beta \text{ch}(h) + \sqrt{e^{2\beta} \text{ch}^2(h) - 2\text{sh}(2\beta)} \end{aligned}$$

La convexité de ψ_β découle de la proposition précédente. □

Proposition 7 De manière analogue, $\mathcal{D}_{m_\beta} = \mathbb{R}$ et pour tout h dans \mathbb{R} ,

$$m_\beta(h) = \frac{e^\beta \text{sh}(h) + \frac{e^{2\beta} \text{sh}(h) \text{ch}(h)}{f(h)}}{f(h) + e^\beta \text{ch}(h)}$$

où $f(h) = \sqrt{e^{2\beta} \text{ch}^2(h) - 2\text{sh}(2\beta)}$

Démonstration : Comme la pression existe, la fonction m_β aussi.

On calcule f' . On a, pour tout $h \in \mathbb{R}$, $f'(h) = \frac{e^{2\beta} \text{ch}(h) \text{sh}(h)}{f(h)}$.

On a $\psi_\beta(h) = \log[e^\beta \text{ch}(h) + f(h)]$ avec f définie comme dans la proposition.

Donc $m_\beta(h) = \frac{\partial \psi_\beta(h)}{\partial h} = \frac{e^\beta \text{sh}(h) + f'(h)}{e^\beta \text{ch}(h) + f(h)}$ □

Voici son allure :

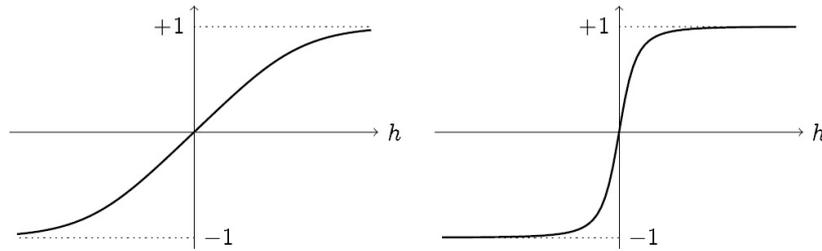


FIGURE 10 – Graphes de la magnétisation m_β pour $\beta = 0,8$ (gauche) et $\beta = 2$ (droite),
Source : [1]

Proposition 8 $\forall \beta > 0$, $m_\beta(h) \xrightarrow{h \rightarrow +\infty} +1$ et $m_\beta(h) \xrightarrow{h \rightarrow -\infty} -1$

Démonstration : On procède par équivalent dans la formule donnée dans la proposition précédente. On montre le cas $h \rightarrow +\infty$, l'autre cas se faisant de manière similaire. On sait que $\text{ch}(h) \underset{h \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^h}{2}$.

Alors, $f(h) \underset{h \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^\beta e^h}{2}$, $f'(h) \underset{h \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{e^\beta e^h}{2}$.

Donc

$$m_\beta(h) \underset{h \rightarrow +\infty}{\sim} \frac{\frac{e^\beta e^h}{2} + \frac{e^\beta e^h}{2}}{\frac{e^\beta e^h}{2} + \frac{e^\beta e^h}{2}}$$

i.e. $m_\beta(h) \xrightarrow{h \rightarrow +\infty} +1$ □

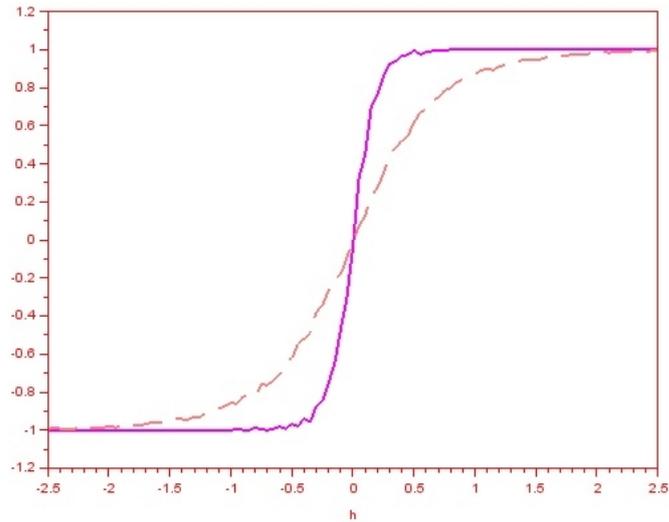


FIGURE 11 – Courbes de m_β sur V_{10} en fonction de h pour $\beta = 0,2$ en pointillé et $\beta = 2$ en trait plein

Pour obtenir la courbe ci-dessus, j'ai fait des simulations sur un réseau de taille 10 avec 500 expériences. La méthode utilisée pour implémenter les algorithmes est détaillée dans la dernière partie. Ces simulations nous permettent de vérifier la **Proposition 8** et intuitionner la **Proposition 9**.

En effet, on remarque déjà bien que les limites en $-\infty$ et $+\infty$ sont bien respectivement -1 et $+1$. De plus, on retrouve $m_\beta(0) = 0$.

Enfin, on remarque que lorsque β croît, la courbe se rapproche d'un créneau. Si l'on imagine la courbe limite pour $\beta = +\infty$, voici ce que l'on obtient :

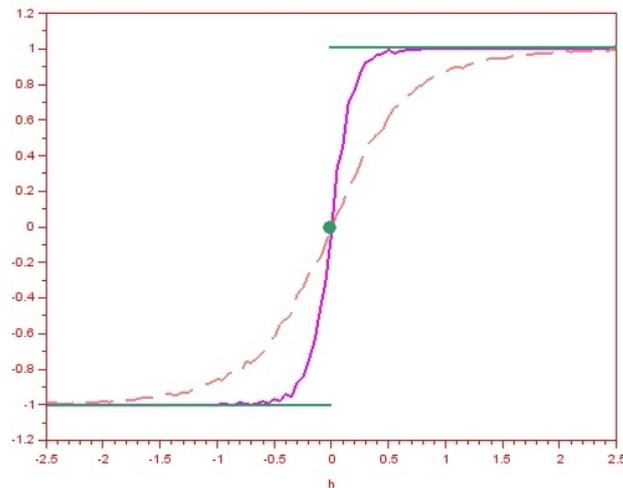


FIGURE 12 – Courbes de m_β sur V_{10} en fonction de h pour $\beta = 0,2$ en pointillé et $\beta = 2$ en trait plein avec ajout de la courbe limite en vert

Cela nous donne la proposition suivante :

Proposition 9 Si $h > 0$, $m_\beta(h) \xrightarrow{\beta \rightarrow +\infty} +1$. Si $h < 0$, $m_\beta(h) \xrightarrow{\beta \rightarrow +\infty} -1$

Démonstration : On procède encore par équivalent. On montre le cas $h > 0$, l'autre cas se faisant de manière similaire. On obtient cette fois $f(h) \underset{\beta \rightarrow \pm\infty}{\sim} e^{\beta \text{sh}(h)}$ donc $f'(h) = e^{\beta \text{ch}(h)}$ et donc $m_\beta(h) \xrightarrow{\beta \rightarrow \pm\infty} +1$. \square

4 Etude sans champ magnétique

4.1 En dimension quelconque

On se place maintenant uniquement dans le cas où $h = 0$, et on considère $\beta \neq 0$. Ainsi, on se place dans le cas du ferromagnétisme i.e. les spins ont tendance à s'aligner dans l'une ou l'autre des directions.

On rappelle qu'ici, les fonctions définies plus haut sont notées $\mathcal{H}_{N,\beta}$, $\mu_{N,\beta}$, $Z_{N,\beta}$ et $\langle \cdot \rangle_{N,\beta}$.

On note $-\omega$ la configuration où tous les spins ont été inversés par rapport à la configuration $\omega \in \Omega_N$. D'après l'expression de l'énergie, on a $\mathcal{H}_{N,\beta}(-\omega) = \mathcal{H}_{N,\beta}(\omega)$. En effet, aucune orientation pour les spins n'est favorisée sans champ extérieur. On a donc également $\mu_N(-\omega) = \mu_N(\omega)$. La mesure μ est invariante par retournement global des spins.

Proposition 10 On a, pour tout β positif, $\langle M_N \rangle_{N,\beta} = 0$. Autrement dit, la magnétisation moyenne est nulle.

Cette proposition semble assez naturelle. En effet, sans champ extérieur, les spins n'ont pas d'influence pour aller dans l'une ou l'autre des directions.

Démonstration : On a :

$$\begin{aligned} \langle M_N \rangle_{N,\beta} &= \sum_{\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i(\omega) \mu_{N,\beta}(\omega) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i(\omega) \mu_{N,\beta}(\omega) + \sum_{-\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i(-\omega) \mu_{N,\beta}(-\omega) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left(\sum_{\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i(\omega) \mu_{N,\beta}(\omega) - \sum_{\omega \in \Omega_N} \sum_{i \in V_N} \sigma_i(\omega) \mu_{N,\beta}(\omega) \right) \end{aligned}$$

par symétrie de $\mu_{N,\beta}$ et car $\sum_{i \in V_N} \sigma_i(-\omega) = - \sum_{i \in V_N} \sigma_i(\omega)$. □

4.1.1 Cas de la température infinie i.e. $\beta \sim 0$

Dans ce cas, les interactions entre les spins sont quasiment inexistantes. Comme ce cas se traite facilement, nous pouvons étudier la limite $N \rightarrow \infty$.

Afin d'appliquer les théorèmes usuels, nous cherchons la loi de probabilité d'équilibre $\mu_{N,0}$.

Comme ici, $h = 0$ et $\beta = 0$, on a

$$\forall \omega \in \Omega_N, \mu_{N,0}(\omega) = \frac{1}{Z_{N,0}}$$

où

$$Z_{N,0} = \sum_{\omega \in \Omega_N} 1 = |\Omega_N| = 2^{|V_N|}$$

Ainsi, $\mu_{N,0}$ est la loi uniforme sur Ω_N .

Les variables aléatoires étudiées sont les σ_i . Comme il n'y a pas d'interactions entre les différentes particules ($\beta = 0$), et que $\mu_{N,0}$ est uniforme, ces variables aléatoires sont indépendantes et identiquement distribuées.

Leur espérance vaut $\langle M_N \rangle_{N,0}$ et est donc nulle (**Proposition 10**).
 La loi des grands nombres donne la convergence presque sûre :

$$m_N = \frac{M_N}{|V_N|} \xrightarrow[\mu_{N,0}]{\text{p.s.}} 0$$

donc

$$\mu_{N,0}(m_N \in [-\varepsilon; +\varepsilon]) \xrightarrow[N \rightarrow \infty]{} 0$$

Comme $\sigma_i^2 = 1$ pour tout i , la variance des variables aléatoires vaut 1. On peut donc appliquer le théorème central limite qui donne la convergence en loi :

$$\frac{M_N}{\sqrt{|V_N|}} \xrightarrow[\mu_{N,0}]{\mathcal{L}} \mathcal{N}(0, 1)$$

Pour vérifier cette convergence en loi, j'ai tracé l'histogramme de la magnétisation pour un β très petit (10^{-5}). En effet, effectuer la simulation pour un β nul n'avait aucun intérêt puisque donnait directement le résultat. Voici le graphe obtenu :

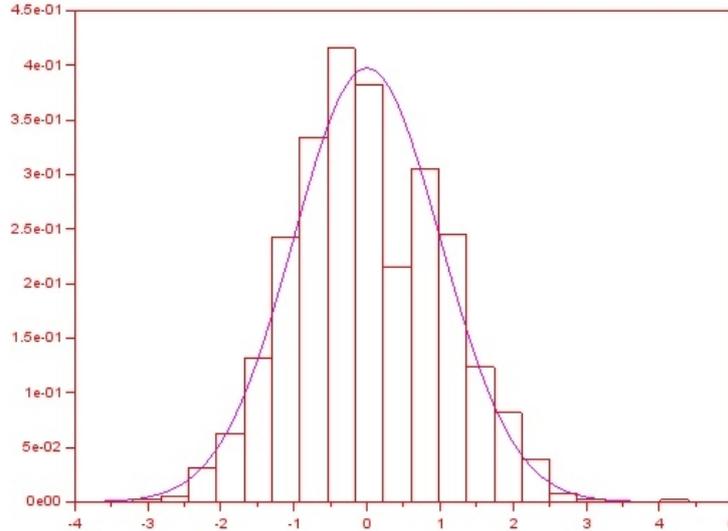


FIGURE 13 – Histogramme de $\frac{M_N}{\sqrt{|V_N|}}$ en comparaison avec la gaussienne pour une loi $\mathcal{N}(0,1)$

Cette étude montre que la proportion de spins vers le haut est égale à la proportion de spins vers le bas : il y a, presque sûrement, lorsque N est grand, autant de spins $+1$ que de spins -1 .

4.1.2 Cas de la température nulle i.e. $\beta \rightarrow \infty$

Dans la démonstration de la **Proposition 1**, nous avons obtenu

$$\mathcal{H}_{N,\beta}(\omega) - \mathcal{H}_{N,\beta}(\omega^+) = \beta \sum_{i \sim j} (1 - \sigma_i(\omega)\sigma_j(\omega)) \geq 2\beta$$

Donc, si l'on se place dans une configuration ω différente de ω^+ , on a :

$$0 \leq \frac{\mu_{N,\beta}(\omega)}{\mu_{N,\beta}(\omega^+)} = \frac{e^{-\mathcal{H}_{N,\beta}(\omega)}}{e^{-\mathcal{H}_{N,\beta}(\omega^+)}} \leq e^{-2\beta} \xrightarrow[\beta \rightarrow \infty]{} 0$$

donc $\mu_{N,\beta}(\omega) \xrightarrow{\beta \rightarrow \infty} 0$ dès que $\omega \notin \{\omega^+, \omega^-\}$

Mais, comme $\mu_{N,\beta}$ est une mesure de probabilité, on a $\sum_{\omega \in \Omega_N} \mu_{N,\beta}(\omega) = 1$. Donc :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \sum_{\omega \in \Omega_N} \mu_{N,\beta}(\omega) = \mu_{N,\beta}(\omega^+) + \mu_{N,\beta}(\omega^-) = 2\mu_{N,\beta}(\omega^+) = 1$$

On a au bilan :

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \mu_{N,\beta}(\omega) = \begin{cases} \frac{1}{2} & \text{si } \omega \in \{\omega^+, \omega^-\} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Ainsi, presque sûrement, on obtient la configuration ω^+ ou la configuration ω^- , de manière équiprobable.

Bilan des deux comportements aux limites (formellement)

$$\begin{array}{l} \text{ordre :} \\ \text{magnétisation moyenne :} \end{array} \quad \begin{array}{l} \underline{\beta = 0, N \text{ grand}} \\ \text{autant de spins + que de spins -} \\ \underline{m_N \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \text{ p.s.}} \end{array} \quad \left| \quad \begin{array}{l} \underline{\beta = +\infty} \\ \text{ordre global : situation } \omega^+ \text{ ou } \omega^- \\ \underline{m_N = \pm 1 \text{ p.s.}} \end{array} \right.$$

4.2 En dimension 1

4.2.1 Etude en modèle classique

Théorème 11 Quelque soit $\beta > 0$ fini et quelque soit $\varepsilon > 0$, il existe une constante $c(\beta, \varepsilon) > 0$, telle que, pour N assez grand, et presque sûrement, on ait :

$$\mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \in]-\varepsilon; +\varepsilon[\right) \geq 1 - 2e^{-c(\beta,\varepsilon)|V_N|}$$

Ainsi, nous allons montrer que l'évènement $\frac{M_N}{|V_N|} \notin]-\varepsilon; +\varepsilon[$ se produit très rarement (sa probabilité décroît exponentiellement en N). Ce type d'évènement atypique est appelé une grande déviation. On effectue l'étude ensuite.

Démonstration : On a, $\forall \varepsilon > 0$:

$$\begin{aligned} \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \notin]-\varepsilon; +\varepsilon[\right) &= \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \geq \varepsilon \text{ ou } \frac{M_N}{|V_N|} \leq -\varepsilon \right) \\ &= 2\mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \geq \varepsilon \right) \quad \text{car } \mu_{N,\beta} \text{ est symétrique} \end{aligned}$$

De plus, $\forall h \geq 0$,

$$\begin{aligned} \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \geq \varepsilon \right) &= \mu_{N,\beta} \left(e^{hM_N} \geq e^{h\varepsilon|V_N|} \right) \\ &\leq \frac{\langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}}{e^{h\varepsilon|V_N|}} \quad \text{par l'inégalité de Markov} \\ &\leq e^{-h\varepsilon|V_N|} \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \end{aligned}$$

Donc :

$$\frac{1}{|V_N|} \log \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \geq \varepsilon \right) \leq -h\varepsilon + \frac{1}{|V_N|} \log \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta}$$

Lorsque la limite de droite est finie, on a :

$$\begin{aligned} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \geq \varepsilon \right) &\leq \lim_{N \rightarrow \infty} \left(-h\varepsilon + \frac{1}{|V_N|} \log \langle e^{hM_N} \rangle_{N,\beta} \right) \\ &\leq -h\varepsilon + \Lambda_\beta(h) \\ &\leq -\sup_{h \geq 0} [h\varepsilon - \Lambda_\beta(h)] \end{aligned}$$

Etudions, pour tout $\varepsilon > 0$, la fonction : $g : h \in \mathbb{R}^+ \mapsto h\varepsilon - \Lambda_\beta(h)$

On a $g'(h) = \varepsilon - \Lambda'_\beta(h) = \varepsilon - m_\beta(h)$.

Or, d'après les propositions précédentes, m_β croît de 0 à 1 quand $h \geq 0$. Donc :

• si $\varepsilon \geq 1$, $g'(h) > 0$. Donc la fonction g est strictement croissante et vaut 0 en $h = 0$. Elle est donc toujours positive.

• si $0 < \varepsilon < 1$, il existe un h^* tel que $m_\beta(h^*) = \varepsilon$.

Le tableau de variation de g est

h	0	h^*	$+\infty$
$g'(h)$		+	-
$g(h)$	0	$g(h^*)$	

Donc $g(h^*) > 0$.

Dans chacun des cas, on a montré que $\sup_{h \geq 0} [h\varepsilon - \Lambda_\beta(h)] > 0$. On appelle cette quantité $c(\beta, \varepsilon)$.

□

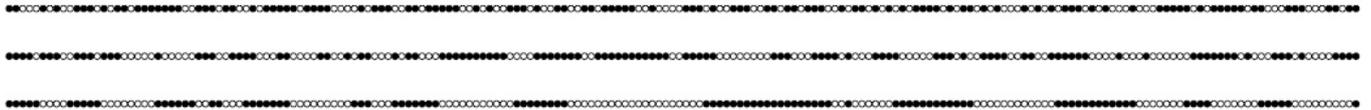


FIGURE 14 – Exemple de configurations en dimension 1 pour β croissant,

Source : [1]

On remarque un groupement des particules selon leurs spins lorsque β croît. Cela n'est pas étonnant car ce sont les configurations d'énergie la plus basse (les voisins s'alignent). On vérifie ce résultat lors de simulations :



FIGURE 15 – Exemple de configurations sur V_{200} en dimension 1 pour $\beta = 0,8$

Définition 13 La [transformée de Legendre](#) de Λ_β est définie pour $m \in \mathbb{R}$ par :

$$I_\beta(m) = \sup_{h \in \mathbb{R}} [mh - \Lambda_\beta(h)]$$

On remarque déjà que $I_\beta(0) = 0$.

On peut montrer un résultat (ce n'est pas fait ici) qui est en fait un cas particulier du principe des grandes déviations de CRAMER :

Proposition 12 Pour tout intervalle F de $[-1, 1]$, on a

$$\limsup_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{|V_N|} \log \mu_{N,\beta} \left(\frac{M_N}{|V_N|} \in F \right) \leq - \inf_{m \in F} I_\beta(m)$$

On a montré un résultat similaire dans le cas particulier où $F =]-\varepsilon; +\varepsilon[$ dans le théorème précédent.

Proposition 13 La fonction I_β est symétrique

Démonstration : En effet, pour tout m dans \mathbb{R} ,

$$\begin{aligned} I_\beta(-m) &= \sup_{h \in \mathbb{R}} [-mh - \Lambda_\beta(h)] \\ &= \sup_{h \in \mathbb{R}} [m(-h) - \Lambda_\beta(-h)] \\ &= \sup_{h \in \mathbb{R}} [mh - \Lambda_\beta(h)] \\ &= I_\beta(m) \end{aligned}$$

□

D'après cette proposition, on peut se contenter d'étudier $I_\beta(m)$ pour $m > 0$. Nécessairement, le supremum va être atteint pour un $h \geq 0$. On peut donc restreindre notre étude pour $m > 0$ en écrivant

$$I_\beta(m) = \sup_{h \geq 0} [mh - \Lambda_\beta(h)]$$

Proposition 14 Quelque soit $m \neq 0$, $I_\beta(m) > 0$

Démonstration : On utilise la symétrie et ce qui a été fait dans la démonstration du **Théorème 11**. □

Proposition 15 Quelque soit $m \in]0, 1[$,

$$I_\beta(m) = mh_\beta(m) - \Lambda_\beta(h_\beta(m))$$

avec

$$h_\beta(m) = \operatorname{argch} \sqrt{1 + \alpha}, \quad \alpha = e^{-4\beta} \frac{m^2}{1 - m^2}$$

Démonstration : On continue de noter, pour tout $h \in \mathbb{R}^+$,

$$f(h) = \sqrt{e^{2\beta} \operatorname{ch}^2(h) - 2\operatorname{sh}(2\beta)} = e^\beta \sqrt{\operatorname{ch}^2(h) - 1 + e^{-4\beta}}$$

On calcule :

$$\begin{aligned} \operatorname{ch}(h_\beta(m)) &= \sqrt{1 + \alpha} \\ \operatorname{sh}(h_\beta(m)) &= \sqrt{\alpha} \\ f(h_\beta(m)) &= e^\beta \sqrt{\alpha + e^{-4\beta}} \end{aligned}$$

Vérifions déjà que pour tout $m \in]0, 1[$, $h_\beta(m)$ est un extremum de

$$g : h \in \mathbb{R}^+ \mapsto mh - \Lambda_\beta(h).$$

On a :

$$\begin{aligned} g'(h_\beta(m)) &= m - m_\beta(h_\beta(m)) \\ &= m - \frac{e^\beta \sqrt{\alpha} + \frac{e^{2\beta} \sqrt{\alpha} \sqrt{1+\alpha}}{e^\beta \sqrt{\alpha} + e^{-4\beta}}}{e^\beta \sqrt{\alpha} + e^{-4\beta} + e^\beta \sqrt{1+\alpha}} \\ &= m - \sqrt{\alpha} \frac{\sqrt{\alpha} + e^{-4\beta} + \sqrt{1+\alpha}}{\sqrt{\alpha} + e^{-4\beta} (\sqrt{\alpha} + e^{-4\beta} + \sqrt{1+\alpha})} \\ &= m - \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\alpha} + e^{-4\beta}} \\ &= m - |m| = 0 \end{aligned}$$

Ainsi, h_β est bien un extremum.

C'est bien un maximum. En effet, $g''(h_\beta(m)) < 0$ car ψ_β est convexe donc

$$\forall h \in \mathbb{R}^+, g''(h) = -m'_\beta(h) < 0$$

□

Proposition 16 La fonction I_β est convexe sur $[-1, 1]$.

Démonstration : Par symétrie, on se contente de calculer, pour tout m dans $[0, 1]$,

$$\begin{aligned} I'_\beta(m) &= mh'_\beta(m) + h_\beta(m) - h'_\beta(m)m_\beta(h_\beta(m)) \\ &= h_\beta(m) \end{aligned}$$

$$\text{Donc } I''_\beta(m) = h'_\beta(m) = \frac{1}{m(1-m^2)} \sqrt{\frac{\alpha}{1+\alpha}} > 0.$$

□

On a donc l'allure de la fonction I_β :

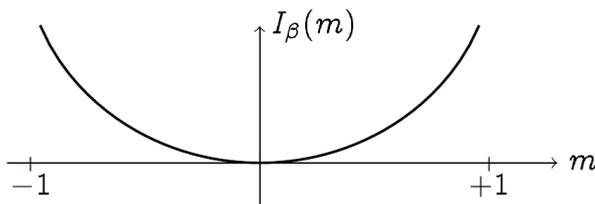


FIGURE 16 – La fonction taux en dimension 1

4.2.2 Approximation en champ moyen : Modèle de Curie-Weiss

Pour simplifier les calculs, nous allons considérer ici que toutes les particules interagissent entre elles. Autrement dit, entre toutes les paires de particules possibles il y a une arête.

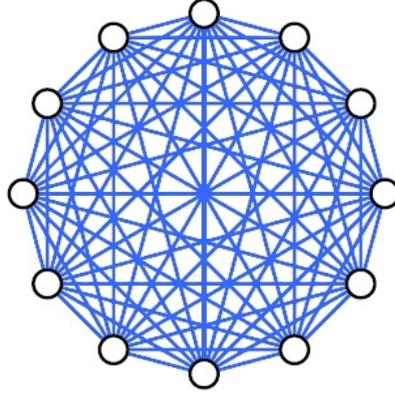


FIGURE 17 – Exemple de boîte dans ce modèle en dimension 1,
Source : [1]

Ceci est motivé par l'écriture puis l'approximation suivantes :

$$\begin{aligned}
 \sum_{i \sim j} \sigma_i \sigma_j &= \sum_i \sigma_i \left(\frac{1}{2} \sum_{j/i \sim j} \sigma_j \right) \\
 &= \sum_i \sigma_i \left(\frac{1}{N} \sum_j \sigma_j \right) \\
 &= \frac{1}{N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j
 \end{aligned}$$

On a remplacé une moyenne locale par une moyenne globale. Chaque spin est relié à tous les autres et l'interaction entre deux spins ne dépend que des spins considérés.

Ce modèle est appelé "Curie-Weiss" en hommage aux travaux de ces deux chercheurs sur le ferromagnétisme.

On renomme les fonctions définies en partie 1 en écrivant "CW" en exposant. On peut ainsi exprimer l'Hamiltonien de Curie-Weiss, pour $\omega \in \Omega_N$:

$$\mathcal{H}_{N,\beta}^{\text{CW}}(\omega) = -\frac{\beta}{N} \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j$$

La **Proposition 10** reste toujours valable : $\forall \beta > 0, \langle M_N \rangle_{N,\beta} = 0$.

Malgré cette ressemblance avec le modèle d'Ising dit "classique", le modèle de Curie-Weiss présente un comportement global très différent du modèle classique. Son comportement dépend de manière très forte de la température. Cela semble logique puisque le modèle de Curie-Weiss propose une forte inter-connectivité entre les spins. Nous allons juste ici présenter ses spécificités dont certaines ont été vérifiées par simulations. Le détail et la preuve de ces dernières se fait de manière calculatoire, comme pour le modèle classique.

Aux hautes températures, le système se comporte comme le modèle classique en dimension 1. La proportion de spins + est la même que la proportion de spins -. On obtient même un théorème identique au **Théorème 11**.

Aux basses températures, une magnétisation spontanée apparaît.

5 Simulations : Méthode MCMC et algorithme de Metropolis-Hastings

5.1 Théorie de l'algorithme

Il s'agit d'appliquer ici la méthode de Monte Carlo via les chaînes de Markov. Nous détaillons ici cette méthode. Les algorithmes sont disponibles en annexe.

Cette méthode permet d'estimer l'espérance d'une variable aléatoire lorsque la loi est inconnue ou difficile à simuler ce qui est le cas ici.

Rappel :

Théorème 17 (Théorème ergodique, Birkhoff) Soit μ une mesure.

Si f est une fonction positive telle que $\mathbb{E}_\mu[f] < \infty$

Si $(X_n)_{n \geq 0}$ est une chaîne de Markov irréductible et récurrente positive ;

Si elle admet une mesure μ pour mesure invariante ;

Alors :

$$\frac{1}{n} \sum_{k=0}^{n-1} f(X_k) \xrightarrow[n \rightarrow +\infty]{} \mathbb{E}_\mu[f]$$

Notre but va donc être de construire une telle chaîne $(X_n)_{n \geq 0}$ avec pour mesure $\mu_{N,\beta,h}$.

On choisit Q_1 la matrice de transition telle que si ω est une configuration, $Q_1(\omega, \cdot)$ est la loi uniforme sur les configurations qui diffèrent de ω d'au plus un spin.

Comme cette loi est uniforme, elle est symétrique. Alors on a, pour ω et ω' deux configurations :

$$Q_1(\omega, \omega') = Q_1(\omega', \omega)$$

On définit maintenant une nouvelle matrice de transition Q construite ainsi :

$$\forall \omega, \omega' \in \Omega_N, \quad \begin{aligned} \text{si } \omega' \neq \omega, \quad Q(\omega, \omega') &= Q_1(\omega, \omega') \left(1 \wedge \frac{\mu_{N,\beta,h}(\omega')}{\mu_{N,\beta,h}(\omega)} \right) \\ \text{sinon,} \quad Q(\omega, \omega) &= 1 - \sum_{\omega' \neq \omega} Q(\omega, \omega') \end{aligned}$$

Autrement dit :

$$\forall \omega, \omega' \in \Omega_N, \quad \begin{aligned} Q(\omega, \omega') &= \begin{cases} Q_1(\omega, \omega') & \text{si } \mu_{N,\beta,h}(\omega') > \mu_{N,\beta,h}(\omega) \\ Q_1(\omega, \omega') \frac{\mu_{N,\beta,h}(\omega')}{\mu_{N,\beta,h}(\omega)} & \text{sinon} \end{cases} \\ Q(\omega, \omega) &= 1 - \sum_{\omega' \neq \omega} Q(\omega, \omega') \end{aligned}$$

Proposition 18 La mesure de probabilité $\mu_{N,\beta,h}$ est réversible pour Q (donc invariante).

Démonstration : On vérifie que

$$\forall \omega, \omega' \in \Omega_N, \quad \mu_{N,\beta,h}(\omega) Q(\omega, \omega') = \mu_{N,\beta,h}(\omega') Q(\omega', \omega)$$

En effet :

$$\begin{aligned}
\mu_{N,\beta,h}(\omega)Q(\omega, \omega') &= \mu_{N,\beta,h}(\omega)Q_1(\omega, \omega') \left(1 \wedge \frac{\mu_{N,\beta,h}(\omega')}{\mu_{N,\beta,h}(\omega)} \right) \\
&= Q_1(\omega', \omega) (\mu_{N,\beta,h}(\omega) \wedge \mu_{N,\beta,h}(\omega')) \\
&= Q_1(\omega', \omega) \mu_{N,\beta,h}(\omega') \left(\frac{\mu_{N,\beta,h}(\omega)}{\mu_{N,\beta,h}(\omega')} \wedge 1 \right) \\
&= Q(\omega', \omega) \mu_{N,\beta,h}(\omega')
\end{aligned}$$

□

Proposition 19 La chaîne $(X_n)_{n \geq 0}$ définie par la matrice Q est irréductible, récurrente positive.

Démonstration : La chaîne définie par Q_1 est irréductible donc celle définie par Q aussi. Cette dernière est récurrente positive car elle est irréductible et admet une mesure invariante finie. □

5.2 Construction de $(X_n)_{n \geq 0}$

Il s'agit maintenant de construire la matrice Q définie comme précédemment afin de lui associer une chaîne de Markov. Le théorème ergodique s'appliquera donc (on a fait en sorte que) et les simulations nous permettront d'approcher certaines espérances.

La construction de $(X_n)_{n \geq 0}$ s'effectue par récurrence. On détaille le cas $n = 0$ ici :

$$X_0 \xrightarrow[\textcircled{1}]{\text{proposition}} Y_0 \xrightarrow[\textcircled{2}]{\text{acceptation / rejet}} X_1 = (X_0 \text{ ou } Y_0)$$

Etape $\textcircled{0}$: Initialiser la matrice initiale de spins (configuration) notée X_0 (de préférence aléatoire)

Etape $\textcircled{1}$: Choisir la configuration Y_0 avec la loi $Q_1(X_0, \cdot)$. Pour cela, il suffit de tirer de manière uniforme une case de la matrice et d'inverser son spin. (en effet, $Q_1(\omega, \cdot)$ est la loi uniforme sur les configurations qui diffèrent de ω d'au plus un spin.)

Etape $\textcircled{2}$: Accepter ou non la proposition avec la loi Q . En effet, la probabilité d'acceptation est

$$P(X_0, Y_0) = \begin{cases} 1 & \text{si } \mu_{N,\beta,h}(Y_0) > \mu_{N,\beta,h}(X_0) \\ \frac{\mu_{N,\beta,h}(Y_0)}{\mu_{N,\beta,h}(X_0)} & \text{sinon} \end{cases}$$

On tire donc un nombre aléatoire dans $[0, 1]$. S'il est inférieur à $P(X_0, Y_0)$, on renvoie $X_1 = Y_0$. Sinon, on renvoie $X_1 = X_0$.

On généralise ce procédé à un terme n quelconque de la chaîne, selon le schéma ci-dessous :

$$X_n \xrightarrow{\text{proposition}} Y_n \xrightarrow{\text{acceptation / rejet}} X_{n+1} = (X_n \text{ ou } Y_n)$$

N.B. : Le rapport de la probabilité d'acceptation n'est pas compliqué à calculer :

$$\frac{\mu_{N,\beta,h}(Y_n)}{\mu_{N,\beta,h}(X_n)} = \exp(\mathcal{H}_{N,\beta,h}(Y_n) - \mathcal{H}_{N,\beta,h}(X_n))$$

Annexe : Algorithmes en dimension 2 pour le modèle classique

```
function nom=NAME(nombre, chiffre_max)

index = zeros(chiffre_max);
nom = '';
for j = chiffre_max:-1:1
    index(j) = floor(nombre/10^(j-1));
    nombre = nombre - index(j)*10^(j-1);
    nom = [nom,string(index(j))];
end

endfunction
```

```
function S=somme(M)
    G=size(M)
    n=G(1)
    p=G(2)
    X=zeros(1,p)
    Y=zeros(n,1)
    for j=1:p
        for i=1:(n-1)
            X(j)=X(j)+M(i,j)*M(i+1,j)
        end
        X(j)=X(j)+M(n,j)*M(1,j)
    end
    for i=1:n
        for j=1:(p-1)
            Y(i)=Y(i)+M(i,j)*M(i,j+1)
        end
        Y(i)=Y(i)+M(i,p)*M(i,1)
    end
    S=sum(Y)+sum(X)
endfunction
```

```
function M=metropolis(X0,N,m,b)
    //X=ones(1,N^2)
    //disp(X)
    Energie=zeros(1,m)
    X=X0
    //X=2*grand(1, N^2, "bin", 1, 0.8)-1
    LogTime = floor( log(m)/log(10) )+1;
    for i=1:m
        Z=X
        M1=matrix(Z,N,N)
        H1=somme(M1)
        //disp(H1)
        Q=grand(1,1,"uin",0,N^2)
        if Q==0 then X=X
```

```

else Y=zeros(1,N^2);
    Y(Q)=2
    if X(Q)==1 then X=X-Y
    else X=X+Y
    end
end
M2=matrix(X,N,N)
H2=somme(M2)
//disp(H2)
R=min(1,exp(b*(H2-H1)))
U=rand(1)
//disp(R)
//disp(U<R)
if U<R then X=X
else X=Z
end
//disp(X)
Mf=matrix(X,N,N);
//H=somme(Mf)
//Energie(i)=-b*H
Matplot(Mf+5)
Name = NAME(i,LogTime);
xs2gif(0, strcat(['film/anim',Name, '.jpg']));
end
M=matrix(X,N,N)
//plot(Energie)
// +5 pour la couleur
//Matplot(M+5)
endfunction

function M=metropolish(X0,N,m,b,h)
//X=ones(1,N^2)
//disp(X)
Energie=zeros(1,m)
X=X0
//X=2*grand(1, N^2, "bin", 1, 0.8)-1
for i=1:m
    Z=X
    M1=matrix(Z,N,N)
    H1=somme(M1)
    H11=sum(M1)
    //disp(H1)
    Q=grand(1,1,"uin",0,N^2)
    if Q==0 then X=X
    else Y=zeros(1,N^2);
        Y(Q)=2
        if X(Q)==1 then X=X-Y
        else X=X+Y
        end
    end
end
M2=matrix(X,N,N)
H2=somme(M2)

```

```

    H22=sum(M2)
    //disp(H2)
    R=min(1,exp(b*(H2-H1)+h*(H22-H11)))
    U=rand(1)
    //disp(R)
    //disp(U<R)
    if U<R then X=X
    else X=Z
    end
    //disp(X)
    Mf=matrix(X,N,N);
    Energie(i)=-b*somme(Mf)-h*sum(Mf)
    //Matplot(Mf+5)
end
M=matrix(X,N,N)
//plot(Energie)
// +5 pour la couleur
//Matplot(M+5)
endfunction

```

```

function Mag=magnetisation(X0,nbrexp,N,m,b)
    S=0
    for j=1:nbrexp
        M=metropolis(X0,N,m,b)
        S=S+sum(M)/(N^2)
    end
    Mag=S/nbrexp
endfunction

```

```

function Mag=magnetisationh(X0,nbrexp,N,m,b,h)
    S=0
    for j=1:nbrexp
        M=metropolish(X0,N,m,b,h)
        S=S+sum(M)/(N^2)
    end
    Mag=S/nbrexp
endfunction

```

```

function Gmag=graphemagnetisation(nbrexp,N,m)
    pb=0
    Gmag=zeros(1,10)
    X0=2*grand(1,N^2,"bin",1,0.8)-1
    for i=1:10
        b=-0.5*log(1-pb)
        Gmag(i)=magnetisation(X0,nbrexp,N,m,b)
        pb=pb+0.1
    end
    plot(Gmag)
endfunction

```

```

function Gmag=graphemagnetisationh(nbrexp,N,m)
    pb=0
    Gmag=zeros(1,10)
    Gmag2=zeros(1,10)
    Gmag3=zeros(1,10)
    X0=2*grand(1, N^2, "bin", 1, 0.8)-1
    for i=1:10
        b=-0.5*log(1-pb)
        Gmag(i)=magnetisationh(X0,nbrexp,N,m,b,0)
        Gmag2(i)=magnetisationh(X0,nbrexp,N,m,b,0.5)
        Gmag3(i)=magnetisationh(X0,nbrexp,N,m,b,1)
        pb=pb+0.1
    end
    plot(Gmag); plot(Gmag2) ; plot(Gmag3)
endfunction

```

```

function hist=histogramme(nbrexp,N,m,b)
    hist=zeros(1,nbrexp)
    for i=1:nbrexp
        X0=2*grand(1, N^2, "bin", 1, 0.5)-1
        M=metropolis(X0,N,m,b)
        hist(i)=sum(M)/N
    end
    s=variance(hist)
    e=sum(hist)/nbrexp
    disp(e)
    x=[-4:0.1:4]'
    plot(x,(1/sqrt(2*pi*s))*exp(-(x-e)^2/(2*s)))
    histplot(20,hist)
endfunction

```

```

function hist=histogramme2(nbrexp,N,m,b)
    hist=zeros(1,nbrexp)
    for i=1:nbrexp
        X0=2*flour(rand(1,N^2)+0.5)-1 //un X totalement aléatoire
        M=metropolis(X0,N,m,b)
        hist(i)=sum(M)/N
    end
    e=sum(hist)/nbrexp
    s=variance(hist)
    x=[-4:0.1:4]'
    plot(x,(1/sqrt(2*pi*s))*exp(-(x-e)^2/(2*s)))
    histplot(20,hist)
endfunction

```

```

function tab=varN(nbrexp,m,b,Nmax)
    hist=zeros(1,Nmax)
    for i=1:Nmax
        X0=2*grand(1, (10*i)^2, "bin", 1, 0.8)-1
        tab(i)=magnetisation(X0,nbrexp,10*i,m,b)
    end
endfunction

```

```
end
plot(tab)
endfunction
```

Références

- [1] Sacha FRIEDLY et Yvan VELENIK, The Ising Model, preliminary draft, available at <http://www.unige.ch/math/folks/velenik/smbook/>, 2014
- [2] Vanessa BERGERON LAPERRIÈRE, L'algorithme Metropolis-Hastings, Projet de recherche CRSNG, Département de Mathématiques et Statistique Université de Montréal, 2010
- [3] Yvan VELENIK, Introduction aux champs aléatoires markoviens et gibbsiens, 2009
- [4] <http://pages.physics.cornell.edu/sethna/StatMech/ComputerExercises/Ising/Ising.html>
- [5] <http://theor.jinr.ru/kuzemsky/isingbio.html>
- [6] <http://cp3-origins.dk/content/movies/2013-10-25-1200-arthur.pdf>