

Projet MAM : Modèle d'Ising

Amin JIYID Réda YAHI

Table des matières

1	Introduction	2
1.1	Rappel	2
1.2	Objectif du projet	3
2	Construction d'une chaîne de Markov de mesure stationnaire $P_{N,T}$	3
2.1	Espace d'états et graphe des configurations	3
2.2	Matrice de proposition	3
2.3	Construction de la matrice de transition	4
2.4	Irréductibilité de la chaîne	4
2.5	Apériodicité de la chaîne	6
2.6	Mesure stationnaire	7
3	Implémentation et simulation de la mesure $P_{N,T}$	7
3.1	Principe général	8
4	Conditions aux bords	8
4.1	Illustration d'une configuration typique sous $P_{N,T}^+$	8
5	Estimation de $\mathbb{E}_{N,T}^+[\sigma(0)]$ et transition de phase	9

1 Introduction

1.1 Rappel

Le modèle d’Ising est un modèle fondamental de la physique statistique, initialement introduit pour décrire les phénomènes de ferromagnétisme.

Dans ce projet, on considère le modèle d’Ising bidimensionnel défini sur une boîte finie

$$\Lambda_N = \{(i, j) \in \mathbb{Z}^2 : -N \leq i, j \leq N\}.$$

À chaque site $x \in \Lambda_N$ est associé un *spin* prenant ses valeurs dans l’ensemble $\{-1, +1\}$. Une configuration du système est donc une application

$$\sigma : \Lambda_N \longrightarrow \{-1, +1\},$$

et l’ensemble de toutes les configurations possibles est noté

$$\Sigma_N = \{-1, +1\}^{\Lambda_N}.$$

Les interactions entre les spins sont modélisées par une fonction d’énergie définie par

$$H(\sigma) = - \sum_{x \sim y} \sigma(x)\sigma(y),$$

où la somme porte sur toutes les paires de sites voisins pour la relation de voisinage usuelle sur \mathbb{Z}^2 (voisins horizontaux et verticaux).

À température $T > 0$, la probabilité d’observer une configuration $\sigma \in \Sigma_N$ est donnée par

$$P_{N,T}(\sigma) = \frac{1}{Z_{N,T}} \exp\left(-\frac{1}{T}H(\sigma)\right),$$

où la constante de normalisation

$$Z_{N,T} = \sum_{\sigma \in \Sigma_N} \exp\left(-\frac{1}{T}H(\sigma)\right)$$

Cette constante joue un rôle central en théorie, mais elle est en pratique impossible à calculer explicitement lorsque la taille du système devient grande, en raison du nombre exponentiel de configurations dans Σ_N .

1.2 Objectif du projet

Ce projet s'inscrit précisément dans ce contexte : bien que la mesure $P_{N,T}$ soit définie de manière explicite, il est impossible de la simuler directement par un tirage indépendant. L'objectif est alors de construire des méthodes permettant de générer des configurations distribuées approximativement selon $P_{N,T}$, sans avoir à calculer la fonction de partition.

L'objectif principal du projet est donc double. Dans un premier temps, il s'agit de construire une chaîne de Markov sur l'espace des configurations Σ_N dont la mesure stationnaire est exactement la mesure de Gibbs $P_{N,T}$. Dans un second temps, cette chaîne est utilisée pour mettre en œuvre un algorithme de type Monte Carlo par chaînes de Markov, permettant de simuler numériquement le modèle d'Ising et d'estimer différentes quantités d'intérêt associées à la mesure $P_{N,T}$.

2 Construction d'une chaîne de Markov de mesure stationnaire $P_{N,T}$

L'objectif de cette partie est de construire une chaîne de Markov définie sur l'espace des configurations Σ_N dont la mesure stationnaire est exactement la mesure de Gibbs $P_{N,T}$ associée au modèle d'Ising. La construction repose sur la démarche générale des mesures de Gibbs et sur l'algorithme de Metropolis–Hastings.

2.1 Espace d'états et graphe des configurations

L'espace d'états de la chaîne est l'ensemble des configurations

$$\Sigma_N = \{-1, +1\}^{\Lambda_N}.$$

Deux configurations $\sigma, \sigma' \in \Sigma_N$ sont dites *voisines* si elles diffèrent en un seul site, c'est-à-dire s'il existe $x \in \Lambda_N$ tel que

$$\sigma'(x) = -\sigma(x) \quad \text{et} \quad \sigma'(y) = \sigma(y) \quad \text{pour tout } y \neq x.$$

Ce choix de voisinage définit un graphe naturel sur Σ_N , dans lequel chaque configuration admet exactement $|\Lambda_N| = (2N + 1)^2$ voisines possibles.

2.2 Matrice de proposition

À partir d'une configuration σ , on choisit uniformément un site $x \in \Lambda_N$ et l'on propose une nouvelle configuration σ' obtenue en retournant le spin en ce site. Cette procédure

définit une matrice de proposition $Q = (q_{\sigma,\sigma'})_{\sigma,\sigma' \in \Sigma_N}$ donnée par

$$q_{\sigma,\sigma'} = \begin{cases} \frac{1}{|\Lambda_N|}, & \text{si } \sigma' \text{ est voisine de } \sigma, \\ 0, & \text{sinon.} \end{cases}$$

Cette matrice vérifie la condition de symétrie des zéros, à savoir $q_{\sigma,\sigma'} > 0$ si et seulement si $q_{\sigma',\sigma} > 0$, ce qui permet d'appliquer la construction de Metropolis–Hastings.

2.3 Construction de la matrice de transition

On considère comme loi cible la mesure de Gibbs $P_{N,T}$. D'après la méthode de Metropolis–Hastings, la matrice de transition $P = (p_{\sigma,\sigma'})$ est définie, pour $\sigma \neq \sigma'$, par

$$p_{\sigma,\sigma'} = q_{\sigma,\sigma'} \min\left(1, \frac{P_{N,T}(\sigma')}{P_{N,T}(\sigma)}\right).$$

En utilisant l'expression explicite de la mesure de Gibbs, on obtient

$$\frac{P_{N,T}(\sigma')}{P_{N,T}(\sigma)} = \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma)}{T}\right).$$

Ainsi, pour deux configurations voisines σ et σ' , la probabilité de transition s'écrit

$$p_{\sigma,\sigma'} = \frac{1}{|\Lambda_N|} \min\left(1, \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma)}{T}\right)\right),$$

et $p_{\sigma,\sigma'} = 0$ si σ' n'est pas voisine de σ . Le coefficient diagonal est ensuite défini par

$$p_{\sigma,\sigma} = 1 - \sum_{\sigma' \neq \sigma} p_{\sigma,\sigma'}.$$

2.4 Irréductibilité de la chaîne

On note $(X_n)_{n \geq 0}$ la chaîne de Markov sur Σ_N construite par Metropolis–Hastings. On montre ici qu'elle est irréductible, c'est-à-dire que pour toutes configurations $\sigma, \sigma' \in \Sigma_N$, il existe $k \geq 1$ tel que

$$\mathbb{P}_\sigma(X_k = \sigma') > 0,$$

où $\mathbb{P}_\sigma(\cdot)$ désigne la loi de la chaîne conditionnellement à $X_0 = \sigma$.

Soient donc $\sigma, \sigma' \in \Sigma_N$. On considère l'ensemble des sites où les deux configurations diffèrent :

$$D = \{x \in \Lambda_N : \sigma(x) \neq \sigma'(x)\}.$$

Si $D = \emptyset$, alors $\sigma = \sigma'$ et la conclusion est immédiate (prendre $k = 1$ avec $\mathbb{P}_\sigma(X_1 = \sigma) > 0$).

On suppose donc $D \neq \emptyset$ et on pose $|D| = k$. On énumère les éléments de D sous la forme

$$D = \{x_1, x_2, \dots, x_k\}.$$

Construction d'un chemin de σ vers σ' . On définit une suite de configurations $(\sigma_r)_{0 \leq r \leq k}$ par récurrence :

$\sigma_0 = \sigma$, et pour $r = 1, \dots, k$, σ_r s'obtient en retournant le spin en x_r dans σ_{r-1} .

Autrement dit, pour tout $r \in \{1, \dots, k\}$,

$$\sigma_r(x_r) = -\sigma_{r-1}(x_r) \quad \text{et} \quad \sigma_r(y) = \sigma_{r-1}(y) \quad \text{pour tout } y \neq x_r.$$

Ainsi, σ_{r-1} et σ_r sont voisines (elles diffèrent en un seul site). De plus, comme les seuls sites modifiés sont exactement ceux de D , on a bien

$$\sigma_k = \sigma'.$$

Il existe donc un chemin (au sens du graphe de voisinage) reliant σ à σ' en k étapes :

$$\sigma = \sigma_0 \rightarrow \sigma_1 \rightarrow \dots \rightarrow \sigma_k = \sigma'.$$

Probabilité strictement positive de suivre ce chemin. Considérons l'événement

$$A = \{X_1 = \sigma_1, X_2 = \sigma_2, \dots, X_k = \sigma_k\}.$$

On a évidemment $A \subseteq \{X_k = \sigma'\}$, donc

$$\mathbb{P}_\sigma(X_k = \sigma') \geq \mathbb{P}_\sigma(A).$$

Par la propriété de Markov et la règle du produit des probabilités conditionnelles, on obtient

$$\mathbb{P}_\sigma(A) = \prod_{r=1}^k \mathbb{P}_\sigma(X_r = \sigma_r \mid X_{r-1} = \sigma_{r-1}) = \prod_{r=1}^k p_{\sigma_{r-1}, \sigma_r}.$$

Il reste donc à montrer que chaque facteur $p_{\sigma_{r-1}, \sigma_r}$ est strictement positif.

Positivité de chaque transition le long du chemin. Pour deux configurations voisines $\sigma \sim \sigma'$, la probabilité de transition de Metropolis s'écrit

$$p_{\sigma, \sigma'} = \frac{1}{|\Lambda_N|} \min \left(1, \exp \left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma)}{T} \right) \right).$$

Or on a $\frac{1}{|\Lambda_N|} > 0$ et, pour tout réel u , $\exp(u) > 0$, donc $\min(1, \exp(u)) > 0$. Par conséquent,

$$p_{\sigma, \sigma'} > 0 \quad \text{pour toute paire de configurations voisines } \sigma \sim \sigma'.$$

Conclusion. On en déduit

$$\mathbb{P}_\sigma(X_k = \sigma') \geq \prod_{r=1}^k p_{\sigma_{r-1}, \sigma_r} > 0.$$

Ainsi, pour toutes $\sigma, \sigma' \in \Sigma_N$, il existe k tel que $\mathbb{P}_\sigma(X_k = \sigma') > 0$, ce qui prouve que la chaîne est **irréductible**.

2.5 Apériodicité de la chaîne

Choix d'un état d'énergie minimale. Comme Σ_N est fini, la fonction H atteint un minimum. On choisit une configuration $\sigma^* \in \Sigma_N$ telle que

$$H(\sigma^*) = \min_{\sigma \in \Sigma_N} H(\sigma).$$

Alors, pour toute configuration voisine $\sigma' \sim \sigma^*$, on a nécessairement

$$H(\sigma') > H(\sigma^*),$$

Expression de p_{σ^*, σ^*} et positivité. Par définition de la matrice de transition,

$$p_{\sigma^*, \sigma^*} = 1 - \sum_{\sigma' \sim \sigma^*} p_{\sigma^*, \sigma'}.$$

Or, pour tout voisin $\sigma' \sim \sigma^*$,

$$p_{\sigma^*, \sigma'} = \frac{1}{|\Lambda_N|} \min \left(1, \exp \left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T} \right) \right).$$

Comme $H(\sigma') - H(\sigma^*) > 0$, on a

$$0 < \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T}\right) < 1,$$

donc

$$\min\left(1, \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T}\right)\right) = \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T}\right) < 1.$$

Il y a exactement $|\Lambda_N|$ voisins de σ^* , donc en sommant sur tous les voisins,

$$\sum_{\sigma' \sim \sigma^*} \min\left(1, \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T}\right)\right) < \sum_{\sigma' \sim \sigma^*} 1 = |\Lambda_N|.$$

En divisant par $|\Lambda_N|$, on obtient

$$\sum_{\sigma' \sim \sigma^*} p_{\sigma^*, \sigma'} = \frac{1}{|\Lambda_N|} \sum_{\sigma' \sim \sigma^*} \min\left(1, \exp\left(-\frac{H(\sigma') - H(\sigma^*)}{T}\right)\right) < 1.$$

Ainsi,

$$p_{\sigma^*, \sigma^*} = 1 - \sum_{\sigma' \sim \sigma^*} p_{\sigma^*, \sigma'} > 0.$$

Conclusion. On a donc $p_{\sigma^*, \sigma^*} > 0$. Comme la chaîne est irréductible, toutes les périodes sont égales, et la chaîne est donc **apériodique**.

2.6 Mesure stationnaire

Par construction, la chaîne vérifie la condition de réversibilité

$$P_{N,T}(\sigma) p_{\sigma, \sigma'} = P_{N,T}(\sigma') p_{\sigma', \sigma} \quad \text{pour tous } \sigma, \sigma' \in \Sigma_N.$$

La mesure de Gibbs $P_{N,T}$ est donc une mesure stationnaire de la chaîne. De plus, l'irréductibilité et l'apériodicité garantissent que cette mesure stationnaire est unique et que la loi de la chaîne converge vers $P_{N,T}$ lorsque le nombre d'itérations tend vers l'infini.

3 Implémentation et simulation de la mesure $P_{N,T}$

Dans cette partie, on décrit le principe algorithmique permettant de simuler de manière approchée la mesure de Gibbs $P_{N,T}$ associée au modèle d'Ising. L'implémentation repose sur la chaîne de Markov construite à la section précédente et sur un algorithme de type Monte Carlo par chaînes de Markov (MCMC), fondé sur la règle de Metropolis.

3.1 Principe général

La chaîne de Markov $(X_n)_{n \geq 0}$ prend ses valeurs dans l'espace des configurations Σ_N . À chaque itération, l'état courant X_n correspond à une configuration de spins, et l'état suivant X_{n+1} est obtenu par une transition locale reposant sur le retournement éventuel d'un seul spin.

L'algorithme procède de manière itérative selon les étapes suivantes :

- partir d'une configuration initiale $X_0 \in \Sigma_N$, choisie arbitrairement ;
- à partir de la configuration courante X_n , choisir uniformément un site $x \in \Lambda_N$;
- proposer une nouvelle configuration X'_n obtenue en retournant le spin au site x ;
- calculer la variation d'énergie $\Delta H = H(X'_n) - H(X_n)$;
- accepter la configuration proposée avec la probabilité

$$\min\left(1, \exp\left(-\frac{\Delta H}{T}\right)\right),$$

et poser $X_{n+1} = X'_n$ en cas d'acceptation, ou $X_{n+1} = X_n$ en cas de refus.

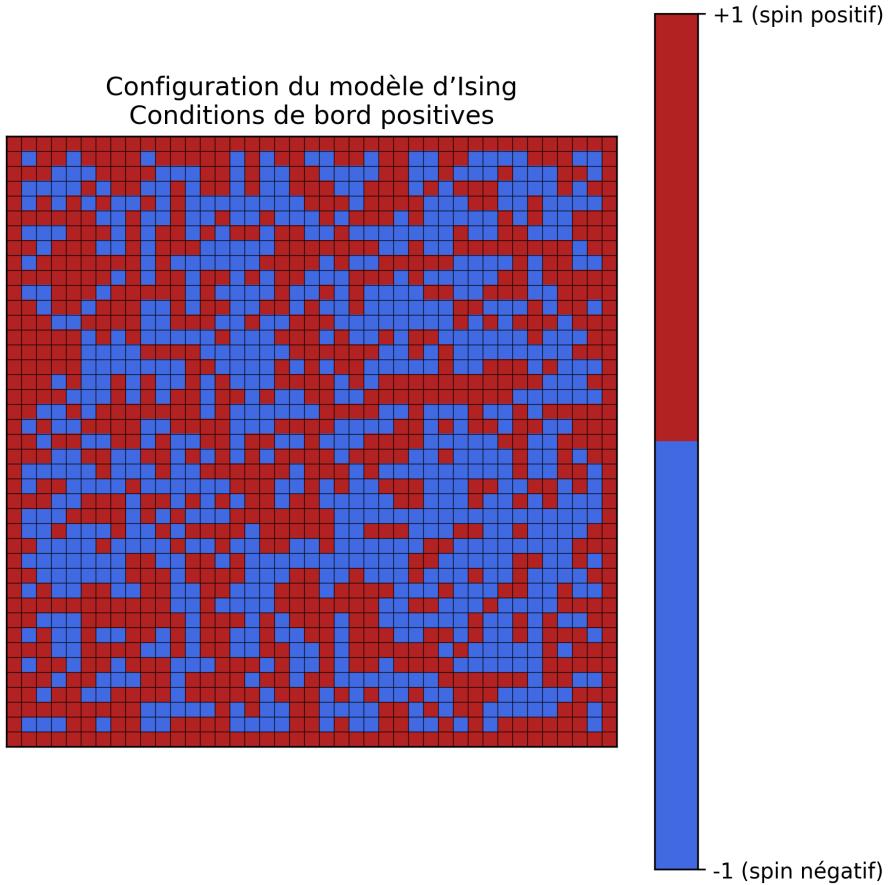
Ce mécanisme correspond exactement à la matrice de transition définie précédemment et garantit que la mesure stationnaire de la chaîne est la mesure de Gibbs $P_{N,T}$.

4 Conditions aux bords

Ce phénomène s'interprète comme une brisure de la symétrie du modèle induite par les conditions aux bords. En imposant des spins positifs sur le bord de la boîte, on favorise l'alignement des spins voisins, ce qui engendre un biais global vers l'état positif. Cette influence se propage progressivement vers l'intérieur du domaine du fait des interactions locales entre spins. Lorsque la taille de la boîte est modérée, cette propagation atteint le centre, expliquant la tendance du spin en 0 à être positif. Le raisonnement est strictement symétrique pour des conditions de bords négatives.

4.1 Illustration d'une configuration typique sous $P_{N,T}^+$

Afin d'illustrer concrètement la mesure de Gibbs $P_{N,T}^+$ simulée par l'algorithme de Metropolis–Hastings, nous représentons ci-dessous une configuration typique du modèle d'Ising obtenue après convergence de la chaîne de Markov. Les conditions de bord positives imposent des spins +1 sur le bord de la boîte, ce qui influence l'organisation des spins à l'intérieur du domaine. La représentation graphique permet de visualiser la structure spatiale des spins, ainsi que la formation de domaines de spins alignés.



5 Estimation de $\mathbb{E}_{N,T}^+[\sigma(0)]$ et transition de phase

Nous avons estimé par simulation Monte Carlo l'espérance

$$\mathbb{E}_{N,T}^+[\sigma(0)]$$

pour différentes valeurs de la température T , en imposant des conditions de bord positives et pour une boîte de grande taille ($N = 100$).

Les résultats montrent que, pour les basses températures, le spin à l'origine est fortement influencé par les conditions de bord, avec une espérance strictement positive. À mesure que la température augmente, cette influence décroît progressivement et l'espérance tend vers zéro.

Numériquement, nous observons un changement de comportement autour de la valeur critique

$$T_c \approx 2.27,$$

ce qui est cohérent avec la température critique théorique du modèle d'Ising bidimensionnel. Pour $T > T_c$, l'influence des conditions de bord disparaît, tandis que pour $T < T_c$, le système présente une phase ordonnée.

Ces observations mettent en évidence l'existence d'une transition de phase entre une phase

ferromagnétique et une phase désordonnée.

