Projet de simulations aléatoires : Modèles d'Ising

Aurélien Enfroy, Shmuel Rakotonirina--Ricquebourg

4 janvier 2018

1 Implémentation du modèle d'Ising

On rappelle la définition du modèle d'Ising sur un réseau carré :

Définition 1.1. On fixe C le réseau carré de dimension 2 de taille N^2. Le modèle d'Ising est la distribution sur l'espace d'état $\{\pm 1\}^C$ dont la loi est donnée par

$$\forall x \in \{\pm 1\}^C, \pi(x) = \frac{1}{Z_T} \exp\left(\frac{\sum_{u\sim v} J_{u,v} x_u x_v + \sum_u h_u x_u}{T}\right)$$

où $T > 0$ est appelée la température, Z_T est une constante de normalisation, $J_{u,v}$ est la force d'interaction entre u et v et h_u est le champ magnétique extérieur en u.

Pour l'implémentation, on remarque qu'il n'y a pas besoin du paramètre T, qu'on peut compter dans J et h. On représente alors ces paramètres en prenant $x \in \mathcal{M}_{N,N}(\{\pm 1\})$, $h \in \mathcal{M}_{N,N}(\mathbb{R})$ et J comme une matrice à trois entrées $\widetilde{J} \in \mathcal{M}_{N,N,2}(\mathbb{R})$ où

$$\widetilde{J}_{i,j,1} = J_{(i,j),(i+1,j)} \text{ et } \widetilde{J}_{i,j,2} = J_{(i,j),(i,j+1)}.$$

2 Simulation naïve en petite taille

En petite taille, on peut faire une simulation naïve. Pour cela, on numérote les 2^{N^2} états (dans l'ordre lexicographique en lisant les matrices colonne par colonne), on calcule exactement la loi et on choisit un numéro en utilisant cette loi et une loi uniforme sur $[0, 1]$.

3 Simulation par Metropolis-Hastings

Nous avons implémenté l'algorithme de Metropolis-Hastings en utilisant la fonction de rejet de Metropolis-Hastings. Pour le choix du noyau instrumental Q, nous avons choisi de changer (multiplier par -1) chaque coordonnée avec une probabilité p, ce qui permet d'explorer tout l'espace, d'avoir un noyau symétrique irréductible, une chaîne de Metropolis-Hastings apériodique (probabilité strictement positive de rester sur place).

Dans le cas $p = \frac{1}{2}$, on propose un nouvel état indépendamment de l'état en cours. Dans le cas $0 < p < \frac{1}{2}$, on reste « plus proche » de l'état en cours, tout en ayant une chance d'explorer des états éloignés.

4 Simulation par l'échantilloneur de Gibbs

En reprenant les notations du cours, on a pour $u \in C$ et $x \in \{\pm 1\}^C$

$$\begin{aligned}\pi_u(x_u \mid x^u) &= \frac{\pi(x_u, x^u)}{\pi(1, x^u) + \pi(-1, x^u)} \\ &= \frac{e^{x_u \lambda_u}}{e^{\lambda_u} + e^{-\lambda_u}}\end{aligned}$$

où $\lambda_u \doteq \sum_{v \sim u} J_{u,v} x_v + h_u$. Donc $\pi_u(\cdot \mid x^u) = \mathcal{B}(\frac{e^{\lambda_u}}{e^{\lambda_u} + e^{-\lambda_u}}) = B(\frac{1}{1+e^{-2\lambda_u}})$