

TEMPS DE MÉLANGE DU MODÈLE DE CURIE-WEISS

On étudie un modèle de spins sur un ensemble de N sommets qui interagissent tous les uns avec les autres (autrement dit, toutes les paires de sites sont des paires de voisins). Dans une première partie, on définit les mesures de probabilité correspondant au modèle et on explique comment les simuler grâce à une chaîne de Markov. Dans une seconde partie, on étudie le comportement limite de la magnétisation (somme des spins) en fonction de la valeur du paramètre β du modèle. Enfin, dans une dernière partie, on montre que la chaîne a un temps de mélange $O(N \log N)$ si le paramètre β du modèle est plus petit que 1.

1. LE MODÈLE DE CURIE-WEISS

Dans tout ce qui suit, $N \geq 2$ est un entier fixé, et $\beta \in \mathbb{R}_+$ est un paramètre positif (l'inverse de la température). On note $\mathfrak{X} = \{\pm 1\}^N$ l'ensemble des configurations de spins sur N sommets : une configuration $\sigma \in \mathfrak{X}$ est donc une fonction qui assigne à tout entier $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$ un signe $\sigma(k) \in \{\pm 1\}$. L'énergie d'une configuration σ est la quantité :

$$H(\sigma) = -\frac{1}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma(i) \right)^2 = -\frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma(i) \sigma(j).$$

L'énergie d'une configuration est donc plus basse si de nombreux sites ont le même signe, et plus haute si de nombreux sites ont des signes différents. Les configurations de plus basse énergie sont $\sigma = 1$ et $\sigma = -1$ (fonctions constantes) ; les configurations de plus haute énergie sont celles avec autant de signes positifs que de signes négatifs (en supposant N pair).

La mesure de Curie-Weiss de paramètre β est la mesure de probabilité sur $\mathfrak{X}$ donnée par :

$$\mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma] = \frac{1}{Z_{N,\beta}} \exp(-\beta H(\sigma)) = \frac{1}{Z_{N,\beta}} \exp \left(\frac{\beta}{2N} \left(\sum_{i=1}^N \sigma(i) \right)^2 \right),$$

avec $Z_{N,\beta} = \sum_{\sigma \in \mathfrak{X}} \exp(-\beta H(\sigma))$ constante de normalisation.

(1) Que dire des spins $\sigma(i)$, $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ si $\beta = 0$? Montrer que dans le cas général,

$$Z_{N,\beta} = \sum_{k=0}^N \binom{N}{k} e^{\frac{\beta(2k-N)^2}{2N}}.$$

Définissons des transitions aléatoires qui vont engendrer une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$. Si $\sigma \in \mathfrak{X}$, on définit une nouvelle configuration $\tau \in \mathfrak{X}$ comme suit :

- on tire au hasard un entier $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$ uniformément ;
- on pose $\tau(l \neq k) = \sigma(l)$, et on tire $\tau(k)$ au hasard, avec

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\tau(k) = 1] &= \frac{\exp \left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right)}{\exp \left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right) + \exp \left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right)}; \\ \mathbb{P}[\tau(k) = -1] &= \frac{\exp \left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right)}{\exp \left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right) + \exp \left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j) \right)}. \end{aligned}$$

On note $P(\sigma, \tau)$ la matrice de transition correspondant à cette construction.

- (2) À quelles conditions sur deux configurations σ et τ a-t-on $P(\sigma, \tau) \neq 0$? Montrer que P est irréductible et apériodique, et que $\mathbb{P}_{N,\beta}$ est une mesure réversible (et donc invariante) pour P :

$$\mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma] P(\sigma, \tau) = \mathbb{P}_{N,\beta}[\tau] P(\tau, \sigma) \quad \text{pour toute paire de configurations.}$$

- (3) Si $(\sigma^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov sur $\mathfrak{X}$ de matrice P , montrer que

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}[\sigma^{(n)} = \sigma] = \mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma].$$

Écrire un programme (dans le langage de votre choix, de préférence **Python** ou une variante) **CurieWeiss(N, beta, n)** qui simule une configuration de taille N et de paramètre β , en effectuant $n \gg 1$ transitions markoviennes de matrice P à partir d'une configuration initiale $\sigma^{(0)}$ (qu'on choisira par exemple sous la loi $\mathbb{P}_{N,0}$). Expérimenter avec $N = 20, n = 1000$ et diverses valeurs du paramètre β .

Comme tous les sites jouent le même rôle, la seule statistique intéressante d'une configuration est sa *magnétisation* $M(\sigma) = \sum_{i=1}^N \sigma(i)$. Notons que $H(\sigma) = -\frac{1}{2N} (M(\sigma))^2$.

- (4) Soit $(\sigma^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ la chaîne de Markov précédemment introduite, et $(M^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ le processus défini par $M^{(n)} = M(\sigma^{(n)})$. Montrer que $(M^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne de Markov irréductible apériodique sur $\mathfrak{M} = \{-N, -N+2, -N+4, \dots, N-2, N\}$, et préciser la valeur de sa matrice de transition Q . Quel est le lien entre $\mathbb{P}_{N,\beta}$ et la loi invariante $\nu_{N,\beta}$ de la chaîne de matrice Q ? Donner la valeur de $\nu_{N,\beta}[m]$ pour $m \in \mathfrak{M}$. Écrire un programme **Magnetisation(N, beta, n)** qui simule une variable aléatoire M de loi $\nu_{N,\beta}$, le paramètre n étant le nombre de transitions markoviennes de la chaîne de Markov pour approcher la loi.

2. ORDRE DE GRANDEUR DE LA MAGNÉTISATION

En fonction de la valeur de β , la distribution de $M_N = M(\sigma)$ avec $\sigma \sim \mathbb{P}_{N,\beta}$ a des comportements très différents. On rappelle pour la suite la valeur de la transformée de Laplace de la gaussienne :

$$\forall z \in \mathbb{C}, \quad \int_{\mathbb{R}} e^{zt - \frac{t^2}{2}} \frac{dt}{\sqrt{2\pi}} = e^{\frac{z^2}{2}}.$$

- (5) Le *cas critique* correspond au paramètre $\beta = 1$. Posons

$$\psi_N(t) = \left(\frac{e^{\frac{t}{N^{1/4}}} + e^{-\frac{t}{N^{1/4}}}}{2} \right)^N e^{-\frac{N^{1/2}}{2} t^2}.$$

Soit $X_N = \sum_{i=1}^N A_i$ la somme de N v.a. indépendantes avec $\mathbb{P}[A_i = 1] = \mathbb{P}[A_i = -1] = \frac{1}{2}$. Montrer que :

$$\begin{aligned} \psi_N(t) &= \mathbb{E} \left[e^{\frac{t X_N}{N^{1/4}}} \right] e^{-\frac{N^{1/2}}{2} t^2} \\ \frac{Z_{N,1}}{2^N} &= \mathbb{E} \left[e^{\frac{(X_N)^2}{2N}} \right] = \sqrt{\frac{N^{1/2}}{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \psi_N(t) dt. \end{aligned}$$

En utilisant un développement de Taylor à l'ordre 4 de $\log\left(\frac{e^t + e^{-t}}{2}\right)$, calculer par ailleurs $\psi(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \psi_N(t)$.

- (6) La fonction $\psi(t)$ est liée à la limite en loi de $\frac{M_N}{N^{3/4}}$ lorsque $\beta = 1$ et t tend vers l'infini : ainsi, on peut montrer que

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{N,1} \left[\frac{M_N}{N^{3/4}} \leq x \right] = \frac{\int_{-\infty}^x \psi(t) dt}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) dt} = F(x).$$

Avec $N = 100$, $\beta = 1$ et en utilisant le programme `Magnetisation(N, beta, n)` avec $n = 100000$, dessiner la fonction de répartition empirique de $\frac{M_N}{N^{3/4}}$, et comparer-la à la fonction $F(x)$. Dans Python, on pourra importer la méthode d'intégration numérique `quad` avec la commande `from scipy.integrate import quad`.

- (7) Le cas *sous-critique* correspond aux paramètres $\beta < 1$. Fixons un tel paramètre, et considérons $M_N = M(\sigma)$ avec $\sigma \sim \mathbb{P}_{N,\beta}$. On rappelle qu'une suite de variables aléatoires $(V_N)_{N \geq 1}$ converge en loi vers la loi normale $N(0, v^2)$ si et seulement si

$$\mathbb{E}[e^{zV_N}] \rightarrow e^{\frac{v^2 z^2}{2}}$$

pour tout $z \in \mathbb{C}$. Avec X_N comme dans la question (5), montrer que sous la loi $\mathbb{P}_{N,\beta}$, on a

$$\mathbb{E}_{N,\beta} \left[e^{\frac{zM_N}{N^{1/2}}} \right] = \frac{\mathbb{E} \left[e^{\frac{zX_N}{N^{1/2}} + \frac{\beta(X_N)^2}{2N}} \right]}{\mathbb{E} \left[e^{\frac{\beta(X_N)^2}{2N}} \right]} = \frac{\int_{\mathbb{R}} \mathbb{E} \left[e^{\frac{(z+u\sqrt{\beta})X_N}{N^{1/2}}} \right] e^{-\frac{u^2}{2}} \frac{du}{\sqrt{2\pi}}}{\int_{\mathbb{R}} \mathbb{E} \left[e^{\frac{u\sqrt{\beta}X_N}{N^{1/2}}} \right] e^{-\frac{u^2}{2}} \frac{du}{\sqrt{2\pi}}}.$$

En utilisant le théorème central limite pour X_N et en admettant que l'on peut passer à la limite sous les signes $\int_{\mathbb{R}}$, en déduire que pour $\beta < 1$,

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mathbb{P}_{N,\beta} \left[\frac{M_N}{N^{1/2}} \leq x \right] = \sqrt{\frac{1-\beta}{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{(1-\beta)t^2}{2}} dt = F_{N(0, \frac{1}{1-\beta})}(x).$$

Vérifier comme dans la question (6) cette convergence en loi en utilisant le programme `Magnetisation(N, beta, n)` (on pourra prendre par exemple $\beta = \frac{1}{2}$).

Ainsi, l'ordre de grandeur de la magnétisation est $N^{1/2}$ pour $\beta < 1$, et $N^{3/4}$ pour $\beta = 1$.

3. TEMPS DE MÉLANGE DANS LE CAS SOUS-CRITIQUE

Dans cette section, $\beta < 1$, et on s'intéresse à la vitesse de convergence de la loi $\pi^{(n)}$ de $\sigma^{(n)}$ vers la loi de Curie-Weiss $\mathbb{P}_{N,\beta}$. Il s'agit de contrôler la *distance en variation totale* :

$$d_{VT}(\pi^{(n)}, \mathbb{P}_{N,\beta}) = \sup_{A \subset \mathfrak{X}} |\mathbb{P}[\sigma^{(n)} \in A] - \mathbb{P}_{N,\beta}[A]|.$$

On rappelle la caractérisation de la distance en variation totale par les couplages :

$$d_{VT}(\pi_1, \pi_2) = \inf_{(X,Y) | X \sim \pi_1, Y \sim \pi_2} \mathbb{P}[X \neq Y],$$

où l'infimum porte sur les couplages des probabilités π_1 et π_2 sur $\mathfrak{X}$, c'est-à-dire les lois de variables aléatoires $(X, Y) \in \mathfrak{X}^2$ avec $X \sim \pi_1$ et $Y \sim \pi_2$.

- (8) Si σ et τ sont deux configurations, on note $d(\sigma, \tau)$ le nombre de sites $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tels que $\sigma(k) = -\tau(k)$. On voit facilement que d est une distance sur $\mathfrak{X}$. La *distance de Wasserstein* entre deux lois π_1 et π_2 sur $\mathfrak{X}$ est définie comme l'infimum sur les couplages :

$$d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2) = \inf_{(X,Y) | X \sim \pi_1, Y \sim \pi_2} \mathbb{E}[d(X, Y)].$$

Montrer qu'on a toujours $d_{VT}(\pi_1, \pi_2) \leq d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2)$.

- (9) Montrer que si σ et τ sont deux configurations dans $\mathfrak{X}$, alors les lignes $P(\sigma, \cdot)$ et $P(\tau, \cdot)$ de la matrice de transition P de $(\sigma^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ vérifient

$$d_{\text{Wasserstein}}(P(\sigma, \cdot), P(\tau, \cdot)) \leq \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{\beta}{N}\right) d(\sigma, \tau).$$

On pourra commencer par traiter le cas où $d(\sigma, \tau) = 1$, et trouver un couplage adéquat de $\sigma^{(1)} \sim P(\sigma, \cdot)$ et de $\tau^{(1)} \sim P(\tau, \cdot)$. On pourra aussi utiliser le fait que $x \mapsto \frac{e^x}{e^x + e^{-x}}$ est lipschitzienne de constante $\frac{1}{2}$.

- (10) Montrer que pour toutes mesures de probabilité π_1 et π_2 sur σ ,

$$d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1 P, \pi_2 P) \leq e^{-\frac{1-\beta}{N}} d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2).$$

En déduire que quelque soit la loi initiale de $\sigma^{(0)}$,

$$d_{\text{VT}}(\pi^{(n)}, \mathbb{P}_{N,\beta}) \leq N e^{-\frac{(1-\beta)n}{N}}.$$

Montrer que pour $n \geq \frac{N \log N}{1-\beta}$, la loi de $\sigma^{(n)}$ approche bien la loi $\mathbb{P}_{N,\beta}$.

On peut montrer qu'à l'inverse, si $\beta > 1$ (cas *sur-critique*), alors il faut attendre un temps au moins égal à $n = \exp(C_\beta N)$ pour que la loi de $\sigma^{(n)}$ approche bien la loi $\mathbb{P}_{N,\beta}$.