

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 $\mathfrak{Y} = \{-N, -N+2, -N+4, \dots, N-2, N\}$, 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 $m \in \mathfrak{Y}$. 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

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

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 :

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

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

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

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* :

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

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

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

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 $d_{\text{VT}}(\pi_1, \pi_2) \leq d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2)$.

- (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 $\mathbb{P}_{N,\beta}$.

CORRIGÉ

- (1) Si $\beta = 0$, alors la loi de Curie-Weiss s'écrit $\mathbb{P}_{N,0}[\sigma] = \frac{1}{2^N}$ pour toute configuration σ . Les spins $\sigma(i)$ sont alors des variables indépendantes, avec $\mathbb{P}[\sigma(i) = 1] = \mathbb{P}[\sigma(i) = -1] = \frac{1}{2}$.

Dans le cas général, il y a $\binom{N}{k}$ configurations avec k signes positifs et $N - k$ signes négatifs, et ces configurations ont pour énergie

$$H(\sigma) = -\frac{1}{2N} (k - (N - k))^2 = -\frac{(2k - N)^2}{2N}.$$

La somme $Z_{N,\beta}$ se réécrit donc par regroupement des termes :

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

- (2) Les configurations σ telles que $P(\sigma, \tau) \neq 0$ sont σ et toutes les configurations qui diffèrent de σ en un seul site $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$. Notons $\sigma_{\hat{k}}$ la configuration avec $\sigma_{\hat{k}}(l) = \sigma(l)$ pour $l \neq k$, et $\sigma_{\hat{k}}(k) = -\sigma(k)$. On a :

$$P(\sigma, \sigma_{\hat{k}}) = \frac{1}{N} \frac{e^{-\frac{\beta\sigma(k)}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}}{e^{\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))} + e^{-\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}},$$

et par complémentation,

$$P(\sigma, \sigma) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \frac{e^{\frac{\beta\sigma(k)}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}}{e^{\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))} + e^{-\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}}.$$

La matrice P est irréductible, car pour passer d'une configuration σ à une autre configuration τ arbitraire, on peut changer un à un les signes en les sites k tels que $\tau(k) = -\sigma(k)$. Elle est aussi apériodique, car $P(\sigma, \sigma) \neq 0$ pour tout $\sigma \in \mathfrak{X}$. Montrons que la mesure $\mathbb{P}_{N,\beta}$ est réversible pour P . Il suffit de montrer que pour tout $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$,

$$\mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma] P(\sigma, \sigma_{\hat{k}}) = \mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma_{\hat{k}}] P(\sigma_{\hat{k}}, \sigma).$$

En effet, les autres cas de l'équation de réversibilité sont triviaux (soit avec $\tau = \sigma$, soit avec 0 pour les deux termes de l'égalité). Fixons donc $\sigma \in \mathfrak{X}$ et $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$. On a :

$$\begin{aligned} \mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma] P(\sigma, \sigma_{\hat{k}}) &= \frac{e^{\frac{\beta}{2}}}{N Z_{N,\beta}} e^{\frac{\beta}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \sigma(i) \sigma(j)} \frac{e^{-\frac{\beta\sigma(k)}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}}{e^{\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))} + e^{-\frac{\beta}{N}(M(\sigma) - \sigma(k))}} \\ &= \frac{e^{\frac{\beta}{2}}}{N Z_{N,\beta}} e^{\frac{\beta}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N, i \neq k} \sigma(i) \sigma(j)} \\ &= \frac{e^{\frac{\beta}{2}}}{N Z_{N,\beta}} e^{\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)} + e^{-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)}. \end{aligned}$$

Remarquons alors que les spins qui apparaissent sont les $\sigma(j)$ avec $j \neq k$, et sont donc égaux à $\sigma_{\hat{k}}(j)$. Par symétrie, on obtient donc la même formule pour $\mathbb{P}_{N,\beta}[\sigma_{\hat{k}}] P(\sigma_{\hat{k}}, \sigma)$, et la réversibilité est établie.

- (3) Par le théorème de convergence vers la loi stationnaire d'une chaîne finie irréductible (récurrente positive) apériodique, la loi marginale de $\sigma^{(n)}$ converge vers la loi invariante de la chaîne, qui est $\mathbb{P}_{N,\beta}$ puisque la réversibilité implique l'invariance. Ainsi,

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

Le programme suivant permet de simuler la chaîne de Markov $(\sigma^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$, pour obtenir une configuration de loi proche de $\mathbb{P}_{N,\beta}$ si n est assez grand :

```
def CurieWeiss(N, beta, n):
    conf = rand.choice([-1, 1], size=N)
    M = np.sum(conf)
    for _ in range(n):
        k = rand.randint(N)
        e = np.exp(-(beta*conf[k]/N) * (M - conf[k]))
        if rand.random() < e/(e + 1/e):
            M -= 2*conf[k]
            conf[k] *= -1
    return conf
```

Dans ce programme, σ_0 est choisi suivant la loi $\mathbb{P}_{N,0}$, c'est-à-dire avec des spins i.i.d. uniformes sur $\{\pm 1\}$. Lors des simulations, des paramètres β petits donnent des configurations avec des spins qui semblent indépendants :

```
>>> CurieWeiss(20, 0.5, 1000)
array([-1, -1,  1,  1, -1,  1, -1, -1,  1,  1, -1,  1, -1,  1, -1, -1, -1,  1])
```

Par contre, si $\beta > 1$, les spins des configurations obtenues sont presque tous les mêmes :

```
>>> CurieWeiss(20, 2, 1000)
array([1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1, 1])
```

- (4) Pour réaliser la transition $\sigma \rightarrow \tau$ de matrice de transition P , on peut procéder comme suit :

- Notons $i_1 < i_2 < \dots < i_k$ les sites tels que $\sigma(i) = +1$, et $j_1 < j_2 < \dots < j_{N-k}$ les sites tels que $\sigma(j) = -1$. La magnétisation de σ est $M(\sigma) = 2k - N$.
- On tire au hasard U uniformément dans $[0, 1]$. Si

$$\frac{l-1}{N} \leq U < \frac{l-1}{N} + \frac{1}{N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right)}, \quad (1)$$

on prend τ égal à σ , sauf éventuellement en i_l , où l'on prend $\tau(i_l) = +1$. De même, si

$$\frac{l-1}{N} + \frac{1}{N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(2k-N-1)\right)} \leq U < \frac{l}{N}, \quad (2)$$

on prend τ égal à σ , sauf éventuellement en i_l , où l'on prend $\tau(i_l) = -1$.

- De même, si

$$\frac{k+m-1}{N} \leq U < \frac{k+m-1}{N} + \frac{1}{N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right)}, \quad (3)$$

on prend τ égal à σ , sauf éventuellement en j_m , où l'on prend $\tau(j_m) = +1$. Enfin, si

$$\frac{k+m-1}{N} + \frac{1}{N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(2k-N+1)\right)} \leq U < \frac{k+m}{N}, \quad (4)$$

on prend τ égal à σ , sauf éventuellement en j_m , où l'on prend $\tau(j_m) = -1$.

On vérifie aisément que les intervalles seuils ont été choisis de sorte que la nouvelle configuration τ soit distribuée suivant la loi $P(\sigma, \cdot)$. Ainsi, on peut construire $(\sigma^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$

en utilisant une suite de variables i.i.d. uniformes $(U^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$, et une fonction de transition $F : \mathfrak{X} \times [0, 1] \rightarrow \mathfrak{X}$ telle que $\sigma^{(n+1)} = F(\sigma^{(n)}, U^{(n)})$. Remarquons maintenant que

$$M(\sigma^{(n+1)}) = \begin{cases} M(\sigma^{(n)}) + 2 & \text{dans le cas (3),} \\ M(\sigma^{(n)}) & \text{dans les cas (1) et (4),} \\ M(\sigma^{(n)}) - 2 & \text{dans le cas (2).} \end{cases}$$

Ainsi, $M^{(n+1)} = G(M^{(n)}, U^{(n)})$ pour une certaine fonction $G : \mathfrak{Y} \times [0, 1] \rightarrow \mathfrak{Y}$. Le théorème de représentation des chaînes de Markov implique donc que $(M^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$ est une chaîne sur l'espace $\mathfrak{Y} = \{-N, -N+2, \dots, N-2, N\}$. Sa matrice de transition est :

$$\begin{aligned} Q(m, m+2) &= \frac{N-m}{2N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m+1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m+1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(m+1)\right)}; \\ Q(m, m-2) &= \frac{N+m}{2N} \frac{\exp\left(-\frac{\beta}{N}(m-1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m-1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(m-1)\right)}; \\ Q(m, m) &= \frac{N-m}{2N} \frac{\exp\left(-\frac{\beta}{N}(m+1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m+1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(m+1)\right)} \\ &\quad + \frac{N+m}{2N} \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m-1)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N}(m-1)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N}(m-1)\right)}. \end{aligned}$$

On voit facilement que Q est irréductible apériodique sur l'espace \mathfrak{Y} . Notons $\pi^{(n)}$ et $\nu^{(n)}$ les lois marginales des variables $\sigma^{(n)}$ et $M^{(n)}$. Si $M : \mathfrak{X} \rightarrow \mathfrak{Y}$ est la surjection qui associe à une configuration sa magnétisation, alors $M^{(n)} = M(\sigma^{(n)})$, donc $\nu^{(n)}$ est la mesure image de $\pi^{(n)}$ par $M : \nu^{(n)} = M_*(\pi^{(n)})$. Par passage à la limite, on en déduit que la mesure invariante $\nu_{N,\beta}$ pour la matrice Q est :

$$\nu_{N,\beta} = \lim_{n \rightarrow \infty} \nu^{(n)} = M_* \left(\lim_{n \rightarrow \infty} \pi^{(n)} \right) = M_* \mathbb{P}_{N,\beta}.$$

D'après ce que l'on a vu à la question (1), si $m \in \mathfrak{Y}$ et $m = 2k - N$, alors il y a $\binom{N}{k}$ configurations σ avec magnétisation m , et ces configurations ont pour énergie commune $H(\sigma) = -\frac{m^2}{2}$. La loi $\nu_{N,\beta}$ s'écrit donc :

$$\nu_{N,\beta}[m] = \frac{1}{Z_{N,\beta}} \binom{N}{\frac{N+m}{2}} e^{\frac{\beta m^2}{2N}}.$$

Le programme suivant implante la chaîne de Markov $(M^{(n)})_{n \in \mathbb{N}}$, et renvoie le dernier état visité :

```
def Magnetisation(N, beta, n):
    b = beta / N
    Q = {}
    for k in range(N+1):
        m = 2*k - N
        Q[(m, m+2)] = ((N - m)/(4*N)) * np.exp(b*(m + 1)) / np.cosh(b*(m + 1))
        Q[(m, m-2)] = ((N + m)/(4*N)) * np.exp(-b*(m - 1)) / np.cosh(b*(m - 1))
        Q[(m, m)] = 1 - Q[(m, m+2)] - Q[(m, m-2)]
    m = -N + 2*np.floor(N / 2)
    for _ in range(n):
        m = rand.choice([m+2, m-2, m], p=[Q[(m, m+2)], Q[(m, m-2)], Q[(m, m)]])
    return int(m)
```

(5) Pour la première formule, il suffit de remarquer que

$$\mathbb{E}\left[e^{\frac{tX_N}{N^{1/4}}}\right] = \prod_{i=1}^N \mathbb{E}\left[e^{\frac{tA_i}{N^{1/4}}}\right] = \left(\mathbb{E}\left[e^{\frac{tA_1}{N^{1/4}}}\right]\right)^N = \left(\frac{e^{\frac{t}{N^{1/4}}} + e^{-\frac{t}{N^{1/4}}}}{2}\right)^N.$$

Pour la seconde formule, partons de l'intégrale et injectons la première formule :

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

Dans l'espérance, on reconnaît la transformée de Laplace en $z = \frac{X_N}{N^{1/2}}$ d'une variable gaussienne standard, égale à $e^{\frac{(X_N)^2}{2N}}$. Ainsi,

$$\mathbb{E}\left[e^{\frac{(X_N)^2}{2N}}\right] = \sqrt{\frac{N^{1/2}}{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} \psi_N(t) dt.$$

Par ailleurs, en décomposant X_N en fonction des valeurs prises par les variables A_i , on obtient :

$$\mathbb{E}\left[e^{\frac{(X_N)^2}{2N}}\right] = \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma \in \mathfrak{X}} e^{\frac{(M(\sigma))^2}{2N}} = \frac{Z_{N,1}}{2^N}.$$

Finalement, la fonction $\log \cosh t$ a pour développement de Taylor en 0 :

$$\log \cosh t = \log\left(1 + \frac{t^2}{2} + \frac{t^4}{24}\right) = \frac{t^2}{2} + \frac{t^4}{24} - \frac{t^4}{8} + o(t^4) = \frac{t^2}{2} - \frac{t^4}{12} + o(t^4).$$

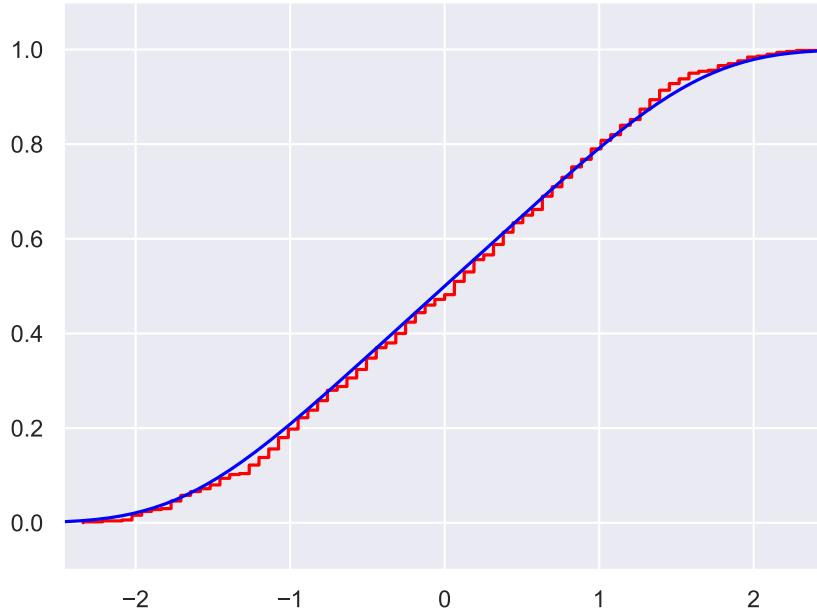
On en déduit que

$$\psi_N(t) = e^{-\frac{t^4}{12} + o_N(t^4)} \rightarrow_{N \rightarrow \infty} e^{-\frac{t^4}{12}} = \psi(t).$$

(6) Le programme suivant dessine la fonction de répartition empirique de $\frac{M_N}{N^{3/4}}$ avec $N = 100$ et $\beta = 1$, et la compare à la fonction F .

```
fig, ax = plt.subplots()
data = np.array([Magnetisation(100, 1, 100000) / 100**((3/4)) for _ in range(500)])
ax.ecdf(data, color="red")
L = max(np.absolute(data))
xx = np.linspace(-L, L, 500)
psi = (lambda x : np.exp(-x**4/12))
Z = quad(psi, -np.inf, np.inf)[0]
yy = [quad(psi, -np.inf, x)[0]/Z for x in xx]
ax.plot(xx, yy, color="blue")
ax.set_xlim(-L, L)
ax.set_ylim(-0.1, 1.1)
plt.show()
```

On obtient le dessin suivant :



Le résultat sur la limite en loi de $\frac{M(\sigma)}{N^{3/4}}$ lorsque $\beta = 1$ est donc bien confirmé par ce programme.

(7) Comme dans la question (5), on peut relier $Z_{N,\beta}$ à $\mathbb{E}[e^{\frac{\beta(X_N)^2}{2N}}]$:

$$\frac{Z_{N,\beta}}{2^N} = \frac{1}{2^N} \sum_{\sigma \in \mathfrak{X}} e^{\frac{\beta(M(\sigma))^2}{2N}} = \mathbb{E}\left[e^{\frac{\beta(X_N)^2}{2N}}\right].$$

On calcule alors sous $\mathbb{P}_{N,\beta}$:

$$\mathbb{E}\left[e^{\frac{zM_N}{N^{1/2}}}\right] = \frac{1}{Z_{N,\beta}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{X}} e^{\frac{zM(\sigma)}{N^{1/2}} + \frac{\beta(M(\sigma))^2}{2}} = \frac{\mathbb{E}\left[e^{\frac{zX_N}{N^{1/2}} + \frac{\beta(X_N)^2}{2N}}\right]}{\mathbb{E}\left[e^{\frac{\beta(X_N)^2}{2N}}\right]}.$$

On a ensuite :

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

Par le théorème central limite pour $\frac{X_N}{N^{1/2}}$, on a convergence des transformées de Laplace

$$\mathbb{E}\left[e^{\frac{(z+u\sqrt{\beta})X_N}{N^{1/2}}}\right] \rightarrow e^{\frac{(z+u\sqrt{\beta})^2}{2}}.$$

En admettant qu'on peut passer à la limite sous le signe intégral, on obtient donc :

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

La convergence en loi de $\frac{M_N}{N^{1/2}}$ vers $N(0, \frac{1}{1-\beta})$ s'en déduit. Le programme suivant permet de la vérifier :

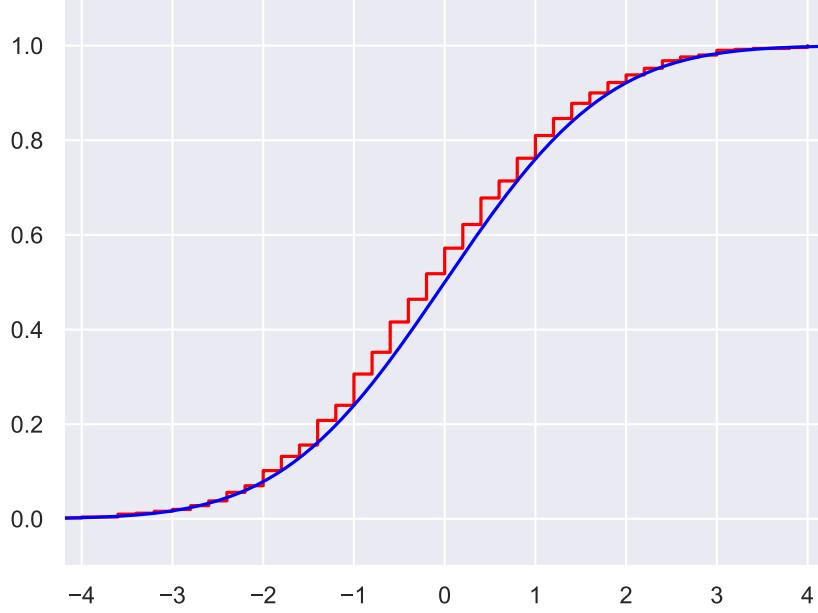
```
fig, ax = plt.subplots()
data = np.array([Magnetisation(100, 1/2, 100000) / 100**0.5 for _ in range(500)])
```

```

ax.ecdf(data, color="red")
L = max(np.absolute(data))
xx = np.linspace(-L, L, 500)
ax.plot(xx, scs.norm(0, np.sqrt(2)).cdf(xx), color="blue")
ax.set_xlim(-L, L)
ax.set_ylim(-0.1, 1.1)
plt.show()

```

On obtient le dessin suivant :



De nouveau, la convergence en loi est confirmée par cette fonction de répartition empirique.

- (8) L'inégalité vient juste du fait que $1_{(X \neq Y)} \leq d(X, Y)$, puisque d est une distance à valeurs entières. En intégrant contre une loi \mathbb{P} d'un couplage entre π_1 et π_2 , on obtient

$$\mathbb{P}[X \neq Y] \leq \mathbb{E}[d(X, Y)],$$

et le résultat s'en déduit en prenant un couplage optimal pour la distance de Wasserstein :

$$d_{\text{VT}}(\pi_1, \pi_2) \leq \mathbb{P}[X \neq Y] \leq \mathbb{E}[d(X, Y)] = d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2).$$

- (9) Supposons d'abord que $\tau = \sigma_i^*$ pour un unique site $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$; on a donc $d(\sigma, \tau) = 1$. On réalise $\sigma^{(1)} \sim P(\sigma, \cdot)$ et $\tau^{(1)} \sim P(\tau, \cdot)$ en choisissant le même site aléatoire $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$, et en utilisant une variable $U \sim \text{Unif}([0, 1])$ avec :

$$\sigma^{(1)}(k) = \begin{cases} +1 & \text{si } U \leq \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right)}, \\ -1 & \text{si } U > \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \sigma(j)\right)}, \end{cases}$$

$$\tau^{(1)}(k) = \begin{cases} +1 & \text{si } U \leq \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right)}, \\ -1 & \text{si } U > \frac{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right)}{\exp\left(\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right) + \exp\left(-\frac{\beta}{N} \sum_{j \neq k} \tau(j)\right)}. \end{cases}$$

Par symétrie de la situation, on peut supposer que $\sigma(i) = -1$ et $\tau(i) = +1$. Calculons la distance $d(\sigma^{(1)}, \tau^{(1)})$ en fonction de k et de U :

- $k \neq i$. Posons $m = M(\sigma) - \sigma(k)$, de sorte que le seuil pour la valeur de $\sigma^{(1)}(k)$ (respectivement, pour $\tau^{(1)}(k)$) est

$$\frac{\exp\left(\frac{\beta m}{N}\right)}{\exp\left(\frac{\beta m}{N}\right) + \exp\left(-\frac{\beta m}{N}\right)} \quad \left(\text{respectivement, } \frac{\exp\left(\frac{\beta(m+2)}{N}\right)}{\exp\left(\frac{\beta(m+2)}{N}\right) + \exp\left(-\frac{\beta(m+2)}{N}\right)} \right).$$

Remarquons tout de suite que la différence entre les deux seuils est plus petite en valeur absolue que $\frac{\beta}{N}$, car la fonction $x \mapsto \frac{e^x}{e^x + e^{-x}}$ est $\frac{1}{2}$ -lipschitzienne (sa dérivée est $\frac{1}{1+\cosh x}$).

Pour $j \neq i, k$, $\sigma^{(1)}(j) = \sigma(j) = \tau(j) = \tau^{(1)}(j)$. On a par ailleurs $\sigma^{(1)}(i) = \sigma(i) = -\tau(i) = -\tau^{(1)}(i)$, donc $\sigma^{(1)}$ et $\tau^{(1)}$ diffèrent en i . Il reste le cas du site k . On a $\sigma^{(1)}(k) = -\tau^{(1)}(k)$ si et seulement si U se trouve entre les deux seuils. Ainsi,

$$\mathbb{E}[d(\sigma^{(1)}, \tau^{(1)}) \mid k \neq i] = 1 + \text{différence entre les deux seuils} \leq 1 + \frac{\beta}{N}.$$

- $k = i$. Alors, le seuil est le même pour la valeur de $\sigma^{(1)}(k)$ et de $\tau^{(1)}(k)$, donc $\sigma^{(1)} = \tau^{(1)}$. On a donc :

$$\mathbb{E}[d(\sigma^{(1)}, \tau^{(1)}) \mid k = i] = 0.$$

On conclut que

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

Dans le cas général, si $d(\sigma, \tau) = d$, alors il existe une suite de configurations $\sigma^{(0)} = \sigma, \sigma^{(1)}, \dots, \sigma^{(d)} = \tau$ telles que $d(\sigma^{(a)}, \sigma^{(a+1)}) = 1$ (changer un-à-un les spins nécessaires). Par l'inégalité triangulaire,

$$\begin{aligned} d_{\text{Wasserstein}}(P(\sigma, \cdot), P(\tau, \cdot)) &\leq \sum_{a=0}^{d-1} d_{\text{Wasserstein}}(P(\sigma^{(a)}, \cdot), P(\sigma^{(a+1)}, \cdot)) \\ &\leq d \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{\beta}{N}\right). \end{aligned}$$

- (10) On choisit $\sigma^{(0)}$ suivant π_1 et $\tau^{(0)}$ suivant π_2 , de sorte que le couplage soit optimal pour la distance de Wasserstein : $\mathbb{E}[d(\sigma^{(0)}, \tau^{(0)})] = d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2)$. Puis, on choisit $\sigma^{(1)}$ suivant $P(\sigma^{(0)}, \cdot)$ et $\tau^{(1)}$ suivant $P(\tau^{(0)}, \cdot)$ avec la construction de la question précédente, et des variables k et U indépendantes de $(\sigma^{(0)}, \tau^{(0)})$. On a donc, pour toute paire de configurations (σ, τ) ,

$$\mathbb{E}[d(\sigma^{(1)}, \tau^{(1)}) \mid \sigma^{(0)} = \sigma, \tau^{(0)} = \tau] \leq \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{\beta}{N}\right) d(\sigma, \tau).$$

En réintégrant par rapport à la loi de $(\sigma^{(0)}, \tau^{(0)})$, on obtient

$$\mathbb{E}[d(\sigma^{(1)}, \tau^{(1)})] \leq \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{\beta}{N}\right) \mathbb{E}[d(\sigma^{(0)}, \tau^{(0)})] = \left(1 - \frac{1}{N}\right) \left(1 + \frac{\beta}{N}\right) d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1, \pi_2).$$

Par construction, $\sigma^{(1)}$ a loi $\pi_1 P$ et $\tau^{(1)}$ a loi $\pi_2 P$, donc l'espérance obtenue est plus grande que $d_{\text{Wasserstein}}(\pi_1 P, \pi_2 P)$. Comme $1 + x \leq e^{-x}$, on conclut que :

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

En appliquant cette inégalité n fois et en prenant $\pi_1 = \text{loi de } \sigma^{(0)} = \pi^{(0)}$ et $\pi_2 = \mathbb{P}_{N,\beta}$, on en déduit :

$$d_{\text{Wasserstein}}(\pi^{(n)}, \mathbb{P}_{N,\beta}) \leq e^{-\frac{(1-\beta)n}{N}} d_{\text{Wasserstein}}(\pi^{(0)}, \mathbb{P}_{N,\beta}) \leq N e^{-\frac{(1-\beta)n}{N}},$$

la dernière inégalité provenant du fait que la distance sur \mathfrak{X} est bornée par N . Comme la distance en variation totale est plus petite que la distance de Wasserstein, on conclut que :

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

quelque soit la loi initiale. Si $n = (1 + \varepsilon) \frac{N \log N}{1-\beta}$, on obtient :

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

Le temps de mélange est donc borné supérieurement par $\frac{N \log N}{1-\beta}$.