Méthode de Monte Carlo pour le modèle d'Ising

ex : $N = 5$

−	+	+	+	+
+	+	−	−	−
−	−	+	+	−
−	+	+	+	+
+	−	+	−	−

site X, valeur $\sigma_X = +1$

y, x

<u>Configuration σ</u>

(1) il y a N^2 sites, et 2 valeurs ± 1 par site, donc 2^{N^2} configurations possibles.

<u>ex</u> : $N = 5$, donne $2^{5^2} = 2^{25} = 33.10^6$ configurations.

Si $B = 0$, $E(\sigma) = \sum_X \sum_{Y \sim X} (-\sigma_X \sigma_Y)$

or $(-\sigma_X \sigma_Y)$ est minimal si $\sigma_X = \sigma_Y = \pm 1$ donnant

$$E(\sigma) = N^2 . \underset{\text{4 voisins par site}}{4} (-1) = -4N^2$$

pour 2 configurations : $\sigma_X = -1, \forall X$ et $\sigma_X = +1, \forall X$.

+	+	+	+
+	+	+	+
+	+	+	+
+	+	+	+

ou

−	−	−	−
−	−	−	−
−	−	−	−
−	−	−	−

② Soit σ une configuration quelconque,

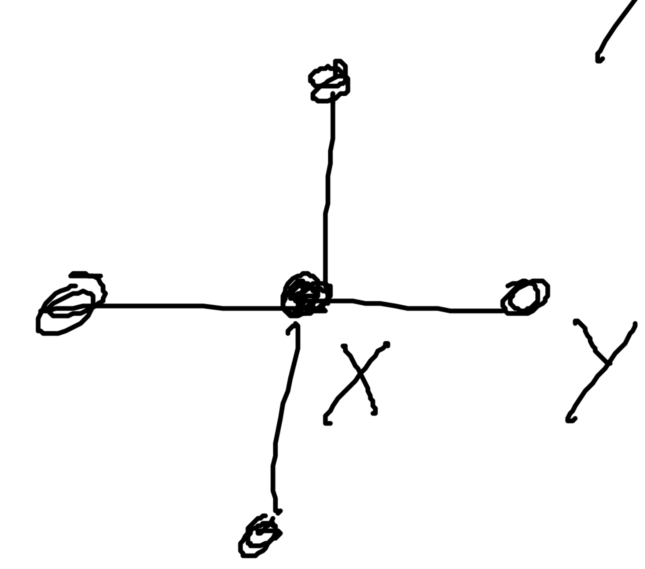
et $X \in \Lambda$ un site,

σ' : configuration tq $\begin{cases} \sigma'_Y = \sigma_Y & \text{si } Y \neq X \\ \sigma'_X = -\sigma_X \end{cases}$

donc $\sigma'_X \sigma'_Y = -\sigma_X \sigma_Y$: si $Y \neq X$
$Y \sim X$

cela concerne 4 arêtes :

notées $\mathcal{A}$



or $E(\sigma) = 2 \cdot \sum_{\text{arêtes } (X' \sim Y')} -(\sigma_{X'}\sigma_{Y'}) + \sum_{X'} B\sigma_{X'}$

car chaque arête était comptée 2 fois.

$$= 2 \cdot \sum_{\text{arêtes} \notin \mathcal{A}} -(\sigma_{X'}\sigma_{Y'}) + \Big(\sum_{X' \neq X} B\sigma_{X'}\Big)$$

$$+ 2 \cdot \sum_{Y \sim X} -(\sigma_X \sigma_Y) + B\sigma_X$$

donc $$E(\sigma') = 2 \cdot \sum_{\text{arêtes} \notin \mathcal{A}} -(\sigma_{X'}\sigma_{Y'}) + \Big(\sum_{X' \neq X} B\sigma_{X'}\Big)$$

$$+ 2 \sum_{Y \sim X} (\sigma_X \sigma_Y) - B\sigma_X$$: (signe opposé)

donc

$$E(f') - E(f) = 4\left(\sum_{y\sim x}\left(f_x f_y\right)\right) - 2 B f_x$$

$$= f_x \cdot 2\left(2\left(\sum_{y\sim x} f_y\right) - B\right)$$

- <u>Algorithme</u> d'évolution d'une configuration f.
  - on choisit $x \in \Lambda$ au hasard.
  - on calcule $\Delta E = f_x\, 2\left(2\left(\sum_{y\sim x} f_y\right) - B\right)$
  - si $\Delta E < 0$ on choisit la configuration f'

sinon (si $\Delta E \geq 0$) on choisit un nombre au hasard uniforme $\alpha \in [0,1]$,

et si $\alpha < \exp(-\beta \Delta E)$ alors on choisit f'

sinon on garde f.

(2) Soit $\mathcal{C}, \mathcal{C}'$ deux configurations quelconques.

D'après la loi d'évolution,

- si $\mathcal{C}$ et $\mathcal{C}'$ sont différents sur plus que 2 sites,
  alors $L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}} = 0$ et $L_{\mathcal{C},\mathcal{C}'} = 0$
- si $\mathcal{C}$ et $\mathcal{C}'$ sont différents seulement au site $X \in \Lambda$

car il y a N^2 sites X possibles.

alors
- si $E(\mathcal{C}') < E(\mathcal{C})$, $L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}} = \frac{1}{N^2}$

  et il n'y a pas de contribution à $L_{\mathcal{C},\mathcal{C}}$.
- sinon $L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}} = \exp\left(-\beta\left(E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C})\right)\right) \cdot \frac{1}{N^2}$

et à $L_{\mathcal{C},\mathcal{C}}$ se rajoute $\left(1 - \exp\left(-\beta\left(E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C})\right)\right)\right) \frac{1}{N^2}$

la somme de ces 2 contributions est $\frac{1}{N^2}$

a) Au total à $\mathcal{C}$ fixé,

$$\sum_{\mathcal{C}'} L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}} = \sum_{\substack{\mathcal{C}' \\ \text{qui diffère de } \mathcal{C} \\ \text{en un site } X \in \Lambda \\ \text{seulement}}} \frac{1}{N^2} = \underbrace{\sum_{X \in \Lambda}}_{N^2 \text{ termes}} \frac{1}{N^2} = 1$$

donc la matrice L est <u>stochastique</u>.

b) • Soit $p(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta E(\mathcal{C})}$: mesure de proba sur les N^2 configurations

avec $Z = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta E(\mathcal{C})}$ de sorte que $\sum_{\mathcal{C}} p(\mathcal{C}) = 1$.

on a $$L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}}\, p_{\mathcal{C}} = \begin{cases} \frac{1}{ZN^2} e^{-\beta E(\mathcal{C})} & : \text{si } E(\mathcal{C}') < E(\mathcal{C}) \\ \frac{1}{ZN^2} \left(e^{-\beta (E(\mathcal{C}') - E(\mathcal{C}))} \right) e^{-\beta E(\mathcal{C})} = \frac{1}{ZN^2} e^{-\beta E(\mathcal{C}')} & : \text{si } E(\mathcal{C}') \geq E(\mathcal{C}) \end{cases}$$

et de même

$$L_{\mathcal{C},\mathcal{C}'}\, p_{\mathcal{C}'} = \begin{cases} \frac{1}{ZN^2} e^{-\beta E(\mathcal{C}')} & \text{si } E(\mathcal{C}) < E(\mathcal{C}') \\ \frac{1}{ZN^2} e^{-\beta E(\mathcal{C})} & \text{si } E(\mathcal{C}) \geq E(\mathcal{C}') \end{cases}$$

donc $L_{\mathcal{C},\mathcal{C}'}\, p_{\mathcal{C}'} = L_{\mathcal{C}',\mathcal{C}}\, p_{\mathcal{C}}$, $\forall \mathcal{C}, \mathcal{C}'$.

La matrice L est <u>réversible</u>.

Cela implique que $Lp = p$ car :

$$(Lp)_{\mathcal{C}'} = \sum_{\mathcal{C}} L_{\mathcal{C}'\mathcal{C}}\, p_{\mathcal{C}} \underset{\text{réversible}}{=} \underbrace{\left(\sum_{\mathcal{C}} L_{\mathcal{C}\mathcal{C}'} \right)}_{1 \text{ car stochastique}} p_{\mathcal{C}'} = p_{\mathcal{C}'}$$

c) Il y a N^2 sites, donc au temps $n = N^2$ (et après) il y a une probabilité non nulle $(L^n)_{f',f}$ de transiter entre f et f', pour n'importe quelles configurations f, f'.