Introduction au domaine de recherche
La marche aléatoire autoévitante

Benoît Laslier

14 décembre 2011

Table des matières

La physique statistique s'intéresse aux propriétés émergeant à grande échelle de systèmes physiques gouvernés par des interactions à petite échelle. L'application originelle est par exemple l'étude d'un gaz dans son ensemble en partant uniquement de la connaissance des lois de Newton et Maxwell pour des atomes individuels. Ce cadre offre deux principaux types de développement mathématique : travailler directement sur le système dynamique déterministe ou admettre qu'il est ergodique et partir de la mesure stationnaire. Dans les deux cas, l'idée de propriété émergeant à grande échelle se traduit mathématiquement en se concentrant sur la caractérisation de la limite du système quand le nombre de particule tend vers l'infini. Ici nous aborderons uniquement la deuxième démarche.

Nous nous intéressons à un modèle décrivant un unique polymère flottant dans une solution. Celui ci peut se tordre assez librement mais deux monomères ne peuvent bien sur pas se chevaucher. Bien que cette situation physique ne soit pas très intéressante en elle même, le modèle sous-jacent est très riche. C'est en particulier l'un des seuls modèle présentant des interactions de type “volume exclu” (le fait que deux monomères ne puisse pas s'interpénétrer) que l'on sache bien étudier.

1 Définition du modèle

1.1 La marche aléatoire autoévitante

Rappelons notre modèle physique : un polymère est une longue chaîne d'éléments élémentaires, appelés monomères, tous identiques. Un polymère est souple mais deux monomères ne peuvent pas se superposer. Pour des raisons pratiques nous utiliserons un modèle discret inclus dans $\mathbb{Z}^d$ et nous ne nous limiterons pas à $d = 3$.

Définition 1. Une marche ω de longueur n pour le modèle de plus proche voisin est une suite finie dans $\mathbb{Z}^d$, $\omega = (\omega(0), \ldots, \omega(n-1))$, telle que pour tout i, $\|\omega(i) - \omega(i-1)\|_1 = 1$. Nous notons $W_n(a, b)$ l'ensemble des marches de longueur n telles que $\omega(0) = a$ et $\omega(n-1) = b$ ainsi que $W_n = \cup_{x\in\mathbb{Z}^d} W_n(0, x)$ l'ensemble des marches partant de 0.

Définition 2. Une marche ω est dite autoévitante si $\forall\ i \neq j$, $\omega(i) \neq \omega(j)$.

Nous considérerons toujours ici le polymère comme infiniment souple. La mesure d'équilibre d'un polymère en suspension dans un liquide est alors uniforme sur tous les états possibles ce qui conduit aux définitions suivantes.

Définition 3. Soit $\mathbb{Q}_n^{(0)}$ la mesure uniforme sur W_n l'ensemble des marches de longueur n partant de 0. Soit $\mathbb{Q}_n^{(1)}$ la mesure uniforme sur les marches autoévitantes de longueur n partant de 0.

$\mathbb{Q}_n^{(0)}$ est souvent appelée marche aléatoire simple et $\mathbb{Q}_n^{(1)}$ marche aléatoire autoévitante.

Nous aurons besoin dans la suite de deux généralisations.

1.2 Marche faiblement autoévitante et marche étalée

La première généralisation porte sur la définition d'une marche.

Définition 4. Soit $L \in \mathbb{N}^*$, une marche étalée de paramètre L et de longueur n est une suite finie $\omega = (\omega(0), \ldots, \omega(n-1))$, telle que pour tout i, $\|\omega(i) - \omega(i-1)\|_\infty \leqslant L$.

Remarque. Cette définition est bien sûre à comparer avec la définition 1. Non seulement une marche étalée peut parcourir une distance supérieure à 1 mais il est aussi habituel de changer de norme, ce qui revient à autoriser les déplacements en diagonale.

La deuxième généralisation consiste à définir des modèles intermédiaires entre la marche simple et la marche "strictement" autoévitante.

Définition 5. Pour $i, j \in \mathbb{N}$, soit $U_{ij}(\omega) = 1$ si $\omega(i) = \omega(j)$ et $U_{ij}(\omega) = 0$ sinon. Pour $\lambda \in [0,1]$ soit $\mathbb{Q}^{(\lambda)}$ la mesure de probabilité sur W_n définie par :

$$\mathbb{Q}_n^{(\lambda)}(\{\omega\}) = \frac{1}{c_n^{(\lambda)}} \prod_{i<j} (1 - \lambda U_{ij}(\omega)) \tag{1}$$

où

$$c_n^{(\lambda)} = \sum_{\omega \in W_n} \prod_{i<j} (1 - \lambda U_{ij}(\omega)) \tag{2}$$

est la constante de normalisation appropriée. Cette mesure est appelée marche aléatoire faiblement autoévitante de paramètre λ. Comme pour W_n, nous notons également $c_n^{(\lambda)}(x) = \sum_{\omega \in W_n(0,x)} \prod_{i<j} (1 - \lambda U_{ij}(\omega))$.

Remarque. Les notations sont cohérentes : pour $\lambda = 0$ le produit est toujours égal à 1 et l'on retrouve la marche simple tandis que pour $\lambda = 1$ le produit devient nul dès que l'un des U_{ij} est égal à 1 donc les seuls termes restant sont les marches autoévitantes qui ont alors un poids 1. Ainsi $c_n^{(0)} = (2d)^n$ est le nombre de marches de longueur n et $c_n^{(1)}$ est le nombre de marches autoévitantes.

Remarque. Il est bien sur possible de combiner les deux généralisations et de considérer des marches étalées faiblement autoévitantes.

1.3 Sous-multiplicativité

Une question usuelle en physique statistique est le calcul de l'énergie libre ou de l'entropie d'un système. Dans notre cas cela équivaut à étudier le comportement asymptotique des c_n. La première étape consiste à montrer que pour $\lambda > 0$, c_n croit exponentiellement avec n comme pour le cas trivial $\lambda = 0$.

Théorème 6. *Soit* $\lambda \in [0, 1]$*,* $d \in \mathbb{N}$ *(et* L *pour le modèle étendu). La suite* $c_n^{(\lambda)}$ *est sous multiplicative, i.e.*

$$\forall n, m \ c_{n+m}^{(\lambda)} \leqslant c_n^{(\lambda)} c_m^{(\lambda)}. \tag{3}$$

De plus on a la limite suivante :

$$\lim_{n \to \infty} \log(c_n^{(\lambda)})/n = \mu_{\lambda,d,L}. \tag{4}$$

Pour la marche strictement autoévitante ($\lambda = 1$*) et le modèle plus proche voisin,* μ_d *est appelé constante de connectivité.*

Démonstration. En décomposant une marche de longueur $n + m$ on obtient deux marches de longueur n et m et d'après (2) le poids de la grande marche est inférieur aux produits des poids car on ajoute les termes d'exclusion entre les deux parties. Ceci prouve la sous multiplicativité. On montre alors facilement que $\log(c_n^{(\lambda)})/n$ est une suite décroissante positive donc converge. □

2 Résultats et conjectures

2.1 Calcul de μ

S'il est possible d'obtenir des valeurs approchées de μ_λ à partir d'énumérations systématiques de toutes les marches, peu de résultats exacts sont connus. En particulier la valeur exacte de μ_1 n'est connue que dans un cas [1] :

Théorème 7 (Duminil-Copin et Smirnov)**.** *Pour le réseau hexagonal plan (ou réseau en nid d'abeille) et le modèle plus proche voisin, on a :*

$$\mu_1 = \sqrt{2 + \sqrt{2}} \tag{5}$$

Le meilleur résultat pour $\mathbb{Z}^2$ a été obtenu par énumération de portions de trajectoires compatibles entre elles pour la borne inférieure (Jensen [7]) et par comparaison avec des marches ayant une mémoire finie pour la borne supérieure (Pönitz et Tittmann [9]) :

Théorème 8. *Pour le modèle de plus proche voisin dans $\mathbb{Z}^2$, on a :*

$$\mu_1 \in [2.625622\ ;\ 2.679193]. \tag{6}$$

Enfin Hara et Slade ont découvert un développement asymptotique quand $d \to \infty$ [6] :

Théorème 9. *Pour les modèles du plus proche voisin dans $\mathbb{Z}^d$, il existe une suite d'entiers $a_i \in \mathbb{Z}$, calculable explicitement, tels que pour tout $M \in \mathbb{N}$,*

$$\mu_1(d) = a_{-1}(2d) + \ldots + a_M(2d)^{-M} + O(d^{-M-1}) \tag{7}$$

quand d tend vers l'infini. Les premiers termes sont : 1, -1, -3, -16, -102, -729.

Remarque. Les termes sont de signes quelconques, le dixième terme est positif par exemple. Bien que cela n'ait pas été démontré, il semble que la série des a_i ait un rayon de convergence nul. Il devrait néanmoins être possible de retrouver la valeur de $\mu(d)$ à partir des a_i à l'aide de sommes de Borel mais cela nécessiterait d'étendre la définition de μ à des valeurs complexe de d ce qui n'a pas encore été réussi.

Nous pouvons aussi noter ici qu'il n'a pas encore été prouvé que $\frac{c_{n+1}^{(\lambda)}}{c_n^{(\lambda)}} \to \mu_\lambda$ pour $d = 2, 3, 4$ même si Kesten [8] a montré que $\frac{c_{n+2}^{(\lambda)}}{c_n(\lambda)} \to \mu_\lambda^2$.

2.2 Exposants critiques et universalité

Paradoxalement la situation semble plus claire pour l'ordre suivant dans le développement asymptotique de $c_n^{(\lambda)}$: une conjecture donne un équivalent.

Conjecture 10. *Soit $\lambda \in]0,1]$ et $L, d \in \mathbb{N}$. Pour le modèle étalé comme pour le plus proche voisin, il existe A, μ et γ tels que l'on ait l'équivalent :*

$$c_n^{(\lambda)} \sim A\mu^n n^{\gamma-1} \tag{8}$$

où A et μ dépendent de λ, L et d mais γ ne dépend que de d. Plus précisément :

$$\gamma = \begin{cases} 1, & d = 1\,; \\ \frac{43}{32}, & d = 2\,; \\ 1.16\ldots\ , & d = 3; \\ 1 \textit{ avec correction logarithmique}, & d = 4; \\ 1, & d \geqslant 5. \end{cases} \tag{9}$$

Remarque. Pour la marche aléatoire simple, $\lambda = 0$, nous connaissons le résultat exact qui est $\gamma = 1$ quel que soit la dimension.

Le fait que γ ne dépende ni de λ ni de L est a priori étonnant. C'est en fait un cas particulier du concept d'universalité des exposants critiques. On suppose qu'il existe un objet continu limite vers lequel convergerait la marche aléatoire autoévitante au même sens que la marche aléatoire simple converge vers le mouvement brownien. Ce "mouvement brownien autoévitant" serait unique comme le brownien standard ce qui implique que toutes les définitions de marches discrètes autoévitantes aurait une même limite. γ est sensé être caractéristique uniquement de la limite et c'est pour cela qu'il ne doit pas dépendre de L et λ.

La valeur $\gamma = 1$ pour $d \geqslant 4$ est en fait une indication que pour ces dimension la limite continue de la marche aléatoire autoévitante est le mouvement brownien standard. En effet c'est un résultat usuel de calcul stochastique qu'à partir de $d = 4$, le mouvement brownien standard n'a aucun point double.

Pour étudier les exposants critiques il est utile de définir la fonction génératrice :

$$G_z^{(\lambda)}(x) = \sum_n c_n^{(\lambda)}(x) z^n \tag{10}$$

et la susceptibilité :

$$\xi_\lambda(z) = \sum_x G_z^{(\lambda)}(x) = \sum_n c_n^{(\lambda)} z^n. \tag{11}$$

Ces deux fonctions sont clairement holomorphes en z et le théorème 6 montre que le rayon de convergence de ξ est $z_c = 1/\mu_\lambda$. G permet d'introduire un nouvel exposant critique lié au comportement spatial du modèle et ξ permet de retrouver γ.

Conjecture 11. *Pour $d \geqslant 2$, quand $x \to \infty$,*

$$G_{z_c}(x) \sim \frac{cst}{x^{d-2+\eta}} \tag{12}$$

où η ne dépend que de la dimension. La valeur de η est conjecturée pour $d \neq 3$ et en particulier $\eta = 0$ pour $d \geqslant 4$.

Conjecture 12. *ξ_λ possède l'équivalent suivant quand $z \to z_c$:*

$$\xi_\lambda(z) \sim \frac{cst}{(1 - z/z_c)^\gamma} \tag{13}$$

Pour ce qui est des résultats prouvés, les cas $d \geqslant 5$ sont bien compris grâce aux théorèmes suivants qui montrent qu'effectivement la marche autoévitante converge vers le mouvement Brownien et a les exposants critiques correspondant [3, 4, 5].

Théorème 13 (Hara et Slade)**.** *Soit $d \geqslant 5$. Nous considérons la marche aléatoire autoévitante sur $\mathbb{Z}^d$. Il existe des constantes $A, D, \epsilon > 0$ telles que :*

$$c_n^1 = A\mu^n(1 + O(n^{-\epsilon})) \tag{14}$$

$$\left(\frac{\omega(\lfloor nt \rfloor)}{\sqrt{Dn}}\right)_{t \geqslant 0} \to (B_t)_{t \geqslant 0} \tag{15}$$

où B_t est un mouvement brownien et la convergence est en loi.

Théorème 14 (Hara)**.** *Soit $d \geqslant 5$. Nous considérons la marche aléatoire autoévitante sur $\mathbb{Z}^d$. Il existe des constantes $c, \epsilon > 0$ telles que*

$$G_{z_c}(x) = \frac{c}{|x|^{d-2}}(1 + O(|x|^{-\epsilon})) \tag{16}$$

Ces deux résultats ont été obtenus à l'aide d'une technique appelée “lace expansion” qui malheureusement ne s'applique pas en dimension 4 ou moins.

Pour la dimension 4, Brydges et Slade on annoncé le résultat suivant :

Théorème 15. *Soit $d \geqslant 4$, il existe λ_{max} tel que pour tout $\lambda \in [0, \lambda_{max}]$, pour le modèle étalé pouvu que L soit assez grand :*

$$G_{z_c}(x) = \frac{c}{|x|^{d-2}}(1 + o(1)) \tag{17}$$

La méthode utilisée ici est très différente et s'appelle le groupe de renormalisation. Nous allons maintenant en exposer succinctement les grandes lignes.

3 Une méthode d'analyse : le groupe de renormalisation

Nous présentons ici une méthode ayant permis d'obtenir des résultats en dimension 4 ou plus. Bien qu'encore mal comprise mathématiquement, les physiciens l'utilisent depuis longtemps et elle est à l'origine de nombreuses conjectures. De plus elle n'est pas restreinte à la marche aléatoire autoévitante ou à des modèles proches mais devrait s'appliquer à une très grande variété de problèmes.

3.1 Représentation intégrale

La première étape consiste à réécrire G et ξ sous forme d'intégrales de champs gaussiens. Un champ gaussien est un ensemble de variables gaussiennes indexées par $\mathbb{Z}^d$. Il a été remarqué que le carré d'un champ gaussien peut être vu comme obtenu à partir d'un ensemble de boucles aléatoires et que cela fournis une expression sous formes d'intégrale gaussienne de la fonction génératrice de l'ensemble de boucle aléatoire. On s'est ensuite aperçu que l'ajout de variables anticommutatives utilisées habituellement en physique pour les fermions permet d'éliminer les termes de boucles et ainsi d'obtenir l'expression suivante :

$$G_z^{(1)}(x) = \int e^{S_C} \bar{\phi}_0 \phi_x \prod_{y \neq 0,x} (1 + \bar{\phi}_y \phi_y + \bar{\psi}_y \psi_y) \tag{18}$$

où les ϕ sont des variables habituelles (bosons) complexes et les ψ sont des variables anticommutatives associées (fermions), $S_C = \phi C^{-1} \bar{\phi} + \psi C^{-1} \bar{\psi}$.

Dans cette expression, C est une généralisation de la matrice de covariance d'une famille de variables gaussiennes et donc le termes e^{S_C} est une généralisation d'une mesure gaussienne. Dans l'heuristique qui suit nous négligerons la différence entre bosons et fermions et nous ferons comme si les intégrales était de simples espérances par rapport à des variables gaussiennes, $G(x) = \mathbb{E}_C[\bar{\phi}_0 \phi_x \prod_{y \neq 0,x} (1 + \bar{\phi}_y \phi_y + \bar{\psi}_y \psi_y)] = \mathbb{E}_C[F(\phi, \psi)]$.

Il faut noter ici que la possibilité de représenter la fonction génératrice comme une intégrale gaussienne n'est pas spécifique à la marche aléatoire autoévitante mais qu'au contraire de très nombreux modèles le permettent. Certaines intégrales de ce type sont aussi intéressante pour elles mêmes dans le cadre de la théorie quantique des champs. C'est ce qui a permis aux physiciens d'utiliser le groupe de renormalisation pour autant de problèmes différents.

3.2 Décomposition de la covariance et changement d'échelle

La principale difficulté dans l'étude de ces intégrales est que la matrice de covariance C possède une portée infinie. L'idée du groupe de renormalisation est de contourner ce problème en remplaçant le champs initial de covariance C par une somme de champs de covariances C_i telles que chaque C_i ait une portée fini et que $C = \sum C_i$. Ainsi l'intégrale se réécrit comme la limite de la suite d'espérances conditionnelles :

$$G_{i+1}(x) = \mathbb{E}\Big[\dots \mathbb{E}\Big[\mathbb{E}\big[F(\sum \phi_i, \sum \psi_i)|\phi_1\big]\Big|\phi_2\Big] \dots \Big]. \tag{19}$$

C'est cette suite que l'on nomme groupe de renormalisation (en fait semi-groupe serait plus approprié). L'étude consiste à exprimer les espérances conditionnelles successives comme un système dynamique portant sur l'intégrande $F = F_0,\ F_{i+1} = \mathbb{E}_{C_i}[F_i|\phi_0, \dots \phi_{i-1}]$. Des arguments physiques heuristiques indiquent que le système dynamique devrait normalement converger vers un terme ne dépendant que de la limite continue du modèle.

Il faut noter ici qu'il n'est en général pas possible d'étudier le système dynamique de façon exacte car les F_i ont alors tendance à devenir de plus en plus complexes et singulières. Il est donc nécessaire de procéder à des approximations à chaque étape pour conserver des fonctions simples. Par exemple pour la preuve du théorème 15 on réalise un développement limité par rapport à λ pour ne travailler qu'avec des expressions polynômiales de degré borné. Cependant cela impose de contrôler la dynamique des termes d'erreur. C'est là que réside à l'heure actuelle la principale difficulté pour mettre en pratique la méthode.

Références

[1] Hp. Duminil-Copin and S. Smirnov 2010. The connective constant of the hexagonal lattice equals $\sqrt{2+\sqrt{2}}$. *arXiv :1007.0575*

[2] B.T. Graham, 2010. Borel-type bounds for the self-avoiding walk connective constant, *J. Phys. A : Math. Theor.* **43**

[3] T. Hara, 2008 Decay of correlations in nearest-neighbor self-avoiding walk, percolation, lattice trees and animals, *Ann. Probab.* **36**

[4] T. Hara and G. Slade, 1992. Self-avoiding walk in ¯ve or more dimensions. I. The critical behaviour, *Commun. Math. Phys.* **147**

[5] T. Hara and G. Slade, 1992. The lace expansion for self-avoiding walk in ¯ve or more dimensions, *Reviews in Math. Phys.* **4**

[6] T. Hara and G. Slade, 1995. The self-avoiding-walk and percolation critical points in high dimensions, *Combin. Probab. Comput.* **4**

[7] Jensen, I. 2004. Improved lower bounds on the connective constants for two-dimensional self-avoiding walks. *J. Phys. A : Math. Gen.* **37** 11521—11529

[8] H. Kesten, 1963. On the number of self-avoiding walks. *J. Math. Phys.* **4**

[9] A. Pönitz and P. Tittmann. 2000. Improved upper bounds for self-avoiding walks in $\mathbb{Z}^d$. *Electron. J. Combin.* **7**