

Ecole Doctorale STIM
Sciences et Technologies de l'In-
formation et des Matériaux.

Spécialité : Mathématiques Fondamentales
et Appliquées.
Laboratoire : Jean Leray.
Equipe : Mathématiques Appliquées.

Polymères dirigés en environnement aléatoire

Alain CAMANES

Mél : camanes-a@univ-nantes.fr

Directeur de thèse : Philippe CARMONA

Résumé : Issus de modèles de physique statistique, les polymères dirigés ont été introduits par J.Z. Imbrie et T. Spencer [IS88]. Nous présentons dans cet article une liste non exhaustive de résultats et conjectures formulés pour ce modèle.

Mots clés : *J-Doc 2007, Mathématiques, Probabilités, Processus aléatoires, Physique statistique, Polymères dirigés.*

Introduction : Le modèle

Description intuitive

Inspirés de la physique statistique, l'idée de ces travaux est l'étude mathématique d'un *polymère* (une suite de monomères hydrophiles) qui interagit avec son milieu (un mélange d'huile et d'eau). Nous supposons que le polymère est

- constitué d'une chaîne de monomères régulièrement espacés,
- autovitant : il se *déroule* dans une direction privilégiée, le polymère est dit *dirigé*.

Cette dernière condition permet de mettre en évidence une dimension particulière pour le polymère. Par analogie avec la théorie des processus, nous qualifions cette dimension de *temporelle* et regardons ainsi tout polymère comme un chemin (cf. figure 1).

Pour modéliser les interactions du polymère avec son milieu, nous considérons que ce dernier est aléatoire. Nous supposons que la caractéristique de tout point de l'environnement est indépendante de sa position.

Après avoir donné un cadre mathématique à ces définitions, nous présenterons un aperçu non exhaustif des résultats démontrés ainsi que des conjectures formulées par les physiciens et qui restent à ce jour non prouvées.

Formalisme mathématique

Nous présentons ici le modèle de polymère dirigé introduit par J.Z. Imbrie et T. Spencer [IS88].

La direction suivant laquelle le polymère se déroule est appelée direction temporelle. Le polymère évolue sur le réseau \mathbb{Z}^d . Nous notons ainsi tout polymère ω comme une suite de points $\{\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_n\} \in (\mathbb{Z}^d)^n$ satisfaisant $\omega_0 = 0$, $\|\omega_{i+1} - \omega_i\|_1 = 1$, $i \in \{0, \dots, n-1\}$ (cf. figure 1).

En chaque point x de \mathbb{Z}^d et à tout instant n l'environnement a pour valeur une variable aléatoire notée $g(n, x)$. Nous supposons les variables aléatoires $(g(n, x))_{n \in \mathbb{N}, x \in \mathbb{Z}^d}$ indépendantes et identiquement distribuées. La valeur de l'environnement modélise le *type* de molécule présente en tout point du milieu : élevée pour une particule d'eau, faible pour une particule d'huile.

Nous noterons par la suite \mathbf{P} la mesure de probabilité uniforme sur l'ensemble des chemins de polymères de longueur n et \mathbf{Q} la mesure de probabilité sur l'environnement.

A tout polymère nous associons son énergie, appelée *hamiltonien*, comme étant la somme des valeurs des sites de l'environnement occupés par le polymère,

$$H_n(\omega) = \sum_{i=1}^n g(i, \omega_i).$$

Nous remarquons que plus le polymère occupe de sites où de l'eau est présente, plus l'hamiltonien est grand. Notre polymère étant hydrophile, nous cherchons à maximiser cet hamiltonien en tenant compte

d'un dernier paramètre : la *température* T . Nous définissons pour cela le poids de Boltzmann du polymère comme étant

$$b_n(\omega) = e^{\beta H_n(\omega)}, \text{ où } \beta = 1/T.$$

Plus la température est grande, moins le polymère est sensible à son environnement.

Nous remarquons que pour $\beta = 0$ l'évolution du polymère ne dépend pas des valeurs de l'environnement, tous les chemins ont le même poids de Boltzmann. Le polymère se comporte comme une *marche aléatoire* équilibrée de dimension 1. Ce comportement de marche aléatoire est-il conservé lorsque β est petit ? Par ailleurs, lorsque $\beta = +\infty$, on retrouve la notion de percolation dirigée qui a fait l'objet de nombreux travaux en probabilités : le polymère choisit uniquement les chemins qui maximisent l'hamiltonien.

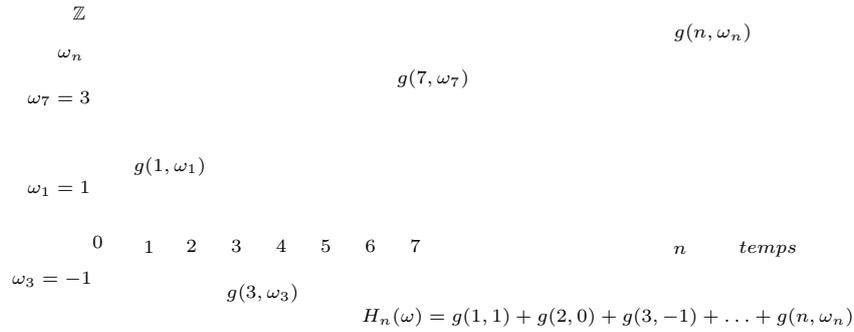


FIG. 1 – Polymère dirigé en dimension 1

Nous nous intéresserons par la suite aux valeurs des poids de Boltzmann lorsque la longueur du polymère est grande, ce qui revient à considérer un nombre de monomères de plus en plus grand et un écart entre ceux-ci de plus en plus petit.

1 Le comportement du polymère

1.1 La fonction de partition : Faible et fort désordre

On s'intéresse tout d'abord à la moyenne des poids de Boltzmann. Nous définissons ainsi la *fonction de partition* renormalisée du modèle

$$W_n(\beta) = \mathbf{P} \left[e^{\beta H_n(\omega) - n\lambda(\beta)} \right],$$

où $\lambda(\beta) = \ln \mathbf{Q}[e^{\beta g}]$, de manière à avoir $\mathbf{Q}(W_n) = 1$.

Lorsque $\beta = 0$, on remarque que $W_n(0) = 1 > 0$ pour tout entier n .

Théorème 1.1. [Bol89],[CY06]

1. Il existe une variable aléatoire W_∞ telle que

$$W_n \rightarrow W_\infty \text{ presque sûrement.}$$

2. La variable aléatoire W_∞ satisfait une loi du 0 – 1, i.e.

$$\mathbf{Q}(W_\infty = 0) \in \{0, 1\}.$$

3. La fonction $\beta \mapsto \mathbf{Q}[W_\infty(\beta)]$ est décroissante pour tout $\theta \in (0, 1)$.

4. Il existe une constante $\beta_c^{WD} \in (0, +\infty]$ telle que

$$\beta_c = \sup \{ \beta; W_\infty(\beta) > 0 \text{ presque sûrement} \}.$$

On appelle zone de *faible désordre* la zone $(0, \beta_c^{WD})$ ($W_\infty > 0$ et les impuretés du milieu n'affectent pas la forme du polymère, par analogie au cas $\beta = 0$) et zone de *fort désordre* la zone $(\beta_c^{WD}, +\infty)$. Une des questions majeures est d'identifier la *température critique* qui sépare ces zones. En dimension 1 et 2, nous savons (cf. [CH02]) que $\beta_c^{WD} = 0$. Cela signifie que dès que la température est strictement positive, le comportement du polymère est affecté par les irrégularités du milieu. En dimension plus grande, pour certains types d'environnement, nous savons que $0 < \beta_c^{WD} < +\infty$.

On peut également remarquer que l'on ne connaît pas le comportement de $W_\infty(\beta_c)$.

Une des caractéristiques de la fonction de partition est qu'elle vaut toujours 1 en moyenne mais tend vers 0 presque sûrement dans la zone de fort désordre s'éloignant ainsi de sa valeur moyenne ; ceci rend son étude assez difficile. On introduit la notion d'énergie libre qui, comme nous le verrons dans la partie suivante, a tendance à rester proche de sa valeur moyenne.

1.2 L'énergie libre : Très faible et très fort désordre

On définit l'énergie libre du système comme étant

$$p_n(\beta) = \frac{1}{n} \ln W_n(\beta).$$

Théorème 1.2. [CY06]

1. Il existe une fonction p telle que

$$p_n(\beta) \rightarrow p(\beta) \text{ presque sûrement et dans } L^1.$$

2. Inégalité de concentration : pour tout $\nu > 1/2$, il existe $n_0 = n_0(\beta, \nu) \in \mathbb{N}$ tel que pour tout $n \geq n_0$,

$$\mathbf{P}(|\ln W_n - Q \ln W_n| \geq n^\nu) \leq e^{-\frac{2\nu-1}{4n^3}}.$$

3. La fonction $\beta \mapsto p(\beta)$ est décroissante.

4. Il existe une constante $\beta_c \in (0, +\infty]$ telle que $p(\beta) = 0$ si et seulement si $\beta < \beta_c$.

On appelle zone de très faible désordre la zone $(0, \beta_c)$ et zone de très fort désordre la zone $(\beta_c, +\infty)$. Identifier précisément la limite entre ces deux zones demeure une question ouverte. En dimension 1, nous savons que $\beta_c = 0$ (cf. [CV05]).

Nous pouvons remarquer que le très fort désordre implique le fort désordre et ainsi $\beta_c^{WD} \leq \beta_c$ (cf. figure 2). Les physiciens ont conjecturé que quel que soit l'environnement étudié et pour toute dimension, $\beta_c = \beta_c^{WD}$. Ce problème reste une question ouverte en dimension supérieure ou égale à 2.

Tableau récapitulatif

Les propriétés caractéristiques des quantités introduites précédemment ainsi que la conjecture principale sont résumées dans le tableau suivant.

	$W_\infty > 0$	$W_\infty = 0$
$d = 1, \beta_c^{WD} = \beta_c = 0$		β_c
$d = 2, \beta_c^{WD} = 0$	0	β_c^{WD}
$d \geq 2, \beta_c \stackrel{??}{=} \beta_c^{WD}$	$p(\beta) = 0$	$p(\beta) < 0$

FIG. 2 – Comportement du polymère

2 Vers une meilleure compréhension des phénomènes

2.1 L'uniforme intégrabilité

Pour mieux comprendre la borne β_c^{WD} , nous introduisons l'uniforme intégrabilité. En effet, l'uniforme intégrabilité de la suite $(W_n)_{n \in \mathbb{N}}$ et la propriété $W_\infty > 0$ p.s. sont équivalentes. Suivant un article de B. Derrida et M.R. Evans, nous nous sommes intéressés à la propriété $\sup_n \mathbf{Q}[W_n^\alpha] < +\infty$ pour $\alpha \in (1, 2)$. Si cette propriété est satisfaite, $(W_n)_{n \in \mathbb{N}}$ est uniformément intégrable ce qui nous permet d'obtenir une borne inférieure sur β_c^{WD} , notée β_α . E. Bolthausen a démontré ce résultat lorsque $\alpha = 2$ (cf. [Bol89]). Nous avons établi le théorème suivant.

Théorème 2.1. [DE92][CC07] Soit $d \geq 3$. Il existe β_{α_c} telle que $\beta_2 < \beta_{\alpha_c} < \beta_c^{WD}$ si et seulement si

$$h_\nu < h_Q,$$

où $h_Q = Q \left[\ln \frac{e^{2\beta_2 g}}{Q[e^{2\beta_2 g}]} \frac{e^{2\beta_2 g}}{Q[e^{2\beta_2 g}]} \right]$, $h_\nu = - \sum_{t,x} \ln \frac{P(t,x)}{\rho} \frac{P(t,x)}{\rho}$,
pour $P(t,x) = P(\omega_j^1 \neq \omega_j^2, 1 \leq j < t, \omega_t^1 = \omega_t^2 = x)$ et $\rho = \sum_{t,x} P(t,x)$.

La quantité $P(t,x)$ désigne la probabilité que deux marches aléatoires indépendantes ω_1, ω_2 issues de 0 se rencontrent pour la première fois à l'instant t , au point x . Les quantités h_Q et h_ν représentent respectivement l'entropie de l'environnement et l'entropie de la mesure définie par les $P(t,x)$. Une meilleure compréhension de cette dernière quantité permettrait d'affiner ce théorème.

2.2 Les exposants caractéristiques

Il serait intéressant d'obtenir des résultats sur la forme du polymère, par exemple connaître la valeur typique de son maximum. C'est dans cette optique qu'ont été introduits les *exposants caractéristiques*.

Définition 2.1. On définit l'exposant de *volume* ζ

$$\zeta = \inf\{\alpha > 0; \mu_n(\mathbb{1}_{\max_{k \leq n} |S_k| \leq n^\alpha}) \rightarrow 1 \text{ en } \mathbf{Q}\text{-probabilité}\},$$

et l'exposant de *fluctuation* χ de l'énergie libre

$$\chi = \sup\{\alpha > 0; \text{Var}(\ln W_n) \geq n^{2\alpha} \text{ pour } n \text{ assez grand}\},$$

où $\mu_n(\cdot) = \mathbf{P}[\cdot e^{\beta H_n - n\lambda(\beta)}] / W_n$ désigne la *mesure de Gibbs* du système.

Peu de propriétés sont connues sur ces exposants. Les physiciens conjecturent que ces exposants sont reliés par la relation $\chi = 2\zeta - 1$ quelles que soient la dimension et la température. Cependant, ce résultat n'a pas été démontré mathématiquement. Seules des bornes sur ces exposants ont été obtenues pour des modèles voisins de celui décrit dans cet article.

2.3 Le modèle en temps continu

Les processus aléatoires en temps continu sont parfois plus faciles à manipuler que ceux en temps discret. K. Itô a montré une formule permettant d'effectuer des calculs de manière assez élémentaire dans ce cadre. C'est pourquoi nous considérons un modèle de polymère où l'environnement est en tout point de $x \in \mathbb{Z}^d$ un mouvement brownien $(B_x(t))_{t \geq 0}$ et la trajectoire ω est un processus qui saute d'un point de \mathbb{Z}^d à un point voisin à des intervalles de temps exponentiels. Z_t satisfait alors à l'équation différentielle stochastique suivante,

$$dZ_t(x) = \Delta Z_t(\cdot)(x) dt + \beta Z_t(x) dB_x(t),$$

où nous avons noté $Z_t(x) = \mathbf{Q} \left[e^{\beta H_t(\omega) - t\beta^2/2} \mathbb{1}_{\omega_t=x} \right]$. Cette vision du modèle a permis de mieux comprendre certains phénomènes en diminuant la technicité des preuves par rapport à celles effectuées dans un cadre discret (cf. [CH06]).

Références

- [Bol89] E. BOLTHAUSEN : A note on the diffusion of directed polymers in a random environment. *Commun. Math. Phys.*, 123(4):529–534, 1989.
- [CC07] A. CAMANES et Ph. CARMONA : Uniform integrability and critical temperature in directed polymers. *preprint*, 2007.
- [CH02] Ph. CARMONA et Y. HU : On the partition function of a directed polymer in a Gaussian random environment. *Probab. Theory Relat. Fields*, 124(3):431–457, 2002.
- [CH06] Ph. CARMONA et Y. HU : Strong disorder implies strong localization for directed polymers in a random environment. *ALEA*, 2:217–229, 2006.
- [CV05] F. COMETS et V. VARGAS : Majorizing multiplicative cascades for directed polymers in random media. 2005.

- [CY06] F. COMETS et N. YOSHIDA : Directed polymers in random environment are diffusive at weak disorder. *Ann. of Prob.*, 2006.
- [DE92] B. DERRIDA et M.R. EVANS : Improved bounds for the transition temperature of directed polymers in a finite-dimensional random medium. *J. Stat. Phys.*, 69(1-2):427–437, 1992.
- [IS88] J.Z. IMBRIE et T. SPENCER : Diffusion of directed polymers in a random environment. *J. Stat. Phys.*, 52(3-4):609–626, 1988.