Le modèle d'Ising dilué

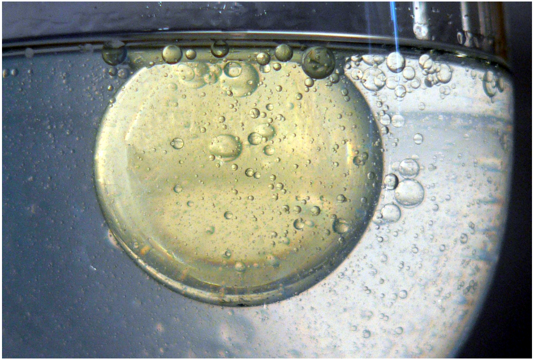
Tension superficielle, coexistence de phases et dynamique lente dans la région de transition de phase

Marc Wouts
Universités Paris 7 et Paris X

13 Septembre 2007
Journées de Probabilités

Objectif de l'exposé

Décrire le phénomène de *coexistence de phases* à l'équilibre en milieu aléatoire. Applications à la dynamique.



Le modèle d'Ising

Modèle ferromagnétique : sur $\mathbb{Z}^d$, on dispose des *spins* $\sigma_x \in \pm 1$.

Hamiltonien

$$H_\Lambda(\sigma) = - \sum_{\{x,y\} \in E(\Lambda)} \sigma_x \sigma_y .$$

Deux états d'energie minimale : $+1$ et -1, sur tout le domaine.

Mesure de Gibbs

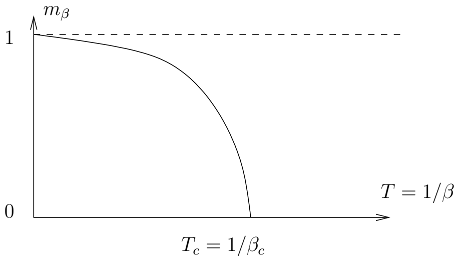
Température inverse $\beta = 1/T \geqslant 0$.

$$\mu_\Lambda(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_\Lambda} \exp\left(-\beta H_\Lambda(\sigma)\right).$$

Transition de phase

Transition de phase

L'aimantation $m_\beta = lim_N \mu^+_{\Lambda_N}(\sigma_0)$ est strictement positive pour β assez grand, $d \geqslant 2$.



Coexistence de phases

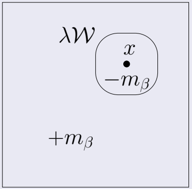
Les deux phases du modèle d'Ising

Pour $\beta > \beta_c$, les configurations de spins ont une certaine structure sous μ^+ : c'est la *phase plus*. Aimantation moyenne $m_\beta > 0$. La *phase moins* est symétrique de la phase plus.

Cristal de Wulff (Dobrushin, Kotecký, Shlosman (1992), Pfister (1991), Ioffe, Schonmann (1998), Bodineau (1999), Cerf (2000))

On prend $\beta > \beta_c$, $m < m_\beta$ et on montre que

$\mu_\Lambda^+ \Bigg($



$\Bigg| \; m_\Lambda \leqslant m \Bigg) \simeq 1$

$$m_\Lambda = \frac{1}{|\Lambda|} \sum_{x \in \Lambda} \sigma_x,$$

aimantation dans Λ, Λ grand cube.

Pourquoi le milieu aléatoire

Motivations physiques

- Modéliser les défauts des structures cristalines
- Étudier les phénomènes ferromagnétiques dans les alliages

Quelques questions

- Conséquences du milieu aléatoire sur la transition de phase ?
- Effets de l'aléa sur les interfaces
- Et sur la dynamique

Le modèle d'Ising dilué

Hamiltonien

$$H_\Lambda(\sigma) = - \sum_{\{x,y\} \in E(\Lambda)} J_{x,y} \sigma_x \sigma_y .$$

Dilution

Les $J_{x,y}$, $\{x, y\} \in E(\mathbb{Z}^d)$ sont i.i.d. sous $\mathbb{P}$, et $J_{\{x,y\}} \in [0, 1]$ p.s.

Interpretation

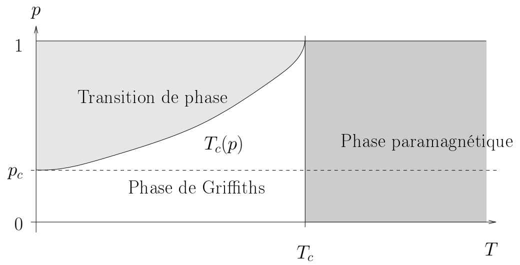
Les interactions entre spins ne sont plus uniformes.
Par exemple : $\mathbb{P}(J_{x,y} = 1) = 1 - \mathbb{P}(J_{x,y} = 0)$=p.

Diagramme de phase

Mesure de Gibbs

Température inverse $\beta = 1/T \geqslant 0$, réalisation J pour le milieu.

$$\mu_\Lambda^{J,+}(\{\sigma\}) = \frac{1}{Z_\Lambda^{J,+}} \exp\left(\beta \sum_{\{x,y\}\in E(\Lambda)} J_{x,y}\sigma_x\sigma_y\right) \; ; \; J \sim \mathbb{P}$$



Les mesures quenched et annealed

Les combinaisons de $\mathbb{P}$ et $\mu^{J,+}$

- Mesure *quenched* : on étudie $\mu^{J,+}$ pour J *typique* sous $\mathbb{P}$. Correspond, dans le cas de métaux, à un refroidissement brutal (la *trempe*) qui gèle sur place les impuretés.
- Mesure *annealed* : c'est $\mathbb{P} \times \mu^{J,+}$, i.e. on moyenne sur le milieu aléatoire. Correspond à un refroidissement lent : les impuretés s'adaptent aux contraintes.

Les phases du modèle d'Ising dilué

Sous une hypothèse de *percolation par tranches* (Pisztora (1996))

Procédure de renormalisation, cas uniforme

Il existe (ϕ_i), $\phi_i \in \{-1, 0, 1\}$ telle que

- $\phi_i \neq 0$ implique que l'aimantation sur le bloc de taille K centré en Ki est proche de $m_\beta \phi_i$
- Pour K assez grand, le processus des sites où la phase est bien définie domine stochastiquement la percolation par site de haute densité.

K est une échelle *mésoscopique*.

Notre résultat

Mêmes conclusions. Difficulté : la mesure annealed n'est pas Gibbs.

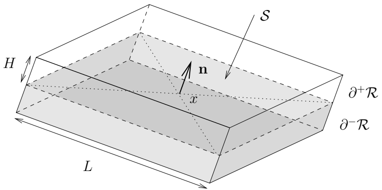
La notion de tension superficielle

La tension superficielle est l'énergie libre d'une interface normale à **n**, par unité de surface.

Définition

Étant donné J et une boîte $\mathcal{R}$

$$\begin{aligned}\tau^J_{\mathcal{R}} &= -\frac{1}{L^{d-1}} \log \frac{Z^{J,\pm}_{\mathcal{R}}}{Z^{J,+}_{\mathcal{R}}} \\ &= -\frac{1}{L^{d-1}} \log \mu^{J,\emptyset}_{\mathcal{R}} \left(\begin{array}{l} \exists \text{ interface} \\ \text{dans } \mathcal{R} \end{array} \right)\end{aligned}$$



Convergence

Sous-additivité

Comme dans le cas uniforme (Messager, Miracle-Solé, Ruiz (1992)), la tension superficielle est *sous-additive*

Théorème

Si $\mathcal{R}_N$ est une suite de parallelélépipèdes rectangles d'orientation $\mathbf{n}$, de base N^{d-1} et de hauteur δN, alors

$$\tau^J_{\mathcal{R}_N} \xrightarrow[N\to\infty]{} \tau^q(\mathbf{n}) \text{ en } \mathbb{P}\text{-probabilité.}$$

Convergence

Sous-additivité

Comme dans le cas uniforme (Messager, Miracle-Solé, Ruiz (1992)), la tension superficielle est *sous-additive*

Théorème

Si $\mathcal{R}_N$ est une suite de parallelélépipèdes rectangles d'orientation $\mathbf{n}$, de base N^{d-1} et de hauteur δN, alors

$$\tau^J_{\mathcal{R}_N} \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} \tau^q(\mathbf{n}) \text{ en } \mathbb{P}\text{-probabilité.}$$

Tension annealed

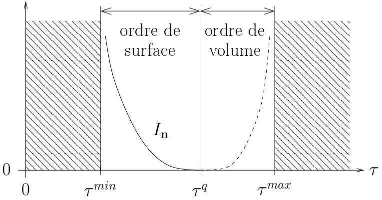
$$\tau^a(\mathbf{n}) = \lim_N -\frac{1}{N^{d-1}} \log \mathbb{E}\mu^{J,\emptyset}_{\mathcal{R}_N}\left(\begin{array}{c} \exists \text{ interface} \\ \text{dans } \mathcal{R}_N \end{array} \right) \leqslant \tau^q(\mathbf{n}).$$

Grandes déviations

Par le haut

Les déviations supérieures ont un ordre de *volume* : $\forall \epsilon > 0$,

$$\lim_N \frac{1}{N^d} \log \mathbb{P}\left(\tau^J_{\mathcal{R}^N} \geqslant \tau^q + \epsilon \right) > 0.$$



Par le bas

Les déviations inférieures ont un ordre de *surface* : $\forall \tau \neq \tau^{\min}$,

$$\exists I_{\mathbf{n}}(\tau) = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{N^{d-1}} \log \mathbb{P}\left(\tau^J_{\mathcal{R}^N} \leqslant \tau \right).$$

Une borne inférieure sur le coût des déviations

Fonction de taux pour les déviations inférieures

$$I_{\mathbf{n}}(\tau) = \lim_{N\to\infty} -\frac{1}{N^{d-1}} \log \mathbb{P}\left(\tau^J_{\mathcal{R}^N} \leqslant \tau\right).$$

Concentration de la mesure

Si $\mathbb{P}$ satisfait une inégalité de log-Sobolev, alors, pour Lebesgue-presque tout $\beta \geqslant 0$, $\exists c > 0$ tel que, pour $r > 0$ assez petit,

$$I_{\mathbf{n}}(\tau^q(\mathbf{n}) - r) \geqslant cr^2.$$

À basse température

Théorème

Si $\mathbb{P}(J_e > 0) = 1$, alors

- $\tau^a(\mathbf{n})/\beta$ tend vers $J^{\min}\|\mathbf{n}\|_1$.
- $\tau^q(\mathbf{n})/\beta$ tend vers le *temps de premier passage* de $\mathbb{P}$ suivant $\mathbf{n}^\perp$ (*flux maximal* si $d \geqslant 3$)

Corollaire

Si $\mathbb{P}(J_e > J^{\min}) > p_c(d)$, alors $\tau^a < \tau^q$ à basse température.

Profil d'aimantation

Phase locale

On se donne K échelle *mésoscopique*. Profil d'aimantation

$$x \in [0,1]^d \mapsto \mathcal{M}_K(x) = \frac{1}{K^d} \sum_{z \in \Delta_{i(x)}} \sigma_z$$

où $\Delta_{i(x)} = \{1, \ldots, K\}^d + Ki(x)$ tel que $\Delta_{i(x)}$ « contient » Nx.

Macroscopique → microscopique

$U \subset [0,1]^d$ de périmètre fini, $\chi_U = \mathbf{1}_{U^c} - \mathbf{1}_U$ et $\mathcal{V}(\chi_U, \epsilon)$ le voisinage de χ_U dans L^1. Alors

$$\begin{aligned} \mu^{J,+}_{\Lambda_N}\left(\frac{\mathcal{M}_K}{m_\beta} \in \mathcal{V}(\chi_U,\epsilon)\right) &\simeq \exp\left(-N^{d-1}\int_{\partial^\star U} \tau^q(\mathbf{n}_x)ds\right) \\ \mathbb{E}\mu^{J,+}_{\Lambda_N}\left(\frac{\mathcal{M}_K}{m_\beta} \in \mathcal{V}(\chi_U,\epsilon)\right) &\simeq \exp\left(-N^{d-1}\int_{\partial^\star U} \tau^a(\mathbf{n}_x)ds\right) \end{aligned}$$

Conséquences

- Pas de coexistence sous $\mu^{J,+}$ ou $\mathbb{E}\mu^{J,+}$. Nécessité de la contrainte de volume.
- Problème *isopérimétrique* : il faut minimiser l'intégrale sous une contrainte de volume.

Le cristal de Wulff

Théorème (Wulff (1901), Taylor (1978), Fonseca (1991))

Étant donnée τ positive, d'extension homogène convexe, les formes qui minimisent $\int_{\partial^\star U} \tau(\mathbf{n}_x) ds$ sous la contrainte de volume $Vol(U) = 1$ sont, à translation près,

$$\mathcal{W} = \alpha \left\{ x \in \mathbb{R}^d : x \cdot \mathbf{n} \leqslant \tau(\mathbf{n}) \right\}$$

avec $\alpha \in (0, \infty)$ tel que $Vol(\mathcal{W}) = 1$.

Coexistence de phases

Théorème

Sous une hypothèse de percolation par tranches, et pour $\varepsilon > 0$, $m < m_\beta$ assez proche de m_β et K assez grand :

$$\lim_{N\to\infty} \mu^{J,+}_{\Lambda_N} \left(\frac{\mathcal{M}_K}{m_\beta} \in \bigcup_z \mathcal{V}(\chi_{z+\alpha_m \mathcal{W}^q}, \varepsilon) \,\middle|\, m_{\Lambda_N} \leqslant m \right) = 1$$

en $\mathbb{P}$-probabilité, et :

$$\lim_{N\to\infty} \left(\mathbb{E}\mu^{J,+}_{\Lambda_N}\right) \left(\frac{\mathcal{M}_K}{m_\beta} \in \bigcup_z \mathcal{V}(\chi_{z+\alpha_m \mathcal{W}^a}, \varepsilon) \,\middle|\, m_{\Lambda_N} \leqslant m \right) = 1.$$

Forme des cristaux à basse température

À partir des asymptotiques sur la tension superficielle à basse température :

Théorème

Supposons $\mathbb{P}(J_e > 0) = 1$. Alors, lorsque $\beta \to \infty$:

- Le cristal de Wulff quenched tend vers le cristal du temps de premier passage pour $\mathbb{P}$ (flux maximal si $d \geqslant 3$)
- Le cristal annealed converge vers le cube unité.

Dynamique de Glauber

Définition

On met à jour le spin $\sigma_t(x)$ en x avec un taux 1, suivant la mesure de Gibbs sur $\{x\}$ pour la condition au bord σ_t. La mesure $\mu^{J,+}$ est *réversible* pour la dynamique.

Notations

Chaîne de Markov (σ_t). $\sigma_t(x)$ est le spin en $x \in \mathbb{Z}^d$ au temps $t \geqslant 0$. On note

$$E^{J,\rho}$$

l'espérance associée à la chaîne partant de l'état initial ρ.

Autocorrélation moyenne

$$A(t) = \mathbb{E} \int \left| E^{J,\rho}(\sigma_t(0)) - \mu^{J,+}(\sigma(0)) \right| d\mu^{J,+}(\rho)$$

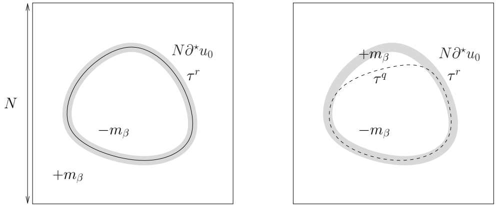
Quelques résultats et conjectures

	Ising uniforme	Ising dilué
$\beta < \beta_c^{\text{pure}}$	$\exp(-ct)$	$\exp(-ct)$
Griffiths	–	$\exp\left(-c(\log t)^{\frac{d}{d-1}}\right)$ ([a])
$\beta > \beta_c$	$\exp(-c\sqrt{t})$ $d=2$ $\exp(-ct)$ $d \geqslant 3$ ([b])	$\geqslant t^{-\alpha}$ ([b])

[a] Cesi, Maes, Martinelli (1997)
[b] Conjectures : Fisher, Huse (1987)

Heuristique

État initial : la tension est réduite sur le bord de u_0, et on a coexistence initiale suivant u_0.



- Probabilité sous $\mathbb{P}$:

$$\exp\left(-N^{d-1}\mathcal{I}^r(u_0)\right) \text{ avec } \mathcal{I}^r(u_0) = \int_{\partial^\star u_0} I_{\mathbf{n}_x}(\tau^r(x))ds$$

- Probabilité sous $\mu^{J,+}$:

$$\exp\left(-N^{d-1}\mathcal{F}^r(u_0)\right) \text{ avec } \mathcal{F}^r(u_0) = \int_{\partial^\star u_0} \tau^r(x)ds$$

Heuristique

- La relaxation nécessite la *disparition* de la goutte initiale
- On montre que l'évolution de la forme est *continue* dans L^1.

Energie superficielle réduite

$$\mathcal{F}^r(u) = \int_{\partial^\star u \cap \partial^\star u_0} \tau^r(x) ds + \int_{\partial^\star u \setminus \partial^\star u_0} \tau^q(\mathbf{n}_x) ds$$

Surcoût pour décrocher l'interface

$$\mathcal{K}^r(u_0) = \inf \sup_t \mathcal{F}^r(u_t) - \mathcal{F}^r(u_0).$$

Métastabilité

La goutte a une *durée de vie* $\exp\left(N^{d-1}\mathcal{K}^r(u_0)\right)$.

Borne inférieure sur l'autocorrélation

Principe

On a

$$\begin{aligned} A(t) &= \mathbb{E} \int \left| E^{J,\rho}(\sigma_t(0)) - \mu^{J,+}(\sigma(0)) \right| d\mu^{J,+}(\rho) \\ &\geqslant \mathbb{P} \times \mu^{J,+} \text{ (condition initiale)} \end{aligned}$$

tant que

$$t \leqslant \exp\left(N^{d-1} \mathcal{K}^r(u_0) \right).$$

On choisit alors N en fonction de t, ce qui donne :

$$A(t) \geqslant t^{-\frac{\mathcal{I}^r(u_0)+\mathcal{F}^r(u_0)}{\mathcal{K}^r(u_0)}}$$

Théorème

Sous une hypothèse de percolation par tranches :

$$\liminf_{t\to\infty} \frac{\log A(t)}{\log t} \geqslant - \inf_{(u_0,\tau^r)\in \mathrm{IC}} \frac{\mathcal{I}^r(u_0) + \mathcal{F}^r(u_0)}{\mathcal{K}^r(u_0)} \in [0,\infty].$$

- $\mathcal{I}^r(u_0)$ coût de la réduction de la tension superficielle
- $\mathcal{F}^r(u_0)$ coût de la coexistence initiale, pour la t.s. réduite
- $\mathcal{K}^r(u_0)$ surcoût de décrochement.

Un peu de géométrie

- Si le bord de u_0 est C^1 et si $\tau^r < \tau^q - \epsilon$, on a $\mathcal{K}^r(u_0) > 0$
- A basse température : si $0 < \mathbb{P}(J_e = 0) < 1 - p_c(d)$, décroissance comme $-C/\beta$ pour β grand.