LE MODÈLE D'ISING STOCHASTIQUE ET SA MÉTASTABILITÉ À BASSE TEMPÉRATURE

EMMANUEL BREUILLARD

Journées de Foljuif 1998

1. Introduction

1.1. Modèle d'Ising et ferromagnétisme. Le modèle d'Ising permet de décrire de façon simplifiée le comportement d'un cristal ferromagnétique en présence d'un champ magnétique extérieur. En particulier, il permet de prédire l'évolution de l'aimantation du cristal quand le champ extérieur varie ou quand la température varie. L'aimantation naturelle (en absence de champ) des matériaux ferromagnétiques disparaît au dessus d'une certaine température critique T_c. Le modèle d'Ising permet de rendre compte du comportement des grandeurs physiques au voisinage de ce point critique et notamment de calculer les exposants critiques (coefficients α qui définissent le comportement en $(T-T_c)^\alpha$ des grandeurs physiques comme l'aimantation ou la capacité calorifique au voisinage de T_c). Son étude a été l'un des grands problèmes de la physique statistique du vingtième siècle. Nous le présentons dans ce paragraphe en quelques mots.

On considère le système constitué par un cristal ferromagnétique de volume V dans un thermostat à la température T soumis au champ magnétique B. La description canonique de ce système permet de déterminer la distibution d'équilibre et la valeur des grandeurs physiques associées telles l'aimantation, pourvu que l'on connaisse le hamiltonien et qu'on sache exprimer simplement la fonction de partition en fonction des variables d'état V, B, T. Le hamiltonien contient déjà le terme d'interaction avec le champ : $-g\mu_B \overrightarrow{B} \cdot \sum \overrightarrow{S}_i$. L'aimantation du cristal ferromagnétique résulte des moments dipolaires magnétiques de chaque atome du cristal : c'est la somme des moments magnétiques des atomes du cristal. Ceux-ci prennent alternativement les valeurs $+\mu$ ou $-\mu$ où $\mu = \frac{g\mu_B}{2}$ (μ_B est le magnéton de Bohr et g le facteur de Landé d'un atome du cristal, le facteur $\frac{1}{2}$ provient du spin égal à $\pm\frac{1}{2}$). L'aimantation naturelle apparaît parce que tous les spins du cristal tendent à s'aligner. Ce phénomène ne peut s'expliquer sans rajouter un terme d'interaction entre les spins des atomes. Heisenberg a proposé la forme suivante de l'énergie d'interaction entre deux spins i et j : $-J_{i,j}\overrightarrow{S_i} \cdot \overrightarrow{S_j}$ où $J_{i,j}$ est un "coefficient de couplage" qui doit être positif pour que l'interaction favorise l'alignement des spins. Naturellement, il décroît avec la distance entre les deux spins et on fait l'approximation de ne prendre en considération que les interactions entre spins d'atomes voisins et donc un seul coefficient J. Le "hamiltonien de Heisenberg"

Date: 10-11 septembre 1998 .

s'écrit alors :

$$slH = -\, g\mu_B \overrightarrow{B} \cdot \sum \overrightarrow{S}_i - J \cdot \sum_{i\sim j} \overrightarrow{S_i} \cdot \overrightarrow{S_j}$$

où l'on note $i \sim j$ si i et j sont deux atomes "proches voisins".

Dans la pratique, on modélise le cristal par un réseau carré, une partie de $\mathbb{Z}^d$, les atomes étant disposés sur chacun des noeuds. Ainsi, chaque atome possède $2d$ "proches voisins" (en physique, $d = 3$ mais nous considérerons aussi le cas plus simple $d = 2$). L'état du système est alors parfaitement caractérisé par la configuration de spins $+$ et de spins $-$, la température et le champ extérieur.

La signification physique du "hamiltonien de Heisenberg" relève de la mécanique quantique : il ne s'agit pas en effet de l'interaction d'origine magnétique entre les moments magnétiques, qui est négligeable jusqu'à des températures très basses de l'ordre de un ou deux Kelvins. Mais, d'une "interaction d'échange" qui résulte d'un effet combiné de l'interaction coulombienne et du principe d'exclusion de Pauli. En fait, le calcul de J est inextricable, mais le plus important est de savoir que l'interaction est bien de cette forme.

1.2. **Le modèle d'Ising stochastique.** Dans cette présentation, nous ne nous intéresserons pas aux développements qui ont permis de "résoudre" le "hamiltonien de Heisenberg" et d'en déduire la fonction de partition et la valeur des exposants critiques que ce soit pour le modèle d'Ising à une, deux ou trois dimensions sur un réseau carré, hexagonal ou plus complexe. Nous allons nous intéresser aux mécanismes de relaxation qui conduisent les spins d'un matériau ferromagnétique à s'orienter tous dans le même sens, produisant ainsi à l'équilibre une aimantation permanente. De plus nous ne nous intéresserons pas à la transition de phase paramagnétique-ferromagnétique, qui a lieu à la température critique T_c, puisque nous serons toujours dans la limite des basses températures de sorte que le matériau considéré soit toujours ferromagnétique.

Pour décrire cette relaxation, nous nous placerons dans le cadre du modèle d'Ising avec un cristal carré (ou cubique) et des conditions aux bords périodiques (cela signifie seulement que deux atomes sont voisins si et seulement si une seule de leurs coordonnées sur le réseau diffère de 1 ou $N-1$, avec N côté du cristal). Puis nous introduisons une dynamique probabiliste en temps discret d'évolution de la configuration de spins : la dynamique de Métropolis[1]. A chaque configuration σ du système de spins on associe son énergie $slE(\sigma)$ égale à la valeur du "hamiltonien de Heisenberg" normalisé :

$$slE(\sigma) = -\frac{h}{2}\sum \sigma(x) - \frac{1}{2}\sum_{x\sim y} \sigma(x)\sigma(y)$$

où $\sigma(x)$ est égal à ± 1 selon le signe du spin de l'atome x et h représente le champ magnétique.

A chaque temps $n \in \mathbb{N}$ la configuration des spins peut changer par un (un seul) retournement de spin selon la loi de probabilité suivante :

$$p_x(\sigma) = \frac{1}{N^d} \exp\left(-\beta\left(\Delta slE_x(\sigma)\right)^+\right)$$

[1] On peut choisir d'autres dynamiques. De façon générale, il s'agit d'une dynamique de Glauber réversible dont le taux de transition est décroissant avec la variation d'énergie (cf. [NS2]).

où $p_x(\sigma)$ représente la probabilité qu'étant dans la configuration σ le spin x se retourne, $\beta = \frac{1}{T}$ est l'inverse de la température, $\Delta slE_x(\sigma) = slE(\sigma^x) - slE(\sigma) = \sigma(x)\left(\sum_{y\sim x}\sigma(y) + h\right)$ est la variation d'énergie entre la configuration σ^x (configuration σ à ceci près que le spin x est retourné) et la configuration σ, et $(x)^+ = \max(x, 0)$.

Il est possible qu'aucun spin ne se retourne et que la configuration reste dans son état. Cela se passe avec la probabilité $1 - \sum_x p_x(\sigma)$. On a ainsi une chaîne de Markov homogène en temps discret sur l'ensemble des configurations de spins.

1.3. **La métastabilité.** Dans toute la suite, nous ne nous intéresserons qu'aux résultats de "grandes déviations", c'est-à-dire au comportement limite des probabilités quand β tend vers l'infini. Lorsque h est assez petit, on observe un phénomène de *métastabilité* dans la limite des faibles températures ; certaines configurations de spins nous ramènent à la configuration de départ (notée $\underline{-1}$, avec tous les spins $-$) avec une probabilité qui tend vers 1 lorsque β tend vers l'infini, tandis que d'autres nous conduisent à la configuration avec tous les spins $+$ (notée $\underline{+1}$) de plus en plus sûrement quand β tend vers l'infini.

Si h est grand ($h > 2d$) les spins $+$ se retournent avec une probabilité qui tend vers 0 quand β tend vers l'infini, alors que les spins $-$ se retournent avec la même probabilité $\frac{1}{N^d}$. Par conséquent, il n'y a pas de métastabilité et tout spin $+$ tend à rester $+$ alors que les spins $-$ sont instables. Le temps de relaxation (temps d'atteinte de la configuration $\underline{+1}$) converge en loi vers le maximum de N^d variables aléatoires de loi géométrique.

Si $2d-2 < h < 2d$, après l'apparition d'un premier spin $+$, trois choses peuvent arriver : avec une probabilité $\frac{1}{N^d}$ le spin redevient $-$, avec une probabilité $\frac{2d}{N^d}$ un spin voisin devient $+$, et avec une probabilité $\frac{N^d-2d}{N^d}\exp(-\beta(2d-h))$ il se forme un autre spin $+$. La dernière éventualité n'apparaît qu'avec une probabilité qui décroît vers zéro quand β tend vers l'infini, donc de notre point de vue, seuls les deux premiers cas sont importants. Si le système revient dans la configuration $\underline{-1}$ tout recommence à zéro (le système "n'a pas de mémoire"). S'il se forme un groupe de deux spins $+$ voisins, alors chacun d'entre eux peut redevenir $-$ avec une probabilité $\frac{1}{N^d}\exp(-\beta(h-(2d-2)))$ qui décroît vers zéro si β tend vers l'infini, tandis que les voisins de ce "domino" passent $+$ avec une probabilité $\frac{1}{N^d}$. Ainsi le "domino" va croître avec une probabilité non nulle lorsque β tend vers l'infini jusqu'à atteindre la configuration $\underline{+1}$. Ce phénomène caractérise la métastabilité : si le système atteint une configuration critique (ici le "domino") elle va croître jusqu'à la relaxation avec une probabilité non nulle dans la limite des basses températures, mais tant que cette configuration n'est pas atteinte le système reviendra à sa position initiale avec une probabilité non négligeable quand β tend vers l'infini.

Lorsque $h < 2$, cas qui nous intéressera désormais, un "domino" n'est plus critique et tend à disparaître. Cependant nous verrons que le même phénomène de "gouttes critiques" de spins $+$ apparaît. De petites gouttes auront tendance à décroître et disparaître, tandis que les gouttes qui auront dépassé une taille critique grossiront jusqu'à remplir le cristal entier avec une probabilité non nulle quand la température tend vers 0.

Dans la suite nous nous intéresserons à ces gouttes critiques (taille et forme) ainsi qu'aux chemins suivis par le processus (chemin de sortie) dont la probabilité d'occurence est non nulle dans la limite des basses températures : ceci fournira une bonne description du mécanisme de relaxaton des spins à basse température.

2. Un raisonnement heuristique pour trouver la taille des gouttes critiques

Le côté de la goutte critique (qui est presque carré ou cubique) est de l'ordre de $\frac{2(d-1)}{h}$. Nous allons dans la suite trouver précisément la forme et la taille de la goutte critique, mais voici un raisonnement heuristique (cf. [NS1]) qui permet de comprendre d'où vient cet ordre de grandeur :

Partons d'une configuration qui possède une goutte de spins $+$ (goutte carré ou cubique) de côté l. A l'intérieur de la goutte la probabilité de retournement des spins décroît exponentiellement quand β tend vers l'infini. La plus grande probabilité de retournement a lieu pour les spins situés aux coins : $\frac{1}{N^d}\exp(-\beta h)$ (il y a autant de voisins $+$ que de voisins $-$). Ainsi, très probablement le premier retournement aura lieu à un coin de la goutte, créant ainsi plusieurs autres coins (avec même nombre de voisins $+$ que de voisins $-$). Mais rapidement ce même spin se retournera avec probabilité $\frac{1}{N^d}$. Cependant, il pourrait arriver avec une probabilité de $\frac{1}{N^d}\exp(-\beta h)$ qu'un autre spin $+$ situé à un coin se retourne créant ainsi un nouveau coin. Par conséquent, dans un temps de l'ordre de $N^d\exp(\beta hk)$ la goutte aura parfois perdu k spins $+$ en ligne (le nouveau coin créé se situe sur la même ligne que les précédents). Une ligne entière pourra disparaître dans un temps de l'ordre de $N^d\exp(\beta h(l-1))$ (car le dernier spin de la ligne se retourne avec une probabilité $\frac{1}{N^d}$, il a $d-1$ voisins $+$ et $d+1$ voisins $-$). S'opposant à cette tendance, les spins $-$ situés sur une des faces de la configuration se retournent avec une probabilité $\frac{1}{N^d}\exp(-\beta h(2d-2-h))$ (ils ont un seul voisin $+$). C'est de la comparaison entre $N^d\exp(\beta(2d-2-h))$ et $N^d\exp(\beta h(l-1))$ que provient le seuil $l=\frac{2(d-1)}{h}$.

Si $l<\frac{2(d-1)}{h}$ le mécanisme d'érosion domine (de plus en plus quand β augmente) et avant l'apparition d'un seul $+$ sur une des faces de la configuration initiale, une ligne entière disparaît mettant une nouvelle ligne en position de coin. Le même mécanisme est ensuite à l'oeuvre pour les autres lignes situées aux coins de la configuration, jusqu'à la disparition complète des spins $+$.

Si $l>\frac{2(d-1)}{h}$ alors avant un temps bien inférieur à $N^d\exp(\beta h(l-1))$ aucune ligne entière n'a disparu. Mais dans un temps de l'ordre de ou inférieur à $N^d\exp(\beta(2d-2-h))$, en tout cas beaucoup plus petit que $N^d\exp(\beta h(l-1))$ surtout si β est grand, un spin $-$ adjacent à la goutte de spins $+$ va se retouner créant une protubérance. Si cette dernière vient remplacer un spin $+$ disparu auparavant par le mécanisme d'érosion, les spins $-$ adjacents à la fois à la goutte et à la protubérance vont se retourner avec une probabilité $\frac{1}{N^d}$. Donc au bout d'un temps $N^d\exp(\beta(2d-2-h+\varepsilon))$ une protubérance de deux spins $+$ apparaît. Ce mécanisme se poursuit jusqu'à recouverture complète des spins $+$ disparus. Il en résulte que la goutte tend à grossir jusqu'à remplir tout le cristal.

Cet argument heuristique est à la base de la première étude de la métastabilité du modèle d'Ising (Schonmann et Neves). Nous ne présenterons pas ici les démonstrations rigoureuses des résultats auxquels ils sont arrivés, mais suivrons une alternative proposé par O. Catoni, R. Cerf et G. Ben Arous, basée sur une étude complètement différente du mécanisme de relaxation. Nous allons trouver très précisément toutes les suites de configurations susceptibles d'être empruntées par le système avec une probabilité qui reste non négligeable quand la température tend vers 0.

3. La décomposition en cycles

3.1. Lemmes de Freidlin et Wentzell appliqués aux chaînes de Markov à transitions rares.

Pour mener à bien ce programme, nous allons nous placer dans le cadre très général de la théorie des chaînes de Markov à transitions rares développée dans les articles [CC] et [C] à partir de la théorie de Freidlin et Wentzell (cf. [FW]). Nous rappelons les définitions et les théorèmes les plus importants.

On considère une chaîne de Markov homogène et irréductible $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ sur un espace d'état fini E, et l'on note $p(x,y) = P(X_n = y \mid X_{n-1} = x)$.

Définition: *Pour toute partie W de E, on appelle $W-graphe$ tout graphe orienté $g \subset E \times E$ satisfaisant aux conditions suivantes :*

1. *Aucune flèche de g ne part d'un élément de W et de tout point de W^c (complémentaire de W) il part une et une seule flèche du graphe*
2. *Tout élément de W^c mène à W après une suite finie de flèches.*

Définition: *On note $G(W)$ l'ensemble des $W-graphes$. Si $x \in E$, $y \in W$ on note $G_{x,y}(W)$ le sous-ensemble de $G(W)$ constitué des graphes qui relient x à y par une suite de flèches si $x \neq y$,* et $G(W)$ tout entier si $x = y$. *Et pour tout $g \in G(W)$ $p(g) = \prod_{(x\to y)\in g} p(x,y)$.*

Définition: *On note $\tau(W) = \min(n : X_n \notin W)$ le temps passé avant la sortie de W.*

Les quatre lemmes qui suivent sont les résultats clé de la théorie de Freidlin-Wentzell qui exprime en termes de $W-$*graphe* certaines probabilités, relatives au temps d'entrée dans un domaine W, explicitement en fonction de la seule fonction p. Le premier lemme, dû à Catoni, permet, outre son intérêt propre, de donner une preuve simple des trois autres (pour une démonstration, cf. [CC] ou [FW]).

Proposition 3.1. *Soit $y \in W^c$ et $x \in E$, le nombre moyen de passages en y avant l'entrée dans W sachant que l'on part de x s'écrit :*

$$\sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, \tau(W^c) > n \mid X_0 = x) = \frac{\sum_{g\in G_{x,y}(W\cup\{y\})} p(g)}{\sum_{g\in G(W)} p(g)}$$

Proposition 3.2. *La loi stationaire de la chaîne de Markov s'exprime aussi de la façon suivante :*

$$\mu_\beta(x) = \frac{\sum_{g\in G(x)} p(g)}{\sum_{y\in E}\sum_{g\in G(y)} p(g)} \tag{1}$$

Proposition 3.3. *Soit $y \in W$ et $x \in E$, la loi du point d'entrée dans W s'écrit :*

$$P(X_{\tau(W^c)} = y \mid X_0 = x) = \frac{\sum_{g \in G_{x,y}(W)} p(g)}{\sum_{g \in G(W)} p(g)}$$

Proposition 3.4. *Soit $x \in E$, l'espérance du temps passé avant l'entrée dans W s'exprime de la façon suivante :*

$$E(\tau(W^c) \mid X_0 = x) = \frac{\sum_{y \in W^c} \sum_{g \in G_{x,y}(W \cup \{y\})} p(g)}{\sum_{g \in G(W)} p(g)} \tag{2}$$

Dans la suite nous nous intéresserons à une chaîne de Markov *à transitions rares* c'est-à-dire en fait une famille de chaînes de Markov homogènes et irréductibles (X, P_β) dont la probabilité de transition p_β dépend de la température $(\frac{1}{\beta})$ et vérifie le principe de *grande déviation* suivant :

$$\lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln p_\beta(x,y) = V(x,y)$$

où $V : E \times E \to \mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$ est telle la chaîne de Markov homogène associée à la matrice $(e^{-V(x,y)})_{(x,y)}$ soit irréductible.

Dans ce cadre, les lemmes précédents permettent d'introduire les notations suivantes :

Définition: *Si G est un $W-$ graphe on note $V(g) = \sum_{(x \to y) \in g} V(x,y)$.*

Définition: *On appelle énergie virtuelle la fonction $W : E \to \mathbb{R}_+$ définie par $W(x) = \lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln \mu_\beta(x)$. D'après 1 on déduit que cette limite existe et vaut :*

$$W(x) = \min_{g \in G(x)} V(g) - \min_{y \in E} \min_{g \in G(y)} V(g)$$

On note aussi pour $D \subset E$ $W(D) = \min_{x \in D} W(x)$.

Définition: *Soit $D \subset E$, on note $W_D(x,y)$ (énergie virtuelle localisée) : $D \times D \to \mathbb{R}$ la limite suivante :*

$$W_D(x,y) = \lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln \sum_{n=0}^{\infty} P(X_n = y, \tau(D) > n \mid X_0 = x) = \min_{g \in G_{x,y}(D^c \cup \{y\})} V(g) - \min_{g \in G(D^c)} V(g)$$

C'est le taux qui correspond au nombre de passage en y, partant de x. Lorsque $x = y$, on a $-W_D(x,x) = \lim_{\beta \to +\infty} \ln P(X_{\tau(D \setminus \{x\})} \neq x \mid X_0 = x)$ car le nombre moyen de retours en x avant la sortie de D est l'inverse de la probabilité de sortir de D sans repasser par x.

Définition: *On appelle hauteur issue de $x \in D$ d'un sous-ensemble $D \subset E$, la quantité suivante :*

$$H_D(x) = \lim_{\beta \to +\infty} \frac{1}{\beta} \ln E(\tau(D) \mid X_0 = x) = \min_{y \in D} \min_{g \in G_{x,y}(D^c \cup \{y\})} V(g) - \min_{g \in G(D^c)} V(g) \tag{3}$$

Définition: *On note $V_D : D \times D^c \to \mathbb{R}_+$ (coût de passage entre x et y dans D) la quantité suivante :*

$$V_D(x,y) = \lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln P(X_{\tau(D)} = y \mid X_0 = x) = \min_{g \in G_{x,y}(D^c)} V(g) - \min_{g \in G(D^c)} V(g)$$

3.2. **Les cycles.** Dans notre problème de la métastabilité du modèle d'Ising, la relaxation correspond à la phase qui se situe après le dernier passage dans la configuration $\underline{-1}$ avant le premier passage en $\underline{+1}$. Nous étudions cette phase parce que c'est en fait la moins probable parmi toutes les excursions au départ de $\underline{-1}$: nous verrons plus tard que, partant de $\underline{-1}$, le système a une probabilité qui se rapproche de 1 exponentiellement de revenir en $\underline{-1}$ sans passer par $\underline{+1}$. C'est pour cela, d'ailleurs, que l'on parle de métastabilité. Comprendre en détail ce qui se passe durant cette phase rentre dans le cadre plus général de l'étude du chemin de sortie d'un sous-ensemble D de E après son dernier passage par un point $x_0 \in D$.

Définition: On appelle chemin de sortie de la chaîne X, noté $c(X)$, la suite de points aléatoires définie par :

$$\begin{aligned} c_0 &= X_\theta \qquad \text{avec } \theta = \max\{n : n \leqslant \tau(D), X_n = x_0\} \\ c_1 &= X_{\theta+1}, ..., c_r = X_{\theta+r} \qquad \text{avec } r = \tau(D) - \theta \end{aligned}$$

Nous soulignons le fait que θ n'est pas un temps d'arrêt. Le long du chemin de sortie, il se peut que la chaîne revienne dans des états antérieurs et cela un nombre moyen de fois qui peut soit croître ou décroitre exponentiellement avec la température, soit rester fini quand β tend vers l'infini. Ainsi, partant de $x \in D \setminus \{x_0\}$, la probabilité de revenir en x avant de sortir de $D \setminus \{x_0\}$ peut croître exponentiellemnt vers 1 quand β tend vers l'infini. Pour ces points, nous allons déterminer tous les points que la chaîne rencontre pendant chacune de ses excursions entre deux retours en x. L'ensemble des points que rencontre la chaîne partant de x avant sa sortie de $D \setminus \{x_0\}$ avec une probabilité qui tend vers 1 exponentiellement avec β s'appelle le cycle maximal dans $D \setminus \{x_0\}$ contenant x, noté $\pi(x, D \setminus \{x_0\})$. Si V est un "voisinage" de x tel que $x \in V \subsetneq \pi(x, D \setminus \{x_0\})$, la chaîne qui part de x va rentrer et sortir de V exponentiellement souvent avant de sortir de $D \setminus \{x_0\}$, alors que si $x \in \pi(x, D \setminus \{x_0\}) \subsetneq V$, il y aura des points de V qui ne seront pas atteints un nombre exponentiellement grand de fois avant que la chaîne ne sorte de $D \setminus \{x_0\}$. La notion de cycle apparaît donc naturellement pour déterminer les chemins de sortie les plus probables. Notamment, si $c(X)$ est un chemin de sortie qui apparaît avec une probabilité qui ne tend pas vers 0 quand β tend vers l'infini, on peut modifier $c(X)$ en rajoutant des boucles à l'intérieur des cycles sans changer le comportement limite de sa probabilité d'occurence.

Définition: *Un sous-ensemble C de E est appelé cycle s'il est un singleton ou si pour tout $x, y \in C$, $x \neq y$, la probabilité partant de x que l'on sorte de C sans passer par y est exponentiellement faible quand β tend vers l'infini, c'est-à-dire :*

$$\lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln P(X_{\tau(C \setminus \{y\})} \neq y \mid X_0 = x) > 0$$

Nous donnons ici plusieurs définitions équivalentes de la notion de cycle (pour une démonstration voir [C]) :

1. *$C \subset E$ est un cycle s'il est un singleton ou si pour tout $x, y \in C$, $x \neq y$, le nombre moyen de boucles effectuées dans C entre x et y tend exponentiellement vers l'infini quand β tend vers l'infini.*
2. *$C \subset E$ est un cycle s'il est un singleton ou si pour tout $y \in C$, tout $C^c \cup \{y\}-$graphe réalisant le minimum de $V(g)$ sur les $C^c \cup \{y\}-$graphes n'a pas de flèches pointant sur C^c.*
3. *On note $\Gamma_{x,y}$ l'ensemble des chemins dans E menant de x à y (n-uplets $(x_1, ..., x_n)$ de E^n tels que $x_1 = x$ et $x_n = y$, $x \neq y$). Puis pour $\gamma \in \Gamma_{x,y}$,*
$$\begin{aligned} H(\gamma) &= \max_{i=2,\ldots,n} W(x_{i-1}) + V(x_{i-1}, x_i) \\ H(x,y) &= \min_{\gamma \in \Gamma_{x,y}} H(\gamma) \end{aligned}$$
Pour $\lambda \in \mathbb{R}$ on introduit la relation d'équivalence $\mathcal{R}_\lambda$ sur E définie par $x\mathcal{R}_\lambda y \iff x = y$ ou $H(x,y) < \lambda$. Alors l'ensemble des cycles est exactement la réunion des ensembles quotients de toutes les $\mathcal{R}_\lambda$ quand λ parcourt $\mathbb{R}$.

Remarque: L'ensemble des cycles a une structure d'arbre avec à la base l'ensemble E lui-même et au sommet les singletons. Plus précisément, si π et π' sont deux cycles alors ils sont soit disjoints soit comparables pour l'inclusion. Ainsi pour tout sous-ensemble D de E, les cycles compris dans D et maximaux pour la relation d'inclusion forment une partition de D ; on note $\mathcal{M}(D)$ l'ensemble des cycles maximaux de D et pour $x \in D$, $\pi(x, D)$ l'élément de $\mathcal{M}(D)$ contenant x.

Une propriété importante des cycles est que le temps de sortie du cycle ainsi que le point de sortie deviennent indépendants du point de départ de la chaîne quand la température tend vers 0. Le système oublie sa condition initiale :

Proposition 3.5. *Soit C un cycle, x et y deux points de C et z un point extérieur à C, alors $V_C(x,z) = V_C(y,z)$ et $H_C(x) = H_C(y)$. On note $V(C,z)$ et $H(C)$ les valeurs communes.*

preuve: En conditionnant par le passage par x, on a :
$$\begin{aligned} P_\beta(X_{\tau(C)} &= z \mid X_0 = y) = P_\beta(X_{\tau(C)} = z \mid X_0 = x) P_\beta(X_{\tau(C\setminus\{x\})} = x \mid X_0 = y) \\ +P_\beta(X_{\tau(C\setminus\{x\})} &= z \mid X_0 = y) \end{aligned}$$
donc $V_C(y,z) \leqslant V_C(x,z) + V_{C\setminus\{x\}}(y,x)$. Or d'après la première définition donnée d'un cycle, $V_{C\setminus\{x\}}(y,x) = 0$. En échangeant les rôles de x et y, il vient, $V_C(x,z) = V_C(y,z)$. De même,
$$E_\beta(\tau(C) \mid X_0 = x) = \sum_{c \in C} E_\beta(\sum_{n=0}^{\tau(C)} 1_{X_n = c} \mid X_0 = x)$$
Et $E_\beta(\sum_{n=0}^{\tau(C)} 1_{X_n=c} \mid X_0 = x) P_\beta(X_{\tau(C\setminus\{c\})} = z \mid X_0 = c) =$
$P_\beta(X_{\tau(C)} = z \mid X_0 = x)$ donc $H_C(x) = \max_{c \in C} V_{C^c \cup \{c\}}(c,z) - V_C(x,z) = H_C(y)$ □

Ceci montre aussi un autre avantage à considérer la partition en cycles maximaux de $D \setminus \{x_0\}$: la loi du point de sortie de $D \setminus \{x_0\}$, sachant que l'on part de x, ne dépend que de la composante de $\mathcal{M}(D \setminus \{x_0\})$ qui contient x.

Nous donnons ensuite sans démonstration (cf. [C]) trois propriétés utiles pour la suite :

Proposition 3.6. *Pour tout cycle C et tout $x, y \in C$ on a l'identité suivante :*

$$W(y) = W(C) + H(C) + W_C(x,y)$$

Ceci montre en particulier que le temps passé en x avant la sortie de D est d'autant plus grand que $W(x)$ est faible. Ainsi, le temps passé dans $\pi(x, D)$ se passe essentiellement dans les points d'énergie virtuelle minimale (fond du cycle).

Proposition 3.7. *Pour tout cycle π et $y \notin \pi$, on a :*

$$\min_{x\in\pi}(W(x) + V(x,y)) = W(\pi) + E(\pi) + V(\pi, y)$$

Conjuguée à la suivante, cette propriété permet de trouver le coût pour sortir du cycle π par le point y, en disposant seulement de l'énergie virtuelle W.

Proposition 3.8. *Pour tout cycle C :*

$$H(C) = \max_{x\in C}(\min_{y\notin C} H(x,y) - W(x)) \tag{4}$$

3.3. **La suite des "points cols".** Nous allons maintenant nous intéresser à la suite des cycles maximaux de $D \setminus \{x_0\}$ parcourue par la chaîne de Markov pendant son chemin de sortie (suite des éléments de E parcourus par la chaîne après son dernier passage dans $\{x_0\}$ avant son premier passage hors de D). Plus précisément nous examinerons les points rencontrés juste avant et juste après le passage d'un cycle à l'autre. C'est lors de ce passage que s'effectue le saut d'énergie. Par analogie avec les "bassins d'attraction" que représentent intuitivement les cycles (à basse température la chaîne y reste un temps exponentiellement long), nous appellerons *suite des points cols* la succession des points rencontrés juste avant et juste après le saut d'un cycle à l'autre.

Définition: On appelle suite des points cols, notée $\mathcal{C}(X)$, la suite de points et de temps aléatoires définis récursivement pour la chaîne $(X_n)_{n\in\mathbb{N}}$ comme suit :

$$\begin{array}{ll}
\tau_0 = \max\{n : n \leqslant \tau(D), X_n \in \{x_0\}\} + 1 & \text{et } s_0 = X_{\tau_0-1} \quad s_1 = X_{\tau_0} \\
\tau_1 = \min\{n : n \geqslant \tau_0, X_n \notin \pi(s_1, D \setminus \{x_0\})\} & \text{et } s_2 = X_{\tau_1-1} \quad s_3 = X_{\tau_1} \\
\vdots & \\
\tau_k = \min\{n : n \geqslant \tau_{k-1}, X_n \notin \pi(s_{2k-1}, D \setminus \{x_0\})\} & \text{et } s_{2k} = X_{\tau_k-1} \quad s_{2k+1} = X_{\tau_k} \\
\vdots & \\
\tau_r = \tau(D) & \text{et } s_{2r} = X_{\tau_r-1} \quad s_{2r+1} = X_{\tau_r}
\end{array}$$

Le résultat clé de cette présentation et que l'on cherchera à appliquer au modèle d'Ising stochastique est le théorème suivant qui donne une estimation du comportement limite quand la température tend vers 0 de la loi de la *suite des points cols* (pour une démonstration voir [CC] théorème 7.4.):

Théorème: On a la limite suivante :

$$\lim_{\beta\to+\infty} -\frac{1}{\beta} \ln P_\beta(\mathcal{C}(X) = (s_0, ..., s_{2r+1}) \mid X_0 = x) = V_x(s_0, ..., s_{2r+1})$$

où $V_x(s_0, ..., s_{2r+1})$ est la "fonction de coût" définie par :

$$\begin{aligned}
V_x(s_0, ..., s_{2r+1}) \quad = \quad & W_D(x, s_0) + V(s_0, s_1) + \\
& \sum_{k=1}^{r} (W(s_{2k}) + V(s_{2k}, s_{2k+1}) - H(\pi(s_{2k}, D \setminus \{x_0\})) - W(\pi(s_{2k}, D \setminus \{x_0\})))
\end{aligned}$$

Pour étudier le mécanisme de relaxation, on veut trouver toutes les suites de cycles et de points cols susceptibles d'apparaître avec une probabilité qui ne tend pas vers 0 quand β tend vers l'infini. C'est pourquoi, c'est précisément ce théorème qui va nous donner la réponse : la condition nécessaire et suffisante pour que $P_\beta(\mathcal{C}(X) = (s_0, ..., s_{2r+1}) \mid X_0 = x)$ ne tende pas vers 0 dans la limite des basses températures est que $V_x(s_0, ..., s_{2r+1})$ soit nul. Notre prochain travail va donc consisiter à déterminer toutes les suites $(s_0, ..., s_{2r+1})$ de coût nul. Nous le ferons dans le cas particulier du modèle d'Ising.

Nous terminons cette section en donnant quelques résultats, qui découlent simplement des développements précédents, sur les comportements limites de la loi du temps de sortie $\tau(D)$ d'un ensemble D.

3.4. **Temps de sortie d'un domaine.** Soit $D \subset E$, la connaissance de $H(D) = \max_{x \in D} H_D(x)$ permet de déduire les estimations suivantes du temps de sortie de D.

Proposition 3.9. *Pour tout $\varepsilon > 0$ et $x \in D$ on a :*

$$\lim_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\varepsilon)} \mid X_0 = x) = +\infty$$

et,

$$\liminf_{\beta \to +\infty} -\frac{1}{\beta} \ln(\min_{y \in D} P_\beta(\tau(D) < e^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = y) \geqslant \varepsilon$$

preuve: On note $\lfloor x \rfloor$ la partie entière de x :

$$P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\varepsilon)} \mid X_0 = x) \leqslant P_\beta(\tau(D) > \lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = x)$$

Puis en appliquant la propriété de Markov :

$$\begin{aligned} P_\beta(\tau(D) &> \lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = x) = \\ \sum_{y \in D} P_\beta(\tau(D) &> (\lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor - 1) e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})}, X_{\lfloor (\lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor - 1) e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \rfloor} = y \mid X_0 = x) \\ \times P_\beta(\tau(D) &> e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = y) \\ &\leqslant \max_{y \in D} P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = y) \times P_\beta(\tau(D) > (\lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor - 1) e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = x) \end{aligned}$$

En réitérant ce raisonnement, il vient :

$$P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\varepsilon)} \mid X_0 = x) \leqslant \left(\max_{y \in D} P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \mid X_0 = y) \right)^{\lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor}$$

Puis par l'inégalité de Tchébychev :

$$P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\varepsilon)} \mid X_0 = x) \leqslant \left(\max_{y \in D} E_\beta(\tau(D) \mid X_0 = y) e^{\beta(H(D)+\frac{\varepsilon}{2})} \right)^{\lfloor e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} \rfloor}$$

Enfin, compte tenu des équations 3 et 2 et de la définition de $H(D)$, on a pour β assez grand :

$$P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)+\varepsilon)} \mid X_0 = x) \leqslant \exp -\beta(\frac{\varepsilon}{2}(e^{\frac{\beta\varepsilon}{2}} - 1))$$

Prouvons maintenant la seconde équation :

$$\sum_{k=0}^{+\infty} P_\beta(\tau(D) > ke^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = x) \geqslant E_\beta(\tau(D)e^{-\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = x)$$

En appliquant comme précédemment la propriété de Markov :

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{+\infty} P_\beta(\tau(D) &> ke^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = x) \leqslant \sum_{k=0}^{+\infty} \left(\max_{y\in D} P_\beta(\tau(D) > e^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = y)\right)^k \\ &= \frac{1}{\min\limits_{y\in D} P_\beta(\tau(D) \leqslant e^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = y)}\end{aligned}$$

d'où :

$$\min_{y\in D} P_\beta(\tau(D) \leqslant e^{\beta(H(D)-\varepsilon)} \mid X_0 = y) \leqslant \frac{e^{\beta(H(D)-\varepsilon)}}{E_\beta(\tau(D) \mid X_0 = x)}$$

On conclut par l'équation 3. □

4. Application au modèle d'Ising : stratégie pour trouver le chemin de sortie

4.1. Expression des coefficients W, H et V. Nous conservons les notations des sections précédentes et précisons, dans notre cas particulier, les différentes notions introduites dans la section précédente. Ici l'espace d'état E est l'ensemble de toutes les configurations de spins sur le tore (cf. Introduction, "le modèle d'Ising stochastique"). Le noyau de transition $p_\beta(\sigma,\eta)$ est nul si σ et η diffèrent de plus d'un spin, et égal à $p_x(\sigma) = \frac{1}{N^d}\exp\left(-\beta\left(\Delta slE_x(\sigma)\right)^+\right)$si $\eta = \sigma^x$. Il s'agit donc bien d'une chaîne de Markov homogène et irréductible à transitions rares avec pour "fonction de coût" $V(\sigma,\sigma^x) = (E(\sigma^x) - E(\sigma))^+$ et $V(\sigma,\eta) = +\infty$ si σ et η diffèrent de plus d'un spin.

La loi stationnaire de la chaîne est la *distribution de Gibbs* : $\mu_\beta(\sigma) = \frac{1}{Z}e^{-\beta E(\sigma)}$ où Z est la fonction de partition, $Z = \sum\limits_\sigma e^{-\beta E(\sigma)}$. On déduit de la section précédente que *l'énergie virtuelle,* $W(\sigma)$ est précisément égale à l'énergie $E(\sigma)$. De même, on a des expressions explicites des grandeurs introduites précédemment en fonction de l'énergie. Ainsi, la quantité $H(\gamma)$ où $\gamma = (\xi_1,...,\xi_n)$ se simplifie en $\max\limits_{1\leqslant i\leqslant n} E(\xi_i)$ si ξ_{i+1} ne diffère de ξ_i que d'un spin pour chaque i, et $+\infty$ dans le cas contraire.

La définition des cycles se simplifie aussi : $\sigma\mathcal{R}_\lambda\eta$ si et seulement si $\sigma = \eta$ ou il existe une suite de spins $x_1,...,x_n$ telle que pour tout $1 \leqslant i \leqslant n$ la configuration σ modifiée par le retournement des spins $x_1,...,x_i$ (configuration que l'on note $\sigma^{x_1,\dots,x_i}$) a une énergie inférieure ou égale à λ et $\eta = \sigma^{x_1,\dots,x_n}$. Autrement dit, dans un cycle π il existe un niveau minimum, noté $\lambda(\pi)$, tel que l'on peut passer d'un point à l'autre du cycle par retournements successifs de spins en restant toujours à une énergie inférieure ou égale à $\lambda(\pi)$.

Notation: On note $\pi(\sigma,\lambda)$ le plus grand cycle tel que $\lambda(\pi) \leqslant \lambda$.

Nous introduisons ici quatre definitions indispensables pour la suite :

Définition: *Soit π un cycle :*

1. *l'énergie du cycle est définie par* $E(\pi) = \min\limits_{\sigma\in\pi} E(\sigma)$

2. *Le fond du cycle est l'ensemble des points d'énergie minimale* $F(\pi) = \{\sigma \in \pi : E(\sigma) = E(\pi)\}$
3. *la frontière du cycle est l'ensemble* $B(\pi) = \{\sigma \notin \pi : \exists \eta \in \pi, \exists x, \sigma = \eta^x\}$
4. *la frontière principale du cycle est l'ensemble* $\widetilde{B}(\pi) = \{\sigma \in B(\pi) : E(\sigma) \leqslant E(\pi) + H(\pi)\}$

Enfin, l'équation 4 de la proposition 3.8. permet de trouver une expression simple de la hauteur d'un cycle : on a bien sûr $\min_{\sigma \notin \pi} H(\eta, \sigma) = \max(\min_{\sigma \in B(\pi)} E(\sigma), E(\pi))$ et donc $H(\pi) = \max_{\eta \in C}(\min_{\sigma \notin C} H(\eta, \sigma) - W(\eta)) = \min_{\sigma \in B(\pi)} (E(\sigma) - E(\pi))^+$. De même, la proposition 3.7. mojntre que la frontière princimpale de π est, du poin t de vue probabiliste, l'ensemble des points de sortie de π qui apparaissent avec une probabilité qui ne décrît pas exponentiellement vers 0 quand β tend vers l'infini.

4.2. **Suites de points cols de coût nul.** Nous sommes maintenant en mesure de rechercher toutes les suites de points cols $(s_0, ..., s_{2r+1})$ de coût nul. Nous étudions le trajet suivi avant le premier passage en $\underline{+1}$ après le dernier passage en $\underline{-1}$. Par suite, dans notre cas, $D = \underline{+1}^c$ et $\{x_0\} = \underline{-1}$. L'expression du coût est alors :

$$V_{\underline{-1}}(s_0, \ldots, s_{2r+1}) = W_{\underline{+1}^c}(\underline{-1}, \underline{-1}) + V(\underline{-1}, s_1) +$$
$$\sum_{k=1}^{r} \left(E(s_{2k}) + (E(s_{2k+1}) - E(s_{2k}))^+ - H(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) - E(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))\right)$$

Nous allons nous appuyer sur les remarques suivantes :

1. Pour tout cycle π et $x \in \pi, y \in B(\pi)$ tel que x et y communiquent, on a $E(x) + (E(y) - E(x))^+ \geqslant H(\pi) + E(\pi)$ avec égalité si et seulement si $y \in \widetilde{B}(\pi)$ (c'est une conséquence directe des définitions précédentes).
2. On a toujours : $E(s_{2k}) + (E(s_{2k+1}) - E(s_{2k}))^+ - H(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) - E(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) \geqslant \max(E(s_{2k}), E(s_{2k+1})) - \max(E(s_{2k-2}), E(s_{2k-1}))$(là aussi, c'est une conséquence immédiate des définitions).
3. D'après ce qui précède (proposition 3.6.) $W_{\underline{+1}^c}(\underline{-1}, \underline{-1}) = -H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) - E(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + E(\underline{-1})$. Nous verrons par la suite que $E(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) = E(\underline{-1})$. Par conséquent $W_{\underline{+1}^c}(\underline{-1}, \underline{-1}) = -H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$.

On note $r_* = \min\{k : s_{2k+1} \notin \pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)\}$. On a alors les inégalités suivantes, puisque $E(s_1) - E(\underline{-1}) = 2d - h \geqslant 0$:

$$- H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + V(\underline{-1}, s_1) +$$
$$\sum_{k=1}^{r_*} \left(E(s_{2k}) + (E(s_{2k+1}) - E(s_{2k}))^+ - H(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) - E(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))\right) \geqslant$$
$$- H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + V(\underline{-1}, s_1) + \max(E(s_{2r_*}), E(s_{2r_*+1})) - \max(E(\underline{-1}), E(s_1)) =$$
$$- H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + E(s_{2r_*+1}) - E(\underline{-1}) \geqslant 0$$

Il en résulte que si $V_{\underline{-1}}(s_0, ..., s_{2r+1}) = 0$ on a nécessairement :

1. $\forall k, r_* + 1 \leqslant k \leqslant r \; s_{2k+1} \in \widetilde{B}(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))$
2. $s_{2r_*+1} \in \widetilde{B}(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$

Pour trouver une condition nécessaire et suffisante nous allons utiliser la propriété de réversibilité de la dynamique de Métropolis :

Proposition 4.1. *Si $(s_0,...,s_{2r+1})$ est une suite de points cols pour le chemin de sortie de $\{x_0\}$ à D, $(s_{2r+1},...,s_0)$ est une suite de points cols pour le chemin de sortie de D^c à $\{x_0\}^c$. Cela forme une bijection entre les suites de points cols de $\{x_0\}$ à D et celles de D^c à $\{x_0\}^c$.*

preuve: Il suffit de constater que $s_{2k} \in \pi(s_{2k-1}, D\backslash\{x_0\}) \Longleftrightarrow s_{2k-1} \in \pi(s_{2k}, \{x_0\}^c \backslash D^c)$ et $s_{2k+1} \in B(\pi(s_{2k}, D \setminus \{x_0\})) \Longleftrightarrow s_{2k} \in B(\pi(s_{2k+1}, \{x_0\}^c \setminus D^c))$. □

Plus précisément, en notant $s'_k = s_{2r+1-k}$:

$$- H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + V(\underline{-1}, s_1) + \sum_{k=1}^{r_*} \big(E(s_{2k}) + (E(s_{2k+1}) - E(s_{2k}))^+ - H(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) - E(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))\big) =$$

$$- H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) + E(s'_{2(r-r_*)+1}) + (E(s'_{2(r-r_*)}) - E(s'_{2(r-r_*)+1}))^+ - E(\underline{-1}) + \sum_{k=r-r_*+1}^{r} \big(E(s'_{2k+1}) + (E(s'_{2k}) - E(s'_{2k+1}))^+ - H(\pi(s'_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)) - E(\pi(s'_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))\big)$$

Or, puisque $E(s'_{2(r-r_*)}) > E(s'_{2(r-r_*)+1})$ par définition de r_* :
$E(s'_{2(r-r_*)+1}) + (E(s'_{2(r-r_*)}) - E(s'_{2(r-r_*)+1}))^+ = E(s'_{2(r-r_*)}) \geqslant H(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) - E(\underline{-1})$

Si $V_{\underline{-1}}(s_0,...,s_{2r+1}) = 0$ toutes les inégalités précédentes deviennent des égalités et $s'_{2k+1} \in \widetilde{B}(\pi(s'_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))$ pour $r - r_* + 1 \leqslant k \leqslant r$; réciproquement si cette dernière condition est vérifiée ainsi que les conditions précédentes numérotées 1 et 2 on vérifie que $V_{\underline{-1}}(s_0,...,s_{2r+1}) = 0$. On obtient ainsi une condition nécessaire et suffisante pour que $V_{\underline{-1}}(s_0,...,s_{2r+1}) = 0$:

1. $s_{2r_*+1} \in \widetilde{B}(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$
2. $\forall k, r_* + 1 \leqslant k \leqslant r \; s_{2k+1} \in \widetilde{B}(\pi(s_{2k}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))$
3. $\forall k, 0 \leqslant k \leqslant r_* \; s_{2k} \in \widetilde{B}(\pi(s_{2k+1}, \{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c))$

La stratégie va donc consister à chercher tous les éléments $\sigma \in \widetilde{B}(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$ susceptibles d'apparaître sur le chemin de sortie, puis pour chaque σ trouver toutes les suites de cycles $\pi_0, ..., \pi_r$ dans $\mathcal{M}(\{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c)$ telles que $\sigma \in \pi_0, \underline{+1} \in \pi_r$ et $\widetilde{B}(\pi_k) \cap \pi_{k+1} \neq 0$ pour $0 \leqslant k \leqslant r$. Ensuite, on cherchera les points s_{2k} et s_{2k+1} tels que $s_{2k+1} \in \widetilde{B}(\pi_k) \cap \pi_{k+1}$ et ne diffère de s_{2k} que d'un spin. Enfin, on réalisera le même travail dans l'autre sens pour le trajet de $\underline{-1}$ à σ.

4.3. **Le fond des cycles.** Pour suivre ce programme, et en particulier pour décrire les cycles rencontrés sur le chemin de sortie, nous allons donner deux théorèmes concernant les configurations qui appartiennent au fond d'un cycle. Leur preuve se base sur la caractéristique suivante du profil d'énergie de la dynamique de Métropolis :

Remarque: Pour deux configurations de spins σ et η, on note $\eta \subset \sigma$ si les spins + de η sont aussi + dans la configuration σ. Alors si $\eta \subset \sigma \subset \xi$ on a l'encadrement $E(\sigma \setminus \eta) - E(\sigma) \leqslant E(\xi \setminus \eta) - E(\xi)$. Cela signifie que la variation d'énergie qui résulte du retournement d'un groupe donné de spins + à l'intérieur d'une configuration augmente si cette configuration augmente (cela se vérifie aisément avec l'expression de $E(\sigma)$).

Proposition 4.2. *Soit π un cycle, $\sigma \in F(\pi)$ et $(x_1, ..., x_n)$ n spins tels que pour tout $j \in \{1, ..., n\}$ $\sigma^{x_1,\dots,x_j} \in \pi$. Alors, s'il on note, pour $\varepsilon = \pm 1$, $\sigma^{(x_1,\dots,x_j)^\varepsilon}$ la configuration obtenue à partir σ en retournant les spins x_i tels que $\sigma(x_i) = \varepsilon$, $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^+}$ et $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^-}$ appartiennent aussi à π.*

preuve: On procède par récurrence sur n. Si $n = 1$, c'est immédiat. Supposons la proposition vraie au rang n. Soit $\xi = \sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-}$et η la configuration telle que $\sigma \setminus \eta = \sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}$. Par hypothèse, $\xi \setminus \eta \in \pi$, donc $E(\xi \setminus \eta) \leqslant \lambda(\pi)$. Si $\sigma(x_{n+1}) = -1$, $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^+} = \sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}$, donc par hypothèse de récurrence : $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^-} \in \pi$ et $\sigma \setminus \eta \in \pi$. Donc $\xi \in B(\pi)$ et $E(\sigma \setminus \eta) \geqslant E(\sigma) = E(\pi)$. De plus d'après la remarque précédente : $E(\xi) \leqslant E(\xi \setminus \eta) + E(\sigma) - E(\sigma \setminus \eta) \leqslant \lambda(\pi)$ donc $\xi \in \pi$. Le raisonnement est identique si $\sigma(x_{n+1}) = +1$. □

Proposition 4.3. *Soit π un cycle et $\sigma \in \pi$ telle que pour tout $\varepsilon \in \{+1, -1\}$ et toute suite de taille n $(x_1, ..., x_n)$ de spins du même sens ε et tout j entre 1 et n, on ait $\sigma^{x_1,\dots,x_j} \in \pi$ et $E(\sigma^{x_1,\dots,x_n}) \geqslant E(\sigma)$ avec égalité si et seulement si $\sigma^{x_1,\dots,x_n} = \sigma$. Alors $F(\pi) = \{\sigma\}$, et pour toute suite de spins $(x_1, ..., x_n)$ telle que $\sigma^{x_1,\dots,x_j} \in \pi$ quel que soit j dans $\{1, ..., n\}$, et pour chaque $\varepsilon \in \{+1, -1\}$, on a $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^\varepsilon} \in \pi$, $E(\sigma^{x_1,\dots,x_n}) \geqslant E(\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^\varepsilon})$.*

preuve: Toujours par récurrence sur n, on suppose la propriété vraie au rang n, et on prend une suite de spins $(x_1, ..., x_{n+1})$ vérifiant la propriété de l'énoncé. Si $\sigma(x_{n+1}) = -1$, alors $\sigma^{(x_1,\dots,x_n)^+} = \sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}$ donc par hypothèse de récurrence, $\sigma^{(x_1,\dots,x_j)^+} \in \pi$ pout tout $j \in \{1, ..., n+1\}$. Comme, par hypothèse, $E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}) \geqslant E(\sigma)$, $E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-}) \leqslant E(\sigma^{x_1,\dots,x_{n+1}}) + E(\sigma) - E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}) \leqslant \lambda(\pi)$. Donc $\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-} \in \pi$, et par hypothèse sur σ, $E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-}) \geqslant \sigma$. Le raisonnement est semblable dans le cas $\sigma(x_{n+1}) = +1$. Dans les deux cas il y a égalité si et seulement si $E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+}) = E(\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-}) = E(\sigma)$ et ceci conduit, par hypothèse sur σ, à $\sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^+} = \sigma^{(x_1,\dots,x_{n+1})^-} = \sigma$ et donc $\sigma^{x_1,\dots,x_{n+1}} = \sigma$. □

5. Modèle d'Ising et polyominos

5.1. **Le problème variationnel.** Autour de chaque noeud du réseau $\mathbb{Z}^d$ considérons le carré ou cube de côté 1 et de centre le noeud en question. Remplissons ce carré si le spin du noeud est $+$, et ne faisons rien s'il est $-$. A chaque configuration σ on associe ainsi une figure du plan ou de l'espace que l'on appelle *polyomino*. L'avantage de ce point de vue est que l'énergie de la configuration s'exprime alors très simplement en fonction de l'aire et du périmètre, en dimension 2, ou du volume et de l'aire latérale en dimension 3, du polyomino correspondant. Désormais nous confondrons, par abus de langage, polyominos et configurations. Dans la suite nous nous intéresserons essentiellement au cas plus simple de la dimension 2. Alors, si $p(\sigma)$ désigne le périmètre du polyomino et $a(\sigma)$ son aire (N est la taille du réseau, cf. supra) :

$$slE(\sigma) = -\frac{h}{2}\sum \sigma(x) - \frac{1}{2}\sum_{x\sim y} \sigma(x)\sigma(y) = p(\sigma) - ha(\sigma) + N^2(\frac{h}{2} - 1)$$

De plus comme la dynamique ainsi que la décomposition en cycles restent inchangées par ajout d'une constante arbitraire à l'énergie, nous considèrerons désormais que $slE(\sigma) = p(\sigma) - ha(\sigma)$.

Nous introduisons ici des hypothèses supplémentaires, très naturelles, sur h : nous supposerons h assez petit et N assez grand pour que, jusqu'à la goutte critique, le comportement sur le tore soit identique à celui observé sur le réseau infini $\mathbb{Z}^2$. Typiquement, il faut que la goutte critique loge dans le tore, soit $hN > K$ pour K assez grand.

Nous allons maintenant nous intéresser plus précisément à ces polyominos. Notre première tâche pour trouver la *suite des points cols* est de déterminer la frontière principale de $\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)$. Pour cela nous allons d'abord déterminer $\lambda(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$, c'est-à-dire la barrière d'énergie à franchir pour passer de $\underline{-1}$ à $\underline{+1}$. Comme tout chemin qui part de $\underline{-1}$ pour arriver à $\underline{+1}$ passe par des polyominos de toutes les aires entre 0 et N^2, il nous faut donc déterminer pour chaque n entre 0 et N^2 les configurations d'énergie minimale. La valeur de $\lambda(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c))$ sera précisément le maximum de ces valeurs. Nous sommes donc ramenés au problème combinatoire de trouver tous les polyominos de périmètre minimal pour une aire donnée. La proposition 5.2. qui va suivre nous donnera presque toute la réponse :

Proposition 5.1. *Pour tout entier $n \in \mathbb{N}$ il existe un unique triplet (l, k, ε) tel que :*

$$\varepsilon \in \{0, 1\}, \quad 0 \leqslant k < l + \varepsilon \text{ et } n = l(l + \varepsilon) + k$$

preuve: La décomposition existe car pour l fixé, $l(l + \varepsilon) + k$ prend toutes les valeurs entre l^2 et $(l + 1)^2 - 1$ lorsque ε et k varient. De plus l vaut nécessairement $\lfloor \sqrt{n} \rfloor$ et k est le reste de la division euclidienne de n par $l + \varepsilon$.

On note M_n l'ensemble des polyominos d'aire n et de périmètre minimal, et $\widetilde{M}_n$ l'ensemble des *polyominos principaux* obtenus en collant une barre de longueur k sur un des côtés d'un rectangle de côtés l et $l + \varepsilon$. La figure 1 montre un élément de M_{43} et un élément de $\widetilde{M}_{43}$ $(43 = 6 \times 7 + 1)$. ftbpF287pt116.4375pt0ptFigure

Proposition 5.2. *On a $\widetilde{M}_n \subset M_n$.*

preuve: Remarquons d'abord que les éléments de $\widetilde{M}_n$ ont tous même périmètre. Nous allons prendre un élément quelconque de M_n et le transformer en un élément de $\widetilde{M}_n$ par une suite d'opérations qui conservent l'aire et n'augmente pas le périmètre. Nous plaçons le polyomino dans le quadran supérieur droit d'un repère avec un axe des abscisses et un axe des ordonnées. Puis, par gravité, nous faisons tomber les petits carrés d'abord sur l'axe des abscisses puis sur l'axe des ordonnées et ainsi de suite jusqu'à ce que cette opération ne modifie pas le polyomino obtenu. On obtient alors un profil décroissant de haut en bas et de gauche à droite. Il est facile de voir que cette opération ne modifie pas l'aire et n'augmente pas le périmètre du polyomino. Le périmètre du polyomino s'écrit alors $p = 2(r + c)$ où r et c sont les nombres de rangées et de colonnes. On minimise le périmètre en diminuant le nombre de rangées par exemple : on obtient alors un rectangle de côtés $l_1 \leqslant l_2$ accollé à une barre de longueur $r < l_1$. On a $n = l_1 l_2 + r$ et le périmètre est $p = 2(l_1 + l_2 + 1_{r \neq 0}) = 2\lceil l_1 + \frac{n}{l_1} \rceil$. Le minimum de p est atteint pour $l_1 = \lfloor \sqrt{n} \rfloor$ et $l_2 = l_1$ ou $l_1 + 1$. De plus r est le reste de la division euclidienne de n par l_1. L'élément obtenu est donc bien dans $\widetilde{M}_n$. □

Nous sommes maintenant en mesure de calculer l'energie minimale $\mathcal{E}(n)$ d'une configuration à n spins. Le périmètre d'un polyomino de $\widetilde{M}_n$, vaut $2(2l+\varepsilon)$ si $k=0$ et $2(2l+\varepsilon)+2$ si $k\neq 0$. La figure 2 montre le profil de $\mathcal{E}(n)$ pour h de l'ordre de $0,2$.

ftbpF432.125pt256.0625pt0ptFigure

5.2. **Quelques propriétés combinatoires.** On note S_n l'ensemble des *polyominos standards*, sous-ensemble de $\widetilde{M}_n$ qui contient les polyominos tels que la barre de longueur k soit accollée au côté le plus petit du rectangle $l\times(l+\varepsilon)$. Les deux remarques suivantes vont nous permettre de déterminer le chemin de sortie :

Proposition 5.3. *Pour tout n et tout polyomino $c\in\widetilde{M}_n$, il existe une suite $c_0,...,c_n$ de polyominos telle que $c_i\in\widetilde{M}_i$ pour tout i, $c_0=\emptyset$, et $c_n=c$.*

Proposition 5.4. *Pour tous entiers $m\leqslant n$ et tout polyomino $c\in S_m$, il existe une suite $c_0,...,c_n$ de polyominos telle que $c_i\in S_i$ pour tout i, $c_0=\emptyset$, et $c_m=c$.*

Pour passer de $\underline{-1}$ à $\underline{+1}$, il faut passer par toutes les aires comprises entre 0 et N^2. Par conséquent $H(\underline{-1},\underline{+1})\geqslant\max_{0\leqslant n\leqslant N^2}\mathcal{E}(n)$, vu les hypothèses faites sur N. De plus par la proposition précédente on peut passer de $\underline{-1}$ à $\underline{+1}$ en restant dans des configurations standards et donc minimales. Il vient : $H(\underline{-1},\underline{+1})=\max_{0\leqslant n\leqslant N^2}\mathcal{E}(n)$. Cherchons les valeurs de n qui maximisent $\mathcal{E}(n)$ en nous servant des éléments de $\widetilde{M}_n$. Nécessairement n est de la forme $l(l+\varepsilon)+1$ car en rajoutant k on ne change pas le périmètre mais on augmente l'aire donc diminue l'énergie. De plus la différence d'énergie entre deux n consécutifs de cette forme est de $2-hl$:

$$l^2+1\underset{\Delta\mathcal{E}=2-h(l-1)}{\longrightarrow}l(l+1)+1\underset{\Delta\mathcal{E}=2-hl}{\longrightarrow}(l+1)^2+1$$

Le maximum est donc atteint pour l'aire $n_c=l_c(l_c+1)+1$ avec $l_c=\lceil\frac{2}{h}\rceil$, plus petit entier supérieur ou égal à $\frac{2}{h}$. Il vient : $\mathcal{E}(n_c)=H(\underline{-1},\underline{+1})=4\lceil\frac{2}{h}\rceil-h\lceil\frac{2}{h}\rceil^2+h\lceil\frac{2}{h}\rceil-h$. Et $\lambda(\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c))=\max(E(\sigma):E(\sigma)<\mathcal{E}(n_c),a(\sigma)<n_c)$. De plus $\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c)$ ne contient que des configurations d'aire inférieure à n_c.

La proposition suivante est cruciale pour déterminer la forme des gouttes critiques :

Proposition 5.5. *On a $M_n=\widetilde{M}_n$ si et seulement si n est de la forme $l^2,l(l+1)-1,l(l+1)$ ou $(l+1)^2-1$.*

preuve: Soit $n=l(l+\varepsilon)+k$ tel que $M_n=\widetilde{M}_n$. Le polyomino formé à partir du rectangle $l\times(l+\varepsilon)$ en enlevant un carré à un coin du rectangle et en accollant une barre de longueur k sur un côté opposé au coin est toujours dans M_n. Il n'est dans $\widetilde{M}_n$ que si $k=0$ ou $k=l+\varepsilon-1$. Réciproquement si $k=0$ ou $k=l+\varepsilon-1$, n est de la forme ci-dessus et on va montrer que $M_n=\widetilde{M}_n$. Soit $c\in M_n$, la suite de transformations décrite dans la preuve de la proposition 5.2. conduit, sans changer aire ni périmètre, à un rectangle $l_1\times l_2$ ($l_1\leqslant l_2$) accollé à une barre de longueur k. De même, pour que le périmètre ne diminue pas en poussant les carrés, il faut que la configuration obtenue après les projections soit déjà de la forme ci-dessus. Or on a vu dans cette même preuve que le minimum du périmètre était atteint pour la valeur $l_1=\lfloor\sqrt{n}\rfloor$ et pour celle-la seule, donc $l_1=l$, et $l_2=l+\varepsilon$. Puisque le périmètre reste inchangé, c doit être initialement connexe pour que les projections ne réduisent pas le périmètre. Le périmètre de c est alors plus grand ou égal à celui du plus petit rectangle le contenant ; ce rectangle doit donc être $(l+1_{k\neq 0})\times(l+\varepsilon)$. Vue la forme de n il y a moins de deux cases du rectangle qui ne sont pas dans c et par suite $c\in\widetilde{M}_n$. $\square$

Par suite, s'il n'y pas d'unicité pour la forme de la goutte critique ; il y a par contre unicité de la configuration précédente d'aire tout juste inférieure. Cette configuration est un rectangle de côtés l_c et l_c-1.

Notons enfin une dernière remarque dont on fera grand usage pour caractériser certains cycles rencontrés sur le chemin de sortie :

Proposition 5.6. *On cherche à enlever k carrés unités à un rectangle $l_1\times l_2$ avec $k<\min(l_1,l_2)$. La seule façon de le faire est d'enlever k carrés situés à chaque fois à un coin, c'est-à-dire possédant au moins deux côtés sur la frontière du polyomino. De même s'il on cherche à rajouter k carrés unités au rectangle pour obtenir un périmètre minimal, il faut en faire une barre et l'accoller à un des côtés du rectangle.*

6. Le chemin de sortie

Dans cette dernière section nous allons aboutir aux résultats promis en introduction, à savoir donner une description précise des chemins de sortie les plus probables. A cette fin, nous allons suivre la stratégie décrite plus haut. Le prochain résultat détermine les configurations de la frontière principale du cycle $\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c)$ qui sont susceptibles d'être sur le chemin de sortie.

Proposition 6.1. *Le chemin de sortie passe par une configurations de $\widetilde{M}_{n_c}$ qui est dans $\widetilde{B}(\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c))$.*

preuve: Pour $\sigma\in\widetilde{M}_{n_c}$, par la proposition 5.3., il existe une suite de configurations qui sont des polyominos principaux et croissent depuis $\underline{-1}$ jusqu'à σ en ajoutant un spin + à chaque coup. Toutes les configurations avant σ ont une énergie inférieure à $\mathcal{E}(n_c)$, donc sont dans $\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c)$. Ainsi σ appartient à la frontière de ce cycle. De plus $E(\sigma)=H(\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c))$ donc σ appartient à la frontière principale du cycle.Inversemant, on fait le raisonnement suivant : tout chemin de sortie passe à un moment donné par une configuration d'aire n_c ; cette configuration n'est donc plus dans $\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c)$, et par réversibilité, elle n'est pas non plus dans $\pi(\underline{+1},\underline{-1}^c)$; d'après la forme de la suite de points cols de coût nul décrite plus haut, la configuration doit être dans la frontière principale des deux cycles, et donc d'aire $\mathcal{E}(n_c)$. Donc $\sigma\in M_{n_c}$ et il existe un polyomino η dans $\pi(\underline{-1},\underline{+1}^c)$ qui communique avec σ (i.e. ils ne diffèrent que d'un spin). Alors $4l_c-2\leqslant p(\eta)\leqslant 4l_c-h$. Donc $p(\eta)=4l_c-2=\min\{p(\xi):a(\xi)=n_c-1\}$ et $\eta\in M_{n_c-1}$. D'après la proposition 5.4., puisque n_c-1 est de la forme voulue, $\eta\in\widetilde{M}_{n_c-1}$. Et, comme σ communique avec η, il est facile de voir que $\sigma\in\widetilde{M}_{n_c}$.

Ensuite il nous faut trouver les cycles rencontrés sur la partie descendante du chemin de sortie, de la goutte critique à l'équilibre. La remarque suivante règle la question de savoir si les cycles rencontrés sont maximaux ou non.

Remarque: Soit $\pi_0,\dots,\pi_n$ des cycles inclus dans $\{\underline{-1},\underline{+1}\}^c$ tels que $\pi_i\cap\pi_{i+1}=\emptyset$ et $\pi_{i+1}\cap\widetilde{B}(\pi_i)\neq\emptyset$ pour tout i, et $\widetilde{B}(\pi_n)\cap\{\underline{-1},\underline{+1}\}\neq\emptyset$. Alors ce sont des cycles maximaux de $\{\underline{-1},\underline{+1}\}^c$. Pour voir cela, il suffit de considérer

π_0, les autres vérifiant les mêmes hypothèses. Si π est un cycle qui contient strictement π_0, il contient $\widetilde{B}(\pi_0)$ donc rencontre π_1. Les cycles ayant une structure d'arbre et π_0 étant disjoint de π_1, on doit avoir $\pi_1 \subset \pi$ strictement. De proche en proche, on a ainsi $\pi \cap \{\underline{-1}, \underline{+1}\} \neq \emptyset$.

Le point clé pour trouver la suite descendante des cycles est le théorème suivant qui décrit le cycle maximal qui contient le rectangle $l_1 \times l_2$.

Proposition 6.2. *Soit l_1 et $l_2 \geqslant l_c$, les cycles suivants sont maximaux :*

$\pi(l_1 \times l_2, A)$ avec $A = \{\sigma : E(\sigma) < 2(l_1+l_2+1) - h(l_1 \times l_2 + 1)\}$

$\{\sigma\}$ où σ est un rectangle $l_1 \times l_2$ accollé à une barre de longueur k, $0 < k < l_1 - l_c + 2$

De plus $F(\pi(l_1 \times l_2, A)) = \{l_1 \times l_2\}$ et $\pi(l_1 \times l_2, A)$ est constitué de configurations ayant entre $l_1 \times l_2 - l_c + 2$ et $l_1 \times l_2$ spins + tous inclus dans un même rectangle $l_1 \times l_2$. Enfin, la frontière principale de ce cycle est constitué des polyominos obtenus en accollant un carré unité au rectangle $l_1 \times l_2$, et il existe un chemin de cycles maximaux partant de ce cycle et arrivant à un cycle contenant $\underline{+1}$.

preuve : Nous allons appliquer le résultat sur le fond des cycles (proposition 4.3.). Montrons que nous sommes bien dans les hypothèses de l'énoncé pour $\pi = \pi(l_1 \times l_2, A)$. On note $\sigma = l_1 \times l_2$ et considère une suite de spins $(x_1, ..., x_n)$ telle que les $\sigma(x_i)$ soient du même signe et que pour tout $j \in \{1, ..., n\}$ $\sigma^{x_1,...,x_j} \in \pi$. Nécessairement les $\sigma(x_i)$ valent $+1$, car ajouter à σ un spin + égalerait ou dépasserait la limite supérieure d'énergie $2(l_1 + l_2 + 1) - h(l_1 \times l_2 + 1)$. Par suite, on va enlever k carrés unités au rectangle $l_1 \times l_2$. D'après la propriété 5.6.,

$$2(l_1 + l_2 + 1) - h(l_1 \times l_2 + 1) > E(\sigma^{x_1,...,x_k}) \geqslant 2(l_1 + l_2) - h(l_1 \times l_2 - k)$$

donc $(k+1)h < 2$ c'est-à-dire $k \leqslant l_c - 2$. De plus $2(l_1+l_2) - h(l_1 \times l_2 - k) > E(\sigma)$ pour $k \leqslant l_c - 2$. Ainsi les hypothèses de la proposition 4.3. sont satisfaites. Il en résulte que $F(\pi) = \{l_1 \times l_2\}$. De plus, on peut enlever jusqu'à $l_c - 2$ carrés "coins" car ils réalisent l'égalité dans l'inégalité précédente. Enfin si η est dans la frontière principale du cycle, son énergie est $2(l_1 + l_2 + 1) - h(l_1 \times l_2 + 1)$, donc son aire est $l_1 \times l_2 + 1$ et η comunique avec π. (Pour certaines valeurs de h, $\frac{2}{h}$ entier, η peut aussi être obtenue en enlevant $l_c - 1$ carrés "coins" à $l_1 \times l_2$. Mais la frontière principale de $\{\eta\}$ est incluse dans π, sauf si l_1 ou $l_2 = l_c$, auquel cas on peut retomber sur un rectangle inférieur.) Or le seul élément de π d'aire $l_1 \times l_2$ est σ : c'est une conséquence immédiate de la propriété 4.2. Par suite η est le rectangle $l_1 \times l_2$ accollé à un carré unité. La suite est simple : il suffit de remarquer que les polyominos de la forme $l_1 \times l_2$ accollés le long d'un côté de longueur l_1 à une barre de longueur k, $1 \leqslant k < l_1$, ont pour frontière principale un (ou deux selon la position de la barre) polyomino de la même forme, mais avec une barre de longueur $k + 1$ ou $k - 1$ ($k - 1$ seulement si $k = 1$). Ainsi, partant de la configuration critique (rectangle $l_c \times (l_c - 1)$ plus un carré unité accollé), la suite de cycles passe par des cycles singletons lorsque la configuration est un rectangle $l_1 \times l_2$ accollé, sur le côté l_1, à une barre de longueur strictement inférieure à $l_1 - (l_c - 2)$. Puis elle rentre dans un cycle comme π ci-dessus et recommence une suite de singletons. Le seul moment où la suite peut revenir en arrière (c'est-à-dire voir l'aire diminuer) est quand elle est dans une configuration avec un rectangle plus un carré accollé, au quel cas elle peut revenir dans un cycle du type de π, ou encore, pour certaines valeurs de h comme décrit précédemment. Ce phénomène écarté, toute suite conduit à augmenter l'aire du polyomino, donc conduit à la configuration $\underline{+1}$. D'après la remarque ci-dessus, tous les cycles rencontrés (puisque qu'ils sont dans $\{\underline{-1}, \underline{+1}\}^c$) sont maximaux. □

Remarque: Compte tenu des conditions aux limites imposées au système, la dernière proposition doit être légèrement modifiée lorsqu'une des longueurs l_1 ou l_2 devient supérieure ou égale à $N-1$. Dans ce cas les rectangles sont remplacés par des tores et seule la largeur du tore représente la taille de la configuration. Mais les résultats ci-dessus demeurent.

Le mécanisme décrit ci-dessus ne fonctionne que si à tout moment l_1 et l_2 sont supérieurs ou égaux à l_c. C'est le cas si et seulement si la configuration critique est un polyomino standard, c'est-à-dire lorsque le carré unité accollé au rectangle se trouve sur un côté de longueur l_c. En effet, dans ce cas de figure, on peut soit retomber dans $\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)$ soit arriver dans le cycle π ci-dessus avec l_1 et l_2 égaux à l_c. Dans le cas contraire, on est dans un cul-de-sac comme le montre la proposition suivante :

Proposition 6.3. *Les cycles suivants sont maximaux :*

$\pi((l_c-1)\times(l_c+1), A)$ *avec* $A = \{\sigma : E(\sigma) < \mathcal{E}(n_c)\}$

$\{\sigma\}$ *où* σ *est obtenu en enlevant* l_c-2 *carrés "coins" au rectangle* $(l_c-1)\times(l_c+1)$

De plus $F(\pi((l_c-1)\times(l_c+1), A)) = \{(l_c-1)\times(l_c+1)\}$ *et* $\pi((l_c-1)\times(l_c+1), A)$ *est constitué de configurations ayant entre* $(l_c-1)\times l_c+2$ *et* $(l_c-1)(l_c+1)$ *spins* $+$ *tous inclus dans un même rectangle* $(l_c-1)\times(l_c+1)$ *. Enfin, la frontière principale de ce cycle est constituée des polyominos obtenus en enlevant* l_c-2 *carrés "coins" au rectangle* $(l_c-1)\times(l_c+1)$*, et il n'existe pas de chemin de cycles maximaux partant de ce cycle et arrivant à un cycle contenant* $\underline{+1}$*.*

preuve: On suit le même schéma de preuve que pour la proposition précédente : nous appliquons le résultat de la proposition 4.3. au cycle $\pi = \pi((l_c-1)\times(l_c+1), A)$. On note $\sigma = (l_c-1)\times(l_c+1)$ et considère une suite de spins $(x_1, ..., x_n)$ telle que les $\sigma(x_i)$ soient du même signe et que pour tout $j \in \{1, ..., n\}$ $\sigma^{x_1,\dots,x_j} \in \pi$. Nécessairement les $\sigma(x_i)$ valent $+1$, car ajouter à σ un spin $+$ égalerait ou dépasserait la limite supérieure d'énergie $\mathcal{E}(n_c)$. Par suite, on va enlever k carrés unités au rectangle $(l_c-1)\times(l_c+1)$. D'après la propriété 5.6.,

$$4l_c - h(l_c^2 - l_c + 1) > E(\sigma^{x_1,\dots,x_k}) \geqslant 4l_c - h(l_c^2 - 1 - k)$$

donc $h(l_c-k-2) > 0$ c'est-à-dire $k \leqslant l_c-3$. De plus $4l_c - h(l_c^2-1-k) > E(\sigma)$ pour $k > 0$. Ainsi les hypothèses de la proposition 4.3. sont satisfaites. Il en résulte que $F(\pi) = \{\sigma\}$. De plus on peut enlever jusqu'à l_c-3 carrés "coins" car ils réalisent l'égalité dans l'inégalité précédente. Enfin si η est dans la frontière principale du cycle, son énergie est $4l_c - h(l_c^2 - l_c + 1)$ et η communique avec π par une configuration $\xi \in \pi$, donc son aire est n_c. Or, tout élément de π est inclus dans le rectangle $(l_c-1)\times(l_c+1)$: ceci est une conséquence immédiate de la proposition 4.2. Par suite η est incluse dans le rectangle $(l_c-1)\times(l_c+1)$ et d'après la proposition 5.6. on l'obtient en enlevant l_c-3 carrés "coins" de ce même rectangle. Réciproquement, toute configuration de cette forme communique avec π et a pour énergie $\mathcal{E}(n_c)$, donc est dans la frontière principale de π. On en déduit que $\widetilde{M}_{n_c} \setminus S_{n_c}$ est inclus dans la frontière principale du cycle. Ainsi π est maximal, car tout cycle le contenant strictement contient sa frontière principale donc $\widetilde{M}_{n_c} \setminus S_{n_c}$, et donc $\underline{-1}$ car on peut passer de $\widetilde{M}_{n_c}$ à $\underline{-1}$ en restant à une énergie inférieure à $\mathcal{E}(n_c)$ (proposition 5.3.). Soit maintenant $\eta \in \widetilde{B}(\pi)$, nécessairement $E(\eta) = \mathcal{E}(n_c)$. Montrons que $\{\eta\}$ est un cycle maximal et regardons avec quels cycles il communique. Soit $\xi \in \widetilde{B}(\{\eta\})$, si $a(\xi) = n_c - 1$ alors, d'après la proposition 5.5., ξ est un rectangle $(l_c - 1) \times l_c$ donc on doit avoir $\eta \in \widetilde{M}_{n_c} \setminus S_{n_c}$. Réciproquement si $\eta \in \widetilde{M}_{n_c} \setminus S_{n_c}$, $(l_c - 1) \times l_c \in \widetilde{B}(\{\eta\})$ et tout cycle contenant strictement $\{\eta\}$ contient $(l_c - 1) \times l_c$ donc $\underline{-1}$. Ainsi $\{\eta\}$ est maximal. Si $a(\xi) = n_c + 1$, nécessairement $E(\xi) < E(\eta)$ (car on diminue l'énergie en rajoutant un carré "coin" à η) et de plus il existe un spin x tel que $\xi = \eta \cup \{x\}$. Comme le polyomino η est convexe, la seule possibilté est que x soit un carré unité avec deux côtés contre η et deux côtés en dehors, c'est-à-dire en fait que ξ s'obtient en enlevant $l_c - 3$ carrés "coins" à $(l_c - 1) \times (l_c + 1)$ donc $\xi \in \pi$. Ainsi $\{\eta\}$ est maximal. On voit donc que aucune suite de cycles maximaux partant de π ne conduit à $\underline{+1}$ sans repasser par $\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)$. $\square$

Ainsi, les configurations de $\widetilde{M}_{n_c} \setminus S_{n_c}$ sont des culs-de-sac : partant de l'une d'elles, aucune suite de cycles maximaux ne conduit à l'équilibre sans repasser par $\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)$. Les vraies gouttes critiques sont en fait les configurations de S_{n_c}.

Reste à étudier la phase ascendante du chemin de sortie. Nous avons une description similaire aux résultats précédents :

Proposition 6.4. *Soit $l < l_c$, les cycles suivants sont maximaux :*

$\pi(l \times l, A)$ avec $A = \{\sigma : E(\sigma) < \mathcal{E}(l(l-1)+1)\}$
$\pi(l \times (l+1), A)$ avec $A = \{\sigma : E(\sigma) < \mathcal{E}(l^2+1)\}$
$\{\sigma\}$ où σ est obtenu en enlevant $l-1$ carrés "coins" au rectangle $l \times (l+1)$
$\{\sigma\}$ où σ est obtenu en enlevant $l-1$ carrés "coins" au rectangle $l \times l$

De plus $F(\pi(l \times l, A)) = \{l \times l\}$ et $\pi(l \times l, A)$ est constitué de configurations ayant entre $l \times l - l + 2$ et $l \times l$ spins + tous inclus dans un même rectangle $l \times l$. Enfin, la frontière principale de ce cycle est constituée des polyominos obtenus en enlevant $l - 1$ carrés "coins" au rectangle $l \times l$, et il existe un chemin de cycles maximaux partant de ce cycle et arrivant à un cycle contenant $\underline{-1}$. On a le même énoncé en remplaçant $l \times l$ par *$l \times (l+1)$.*

preuve: Comme $l < l_c$, $\mathcal{E}(l^2+1) > \mathcal{E}(l(l-1)+1)$. L'aire maximale d'un élément de $\pi = \pi(l \times l, A)$ est l^2 ; de même l'aire minimale d'un élément de π est $l(l-1)+2$ car on peut passer de $l \times l$ à une configuration d'aire $l(l-1)+2$ en augmentant graduellement l'énergie jusqu'à $\mathcal{E}(l(l-1)+2) < \mathcal{E}(l(l-1)+1)$. Il en résulte aussi que $\{l \times l\} \subset F(\pi)$ et d'après la proposition 5.5., $\{l \times l\} = F(\pi)$. Enfin, d'après ce qui précède, il est facile de voir que les configurations de la frontière principale de π ont pour énergie $\mathcal{E}(l(l-1)+1)$ et donc s'obtiennent en enlevant $l-1$ carrés "coins" au rectangle $l \times l$. En ce qui concerne les rectangles $l(l+1)$ la preuve est identique. Soit maintenant η une configuration de $\widetilde{B}(\pi)$: alors si η est un rectangle avec un carré accollé, $\widetilde{B}(\{\eta\})$ est égal au rectangle sous-jacent, et sinon chaque carré de η a au plus deux côtés en contact avec l'extérieur du polyomino, donc $\widetilde{B}(\{\eta\})$ est une configuration de π. En évitant ces boucles (passage de π à $\{\eta\}$ avec retour sur π), l'aire ne fait que décroître et on a donc trouvé toutes les suites de cycles qui sont au départ d'un rectangle $l \times l$ ou $l \times (l+1)$. Elle conduisent toutes à $\underline{-1}$, ce qui prouve au passage que les cycles décrits ici sont maximaux. $\square$

La description du chemin de sortie est désormais complète. Nous n'avons plus qu'à recoller les deux morceaux ascendant et desendant pour obtenir le chemin de sortie, comme nous l'avions mentionné dans le cas général plus haut. La connaissance de la suite de cycles rencontrés et des points cols que nous possédons désormais est l'information la plus complète possible sur le comportement limite du système de spins. Nous pouvons notamment en déduire un grand nombre de résultats sur la loi limite du temps de relaxation, du temps passé dans un cycle, etc.Nous présentons les points clés de notre étude dans la conclusion ci-dessous.

7. Conclusion

L'application au modèle d'Ising stochastique de la méthode générale pour étudier la sortie d'un domaine dans le cas d'une chaîne de Markov à transition rares permet de décrire très précisément le comportement limite de la chaîne lors de son chemin de sortie, quand la température tend vers 0. Pendant le chemin de sortie, le système passe une fois et une seule par une configuration critique (polyomino de S_{n_c}) et y reste un temps très faible (pour tout $\varepsilon > 0$, le temps passé à l'arrêt dans cette configuration est inférieur à $e^{-\beta\varepsilon}$ avec une probabilité qui temps vers 1 quand β tend vers $+\infty$, d'après la proposition 3.8.). Pendant la phase ascendante, avant la goutte critique, le système est formé d'une seule goutte de la forme $l(l+\varepsilon)+k$ qui grossit régulièrement. D'après la proposition 3.4., le temps moyen passé entre deux rectangles consécutifs est équivalent à $e^{\beta(l-1)}$, où l est la longueur du plus petit côté du rectangle précédent. De même, pendant la phase descendante le système de spins reste sous la forme d'une goutte rectangulaire de spins plus qui ne fait que croître, jusqu'à la relaxation. Le système y reste un temps moyen équivalent à $e^{\beta(2-h)}$ quand β tend vers l'infini, pour chaque rectangle rencontré (c'est encore une application immédiate de la proposition 3.4.). Le temps passé entre la dernière visite en $\underline{-1}$ avant la première visite en $\underline{+1}$ se comporte comme le maximum du temps passé dans chaque cycle maximal, soit $e^{\beta(2-h)}$. Ainsi, avec une probabilité qui tend vers un quand la température tend vers 0, le système se relaxe selon ce chemin bien précis, en restant toujours connexe (il n'y a jamais qu'une seule goutte de spins plus). Enfin la proposition 3.8. donne le résultat suivant quant à la loi du temps de relaxation :

$$\forall\varepsilon > 0 \qquad P(e^{\beta(\mathcal{E}(n_c)-\varepsilon)} < \tau(\pi(\underline{-1}, \underline{+1}^c)) < e^{\beta(\mathcal{E}(n_c)+\varepsilon)}) \underset{\beta\to+\infty}{\longrightarrow} 1$$

Pour terminer, parlons de ce qu'il se passe en dimension trois. Les techniques mises en oeuvre dans les deux dernières sections sont identiques pour traiter la dimension trois, bien que pratiquement plus lourdes. Le chemin est exactement du même type, avec des gouttes critiques qui sont des quasi-cubes (parallélépipèdes dont la longueur des côtés est la même à une unité près) accollés à un polyomino critique de dimension deux. Le système se relaxe en passant par une suite croissante, puis décroissante de quasi-cubes. Et entre chaque quasi-cube le système se comporte comme en dimension deux : sur une des faces du quasi-cube un polyomino de dimension deux grossit selon les règles décrites ci-dessus jusqu'à remplir la face entière.

Les résultats de cette étude retrouvent l'heuristique décrite en introduction ainsi que les travaux de Schonmann mais ils apportent en plus une description beaucoup plus complète et générale du phénomène de relaxation.

8. Sommaire

   (a) Lemmes de Freidlin et Wentzell appliqués aux chaînes de Markov à transitions rares
   (b) Les cycles
   (c) La suite des "points cols"
   (d) Temps de sortie d'un domaine
4. Application au modèle d'Ising : stratégie pour trouver le chemin de sortie
   (a) Expression des coefficients W,H,V
   (b) Suites de "points cols" de coût nul
   (c) Le fond des cycles
5. Modèle d'Ising et polyominos
   (a) Le problème variationnel
   (b) Quelques propriétés combinatoires
6. Le chemin de sortie
7. Conclusion

9. Bibliographie

[C] Catoni O. *Simulated annealing algorithms and Markov chains with rares transitions*, cours de DEA Paris XI (1995)

[CC] Catoni O. & Cerf R. *The exit path of a Markov chain with rare transitions*, ESAIM:P&S (1996)

[AC] Alonso L. & Cerf R. *The three dimensional polyominoes of minimal area*, Electronic Journal Of Combinatorics (1996)

[BC] Ben Arous G. & Cerf R. *Metastability of the three dimensional Ising model on a torus at very low temperatures*, Electronic Journal Of Probability (1996)

[DGLR] Diu, Guthmann, Lederer, Roulet *Physique statistique*, Hermann (1989)

[E] Ellis R.S. Entropy, *Large deviations and Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (1985)

[FW] Freidlin M.I. & Wentzell A.D. *Random perturbations of dynamical systems*, Springer-Verlag, New-York, (1984)

[NS1] Neves E.J. & Schonmann R.H. *Critical droplets and metastability for a Glauber dynamics at very low temperatures*, Commun. Math. Phys. (1991)

[NS2] Neves E.J. & Schonmann R.H. *Behaviour of droplets for a class of Glauber dynamics at very low temperatures*, Prob. Th. Related Fields (1992)

[S] Schonmann R.H. *The pattern of escape from metastability of a stochastic Ising model,* Commun. Math. Phys., 147 (1992)