



HAL
open science

La Combinatoire : un outil pour l'étude d'une transition de phase magnétique en physique du solide

Isabelle Bieche

► **To cite this version:**

Isabelle Bieche. La Combinatoire : un outil pour l'étude d'une transition de phase magnétique en physique du solide. Modélisation et simulation. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG; Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1979. Français. NNT : . tel-00289165

HAL Id: tel-00289165

<https://theses.hal.science/tel-00289165>

Submitted on 19 Jun 2008

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE

présentée à

**Université Scientifique et Médicale de Grenoble
Institut National Polytechnique de Grenoble**

pour obtenir le grade de

**DOCTEUR DE 3^{ème} CYCLE
Mathématiques appliquées**

par

BIECHE Isabelle



**LA COMBINATOIRE : UN OUTIL POUR L'ETUDE D'UNE
TRANSITION DE PHASE MAGNETIQUE EN PHYSIQUE DU SOLIDE.**



Thèse soutenue le 8 juin 1979 devant la commission d'examen

M. SAKAROVITCH **Président**

R. MAYNARD
F. ROBERT **Examineurs**
J.P. UHRY

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

Monsieur Gabriel CAU : Président

Monsieur Joseph KLEIN : Vice-Président

MEMBRES DU CORPS ENSEIGNANT DE L'U.S.M.G.

PROFESSEURS TITULAIRES

| | | |
|-----|------------------------|---|
| MM. | AMBLARD Pierre | Clinique de dermatologie |
| | ARNAUD Paul | Chimie |
| | ARVIEU Robert | I.S.N. |
| | AUBERT Guy | Physique |
| | AYANT Yves | Physique approfondie |
| Mme | BARBIER Marie-Jeanne | Electrochimie |
| MM. | BARBIER Jean-Claude | Physique expérimentale |
| | BARBIER Reynold | Géologie appliquée |
| | BARJON Robert | Physique nucléaire |
| | BARNOUD Fernand | Biosynthèse de la cellulose |
| | BARRA Jean-René | Statistiques |
| | BARRIE Joseph | Clinique chirurgicale A |
| | BEAUDOING André | Clinique de pédiatrie et puériculture |
| | BELORIZKY Elie | Physique |
| | BARNARD Alain | Mathématiques pures |
| Mme | BERTRANDIAS Françoise | Mathématiques pures |
| MM. | BERTRANDIAS Jean-Paul | Mathématiques pures |
| | BEZES Henri | Clinique chirurgicale et traumatologie |
| | BLAMBERT Maurice | Mathématiques pures |
| | BOLLIET Louis | Informatique (I.U.T. B) |
| | BONNET Jean-Louis | Clinique ophtalmologie |
| | BONNET-EYMARD Joseph | Clinique hépato-gastro-entérologie |
| Mme | BONNIER Marie-Jeanne | Chimie générale |
| MM. | BOUCHERLE André | Chimie et toxicologie |
| | BOUCHEZ Robert | Physique nucléaire |
| | BOUSSARD Jean-Claude | Mathématiques appliquées |
| | BOUTET DE MONVEL Louis | Mathématiques pures |
| | BRAVARD Yves | Géographie |
| | CABANEL Guy | Clinique rhumatologique et hydrologique |
| | CALAS François | Anatomie |
| | CARLIER Georges | Biologie végétale |
| | CARRAZ Gilbert | Biologie animale et pharmacodynamie |

| | | |
|-----|---------------------|---|
| MM. | CAU Gabriel | Médecine légale et toxicologie |
| | CAUQUIS Georges | Chimie organique |
| | CHABAUTY Claude | Mathématiques pures |
| | CHARACHON Robert | Clinique ot-rhino-laryngologique |
| | CHATEAU Robert | Clinique de neurologie |
| | CHIBON Pierre | Biologie animale |
| | COEUR André | Pharmacie chimique et chimie analytique |
| | COUDERC Pierre | Anatomie pathologique |
| | DEBELMAS Jacques | Géologie générale |
| | DEGRANGE Charles | Zoologie |
| | DELORMAS Pierre | Pneumophtisiologie |
| | DEPORTES Charles | Chimie minérale |
| | DESRE Pierre | Métallurgie |
| | DODU Jacques | Mécanique appliquée (I.U.T. I) |
| | DOLIQUE Jean-Michel | Physique des plasmas |
| | DREYFUS Bernard | Thermodynamique |
| | DUCROS Pierre | Cristallographie |
| | FONTAINE Jean-Marc | Mathématiques pures |
| | GAGNAIRE Didier | Chimie physique |
| | GALVANI Octave | Mathématiques pures |
| | GASTINEL Noël | Analyse numérique |
| | GAVEND Michel | Pharmacologie |
| | GEINDRE Michel | Electroradiologie |
| | GERBER Robert | Mathématiques pures |
| | GERMAIN Jean-Pierre | Mécanique |
| | GIRAUD Pierre | Géologie |
| | JANIN Bernard | Géographie |
| | KAHANE André | Physique générale |
| | KLEIN Joseph | Mathématiques pures |
| | KOSZUL Jean-Louis | Mathématiques pures |
| | KRAVTCHENKO Julien | Mécanique |
| | LACAZE Albert | Thermodynamique |
| | LACHARME Jean | Biologie végétale |
| Mme | LAJZEROWICZ Janine | Physique |
| MM. | LAJZEROWICZ Joseph | Physique |
| | LATREILLE René | Chirurgie générale |
| | LATURAZE Jean | Biochimie pharmaceutique |
| | LAURENT Pierre | Mathématiques appliquées |
| | LEDRU Jean | Clinique médicale B |
| | LE ROY Philippe | Mécanique (I.U.T. I) |

| | | |
|------|----------------------------|-----------------------------------|
| MM. | LLIBOUTRY Louis | Géophysique |
| | LOISEAUX Jean-Marie | Sciences nucléaires |
| | LONGEQUEUE Jean-Pierre | Physique nucléaire |
| | LOUP Jean | Géographie |
| Mlle | LUTZ Elisabeth | Mathématiques pures |
| MM. | MALINAS Yves | Clinique obstétricale |
| | MARTIN-NOEL Pierre | Clinique cardiologique |
| | MAYNARD Roger | Physique du solide |
| | MAZARE Yves | Clinique Médicale A |
| | MICHEL Robert | Minéralogie et pétrographie |
| | MICOUD Max | Clinique maladies infectieuses |
| | MOURIQUAND Claude | Histologie |
| | MOUSSA André | Chimie nucléaire |
| | NEGRE Robert | Mécanique |
| | NOZIERES Philippe | Spectrométrie physique |
| | OZENDA Paul | Botanique |
| | PAYAN Jean-Jacques | Mathématiques pures |
| | PEBAY-PEYROULA Jean-Claude | Physique |
| | PERRET Jean | Séméiologie médicale (neurologie) |
| | RASSAT André | Chimie systématique |
| | RENARD Michel | Thermodynamique |
| | REVOL Michel | Urologie |
| | RINALDI Renaud | Physique |
| | DE ROUGEMONT Jacques | Neuro-Chirurgie |
| | SARRAZIN Roger | Clinique chirurgicale B |
| | SEIGNEURIN Raymond | Microbiologie et hygiène |
| | SENGEL Philippe | Zoologie |
| | SIBILLE Robert | Construction mécanique (I.U.T. I) |
| | SOUTIF Michel | Physique générale |
| | TANCHE Maurice | Physiologie |
| | VAILLANT François | Zoologie |
| | VALENTIN Jacques | Physique nucléaire |
| Mme | VERAIN Alice | Pharmacie galénique |
| MM. | VERAIN André | Physique biophysique |
| | VEYRET Paul | Géographie |
| | VIGNAIS Pierre | Biochimie médicale |

PROFESSEURS ASSOCIES

MM. CRABBE Pierre
SUNIER Jules

CERMO
Physique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

| | | |
|------|-------------------------|--------------------------------|
| Mlle | AGNIUS-DELORS Claudine | Physique pharmaceutique |
| | ALARY Josette | Chimie analytique |
| MM. | AMBROISE-THOMAS Pierre | Parasitologie |
| | ARMAND Gilbert | Géographie |
| | BENZAKEN Claude | Mathématiques appliquées |
| | BIAREZ Jean-Pierre | Mécanique |
| | BILLET Jean | Géographie |
| | BOUCHET Yves | Anatomie |
| | BRUGEL Lucien | Energétique (I.U.T. I) |
| | BUISSON René | Physique (I.U.T. I) |
| | BUTEL Jean | Orthopédie |
| | COHEN-ADDAD Jean-Pierre | Spectrométrie physique |
| | COLOMB Maurice | Biochimie médicale |
| | CONTE René | Physique (I.U.T. I) |
| | DELOBEL Claude | M.I.A.G. |
| | DEPASSEL Roger | Mécanique des fluides |
| | GAUTRON René | Chimie |
| | GIDON Paul | Géologie et minéralogie |
| | GLENAT René | Chimie organique |
| | GROULADE Joseph | Biochimie médicale |
| | HACQUES Gérard | Calcul numérique |
| | HOLLARD Daniel | Hématologie |
| | HUGONOT Robert | Hygiène et médecine préventive |
| | IDELMAN Simon | Physiologie animale |
| | JOLY Jean-René | Mathématiques pures |
| | JULLIEN Pierre | Mathématiques appliquées |
| Mme | KAHANE Josette | Physique |
| MM. | KRAKOWIACK Sacha | Mathématiques appliquées |
| | KUHN Gérard | Physique (I.U.T. I) |
| | LUU DUC Cuong | Chimie organique - pharmacie |
| | MICHOULIER Jean | Physique (I.U.T. I) |
| Mme | MINIER Colette | Physique (I.U.T. I) |

| | | |
|------|-----------------------|--------------------------|
| MM. | PELMONT Jean | Biochimie |
| | PERRIAUX Jean-Jacques | Géologie et minéralogie |
| | PFISTER Jean-Claude | Physique du solide |
| Mlle | PIERY Yvette | Physiologie animale |
| MM. | RAYNAUD Hervé | M.I.A.G. |
| | REBECQ Jacques | Biologie (CUS) |
| | REYMOND Jean-Charles | Chirurgie générale |
| | RICHARD Lucien | Biologie végétale |
| Mme | RINAUDO Marguerite | Chimie macromoléculaire |
| MM. | SARROT-REYNAULD Jean | Géologie |
| | SIROT Louis | Chirurgie générale |
| Mme | SOUTIF Jeanne | Physique générale |
| MM. | STIEGLITZ Paul | Anesthésiologie |
| | VIALON Pierre | Géologie |
| | VAN CUTSEM Bernard | Mathématiques appliquées |

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

| | | |
|-----|------------------------|--|
| MM. | ARMAND Yves | Chimie (I.U.T. I) |
| | BACHELOT Yvan | Endocrinologie |
| | BARGE Michel | Neuro-chirurgie |
| | BEGUIN Claude | Chimie organique |
| Mme | BERIEL Hélène | Pharmacodynamie |
| MM. | BOST Michel | Pédiatrie |
| | BOUCHARLAT Jacques | Psychiatrie adultes |
| Mme | BOUCHE Liane | Mathématiques (CUS) |
| MM. | BRODEAU François | Mathématiques (I.U.T. B) (Personne étrangère habilitée à être directeur de thèse) |
| | BERNARD Pierre | Gynécologie |
| | CHAMBAZ Edmond | Biochimie médicale |
| | CHAMPETIER Jean | Anatomie et organogénèse |
| | CHARDON Michel | Géographie |
| | CHERADAME Hervé | Chimie papetière |
| | CHIAVERINA Jean | Biologie appliquée (EFP) |
| | COLIN DE VERDIERE Yves | Mathématiques pures |
| | CONTAMIN Charles | Chirurgie thoracique et cardio-vasculaire |
| | CORDONNER Daniel | Néphrologie |
| | COULOMB Max | Radiologie |
| | CROUZET Guy | Radiologie |

| | | |
|-----|---------------------------|--|
| MM. | CYROT Michel | Physique du solide |
| | DENIS Bernard | Cardiologie |
| | DOUCE Roland | Physiologie végétale |
| | DUSSAUD René | Mathématiques (CUS) |
| Mme | ETERRADOSSI Jacqueline | Physiologie |
| MM. | FAURE Jacques | Médecine légale |
| | FAURE Gilbert | Urologie |
| | GAUTIER Robert | Chirurgie générale |
| | GIDON Maurice | Géologie |
| | GROS Yves | Physique (I.U.T. I) |
| | GUIGNIER Michel | Thérapeutique |
| | GUITTON Jacques | Chimie |
| | HICTER Pierre | Chimie |
| | JALBERT Pierre | Histologie |
| | JUNIEN-LAVILLAVROY Claude | O.R.L. |
| | KOLODIE Lucien | Hématologie |
| | LE NOC Pierre | Bactériologie-virologie |
| | MACHE Régis | Physiologie végétale |
| | MAGNIN Robert | Hygiène et médecine préventive |
| | MALLION Jean-Michel | Médecine du travail |
| | MARECHAL Jean | Mécanique (I.U.T. I) |
| | MARTIN-BOUYER Michel | Chimie (CUS) |
| | MASSOT Christian | Médecine interne |
| | NEMOZ Alain | Thermodynamique |
| | NOUGARET Marcel | Automatique (I.U.T. I) |
| | PARAMELLE Bernard | Pneumologie |
| | PECCOUD François | Analyse (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse) |
| | PEFFEN René | Métallurgie (I.U.T. I) |
| | PERRIER Guy | Géophysique-glaciologie |
| | PHELIP Xavier | Rhumatologie |
| | RACHALL Michel | Médecine interne |
| | RACINET Claude | Gynécologie et obstétrique |
| | RAMBAUD Pierre | Pédiatrie |
| | RAPHAEL Bernard | Stomatologie |
| Mme | RENAUDET Jacqueline | Bactériologie (pharmacie) |
| MM. | ROBERT Jean-Bernard | Chimie-physique |
| | ROMIER Guy | Mathématiques (I.U.T. B) (Personnalité étrangère habilitée à être directeur de thèse) |
| | SAKAROVITCH Michel | Mathématiques appliquées |

| | |
|------------------------------|---------------------|
| MM. SCHAEERER René | Cancérologie |
| Mme SEIGLE-MURANDI Françoise | Crytogamie |
| MM. STOEbNER Pierre | Anatomie pathologie |
| STUTZ Pierre | Mécanique |
| VROUSOS Constantin | Radiologie |

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

| | |
|-----------------------|--------------------------|
| MM. : DEVINE Roderick | Spectro Physique |
| KANEKO Akira | Mathématiques pures |
| JOHNSON Thomas | Mathématiques appliquées |
| RAY Tuhina | Physique |

MAITRE DE CONFERENCES DELEGUE

| | |
|---------------------|-----------------------------------|
| M. : ROCHAT Jacques | Hygiène et hydrologie (pharmacie) |
|---------------------|-----------------------------------|

Fait à Saint Martin d'Hères, novembre 1977

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

Année universitaire 1977-1978

Président : M. Philippe TRAYNARD

Vice-présidents : M. René PAUTHENET

M. Georges LESPINARD

PROFESSEURS TITULAIRES

| | |
|------------------------|--|
| MM. BENOIT Jean | Electronique - automatique |
| BESSON Jean | Chimie minérale |
| BLOCH Daniel | Physique du solide - cristallographie |
| BONNETAIN Lucien | Génie chimique |
| BONNIER Etienne | Métallurgie |
| * BOUDOURIS Georges | Electronique - automatique |
| BRISSONNEAU Pierre | Physique du solide - cristallographie |
| BUYLE-BODIN Maurice | Electronique - automatique |
| COUMES André | Electronique - automatique |
| DURAND Francis | Métallurgie |
| FELICI Noël | Electronique - automatique |
| FOULARD Claude | Electronique - automatique |
| LANCIA Roland | Electronique - automatique |
| LONGEQUEUE Jean-Pierre | Physique nucléaire corpusculaire |
| LESPINARD Georges | Mécanique |
| MOREAU René | Mécanique |
| PARIAUD Jean-Charles | Chimie - physique |
| PAUTHENET René | Electronique - automatique |
| PERRET René | Electronique - automatique |
| POLOUJADOFF Michel | Electronique - automatique |
| TRAYNARD Philippe | Chimie - physique |
| VEILLON Gérard | Informatique fondamentale et appliquée |
| * en congé pour études | |

PROFESSEURS SANS CHAIRE

| | |
|---------------------|---------------------------------------|
| MM. BLIMAN Samuël | Electronique - automatique |
| BOUVARD Maurice | Génie mécanique |
| COHEN Joseph | Electronique - automatique |
| GUYOT Pierre | Métallurgie physique |
| LACOUME Jean-Louis | Electronique - automatique |
| JOUBERT Jean-Claude | Physique du solide - cristallographie |

.../...

| | | |
|-----|-------------------|-----------------------------------|
| MM. | ROBERT André | Chimie appliquée et des matériaux |
| | ROBERT François | Analyse numérique |
| | ZADWORNY François | Electronique - automatique |

MAITRES DE CONFERENCES

| | | |
|-----|--------------------------|--|
| MM. | ANCEAU François | Informatique fondamentale et appliquée |
| | CHARTIER Germain | Electronique - automatique |
| | CHIAVERINA Jean | Biologie, biochimie, agronomie |
| | IVANES Marcel | Electronique - automatique |
| | LESIEUR Marcel | Mécanique |
| | MORET Roger | Physique nucléaire - corpusculaire |
| | PIAU Jean-Michel | Mécanique |
| | PIERRARD Jean-Marie | Mécanique |
| | SABONNADIÈRE Jean-Claude | Informatique fondamentale et appliquée |
| Mme | SAUCIER Gabrielle | Informatique fondamentale et appliquée |
| M. | SOHM Jean-Claude | Chimie Physique |

CHERCHEURS DU C.N.R.S. (Directeur et Maîtres de Recherche)

| | | |
|-----|---------------------|------------------------|
| M. | FRUCHART Robert | Directeur de Recherche |
| MM. | ANSARA Ibrahim | Maître de Recherche |
| | BRONOEL Guy | Maître de Recherche |
| | CARRE René | Maître de Recherche |
| | DAVID René | Maître de Recherche |
| | DRIOLE Jean | Maître de Recherche |
| | KLEITZ Michel | Maître de Recherche |
| | LANDAU Ioan-Doré | Maître de Recherche |
| | MATHIEU Jean-Claude | Maître de Recherche |
| | MERMET Jean | Maître de Recherche |
| | MUNIER Jacques | Maître de Recherche |

Personnalités habilitées à diriger des travaux de recherche (décision du Conseil Scientifique)

E.N.S.E.E.G.

| | | |
|-----|-----------------|---|
| MM. | BISCONDI Michel | Ecole des Mines St. Etienne (dépt. Métallurgie) |
| | BOOS Jean-Yves | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| | DRIVER Julian | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |

.../...

| | |
|----------------------|--|
| MM. KOBYLANSKI André | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| LE COZE Jean | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| LESBATS Pierre | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| LEVY Jacques | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| RIEU Jean | Ecole des Mines St. Etienne (Métallurgie) |
| SAINFORT | C.E.N. Grenoble (Métallurgie) |
| SOUQUET | U.S.M.G. |
| CAILLET Marcel | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| COULON Michel | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| GUILHOT Bernard | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| LALAUZE René | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| LANCELOT Francis | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| SARRAZIN Pierre | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| SOUSTELLE Michel | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| THEVENOT François | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| THOMAS Gérard | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| TOUZAIN Philippe | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |
| TRAN MINH Canh | Ecole des Mines St. Etienne (Chim. Min. Ph.) |

E.N.S.E.R.G.

| | |
|-----------|--|
| MM. BOREL | Centre d'études nucléaires de Grenoble |
| KAMARINOS | Centre national recherche scientifique |

E.N.S.E.G.P.

| | |
|-------------|--|
| M. BORNARD | Centre national recherche scientifique |
| Mme CHERUY | Centre national recherche scientifique |
| MM. DAVID | Centre national recherche scientifique |
| DESCHIZEAUX | Centre national recherche scientifique |

Je remercie vivement Monsieur Michel SAKAROVITCH de m'avoir accueillie dans son équipe où j'ai pu approfondir les notions de Recherche Opérationnelle auxquelles il m'avait initiée.

Je tiens également à remercier Messieurs les Professeurs Roger MAYNARD et François ROBERT pour l'honneur qu'ils me font en participant au Jury.

Que Monsieur Jean-Pierre UHRY trouve ici l'expression de ma profonde gratitude pour sa disponibilité et le soutien qu'il a su m'apporter pour l'élaboration et la rédaction de cette thèse.

Je remercie aussi Madame NEUMANN qui a assuré la frappe de cette thèse avec compétence et amabilité malgré les conditions d'éloignement qui lui ont rendu la tâche particulièrement délicate.

Je remercie Monsieur LANGERO dont l'art a été plus qu'efficace pour le tracé des courbes, ainsi que Monsieur IGLESIAS et son équipe qui ont assuré le tirage.

TABLE DES MATIERES

LA COMBINATOIRE :
UN OUTIL POUR L'ETUDE D'UNE TRANSITION DE PHASE MAGNETIQUE
EN PHYSIQUE DU SOLIDE

| | Pages |
|--|-------|
| <u>CHAPITRE I</u> : LE PROBLEME POSE PAR LES PHYSICIENS : ETUDE DE L'ETAT FONDAMENTAL D'UN VERRE DE SPINS ET RECHERCHE D'UNE TRANSITION DE PHASE | 3 |
| I-1 - Description sommaire d'un verre de spins | 3 |
| I-2 - Ordres magnétiques à longue distance et transition de phase | 3 |
| I-3 - Modèle de la frustration | 5 |
| <u>CHAPITRE II</u> : FORMULATION MATHÉMATIQUE | 9 |
| II-1 - Graphe $G = (S,E)$ associé à un verre de spins | 9 |
| II-2 - Formulation en termes de cocycles | 9 |
| II-3 - Formulation en termes de cycles | 11 |
| <u>CHAPITRE III</u> : RESOLUTION PRATIQUE DANS LE CAS D'UN GRAPHE PLANAIRE ... | 16 |
| III-1 - Recherche de l'espérance de l'énergie de l'état fondamental | 16 |
| III-1-1 - Recherche d'un ensemble de frustration | 16 |
| III-1-2 - Simulation d'une plaque infinie sur un tore et problèmes posés par la simulation | 18 |
| III-2 - Recherche d'une transition de phase | 27 |
| III-2-1 - Etude de la cohérence des spins entre eux, étude des comas | 29 |
| III-2-2 - Etude de l'aimantation par spin en fonction de concentration en liaisons négatives | 43 |
| III-2-3 - Recherche d'une ligne de fracture | 49 |
| <u>CHAPITRE IV</u> - PLAN D'EXPERIENCE ET RESULTATS | 56 |
| IV-1 - Plan d'expérience | 56 |
| IV-2 - Résultats | 59 |

| | Pages |
|---|-------|
| <u>CHAPITRE V</u> : ALGORITHMES DE COUPLAGE OBTENUS AU COURS DE CETTE ETUDE .. | 77 |
| V-1 - Recherche heuristique d'un couplage parfait de poids minimum : un algorithme de décomposition | 77 |
| V-2 - Algorithme primal de recherche d'un couplage parfait de poids minimum | 85 |
| <u>CHAPITRE VI</u> : PROLONGEMENTS POSSIBLES DE CETTE ETUDE | 94 |
| VI-1 - Ce que permettrait une bonne programmation d'un algorithme primal de couplage | 94 |
| VI-2 - "Amélioration" du modèle physique | 96 |
| VI-3 - Problèmes mathématiques soulevés | 98 |
| <u>ANNEXES</u> : | |
| <u>Annexe 1</u> : Description de l'algorithme de recherche d'un couplage parfait de poids minimum proposé par J. EDMONDS | 99 |
| <u>Annexe 2</u> : Recherche d'un cocycle de poids minimum dans un graphe simple, non orienté et planaire | 105 |
| REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES | 109 |

Les physiciens s'interrogent depuis longtemps sur l'ordre magnétique qui peut régner au sein d'un matériau magnétique et qui reste encore très mal connu. Jusqu'en 1972, les théories phénoménologiques existantes expliquaient le comportement des alliages dilués quand un résultat expérimental inattendu vint bouleverser ces croyances. Les mesures de susceptibilité magnétique en fonction de la température avaient toujours conduit à une courbe arrondie jusqu'au jour où Canella et Mydosh mirent en évidence l'existence d'un pic qui fut depuis maintes fois confirmée. Comment expliquer ce comportement ? Il ressemble beaucoup à une transition de phase, mais quelles sont les phases en présence ? Loin de satisfaire tous les physiciens, cette interprétation soulève une controverse et l'on doit admettre aujourd'hui que le concept de transition de phase tel qu'il est couramment défini (cf. Ch. I) ne suffit pas à expliquer toutes les observations expérimentales faites sur ces alliages dilués. Différentes écoles se sont constituées mais aucune à ce jour n'a su apporter de réponse définitive.

Trois paramètres semblaient régir l'évolution des alliages dilués que l'on appelle aussi systèmes "verres de spins" : le temps, le champ magnétique extérieur et l'histoire thermique et magnétique de l'échantillon. On a construit des modèles, englobant ces facteurs et reflétant l'expérience. Mais les résultats ayant été décevants, l'introduction de nouveaux concepts s'est imposée. Aujourd'hui, on en retient deux à caractère plus géométrique : le paramètre d'ordre à longue distance et la frustration. Ce dernier concept a été introduit par G. Toulouse [II] dans le dessein de dégager les traits microscopiques de la phase baptisée "verre de spins" dans laquelle se trouverait un alliage dilué à très basse température.

L'objet de cette thèse est l'étude de ce modèle de la frustration (Chapitre I) qui est une représentation très schématique d'un verre de spins et dont les physiciens attendent une meilleure connaissance, au moins qualitative, de certaines caractéristiques de cette nouvelle phase.

Or il se trouve que dans ce modèle simplifié, les outils de la combinatoire, en particulier la théorie du couplage de J. Edmonds, sont particulièrement efficaces pour l'étude du matériau à $T = 0$ et permettent le calcul de l'énergie du fondamental (III-1) en fonction de la concentration en liaisons négatives (paramètre caractéristique du modèle) avec une bien meilleure précision que les simulations type Monte-Carlo utilisées jusqu'ici.

Mais l'intérêt du physicien se porte surtout sur l'étude de la structure de "désordre", en particulier au voisinage de la concentration critique ou le ferromagnétisme du matériau disparaît et la partie la plus originale de notre travail à consister à rechercher ce que pouvait apporter les outils mathématiques dont nous disposions pour l'étude de ce "désordre" (III-2). En particulier, nous avons montré que la théorie de la dualité en programmation linéaire se révélait très utile pour la caractérisation des amas qui sont une notion fondamentale pour la compréhension de verres de spins. Ceci nous a permis, entre autres, de préciser la valeur (jusqu'alors mal connue) de la concentration critique où s'opère la transition de phase.

Le succès de ce travail n'a été possible que grâce à la collaboration étroite de MM. MAYNARD et RAMMAL, physiciens du groupe de transition de phase au C.R.T.B.T., qui ont eu la patience de nous inculquer quelques rudiments de leur science et le courage de découvrir nos techniques et notre langage.

Cette collaboration, qui ne se limite pas à ce seul travail et se poursuit en particulier avec les groupes de MM. GASTINEL et ROBERT de l'équipe d'Analyse Numérique, nous apparaît fructueuse pour nos deux disciplines et pour notre part, au moins, nous a conduit à développer nos outils et à ouvrir certains axes de recherche.

CHAPITRE I

LE PROBLEME POSE PAR LES PHYSICIENS :

ETUDE DE L'ETAT FONDAMENTAL D'UN VERRE DE SPINS ET RECHERCHE D'UNE TRANSITION DE PHASE

I-1 - DESCRIPTION SOMMAIRE D'UN VERRE DE SPINS

L'exemple le plus connu de verre de spins est un système obtenu en diluant, à haute température, dans un milieu non magnétique (or) des impuretés magnétiques (Fer) en faible concentration (1%), puis, en abaissant brutalement la température ce qui a pour effet de tremper le désordre structural de l'état liquide.

On obtient ainsi un alliage solide où toute impureté, qui conserve son moment magnétique (Spin), interagit indirectement avec toutes les autres impuretés. L'énergie d'interaction, H_{12} , entre deux impuretés de moments magnétiques \vec{S}_1 et \vec{S}_2 , distantes de R et placées dans un milieu non magnétique est donnée par la formule suivante :

$$H_{12} = - \left(\frac{\Lambda \times \cos(2 \times K_F \times R)}{(K_F \times R)^3} \right) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -J(R) \times \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

où $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ est le produit scalaire des deux vecteurs \vec{S}_1 et \vec{S}_2 ,

K_F est une constante caractéristique du métal qui constitue le milieu non magnétique,

Λ est une constante positive d'échelle.

L'énergie d'interaction entre deux spins ne dépend donc, en signe et en module, que de la distance qui les sépare.

I-2 - ORDRES MAGNETIQUES A LONGUE DISTANCE ET TRANSITION DE PHASE

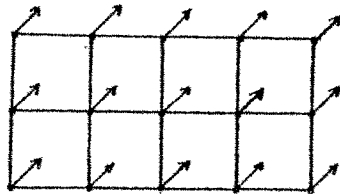
Exemples d'ordres magnétiques à longue distance :

Un premier type d'ordre magnétique à longue distance est l'ordre dit "FERROMAGNETIQUE" où les spins ont tendance à s'aligner dans le même sens via une constante d'interaction $J > 0$.

Un autre type d'ordre magnétique à longue distance, est, par exemple l'ordre dit "ANTI-FERROMAGNETIQUE" où les spins s'alignent antiparallèlement (deux spins en interaction ont les orientations opposées) via une constante d'interaction $J < 0$.

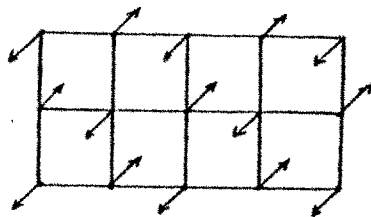
Lorsqu'on augmente la température, le conflit entre l'interaction des spins entre eux et la température tend à détruire ces ordres magnétiques à longue distance.

Réseau plan ferromagnétique



Les spins sont parallèles

Réseau plan anti-ferromagnétique



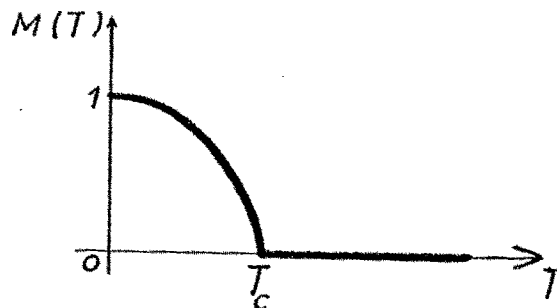
Les spins sont anti-parallèles

Transitions de phases magnétiques (transitions ordre-désordre) :

Un système est dit FERROMAGNETIQUE (respectivement, ANTI-FERROMAGNETIQUE) s'il se trouve à la température $T = 0_K$ (échelle Kelvin) dans une phase magnétique ferromagnétique (respectivement anti-ferromagnétique).

De tels systèmes ont déjà été fort bien étudiés. Par exemple, on sait que pour un système ferromagnétique, il existe une température critique, T_c , en dessous de laquelle l'aimantation par spin du système, $M(t)$, est positive et au delà de laquelle elle est nulle.

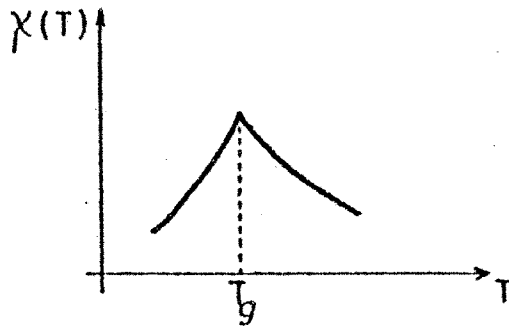
Pour tout système ferromagnétique, la courbe de $M(T)$ en fonction de la température a l'allure suivante :



Ce qui signifie qu'à une température T inférieure à T_c , il existe une corrélation à longue portée entre les spins (paramètre d'ordre) qui s'atténue jusqu'à disparaître aux températures supérieures à T_c . On dit qu'à la température $T = T_c$ il y a transition de phase entre la phase ordonnée ferrimagnétique à $T < T_c$ et la phase désordonnée parasyétrique à $T > T_c$.

On a observé, qu'en général, une telle transition de phase se répercute par des singularités sur d'autres fonctions de réponses du système telles que la susceptibilité, la chaleur spécifique, ..., etc.

Des mesures sur la susceptibilité d'un verre de spins ont récemment mis en évidence une température T_g à laquelle la courbe de la susceptibilité, $\chi(T)$, en fonction de la température présente un pic :



Ce qui semble, par analogie avec les transitions de phases connues, être un indice d'une transition de phase entre une phase magnétique à basse température baptisée "verre de spins" et une phase désordonnée paramagnétique à haute température.

Notre objectif ici est d'étudier, à $T = 0_K$, une éventuelle phase magnétique verre de spins, et de confirmer (ou d'infirmer !) l'existence d'une transition de phase en étudiant le comportement d'un tel système verre de spins en fonction de la probabilité x pour que l'énergie d'une interaction soit négative et qui, comme la température, joue, quand elle augmente, un rôle de destruction de l'ordre ferrimagnétique à longue distance.

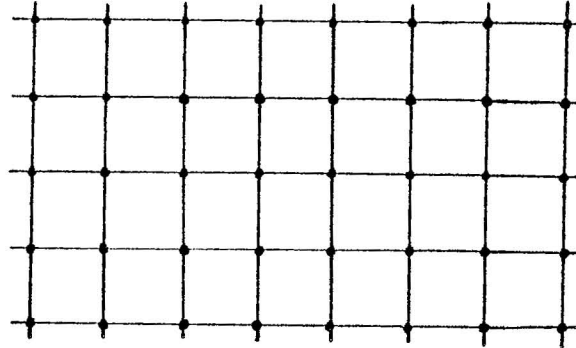
Confrontés à la complexité d'un système verre de spins, on a construit un modèle excessivement simplifié que l'on se propose d'étudier.

I-3 - MODELE DE LA FRUSTRATION

On suppose que les spins sont situés aux noeuds d'un maillage carré régulier de dimension N et ne peuvent être que dans deux états possibles, positif ou négatif.

Exemples de maillages

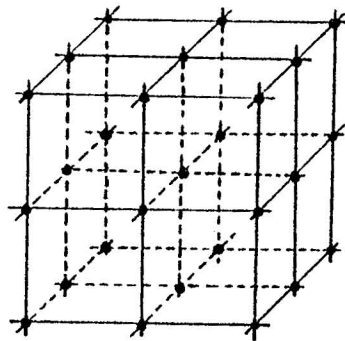
. Maillage plan carré régulier :



Les sites des spins sont marqués d'un point.

Les arêtes du maillage matérialisent l'existence d'une interaction entre les spins.

. Maillage cubique carré régulier :



On caractérisera désormais toute orientation des spins par un vecteur σ dont chaque composante $\sigma_i = \pm 1$ désigne l'état du spin i .

On suppose de plus que les interactions entre spins n'ont lieu qu'entre plus proches voisins (elles sont matérialisées par les arêtes du maillage) et que leurs énergies sont des variables aléatoires indépendantes pouvant prendre des valeurs positives ou négatives. Une interaction (ou liaison) positive entre deux spins voisins dans le maillage tend, rappelons-le, à les aligner dans le même sens, tandis qu'une interaction négative tend à les orienter dans les sens opposés

On note Γ_{ij} la valeur de l'énergie d'interaction entre les spins i et j et E_σ énergie interne du système lorsque les spins ont une orientation σ . E_σ s'écrit :

$$E_\sigma = - \sum_{\{(i,j) | \text{les spins } i \text{ et } j \text{ interagissent}\}} \Gamma_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

Définition : A la température $T = 0_K$, le système verre de spins est dans son ETAT FONDAMENTAL si l'orientation σ de ses spins minimise E_σ .

Remarque 1 : Caractérisation d'une orientation des spins :

Si le sens de l'interaction entre deux spins i et j , $\frac{\Gamma_{ij}}{|\Gamma_{ij}|}$, est respecté, la quantité $\Gamma_{ij} \cdot \sigma_i \cdot \sigma_j$ qui intervient dans le calcul de E_σ vaut $|\Gamma_{ij}|$, sinon on dit qu'il est violé et $\Gamma_{ij} \cdot \sigma_i \cdot \sigma_j$ vaut $-\Gamma_{ij}$. De ceci on déduit qu'une orientation σ des spins qui minimise E_σ peut être caractérisée comme étant une orientation qui minimise la somme des modules des énergies des interactions violées.

Le modèle que l'on a étudié correspond au cas particulier où l'énergie d'interaction est une variable aléatoire Γ_{ij} qui vaut $\gamma_{ij} \cdot J$ avec $\gamma_{ij} = \pm 1$ et J constante strictement positive. On a supposé que γ_{ij} avait la probabilité $(1-x)$ de valoir $+1$ et la probabilité x de valoir -1 en prenant x compris entre 0 et 0.5 ; le cas où x est compris entre 0.5 et 1 se déduisant par symétrie.

Dans ce modèle, l'énergie interne du système lorsque les spins ont l'orientation σ s'écrit :

$$E_\sigma = -J \sum_{\{(i,j) | \text{les spins } i \text{ et } j \text{ interagissent}\}} \gamma_{ij} \sigma_i \sigma_j$$

Il existe une relation entre E_σ et le nombre de liaisons violées :

On note E_σ le nombre d'interactions violées dans la configuration E_σ des spins et m le nombre total de liaisons.

E_σ s'écrit :

$$E_\sigma = -m \cdot J + 2 \cdot J \cdot E_\sigma$$

On voit que, J étant strictement positif, une configuration du fondamental est une configuration σ des spins qui minimise le nombre E_σ de liaisons violées.

Dans le cas particulier du ferromagnétisme où l'énergie d'interaction est une constante positive J sur tout le réseau ($x = 0$) on retrouve le modèle classique d'Ising.

La recherche du fondamental à $T = 0$ est alors évidente ; il suffit pour minimiser l'énergie que tous les spins aient la même orientation.

En température, le problème a été résolu mathématiquement en 1925 par Ising lui-même dans le cas d'un réseau à deux dimensions et en 1944 par L. Onsager pour le cas d'un réseau à deux dimensions.

Dans le premier cas, il n'y a pas de transition de phase (ou plus exactement la température critique est nulle) mais dans le deuxième cas, on retrouve les caractéristiques principales de la transition de phase ferromagnétisme-paramagnétisme.

Un résultat de ces études est que la transition de phase, qui se traduit par des singularités de certaines fonctions, n'apparaît que comme limite quand la dimension de l'échantillon N tend vers l'infini.

Ce résultat intuitif est assez général dans ce type de modèles et vaut sans aucun doute pour le modèle étudié ici $T = 0$.

Mais l'objet de notre étude n'est pas de démontrer l'existence d'une transition de phase ou la convergence quand $N \rightarrow \infty$ des variables aléatoires que nous étudions mais plutôt d'estimer des valeurs critiques ou des limites pour la simulation d'échantillons finis dont la taille augmente et on peut dire en un sens qu'il s'agit là d'un travail d'expérimentation physico-mathématique.

D'autre part, afin d'obtenir des courbes de l'énergie par spin du fondamental en fonction de l'espérance x de la proportion de liaisons négatives, on a modifié le modèle en simulant des réseaux présentant un pourcentage x de liaisons négatives.

CHAPITRE II

FORMULATION MATHÉMATIQUE

II-1 - GRAPHE $G = (S,E)$ ASSOCIÉ À UN VERRE DE SPINS DANS LE MODÈLE DE LA FRUSTRATION :

Dans le modèle de la frustration, un verre de spins est un maillage aux noeuds duquel sont situés les spins et dont les liaisons (interactions) sont positives ou négatives et réparties aléatoirement dans une proportion x . À un tel verre de spin, on associe un graphe $G = (S,E)$ qui représente le maillage et une application γ de E dans l'ensemble $\{-1,+1\}$.

. L'ensemble S des sommets de G est identifiable à l'ensemble des spins du verre.

. L'ensemble E des arêtes de G , que l'on appellera désormais liaisons, est défini comme suit :

Etant donnés deux sommets s et s' , (s,s') est une liaison (arête) de G si et seulement si les deux spins du verre représentés par s et s' interagissent.

. Pour toute liaison e de E , $\gamma_e = \pm 1$ est le signe de l'énergie d'interaction entre les deux spins identifiés aux deux extrémités de e .

II-2 - FORMULATION EN TERMES DE COCYCLES

On partitionne E en deux parties N et P où N représente l'ensemble des liaisons négatives et $P = E - N = \bar{N}$ celui des liaisons positives. La proportion de liaisons négatives du maillage étant x , on a la relation : $|N| = x \cdot |E|$.

On remarque que s'il existe une orientation des spins telle qu'aucune liaison ne soit violée, N est exactement le cocycle de G défini par l'ensemble des spins de même sens dans cette orientation.

Etant donnée une orientation des spins du maillage, en notant S_P l'ensemble des spins orientés positivement, S_N l'ensemble des spins orientés négativement et Ω le cocycle de G défini par : $\Omega = \{e = (i,j) \in E \mid i \in S_P \text{ et } j \in S_N\}$, le nombre de liaisons violées pour cette orientation est :

$$E(\Omega) = |\Omega \cap P| + |\bar{\Omega} \cap N| = |\Omega \Delta N|$$

où Δ désigne l'opération ensembliste de différence symétrique.

$E(\Omega)$ s'écrit aussi :

$$E(\Omega) = |N| + \sum_{e \in E} \gamma_e$$

On a en effet :

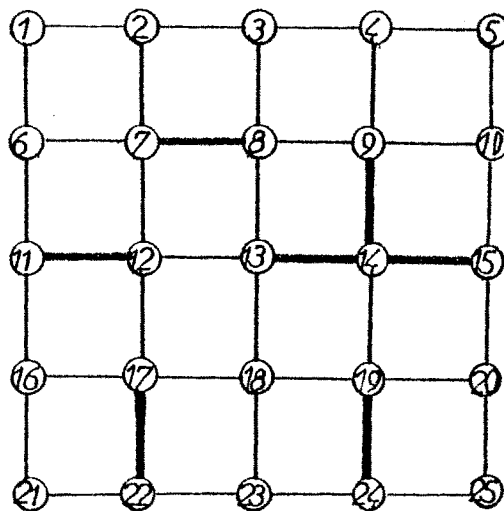
$$E(\Omega) = |\Omega_P| + |\bar{\Omega}_N| = \sum_{\{e \in \Omega | \gamma_e = 1\}} \gamma_e + \sum_{\{e \notin \Omega | \gamma_e = -1\}} (-\gamma_e)$$

$$E(\Omega) = \sum_{\{e \in \Omega | \gamma_e = 1\}} \gamma_e + \sum_{\{e \in \Omega | \gamma_e = -1\}} \gamma_e + \sum_{\{e \in \Omega | \gamma_e = -1\}} (-\gamma_e) + \sum_{\{e \notin \Omega | \gamma_e = -1\}} (-\gamma_e)$$

$$E(\Omega) = \sum_{e \in \Omega} \gamma_e + \sum_{e \in N} (-\gamma_e) = \sum_{e \in \Omega} \gamma_e + |N|$$

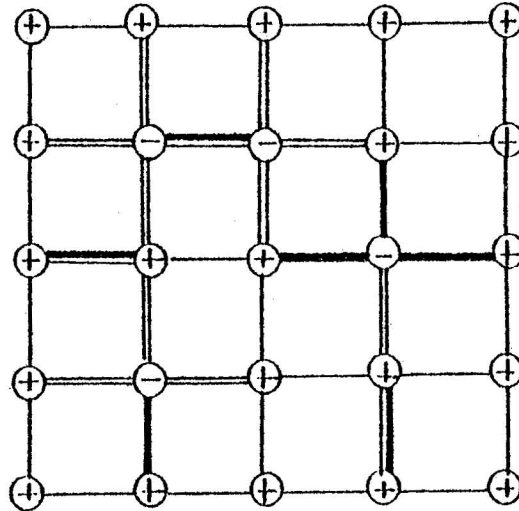
Réciproquement, étant donné un cocycle $\Omega(A)$ de G , en orientant positivement tous les spins correspondant à des sommets de A et négativement tous les autres spins on obtient une configuration des spins où $E = E(\Omega(A)) = |N| + \sum_{e \in E(A)} \gamma_e$ liaisons sont violées.

Exemple : Considérons le verre de spin suivant où les liaisons négatives sont indiquées d'un trait gras :



On se donne $A = \{7, 8, 14, 17\}$

On oriente négativement les spins de A et positivement les autres. La configuration obtenue est dessinée ci-dessous :



Les liaisons violées de cette configuration sont indiquées d'un trait double et sont les liaisons négatives joignant deux spins de même signe ou les liaisons positives joignant deux spins de signes opposés.

La recherche d'une configuration des spins d'énergie minimum se ramène donc à celle d'un cocycle de poids minimum dans le graphe $G = (S, E)$ où le poids considéré sur les arêtes est l'application γ .

Il a été démontré dans [6] que le problème général de la recherche d'un cocycle de poids minimum est un problème classé *N.P.*-complet. (Rappelons que l'on appelle problème *N.P.*-complet tout problème tel que tout problème *N.P.* (Non déterministe-Polynomial) lui est polynomialement réductible).

Cependant, réduit au cas des graphes planaires, le problème devient polynomial. On donne en annexe 2 une méthode polynomiale inspirée de l'algorithme donné dans [2] pour trouver un cocycle de cardinalité maximum dans un graphe planaire et qui consiste à ramener le problème du cocycle de poids minimum au problème bien résolu du postier chinois [3].

II-3 - FORMULATION EN TERMES DE CYCLES

Cette formulation est une généralisation au cas d'un graphe quelconque de la première étape de la résolution du problème de cocycle de poids minimum dans un graphe planaire présentée en annexe 2.

On définit une nouvelle application $\tilde{\gamma}$ de E dans l'ensemble $(0, 1)$ par :

$$\forall e \in E, \tilde{\gamma}_e = \begin{cases} 1 & \text{si } \gamma_e = -1 \\ 0 & \text{si } \gamma_e = +1 \end{cases}$$

A tout cycle C d'un graphe G ayant n sommets, m arêtes et q composante connexes, on associe un vecteur représentatif, V^C :

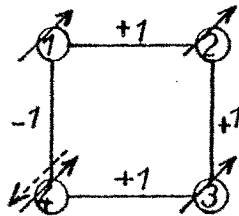
$$V_i^C = \begin{cases} 1 & \text{si la } i\text{ème arête est dans } C \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On désigne par \mathcal{C} l'ensemble des cycles du graphe G . Le sous-ensemble de $\{0,1\}^m$ des vecteurs représentatifs des cycles de \mathcal{C} , que l'on appelle, par abus de langage, \mathcal{C} , est un espace vectoriel sur le corps $G_{F_2} = \frac{\mathbb{Z}}{2\mathbb{Z}} = (\{0,1\}, \oplus, \cdot)$ de dimension $m-n+q$

Définition 1 : On dit qu'un cycle de $G = (S,E)$ est frustré si et seulement si il comporte un nombre impair de liaisons négatives.

Le terme "frustré" vient du fait qu'il n'existe pas d'orientation des spins du cycle où le sens de chaque liaison puisse être respecté.

Exemple 1 : On considère le cycle suivant où le sens des liaisons est indiqué sur les arêtes :



On fixe arbitrairement le spin 1 et l'on oriente successivement les spins 2, 3 et 4 en respectant le sens des liaisons (1,2), (2,3) et (3,4). On donne ainsi au spin 4 la même orientation qu'au spin 1 alors que le sens de la liaison (1,4) est négatif.

Lemme 1 : Un cycle C est frustré si et seulement si $\sum_{e \in C} \tilde{\gamma}_e = 1$.

$\sum_{e \in C} \tilde{\gamma}_e$ indique que l'on fait la somme, dans G_{F_2} , des $\tilde{\gamma}_e$ pour toutes les arêtes e de C .

Formulation :

Théorème 1 : A un ensemble L de liaisons violées, de vecteur d'incidence $y \in \{0,1\}^n$, on peut faire correspondre une orientation des spins si et seulement si y vérifie la condition suivante :

$$(P) : \forall C \in \mathcal{C}, \sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) = 0$$

Démonstration :

. Condition nécessaire : A une orientation donnée des spins, on peut faire correspondre un vecteur y de $\{0,1\}^n$ de la manière suivante :

$$y_e = \begin{cases} 0 & \text{si la liaison } e \text{ n'est pas violée} \\ 1 & \text{si la liaison } e \text{ est violée.} \end{cases}$$

Le vecteur y ainsi défini a la propriété suivante :

$$\forall e = (i,j) \in E \quad y_e \oplus \tilde{y}_e = \begin{cases} 1 & \text{si et seulement si les spins } i \text{ et } j \text{ sont antiparallèles} \\ 0 & \text{si et seulement si les spins } i \text{ et } j \text{ sont parallèles} \end{cases}$$

En effet, $y_e \oplus \tilde{y}_e$ vaut 1 si et seulement si y_e et \tilde{y}_e sont différents c'est à dire si et seulement si e est positive et violée ou si e est négative et violée.

(P) exprimant le fait que le long de tout cycle du maillage il y a un nombre pair d'inversions du sens des spins, y vérifie trivialement (P).

. Condition suffisante : On se donne un vecteur y de $\{0,1\}^m$ tel que la propriété (P) soit réalisée.

On pose : $\forall e \in E, \tilde{y}'_e = y_e \oplus \tilde{y}_e$

On considère le maillage où l'on a changé le sens des énergies d'interactions des liaisons de L. Dans ce maillage, une liaison e est négative si et seulement si \tilde{y}'_e vaut 1 et positive si et seulement si \tilde{y}'_e vaut 0. D'après le lemme 1, la condition (P) exprime le fait que ce nouveau maillage ne présente aucun cycle frustré. On en déduit qu'il existe donc une configuration σ des spins qui ne viole aucune liaison.

On impose cette configuration σ aux spins du maillage initial. Il est immédiat qu'alors les seules liaisons violées sont exactement les liaisons de L.

Définition 2 : On appellera ENSEMBLE DE FRUSTRATION tout ensemble de liaisons de vecteur d'incidence $y \in \{0,1\}^m$ vérifiant (P).

Remarque 1 : Le nombre de liaisons violées pour une orientation des spins associée à un ensemble de frustration de vecteur d'incidence y est :

$$E_y = \sum_{e \in E} y_e = \langle 1, y \rangle.$$

N.B. : Ici la sommation est faite dans \mathbb{R} ; E_y est égal au produit scalaire de y par le vecteur 1 dont les m composantes valent 1 .

Remarque 2 : L'énergie du système quand les spins sont répartis suivant un ensemble de frustration de vecteur d'incidence y est :

$$E_y = -m.J + 2.J.E_y$$

Théorème 2 : Soient $B = \{c_1, c_2, \dots, c_p\}$ une base de l'espace vectoriel C et y un vecteur de $\{0, 1\}^m$.

Si y vérifie la relation suivante :

$$(P') : \forall c_i \in B, \sum_{e \in C_i} (y_e \oplus \tilde{y}_e) = 0$$

Alors y vérifie (P) et est donc le vecteur d'incidence d'un ensemble de frustration.

Démonstration :

Soit $c \in C$; c s'écrit : $c = \sum_{i=1, \dots, p} \alpha_i c_i$ avec $\alpha_i = 0$ ou 1 .

On calcule $\sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e)$:

$$\begin{aligned} \sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) &= \sum_{e \in E} c_e \cdot (y_e \oplus \tilde{y}_e) \\ \sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) &= \sum_{e \in E} \left[\sum_{i=1, \dots, p} \alpha_i c_{i_e} \right] \cdot \left[y_e \oplus \tilde{y}_e \right] \\ \sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) &= \sum_{i=1, \dots, p} \alpha_i \cdot \left[\sum_{e \in E} c_{i_e} \cdot (y_e \oplus \tilde{y}_e) \right] \\ \sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) &= \sum_{i=1, \dots, p} \alpha_i \cdot \left[\sum_{e \in C_i} (y_e \oplus \tilde{y}_e) \right] \end{aligned}$$

En tenant compte de la propriété (P') , on obtient :

$$\sum_{e \in C} (y_e \oplus \tilde{y}_e) = \sum_{i=1, \dots, p} \alpha_i \cdot 0 = 0$$

Les calculs précédents étant indépendants du choix du cycle c de C , y vérifie bien la propriété (P) .

La recherche d'une configuration des spins d'énergie minimum se ramène donc à la recherche d'un vecteur y de $\{0,1\}^m$ vérifiant (P') pour une base de cycles B (ou un système générateur) de C que l'on se donnera et tel que l'énergie E_y correspondante soit minimum.

CHAPITRE III

RESOLUTION PRATIQUE DANS LE CAS D'UN GRAPHE PLANAIRE

III-1 - RECHERCHE DE L'ESPERANCE DE L'ENERGIE DE L'ETAT FONDAMENTAL

Etant donné un maillage carré régulier dont chaque liaison a une probabilité x d'être négative et dont le graphe associé $G = (S,E)$ est planaire, on recherche une configuration des spins telle que le système soit dans un état d'énergie minimum ; ce qui revient, comme on l'a déjà vu au chapitre II, à rechercher un ensemble de frustration de cardinalité minimum ou encore un cocycle de poids γ minimum car les énergies d'interaction sont supposées avoir toutes le même module $J > 0$.

L'énergie minimum est une variable aléatoire appelée ENERGIE DU FONDAMENTAL dépendant de x et de la taille du maillage. On estimera son espérance à x fixée en simulant plusieurs maillages ayant tous une proportion x de liaisons négatives mais étant différents par la répartition des liaisons négatives et par la taille.

III-1-1 - Recherche d'un ensemble de frustration

On applique ici l'algorithme de recherche d'un cocycle de poids minimum décrit en annexe 2.

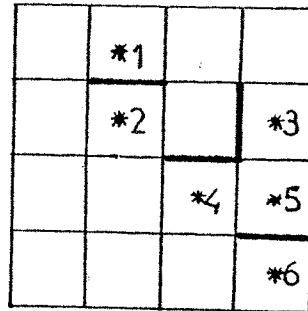
G étant planaire, à l'une de ses représentations planaires (celle du maillage), on associe le graphe dual $G' = (P,E')$. L'ensemble P des sommets de G' est en bijection avec l'ensemble B des contours des faces finies et de la face infinie de la représentation planaire de G choisie. On note F la partie de P qui est en bijection avec les cycles frustrés de B .

Définition 1 : On appellera désormais les éléments de B des PLAQUETTES.

Dans l'annexe 2, on montre comment on peut se ramener au problème de la recherche d'un ensemble de plus courtes chaînes de G' joignant deux à deux les sommets de F et étant disjointes du point de vue des arêtes. Ce résultat a déjà été énoncé par Gérard TOULOUSE dans [11]. Ce problème de la recherche de plus courtes chaînes se résout, comme celui bien connu sous le nom de "problème du postier chinois" [4] en construisant un graphe complet $K = (F,A)$ où le poids d'une arête (f_1, f_2) est égal à la longueur d'une plus courte chaîne, pour le poids $|\gamma|$, joignant f_1 et f_2 dans G' , puis, en recherchant dans K un couplage parfait de poids minimum.

Exemple 1 : On considère le maillage plan, carré $N \times N$ suivant :

G:

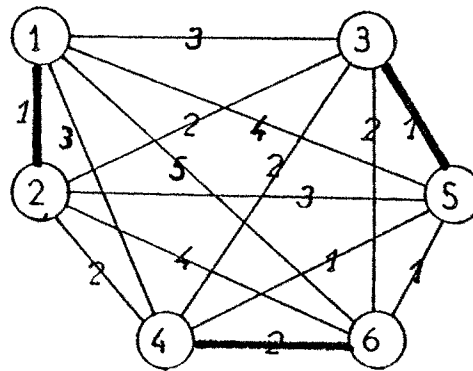


Les liaisons négatives sont indiquées d'un trait gras.

Les plaquettes frustrées sont marquées d'un astérisque et numérotées de 1 à 6.

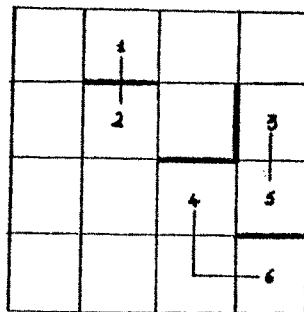
On construit le graphe complet K :

K:

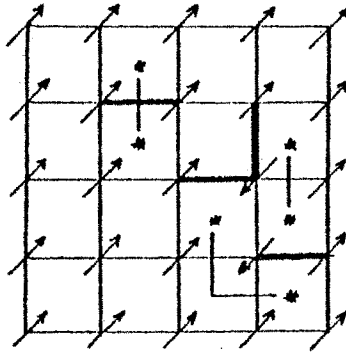


Un couplage parfait de poids minimum de K est donné par les arêtes en trait gras, $M = \{(1,2), (3,5), (4,6)\}$, de poids $\omega(M) = 4$.

Ce couplage M donne un ensemble de plus courtes chaînes de G' dessinées sur le maillage :



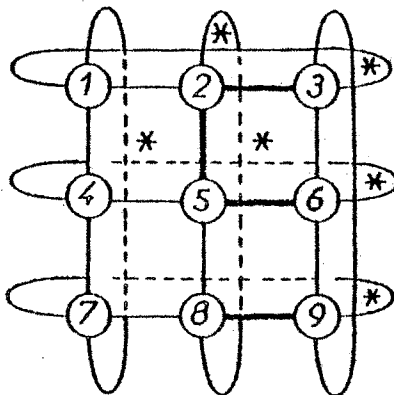
En fixant arbitrairement un spin positif, on obtient la configuration des spins suivante pour laquelle on a violé $\omega(M) = 4$ arêtes ; ces arêtes sont en bijection avec les arêtes des plus courtes chaînes trouvées.



III-1-2 - Simulation d'une plaque infinie sur un pseudo-tore - Problèmes posés pour la simulation

Simuler une plaque infinie par une plaque finie de dimension relativement petite peut introduire un biais important à cause d'éventuelles plaquettes frustrées isolées qui se trouvent près du bord. Pour remédier à ce problème, on a décidé de simuler non pas une plaque $N \times N$ mais un pseudo-tore : du point de vue géométrique des liaisons et donc des plaquettes, on considère que le maillage carré régulier à N^2 spins et $2N^2$ liaisons est dessiné sur un tore, mais, on ne tient pas compte, lors de la recherche d'une configuration des spins de l'état fondamental, de la frustration des cycles à N arêtes de la base de cycles de G qui apparaissent quand on passe de la plaque $N \times N$ au tore $N \times N$.

Exemple de pseudo-tore, $N = 3$:



Les liaisons négatives sont indiquées d'un trait gras et les plaquettes frustrées d'un astérisque.

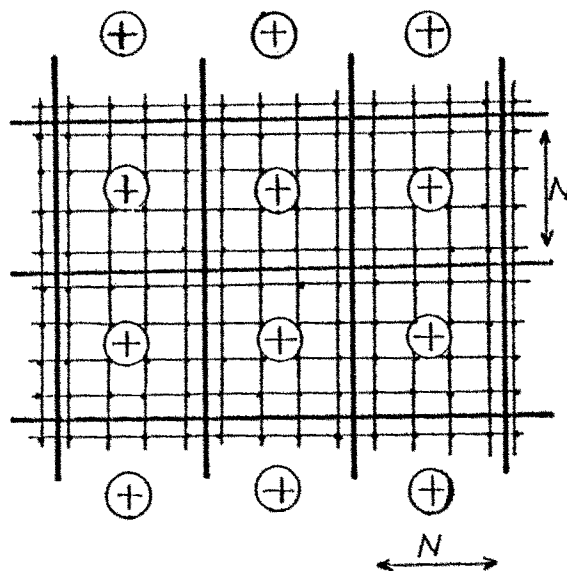
. Du point de vue des liaisons et donc des plaquettes, le maillage est dessiné sur un tore.

. Une base de cycles du graphe $G = (S,E)$ associé au maillage se décompose en deux sous-ensembles, un de $8 = N^2 - 1$ cycles à 4 arêtes, $B_1 = \{(1,2,5,4), (2,3,6,5), (4,5,8,7), (5,6,9,8), (3,1,4,6), (6,4,7,9), (1,2,8,7)\}$ et un de deux cycles à N arêtes, $B_2 = \{(3,6,9), (7,8,9)\}$.

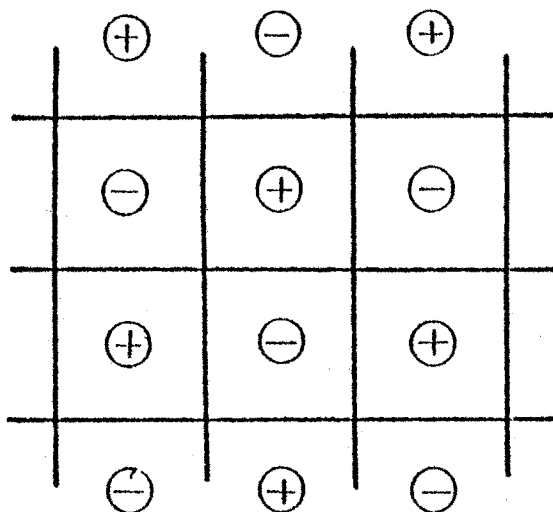
. Pour la recherche d'une configuration des spins du pseudo-tore, on ne tient pas compte de la frustration des cycles de B_2 et l'on ne considère donc que les deux cycles frustrés $(1,2,5,4)$ et $(2,3,6,5)$ de B_1 . On obtient une configuration du fondamental en violant la seule liaison $(2,5)$. Les cycles $(1,2,3), (4,5,6)$ et $(7,8,9)$ restant frustrés, cette configuration n'est pas représentable sur le tore.

Comme on l'a vu dans l'exemple, les configuration de spins que l'on obtient ne sont pas toujours représentables sur le tore puisque les cycles de base ignorés peuvent rester, ou devenir, frustrés. Les configurations doivent être représentées sur une PLAQUE INFINIE PSEUDO-PERIODIQUE : en ce qui concerne les liaisons et par suite les plaquettes, la plaque infinie est divisée en carrés de dimension $N \times N$ superposables. En notant \oplus la configuration des spins obtenue sur l'un des carrés $N \times N$ et \ominus la configuration des spins où chaque spin est inversé par rapport à la configuration \oplus , les configurations des spins de la plaque infinie pseudo-périodique que l'on obtient sont des trois types suivants :

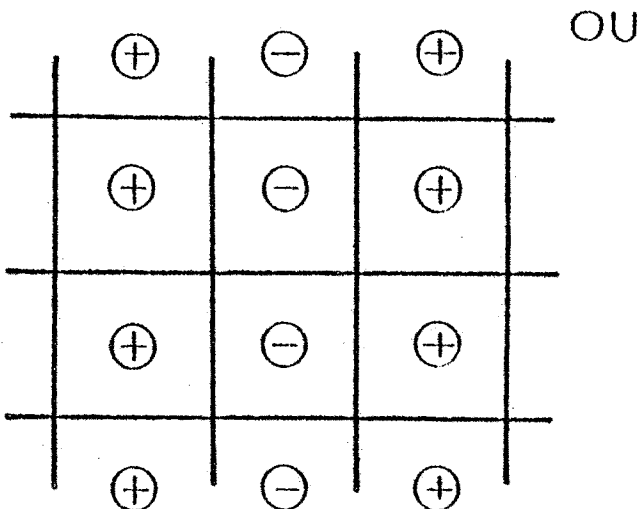
PERIODIQUE si les deux cycles ignorés ne sont pas frustrés



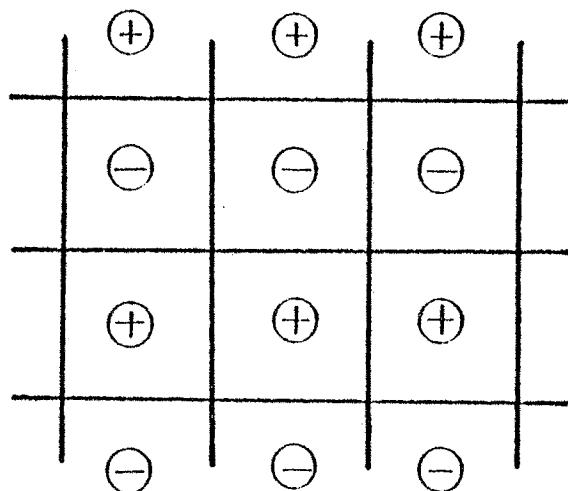
EN DAMIER si les deux cycles ignorés sont frustrés



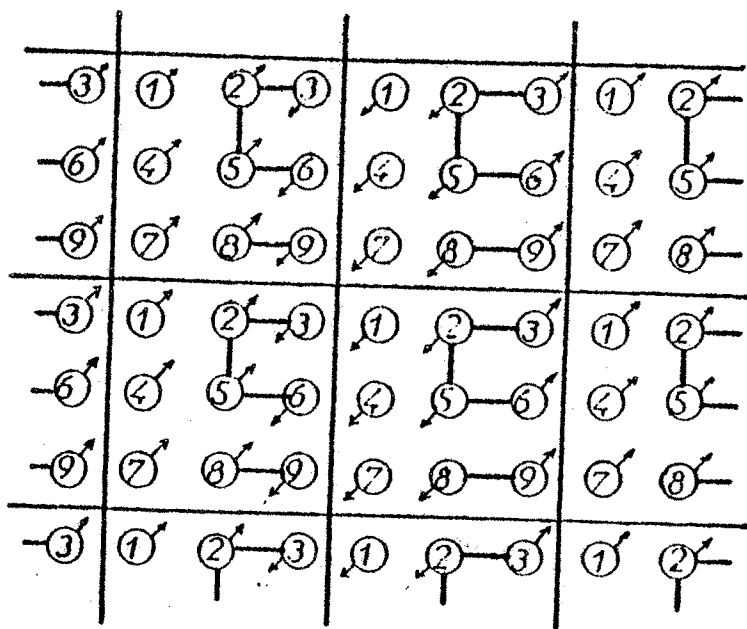
EN BANDES si un seul des deux cycles ignorés est frustré



OU

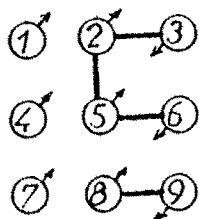


Retour à l'exemple précédent : Représentation sur la plaque pseudo-périodique associée au tore de la configuration obtenue :

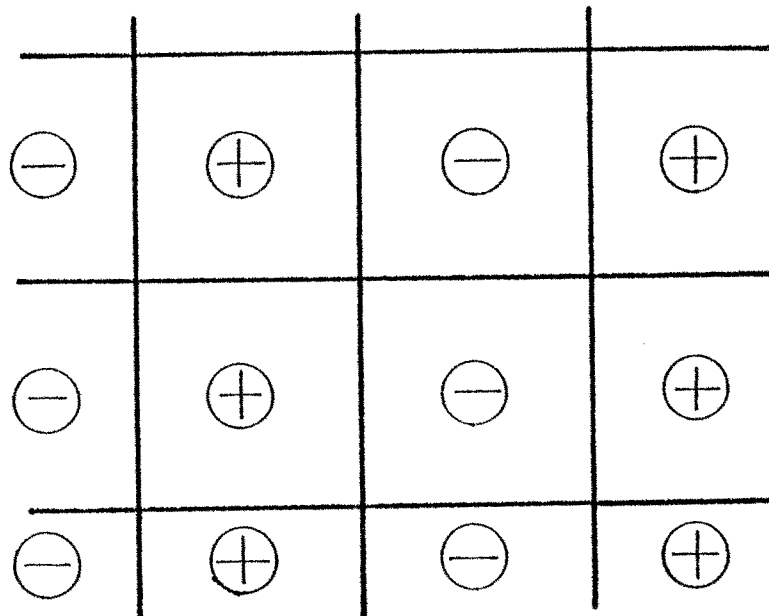


Seules les liaisons négatives sont indiquées

En notant θ la configuration suivante :



On obtient le schéma suivant, où l'on reconnaît le type "en bandes" (en effet, le cycle (7,8,9) de B_2 est resté frustré).



L'intérêt par rapport au tore, du pseudo-tore est d'une part qu'on peut le résoudre par un algorithme polynomial. En effet, en ignorant les deux cycles de base à N arêtes, on ne considère plus qu'un ensemble de cycles tel que toute arête appartient à au plus deux cycles de l'ensemble ce qui est une propriété caractéristique d'une des bases de cycles d'un graphe planaire (il suffit, pour s'en convaincre de considérer la base de cycles constituée des contours des faces d'une représentation planaire). Or cette propriété est la seule utilisée pour résoudre le problème du cocycle de poids minimum dans un graphe planaire en recherchant un ensemble de plus courtes chaînes [annexe 2]. D'autre part, résoudre le tore imposerait une condition supplémentaire de périodicité et l'on pense que ceci ne pourrait que freiner la convergence de l'estimation de l'espérance de l'énergie par spin du fondamental.

On se propose de montrer dans le théorème 1, qu'à la limite, l'énergie par spin du fondamental pour la plaque infinie est égale à l'énergie par spin du fondamental pour le pseudo-tore infini.

Notations :

Dans les réseaux qui suivent les valeurs des liaisons sont des variables aléatoires indépendantes valant $-J$ avec une probabilité x et $+J$ avec une probabilité $1-x$.

$P^{(N,x)}$ désigne une réalisation de la plaque carrée régulière de dimension N (N^2 spins, $2N(N-1)$ liaisons).

$T^{(N,x)}$ désigne une réalisation du pseudo-tore de dimension N (N^2 spins, $2N^2$ liaisons).

$E^P(N,x)$ est le nombre minimum de liaisons violées dans une configuration du fondamental d'une plaque $P^{(N,x)}$

$E^T(N,x)$ est le nombre minimum de liaisons violées dans une configuration du fondamental d'un pseudo-tore $T^{(N,x)}$ donné.

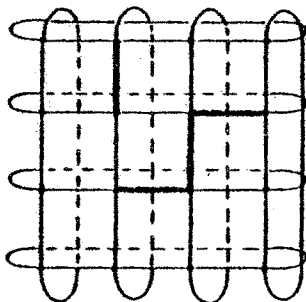
$E^P(N,x)$ et $E^T(N,x)$ sont des variables aléatoires dépendant de N , de x et de, respectivement, $P^{(N,x)}$ et $T^{(N,x)}$. On définit $e^{-P(N,x)}$ (respectivement $e^{-T(N,x)}$)

comme étant l'espérance conditionnée par N et x de la variable aléatoire $E^P(N,x)$ (respectivement $E^T(N,x)$).

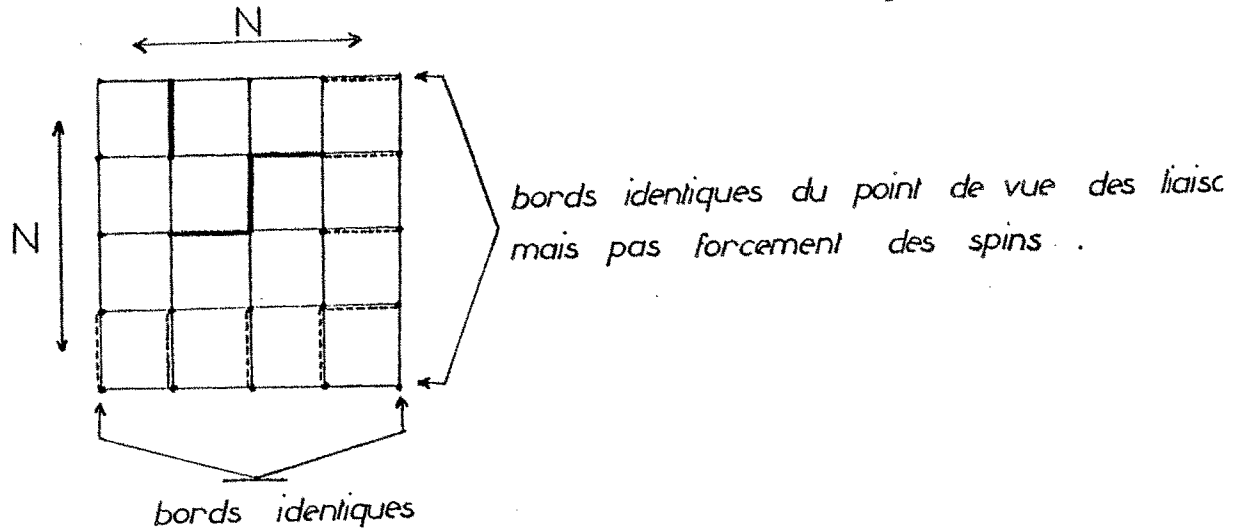
$$\text{On pose, en supposant qu'elle existe, } E^*(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{e^{-P(N,x)}}{N^2}$$

Remarque 1 : En retirant $2N$ liaisons bien choisies à $T^{(N,x)}$, on peut obtenir une plaque $P^{(N,x)}$.

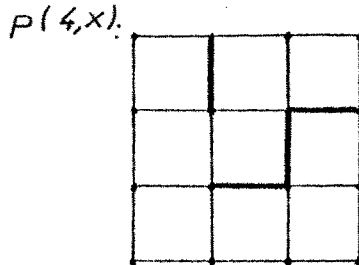
Exemple : On se donne le pseudo-tore $T^{(4,x)}$ suivant où les liaisons négatives sont indiquées en gras :



On dessinera désormais $T^{(N,x)}$ en recopiant deux bords orthogonaux



En supprimant les $2.N$ liaisons indiquées en pointillé, on peut extraire de $T^{(N,x)}$ une plaque $P^{(N,x)}$



Remarque 2 : De même, d'une plaque $P^{(N,x)}$ on peut extraire un tore $T^{(N-1,x)}$ en identifiant les bords parallèles de $P^{(N,x)}$.

Théorème 1 : On a :

$$E^*(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{e^{-T^{(N,x)}}}{N^2}$$

Démonstration : Dans un premier temps, on va montrer que de toute plaque $P^{(N,x)}$ on peut extraire un tore $T^{(N-1,x)}$ tel que l'on ait les deux inégalités suivantes :

$$(1) \forall N \geq 2 \quad E^{T^{(N-1,x)}} - 2(N-1) \leq E^{P^{(N,x)}}$$

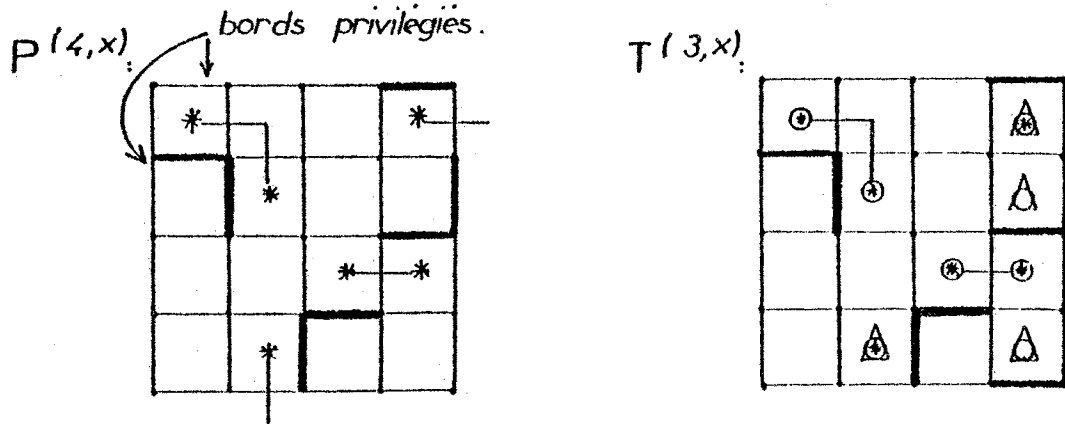
$$(2) \forall N \geq 2 \quad E^{P^{(N,x)}} \leq E^{T^{(N-1,x)}} + 2(N-1)$$

Inégalité 1 :

On se donne une plaque $P^{(N,x)}$ avec un couplage optimum, M , de ses plaquettes frustrées.

A partir de $P^{(N,x)}$ on obtient un tore $T^{(N-1,x)}$ en privilégiant deux bords perpendiculaires de $P^{(N,x)}$ et en remplaçant chacun des deux autres bords par le bord privilégié qui lui est parallèle.

Exemple :



On viole les liaisons de $T^{(N-1,x)}$ qui étaient violées dans $P^{(N,x)}$. Sur le nouveau tore, $T^{(N-1,x)}$, obtenu, on recense les plaquettes frustrées qui ne peuvent se trouver qu'au "bord" et on les couple au mieux ; pour cela, on viole au plus $2(N-1)$ liaisons. (Sur l'exemple, les plaquettes frustrées restantes sont celles indiquées d'un triangle). L'ensemble des liaisons violées de $T^{(N-1,x)}$ constitue, on peut le vérifier aisément, un ensemble de frustration qui n'est pas forcément de cardinalité minimum. On a donc :

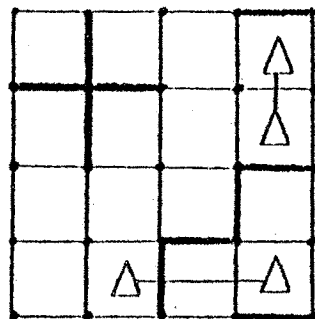
$$E^{T^{(N-1,x)}} \leq E^{P^{(N,x)}} + 2(N-1)$$

De ceci il résulte l'inégalité (1) :

$$E^{T^{(N-1,x)}} - 2(N-1) \leq E^{P^{(N,x)}}$$

Retour à l'exemple :

$T^{(3,x)}$ est donné par le schéma suivant :



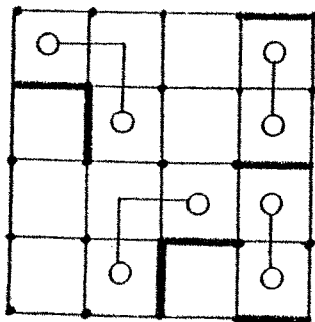
On a $E_P^{(4,x)} = 5$ et l'on vérifie :
 $E_T^{(3,x)} = 6 \leq 3 + 3 \leq E_P^{(4,x)} + 2 \times 3 = 5 + 6 = 11$

Inégalité 2 :

On considère la même plaque $P^{(N,x)}$ et le même tore $T^{(N-1,x)}$ que ci-dessus mais l'on se donne un couplage parfait, M' , des plaquettes frustrées de $T^{(N-1,x)}$. On obtient une plaque $P'^{(N,x)}$ en violant les liaisons de $P^{(N,x)}$ qui sont aussi dans l'un des ensembles de frustration associés au couplage M' . Les plaquettes frustrées de $P^{(N,x)}$ sont nécessairement sur deux bords perpendiculaires et on les couple au mieux en violant au plus $2(N-1)$ liaisons. De ceci, on déduit l'inégalité (2).

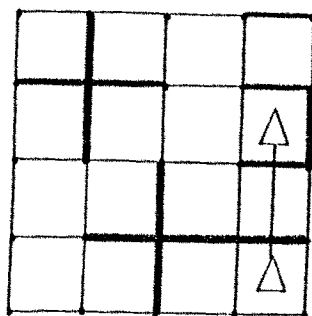
Traitement de l'exemple :

On se donne un couplage parfait M' des plaquettes frustrées de $T^{(3,x)}$. On dessine sur $T^{(3,x)}$ un ensemble de plus courtes chaînes associé au couplage M' :



On a : $E_T^{(3,x)} = 6$

$P'^{(4,x)}$ est représenté par le schéma suivant :



On a bien : $E^P(4,x) = 5 \leq E^T(N-1,x) + 2 \quad 3 = 6 + 6 = 12$

Les inéquations (1) et (2) permettent de déduire :

$$(3) : \frac{(N-1)^2}{N^2} \frac{E^T(N-1,x)}{(N-1)^2} - 2 \frac{N-1}{N^2} \leq \frac{E^P(N,x)}{N^2} \leq \frac{(N-1)^2}{N^2} \frac{E^T(N-1,x)}{(N-1)^2} + 2 \frac{N-1}{N^2}$$

Lorsqu'on passe aux espérances, on obtient :

$$(4) : \frac{(N-1)^2}{N^2} \frac{e^T(N-1,x)}{(N-1)^2} - 2 \frac{N-1}{N^2} \leq \frac{e^P(N,x)}{N^2} \leq \frac{(N-1)^2}{N^2} \frac{e^T(N-1,x)}{(N-1)^2} + 2 \frac{N-1}{N^2}$$

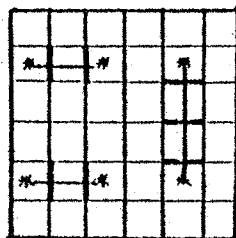
En passant à la limite lorsque N tend vers l'infini, on trouve le résultat cherché :

$$E^*(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{e^P(N,x)}{N^2} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{e^T(N,x)}{N^2}$$

Remarque 3 : Une configuration des spins d'énergie par spin minimum pour le pseudo-tore ne donne pas forcément une configuration d'énergie par spin minimum pour la plaque infinie pseudo-périodique associée.

Exemple : On se donne le pseudo-tore suivant :

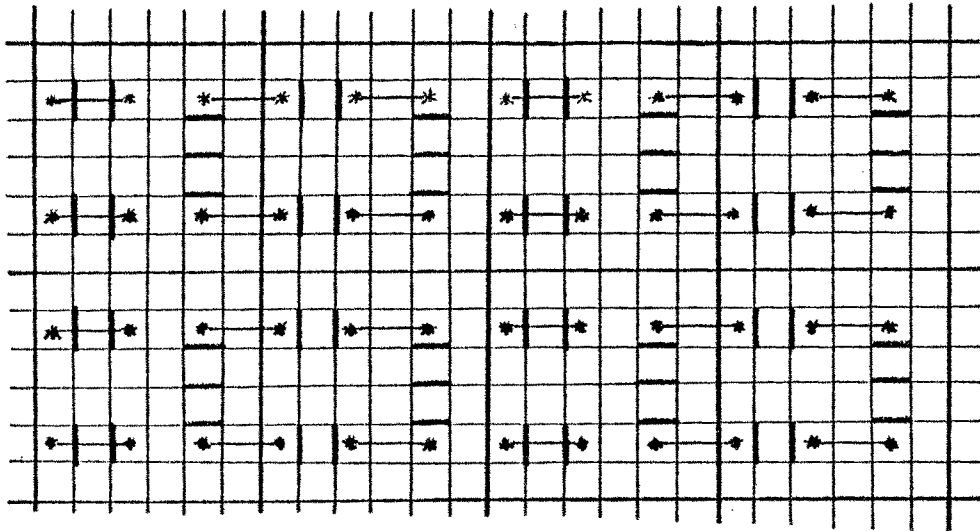
Les liaisons négatives sont en trait gras et les plaquettes frustrées sont marquées d'un astérisque.



Un couplage optimum des plaquettes frustrées a pour poids 7. L'énergie par spin du fondamental vaut donc 7/36.

On considère la plaque infinie pseudo-périodique associée au pseudo-tore et l'on exhibe un couplage de poids rapporté au nombre de spin égal à 6/36.

Ce qui indique que l'énergie par spin du fondamental vaut au plus 6/36 et est donc inférieure à l'énergie par spin du fondamental du pseudo-tore.



Le poids par spin du couplage est égal à $12/72$ soit $6/36 < 7/36$.

Convention : Dans la suite, on appellera ECHANTILLON (N,x) un tore (sauf si on précise un cylindre ou une plaque) de dimension N , ayant des liaisons négatives réparties uniformément dans une proportion x .

III-2 - RECHERCHE D'UNE TRANSITION DE PHASE

On recherche une concentration critique de liaisons négatives, x_c , à laquelle le verre de spin subit un brusque changement pour au moins une de ses grandeurs caractéristiques ou encore à laquelle on voit apparaître un certain désordre.

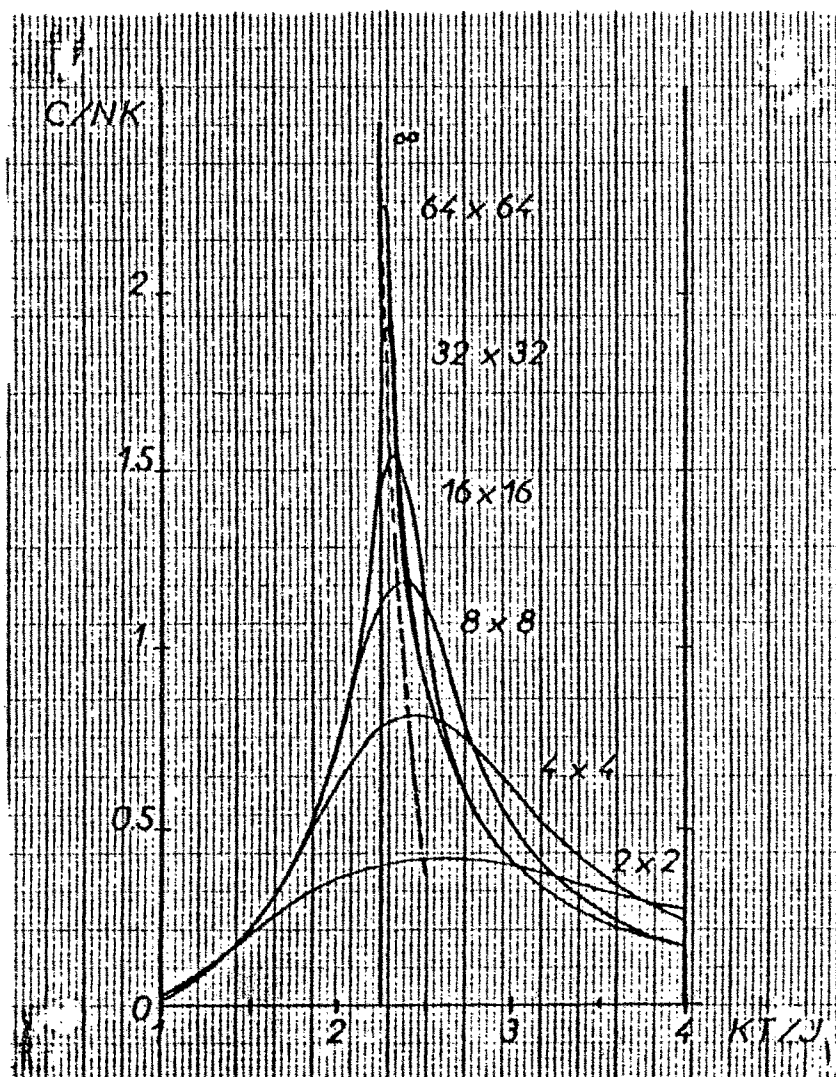
Par analogie, avec un système ferromagnétique qui à la température $T = 0_K^\circ$ présente un ordre magnétique à longue distance (tous les spins sont parallèles), ordre qui se dégrade avec l'augmentation de la température et disparaît pour des températures $T > T_c$, on va s'efforcer d'étudier la cohérence des spins entre eux et l'aimantation moyenne en fonction de l'évolution de la probabilité x pour qu'une liaison soit négative. Cette recherche est motivée par la dégénérescence de l'état fondamental (multiplicité des configurations d'énergie minimum) qui est très liée au nombre de couplages parfaits de poids minimum du graphe $K = (F,A)$. Pour un échantillon où la probabilité x est très faible (inférieure à 5%), l'état fondamental est presque

sûrement unique et correspond à un ordre ferromagnétique (les liaisons négatives doivent être presque sûrement violées) alors que pour un échantillon où la probabilité x est plus grande, la probabilité $C_p(x)$ pour qu'une plaquette soit frustrée étant elle aussi plus grande (elle est égale à la probabilité qu'elle ait dans son contour exactement 1 ou 3 liaisons négatives et vaut donc $C_p(x) = 4x(1-x)^3 + 4x^3(1-x)$ quand chaque liaison du maillage carré régulier a la probabilité x d'être négative), le nombre de configurations de l'état fondamental devient très grand.

D'autre part, il faudra être circonspect quant à la valeur de x_c que l'on pourrait avancer car les résultats théoriques connus pour le modèle d'Ising montrent que la température critique T_c dépend de la taille des échantillons traités.

On voit sur la courbe 1 que lorsque la taille N décroît, la valeur de la température critique qui correspond au maximum de la chaleur spécifique augmente.

Courbes de la chaleur spécifique dans le modèle d'Ising en fonction de la taille des échantillons (résultats théoriques) :



III-2-1 - Etude de la cohérence des spins entre eux, étude des amas

Dans ce sous-paragraphe, on va essayer de caractériser la dégénérescence de l'état fondamental, c'est à dire le nombre de configurations possibles du fondamental rapporté au nombre de spins. C'est en effet cette notion qui semble importante pour la recherche d'une transition de phase.

Convention : Pour toute la suite, on se donne un échantillon (N,x) pour lequel on connaît une configuration σ de spins de l'état fondamental et un couplage M des plaquettes frustrées qui peut donner cette configuration. De plus, on ne s'intéressera qu'à des configurations de l'état fondamental.

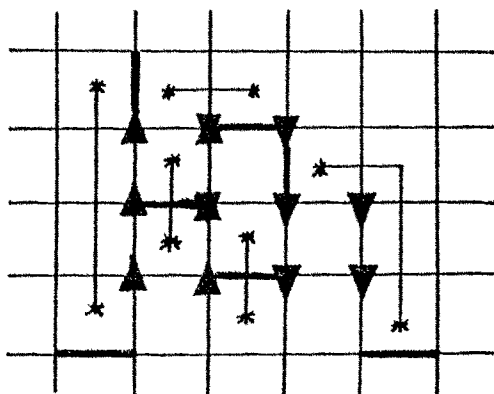
Définition 1 : On appelle amas tout ensemble de spins que l'on peut retourner en bloc pour obtenir une configuration des spins de même énergie.

Définition 2 : On appelle AMAS ELEMENTAIRE tout ensemble connexe de spins que l'on peut retourner en bloc pour obtenir une autre configuration des spins de même énergie ; un amas réduit à un seul spin est appelé SPIN FOU.

Remarque 1 : La dégénérescence de l'état fondamental est très étroitement liée au nombre d'amas.

Remarque 2 : L'union non disjointe de deux amas n'est pas, en général, un amas ; par contre, la différence symétrique de deux amas est toujours un amas. En effet, si l'on retourne successivement les spins de deux amas, on obtient encore encore une configuration du fondamental mais seuls les spins de la différence symétrique des amas ont été effectivement retournés ; ceux de l'intersection ayant été retournés deux fois gardent leur orientation initiale.

L'intersection de deux amas n'est pas nécessairement un amas. En effet, regardons l'exemple suivant :

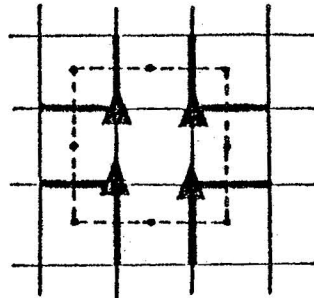


Les liaisons négatives sont indiquées d'un trait gras et les plaquettes frustrées d'un astérisque. On a indiqué les chaînes associées au couplage M.

Les spins marqués ∇ sont ceux d'un premier amas et ceux marqués \blacktriangle sont ceux d'un autre amas. On peut vérifier que les spins de l'intersection marqués \star ne constituent pas un amas car le nombre de liaisons violées quand on les retourne est 11 au lieu de 9 dans la solution optimale.

Définition 3 : On entend par CONTOUR D'UN AMAS l'ensemble des arêtes (i,j) du graphe $G = (S,E)$ associé au maillage telles que le spin i est dans l'amas alors que le spin j n'y est pas. En d'autres termes, le contour d'un amas a est le cocycle $\Omega(a)$ de G .

Exemple :



Les arêtes en trait gras forment le contour des spins marqués \blacktriangle . Les arêtes du graphe dual associé à G qui sont en bijection avec les arêtes du contour forment le cycle indiqué en pointillé.

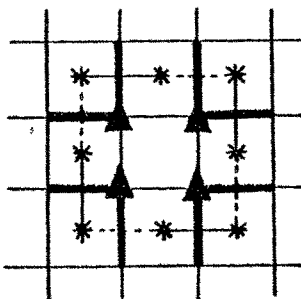
Remarque 3 : Le contour d'un amas contient autant de liaisons violées que de liaisons non violées. En effet, quand on inverse les spins d'un amas, on inverse le caractère violé, non-violé des liaisons du contour.

Définition 4 : Le contour d'un amas est aussi appelé CONTOUR D'ENERGIE NULLE.

Remarque 4 : Tout ensemble de frustration étant en bijection avec un ensemble de plus courtes chaînes de $G' = (P,E')$ disjointes du point de vue des arêtes et joignant deux à deux les plaquettes frustrées et que l'on appellera désormais CHAINES DE FRUSTRATION, la remarque 3 peut s'énoncer dans G' de la manière suivante :

Si P est le contour d'un amas, la partie P' des arêtes de G' en bijection avec les arêtes de P constitue un ensemble de cycles ayant chacun autant d'arêtes dans une chaîne de frustration que d'arêtes hors d'une chaîne de frustration, quelque soit le système de chaînes de frustration choisi.

Exemple :



On considère l'amas constitué des spins marqués \blacktriangle . On appelle P son contour et P' l'image de P dans la bijection qui permet de passer de G à son dual G' . Les arêtes de P' qui sont dans une chaîne de frustration sont indiquées d'un trait plein, les autres sont indiquées d'un pointillé.

Inverser les spins de l'amas revient à violer non plus les liaisons de P "traversées", sur le schéma, par une arête de P' en trait plein mais celles traversées par une arête de P' en pointillé. En d'autres termes, en appelant CF l'ensemble des arêtes de l'ensemble des chaînes de frustration, inverser les spins de l'amas, c'est prendre pour nouvel ensemble CF la différence symétrique $CF \Delta P'$. On remarque que l'opération d'inversion ne devant pas changer l'énergie, on retrouve bien le résultat du théorème 1.

On peut donner la classification suivante des contours des amas :

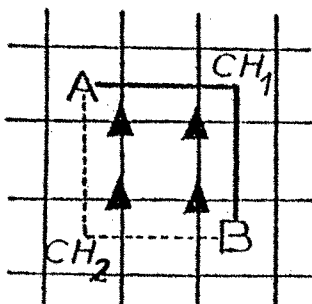
Sur un échantillon (N,x) les contours d'énergie nulle sont de deux types différents :

- . Ceux du TYPE 1 sont l'ensemble des liaisons traversées par les cycles de la réunion de deux plus courtes chaînes de G' différentes correspondant à la même arête du couplage.
- . Ceux du TYPE 2 sont l'ensemble des liaisons traversées par des plus courtes chaînes de G' correspondant à la différence symétrique de deux couplages optima des plaquettes frustrées différents (une plus courte chaîne par arête de couplage).

Exemples :

1 - Contour d'amas de type 1 :

Soient deux plaquettes frustrées A et B couplées dans le couplage M. On suppose qu'il existe dans G' plusieurs plus courtes chaînes d'extrémités A et B. Parmi ces plus courtes chaînes, on en distingue deux, CH1 et CH2.



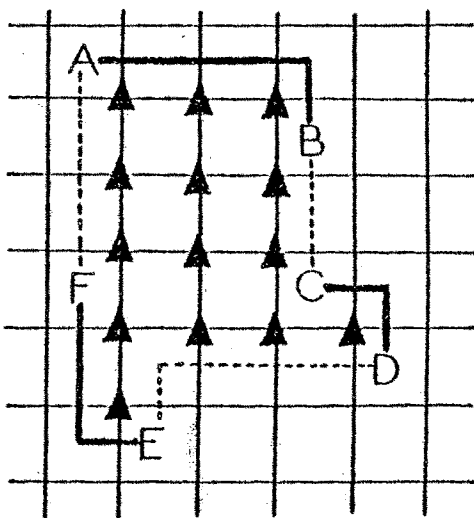
CH1 est indiquée d'un trait gras et CH2 est en pointillé. On voit que suivant que l'on choisit comme chaîne de frustration associée à l'arête (A,B) du couplage M CH1 ou CH2, les spins marqués ▲ sont inversés sans que l'énergie, déterminée entièrement par le poids de M, ne change. Les spins entourés par la réunion de CH1 et de CH2, constituent donc un amas.

2 - Contour d'amas de type 2 :

Soient M et M' deux couplages optimaux du graphe complet $K = (F,A)$ des plaquettes frustrées de l'échantillon (N,x) tels que les arêtes (A,B), (C,D) et (E,F) sont dans M et les arêtes (B,C), (D,E) et (F,A) sont dans M'. On suppose de plus la relation suivante sur le poids des arêtes.

$$(R) \quad \omega_{(A,B)} + \omega_{(C,D)} + \omega_{(E,F)} = \omega_{(B,C)} + \omega_{(D,E)} + \omega_{(F,A)} .$$

On note $CH_{(I,J)}$ une plus courte chaîne de G' joignant les plaquettes I et J.



Les chaînes $CH_{(A,B)}$, $CH_{(C,D)}$ et $CH_{(E,F)}$ sont en trait gras alors que les chaînes $CH_{(B,C)}$, $CH_{(D,E)}$ et $CH_{(F,A)}$ sont en pointillé. Lorsqu'on choisit le couplage M, les chaînes $CH_{(A,B)}$, $CH_{(C,D)}$ et $CH_{(E,F)}$ peuvent être les chaînes de frustration associées respectivement aux arêtes (A,B), (C,D) et (E,F) ; de même, les chaînes $CH_{(B,C)}$, $CH_{(D,E)}$ et $CH_{(F,A)}$ peuvent être prises comme chaînes de frustration lorsqu'on choisit le couplage M'. On voit qu'étant donnée la relation (R) les spins marqués \blacktriangle , entourés par le cycle

$CH_{(A,B)} \cup CH_{(B,C)} \cup CH_{(C,D)} \cup CH_{(D,E)} \cup CH_{(E,F)} \cup CH_{(F,A)}$ constituent un amas.

Intérêt de la notion d'amas :

A propos de ces amas dont le nombre, la superficie et l'imbrication traduisent la dégénérescence de l'état fondamental de l'échantillon (N,x) considéré, on peut se demander si des mesures telles que la proportion de spins appartenant à un amas ou bien la fréquence d'apparition d'un gros amas (amas contenant plus de 50% des spins ou bien amas traversant l'échantillon auquel cas, il y a, on l'étudiera plus tard, une ligne de fracture) peuvent apporter des informations quant à la transition de phase ou plus précisément peuvent donner la valeur d'une concentration critique de liaisons négatives. D'autre part, on verra dans le paragraphe III-2-2 comment on utilise les amas pour étudier l'aimantation des échantillons.

Recherche pratique d'amas :

On ne va s'intéresser ici qu'aux amas dont les contours sont de type 2 (en abrégé, amas de type 2) car on recherche des amas les plus grands possible or l'expérience révèle que les arêtes d'un couplage optimum des plaquettes frustrées sont, en général, de longueur inférieure à 4 et ne peuvent donc engendrer que de très petits amas.

Pour un échantillon (N,x) où N et x ne sont pas très petits, le nombre de couplages optimaux est tel qu'il n'est pas envisageable de les énumérer. On va donc se contenter au cours de cette étude soit de choisir des couplages optimaux les plus différents (méthode 1), soit d'obtenir la réunion de tous les amas (méthode 2).

Méthode 1 :

On recherche pour chaque échantillon (N,x) les amas donnés par deux couplages optimaux les plus différents possible.

Le mode opératoire pour obtenir ces deux couplages est rendu très simple par le fait que les longueurs ω des arêtes de K sont entières :

On recherche un premier couplage optimal M_1 dans (K,ω) puis, on pénalise les arêtes de M_1 en définissant un nouveau poids ω' sur les arêtes de K :

$$\forall e \in A \quad \omega'_e = \begin{cases} \omega_e & \text{si } e \notin M_1 \\ \omega_e + \epsilon & \text{sinon} \end{cases}$$

et l'on recherche un nouveau couplage optimal M_2 dans (K,ω') .

Si l'on choisit $\epsilon > 0$ suffisamment petit (n étant le nombre de sommets de K , on prend ϵ tel que $0 < \frac{n}{2} \cdot \epsilon < 1$), les poids ω étant entiers, on est sûr que $\omega(M_2)$ est égal à $\omega(M_1)$.

Méthode 2 :

Au lieu de rechercher explicitement chaque amas, ce qui demande de connaître chaque couplage optimum, on recherche l'union de tous les amas. On obtiendra ainsi le pourcentage de spins appartenant à un amas. Le principe de cette méthode est de rechercher toutes les arêtes de K pouvant appartenir à un couplage optimum mais pas à tous, puis d'étudier les composantes connexes du graphe partiel de K , K^* , construit sur ces arêtes.

Quelques rappels, définitions et propriétés des couplages [1]

Théorème 2 (C. BERGE) : Soient deux couplages parfaits M' et M'' d'un graphe H .

Les composantes connexes du graphe partiel construit à partir de H en ne gardant que les arêtes de la différence symétrique $M' \Delta M''$ sont :

- soit des points isolés,
- soit des cycles pairs dont les arêtes appartiennent alternativement à M' et à M'' .

Corollaire 1 : Soit M un couplage parfait d'un graphe $H = (M,A)$

Tout couplage parfait, M' , de H est donné de manière biunivoque par un ensemble noté $C(M')$ des cycles élémentaires pairs et disjoints dont les arêtes appartiennent alternativement à M et à $A-M$.

Dans la suite, on appellera de tels cycles des CYCLES ALTERNES par rapport au couplage M .

Définition 4 : Dans un graphe admettant un couplage parfait, on dit qu'une arête est UTILE si et seulement si elle appartient à un couplage parfait du graphe mais pas à tous.

Corollaire 2 (C. BERGE) : Etant donné un couplage parfait M d'un graphe H , une arête de H est utile si et seulement si il existe un cycle alterné par rapport à M qui la contient.

Définition 5 : Dans un graphe où l'on a défini un poids ω sur les arêtes et admettant un couplage parfait, on dit qu'une arête est ω -UTILE si et seulement si elle appartient à un couplage parfait de poids minimum du graphe mais pas à tous.

Pour un graphe H où l'on a défini un poids ω sur les arêtes, on note H^* son graphe partiel construit sur l'ensemble de ses arêtes ω -utiles.

Une caractérisation et une approximation de K^* , sous graphe partiel des arêtes ω -utiles du graphe K des plaquettes frustrées :

Cette caractérisation fait appel à certaines notions définies par J. Edmonds, [5] et [6], que l'on va rappeler pour un graphe quelconque $H = (X, A)$.

1 - Notion de bouton

Pour ce qui suit et le point 2, on se donne un graphe $H = (X, A)$ et un couplage parfait M de H .

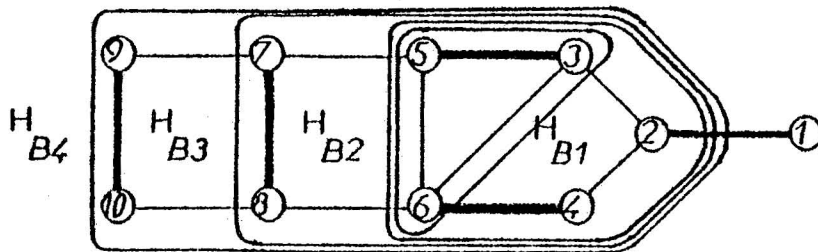
Un BOUTON (ou "BLOSSOM"), B , est un ensemble impair de sommets de H tel que le sous graphe partiel H_B de H construit sur les sommets de B vérifie :

i) Soit M_B la restriction de M à H_B .

M_B sature tous les sommets de B sauf un, r , appelé BASE DU BOUTON B .

- ii) Pour tout sommet $b \neq r$ de B , il existe dans H_B au moins deux chaînes élémentaires, alternées par rapport à M_B et d'extrémités b et r ; l'une est paire et l'autre est impaire.

Exemple :



$$\begin{aligned}
 B_1 &= \{3, 5, 6\} \\
 B_2 &= \{3, 5, 6, 2, 4\} \\
 B_3 &= \{3, 5, 6, 2, 4, 7, 8\} \\
 B_4 &= \{3, 5, 6, 2, 4, 7, 8, 9, 10\}
 \end{aligned}$$

B_1, B_2, B_3 et B_4 sont des BOUTONS IMBRIQUES

2 - Opération de réduction d'un graphe H par rapport à un bouton B

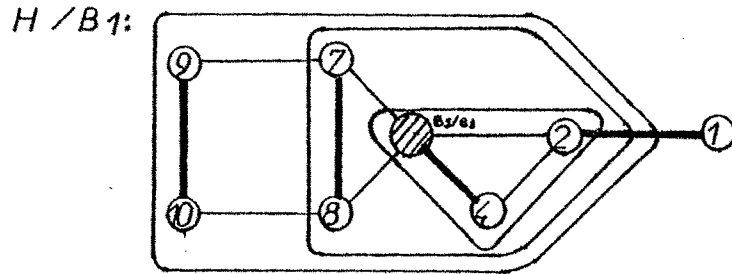
Cette opération consiste à construire un nouveau graphe noté H/B en remplaçant dans H le bouton B par un seul sommet appelé PSEUDO-SOMMET et noté B/B .

- i.e. : . les sommets de B sont remplacés par le pseudo-sommet B/B , les autres sommets de H étant inchangés ;
- . toute arête de H adjacente à deux sommets hors de B est inchangée ;
 - . toute arête de H ayant ses deux extrémités dans B disparaît ;
 - . et toute arête (v_1, v_2) de H adjacente à un seul sommet, v_1 , de B devient une arête $(B/B, v_2)$ de H/B .

Etant donné un pseudo-sommet B/B , on dira que les sommets de B sont REDUITS dans B/B .

On note M/B le couplage de H/B induit par M .

Exemple : On reprend l'exemple donné au point 1.

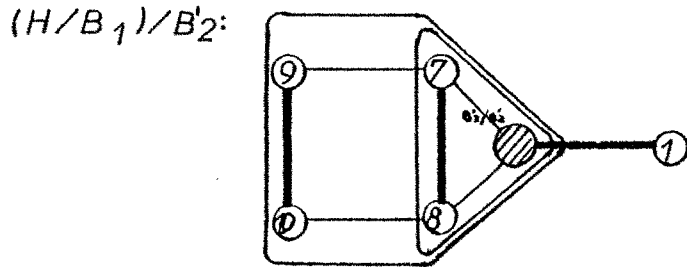


$$B_2^1 = \{2, 4, B_1/B_1\}$$

$$B_3^1 = \{2, 4, B_1/B_1, 7, 8\}$$

$$B_4^1 = \{2, 4, B_1/B_1, 7, 8, 9, 10\}$$

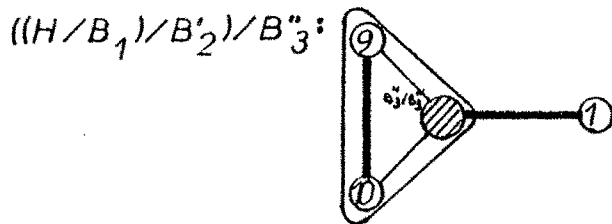
B_2^1 , B_3^1 et B_4^1 sont des boutons de H/B_1 .



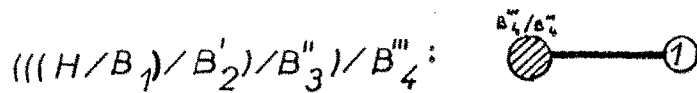
$$B_3^2 = \{7, 8, B_2^1/B_2^1\}$$

$$B_4^2 = \{7, 8, B_2^1/B_2^1, 9, 10\}$$

B_3^2 et B_4^2 sont des boutons de $H/B_1/B_2^1$.



$B_4^3 = \{9, 10, B_3^2/B_3^2\}$ est un bouton de $((H/B_1)/B_2^1)/B_3^2$



On remarque que les graphes H/B_4 et $((((H/B_1)/B_2^1)/B_3^2)/B_4^3)$ sont isomorphes.

3 - Notion de graphe d'égalité

Soit $H = (X, A)$ un graphe simple non orienté.

Considérons le programme linéaire (P) suivant dont on sait, d'après J. EDMONDS [6], que toutes les solutions de base sont les vecteurs d'incidence des couplages parfaits de H :

$$(P) \begin{cases} (1) & x_{ij} \geq 0, \quad \forall (i,j) \in A \\ (2) & \sum_{\{j \in X \mid (i,j) \in A\}} x_{i,j} = 1, \quad \forall i \in X \\ (3) & \sum_{\{(i,j) \in A \mid i \in S \text{ et } j \in S\}} x_{ij} \leq \frac{|S|-1}{2}, \quad \forall S \subset X, |S| = 2k+1 \text{ avec } k \in \mathbb{N}^* \\ (4) & \sum_{(i,j) \in A} \omega_{ij} x_{ij} = W(\text{MIN}) \end{cases}$$

Le dual (D) de (P) s'écrit :

$$(D) \begin{cases} (5) & u_i \geq 0, \quad \forall i \in X \\ (6) & z_S \leq 0, \quad \forall S \subset X, |S| = 2k+1 \text{ avec } k \in \mathbb{N}^* \\ (7) & u_i + u_j + \sum_{\{S \subset X \mid |S| = 2k+1 \text{ avec } k \in \mathbb{N}^* \text{ et } i \in S, j \in S\}} z_S \leq \omega_{ij}, \quad \forall (i,j) \in A \\ (8) & \sum_{i \in X} u_i + \sum_{\{S \subset X \mid |S| = 2k+1 \text{ avec } k \in \mathbb{N}^*\}} \frac{|S|-1}{2} z_S = T(\text{MAX}) \end{cases}$$

D'après le théorème faible des écarts complémentaires, étant donnée une solution (u, z) de (D), tout couplage parfait de H de vecteur d'incidence x est de poids minimum si et seulement si les deux conditions suivantes sont réalisées :

$$i) \quad \forall S \subset X, z_S < 0, \quad \sum_{\{(i,j) \in A \mid i \in S \text{ et } j \in S\}} x_{ij} = \frac{|S|-1}{2}$$

$$ii) \quad \forall e = (i,j) \in A, x_e = 1, u_i + u_j + \sum_{\{S \mid i \in S \text{ et } j \in S\}} z_S = \omega_{ij}$$

On énoncera la propriété i) : "Le couplage sature toute partie impaire S de variable duale z_S non nulle".

Définition : Etant donnée une solution (u,z) de (D), on appelle GRAPHE D'EGALITE de H pour la solution (u,z) le graphe partiel \bar{H}^0 de H construit sur l'ensemble des arêtes vérifiant ii).

Corollaire du théorème faible des écarts complémentaires :

Etant donné une solution (u,z) de (D) et le graphe d'égalité \bar{H}_0 associé, les couplages parfaits de poids minimum de H sont les couplages parfaits de \bar{H}_0 qui saturent toutes les parties impaires S telles que $z_s < 0$.

L'algorithme de J. EDMONDS de recherche d'un couplage parfait de poids minimum dans un graphe $H = (X,A)$, décrit en annexe 1, donne, en plus du couplage, une solution optimale (u,z) de (D). Les parties impaires S de variable duale z_s non nulle dans cette solution permettent de définir une suite de graphes $\{\bar{H}^k\}_{k=0, \dots, p}$ telle que \bar{H}^0 est le graphe d'égalité associé à la solution (u,z) et telle que l'on passe de \bar{H}^k à \bar{H}^{k+1} en réduisant \bar{H}^k par rapport à un bouton B_k les parties impaires S telles que z_s est non nulle sont les parties S_k de sommets de H réduits dans chaque pseudo-sommet $b_k = B_k/B_k$.

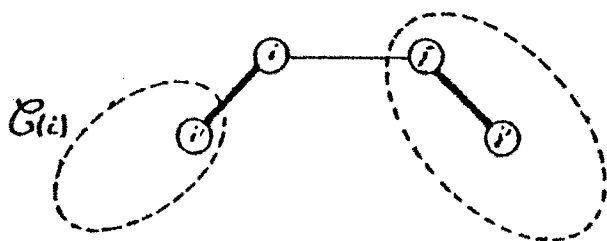
Le graphe \bar{H}^p est appelé GRAPHE D'EGALITE REDUIT de H.

Caractérisation de H^* : D'après le corollaire ci-dessus H est aussi le sous graphe partiel de \bar{H}^0 construit sur ses arêtes utiles et qui saturent les parties S telle que z_s est non nulle dans la solution donnée par l'algorithme d'EDMONDS. Si $p = 0$, H^* est le sous-graphe partiel de $\bar{H}^p = \bar{H}^0$ construit sur ses arêtes utiles.

Une approche de H^* : Après avoir appliqué l'algorithme d'EDMONDS on supprime à \bar{H}^0 certaines de ses arêtes inutiles et l'on approche H^* par les sous-graphe partiel obtenu. Cette méthode, bien qu'étant une approche très grossière, a donné, appliquée au graphe complet $K = (F,A)$ où les longueurs des arêtes correspondent à des distances de types Manhattan, dans les essais que l'on a effectués une assez bonne approximation de K^* et a eu l'avantage d'être très rapide.

Algorithme de suppression de certaines arêtes inutiles de \bar{H}_0

Dans cet algorithme, on supprime les arêtes dont une extrémité est un point d'articulation de \bar{H}_0 . De telles arêtes ne peuvent être utiles car il ne peut y avoir un cycle alterné la contenant.



On suppose que i est point d'articulation et que les arêtes (i,i') et (j,j') sont dans un couplage parfait M . Dans le sous-graphe obtenu en supprimant le sommet i , i' et j' ne sont pas dans la même composante connexe ce qui prouve bien qu'il n'existe pas de cycle alterné contenant (i,j) .

Algorithme :

Pas 0 : - Soient q le nombre de composantes connexes de \bar{G}_0 et S_t l'ensemble des sommets de la $t^{\text{ème}}$ composante connexe.

- Poser : $t = 1$

Pas 1 : - Si $t = q+1$, terminer.

Sinon aller au pas 2.

Pas 2 : - Pour chaque sommet s de S_t qui est un point d'articulation appliquer la procédure suivante :

. Soit $C(s)$ la composante connexe du sous-graphe obtenu en supprimant s qui contient le sommet couplé à s dans M .

. Supprimer toutes les arêtes de la forme (s,i) quand i n'est pas dans $C(s)$.

- Poser $t = t+1$.

- Aller au pas 1.

Il existe un algorithme polynomial de recherche des arêtes -utiles d'un graphe comme par exemple, celui présenté ci-dessous :

(0) - Trouver un couplage parfait de poids minimum, M , du graphe.

(1) - Pour chaque arête e de M , appliquer la procédure suivante :

- . enlever l'arête e du graphe .
 - . rechercher un couplage parfait de poids minimum, M' , dans le nouveau graphe .
 - . si M et M' ont le même poids, e est ω -utile sinon e ne l'est pas.
- (2) - Pour chaque arête e qui est hors de M , appliquer la procédure suivante :
- . supprimer e et ses extrémités .
 - . rechercher un couplage parfait de poids minimum, M'' , dans le sous-graphe partiel .
 - . l'arête e est ω -utile si et seulement si le poids de M est égal au poids de M'' augmenté du poids de l'arête e .

On conjecture qu'il existe un algorithme plus performant qui consisterait à rechercher par l'algorithme donné dans [1] les arêtes utiles des graphes successifs $\bar{H}_p, \bar{H}_{p-1}, \dots, \bar{H}_0$ de la suite $\{\bar{H}^k\}_{k=q, \dots, p}$ donnée par l'algorithme de J. EDMONDS.

Comment déterminer, à partir de K^* , la réunion de tous les amas :

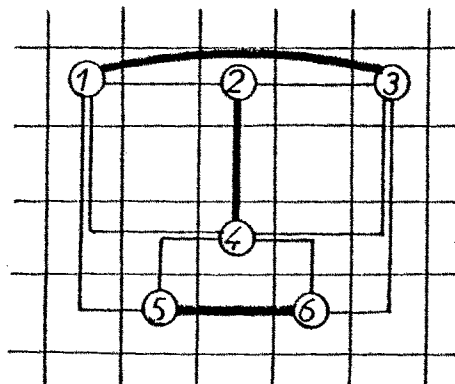
Après avoir trouvé un couplage parfait M de poids minimum du graphe complet $K = (F, A)$ des plaquettes frustrées pour le poids ω , on donne aux arêtes de K un nouveau poids ω^* comme suit :

$$\forall e \in A, \quad \omega^*(e) = \begin{cases} -\omega(e) & \text{si } e \in M \\ +\omega(e) & \text{sinon} \end{cases}$$

Dans le graphe initial $K = (F, A)$, M étant un couplage parfait de poids minimum, pour le poids ω , tous les cycles alternés par rapport à M ont un poids ω^* positif ou nul et toutes les arêtes de K^* appartiennent à au moins un cycle alterné de poids ω^* nul.

Notons qu'il peut exister dans K^* , même pour les graphes particuliers qui nous préoccupent, des cycles alternés de poids ω^* strictement positifs :

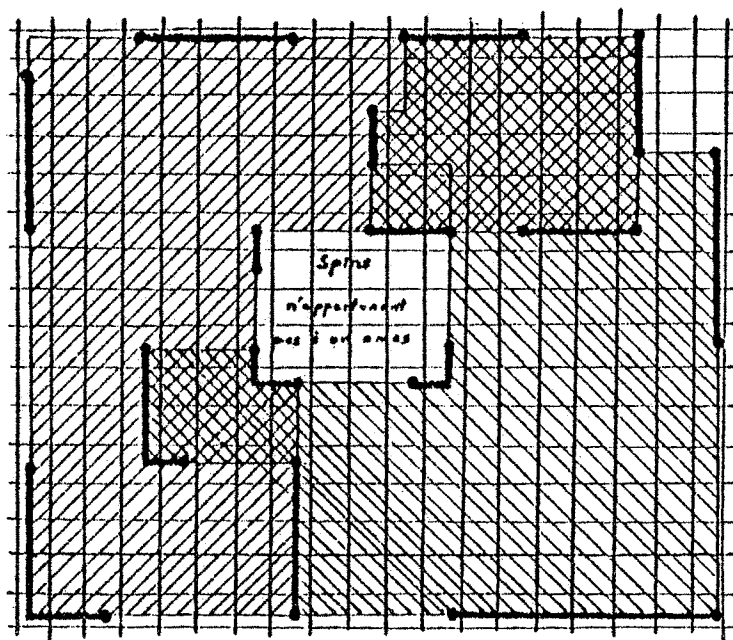
Exemple :



Le graphe K^* est dessiné en superposition sur le maillage. Ses arêtes sont remplacées par une plus courte chaîne de G' . Les faces frustrées sont numérotées de 1 à 6 et les arêtes de M sont en trait gras. Le cycle alterné $(1,3,6,5)$ est de poids ω^* égal à $2 > 0$.

Si l'on dessine, comme dans l'exemple précédent, chaque arête de K^* sur le maillage en la remplaçant par une plus courte chaîne joignant ses extrémités de telle sorte que chaque composante connexe de K^* entoure un nombre maximum de spins, la réunion de tous les spins ainsi entourés est contenue dans la réunion de tous les spins appartenant à un amas de type 2. Ceci vient du fait que toute arête de K^* appartient à un cycle alterné de poids ω^* nul et que le contour d'énergie nulle de tout amas élémentaire de type 2 correspond à un cycle alterné de poids ω^* nul. Le fait qu'il n'y ait pas correspondance exacte entre les deux ensembles vient de l'existence éventuelle de "trou" à l'intérieur des composantes connexes.

Exemple :



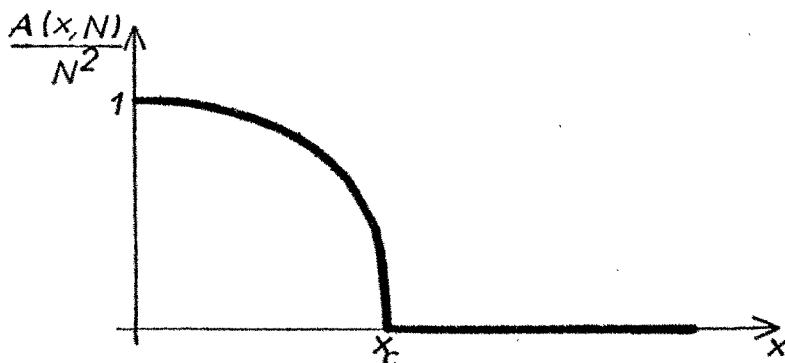
III-2-2 - Etude de l'aimantation par spin en fonction de la concentration x de liaisons négatives

Définition 1 : Pour une configuration donnée de spins, on appelle AIMANTATION RELATIVE la différence entre le nombre de spins positifs et le nombre de spin négatifs ; l'AIMANTATION est la valeur absolue de l'aimantation relative.

But de l'étude :

On aimerait connaître, pour x et N fixés, l'espérance d'aimantation, $A(x,N)$, pour vérifier si la courbe de A en fonction de x a la même allure que celle de l'aimantation en fonction de la température dans le cas d'un système ferromagnétique.

On peut tout à fait, s'il existe une transition de phase à la concentration $x = x_c$, imaginer une courbe ayant l'allure suivante :



En effet, la configuration des spins qui donne une aimantation par spin égale à 1 est celle pour laquelle l'ensemble de frustration coïncide avec l'ensemble des liaisons négatives. Or, à x petit, cette configuration est presque toujours une configuration du fondamental et quand x augmente, cette configuration cesse rapidement de l'être. D'autre part, s'il existe une transition de phase à $x = x_c$, cette transition se fera entre une phase ordonnée et une phase désordonnée où l'on peut imaginer que toutes les aimantations possibles sont équiprobables autour de la moyenne 0, une très grande liberté étant laissée au système qui dans un milieu magnétique neutre aura tendance à l'être aussi.

Etude de l'aimantation correspondant à un couplage optimum donné :

Pour un échantillon (N,x) donné, le nombre de configurations des spins de l'état fondamental étant en général très grand et les amas (ils ont un rôle essentiel pour l'aimantation puisque pour passer d'une configuration du fondamental à une autre il faut retourner les spins d'un amas)

n'étant pas disjoints, il n'est pas envisageable de calculer exactement la valeur moyenne de l'aimantation de l'échantillon. On se limitera donc à calculer des moyennes sur toutes les configurations des spins correspondant à un même couplage optimum des plaquettes frustrées de l'échantillon (N,x) .

Dans toute la suite du paragraphe on va considérer un échantillon (N,x) où l'on connaît un couplage optimum, M , des plaquettes frustrées que l'on imposera.

Deux configurations des spins données par le même couplage M ne peuvent différer que par l'orientation de spins appartenant à des amas dont les contours sont de type 1 (en abrégé, amas de type 1). Passer d'une configuration des spins donnée par M à une autre, c'est donc retourner les spins "entourés" par les cycles formés par deux plus courtes chaînes différentes associées à une même arête de M .

On note v le nombre de configurations de spins correspondant au couplage M et r le nombre d'amas de type 1 induits par le couplage M .

M étant un couplage de poids minimum et la longueur de chaque arête de M correspondant à celle d'une plus courte chaîne entre deux plaquettes frustrées, tout ensemble de chaînes de frustration associé au couplage M est tel que deux chaînes n'ont pas d'arête en commun et donc les r amas sont nécessairement deux à deux disjoints.

Pour le k ième amas, on appelle :

- . a_k l'ensemble de ses spins,
- . α_k^j l'aimantation relative de ses spins calculée dans la j ème configuration correspondant au couplage M .
- . $\gamma^k = \text{MAX}_{j=1, \dots, v} \{ \alpha_k^j \}$
- . $\gamma'^k = \text{MIN}_{j=1, \dots, v} \{ \alpha_k^j \}$

D'autre part, on note :

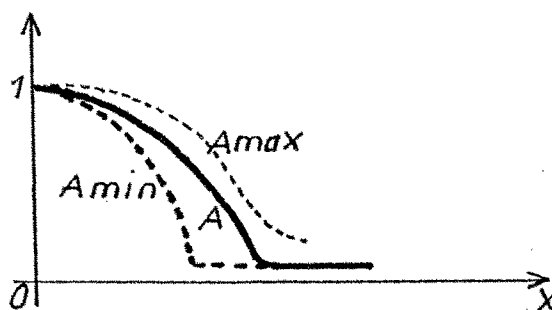
- . a_0 l'ensemble des spins de l'échantillon qui ne sont pas dans un amas ;
- $$a_0 = S - \bigcup_{k=1}^r a_k$$
- . α l'aimantation relative calculée sur les spins de a_0 .

Remarque 1 : L'étude de l'aimantation n'a de sens que si l'on fixe arbitrairement un spin de a_0 au départ.

Calcul de l'aimantation maximum ou minimum d'un échantillon (N,x) où l'on impose un couplage optimum, M, des plaquettes frustrées:

Le calcul de l'aimantation moyenne est rendu difficile par rapport à celui de l'aimantation relative moyenne (que l'on sait faire) du fait que la sommation se fait sur des valeurs absolues et que l'on ne peut pas considérer indépendamment chaque amas. La transition de phase, si elle existe, peut tout à fait transparaître dans la courbe de l'aimantation minimum en fonction de x.

Courbes espérées :



On va donc calculer l'aimantation maximum, A_{\max} , et l'aimantation minimum, A_{\min} , quand on impose un couplage des plaquettes frustrées. Pour cela on calculera, dans un premier temps, l'aimantation relative maximum, AR_{\max} , et l'aimantation relative minimum, AR_{\min} .

Pour le calcul de l'aimantation relative maximum (ou minimum) quand on impose le couplage des plaquettes frustrées, on ne peut jouer que sur le choix de la plus courte chaîne dans chaque amas de type 1 induit par le couplage.

Si l'on fixe arbitrairement un spin de a_0 de telle sorte que l'aimantation relative maximum α ne soit pas négative, l'aimantation relative maximum (resp. minimum) est donnée pour toute configuration qui donne le plus possible de spins positifs (resp. négatifs) dans chaque amas.

En effet :

$$AR_{\max} = \text{MAX}_{j=1, \dots, U} [\alpha + \sum_{k=1}^r \alpha_k^i]$$

$$AR_{\max} = \alpha + \text{MAX}_{j=1, \dots, U} [\sum_{k=1}^r \alpha_k^j]$$

Les amas étant deux à deux disjoints et par conséquent indépendants du point de vue de l'aimantation on a :

$$AR_{MAX} = \alpha + \sum_{k=1}^r \text{MAX}_{j=1, \dots, L} (\alpha_k^j)$$

$$AR_{MAX} = \alpha + \sum_{k=1}^r \gamma^k$$

On a de même :

$$AR_{MIN} = \alpha + \sum_{k=1}^r \gamma'^k$$

Montrons comment le calcul de γ^k (ou de γ'^k) pour le k ème amas peut se ramener à la recherche d'un plus long (ou d'un plus court) chemin entre deux sommets donnés dans un graphe orienté sans circuit :

Pour chaque amas k , γ^k correspond au choix d'une plus courte chaîne qui donne le plus possible de spins positifs.

Pour l'amas k , on note :

- . (A,B) l'arête de M qui le donne,
- . CH une plus courte chaîne de G' d'extrémités A et B,
- . R l'ensemble de toutes les plaquettes qui peuvent être sur une plus courte chaîne de G' d'extrémités A et B,
- . $R' \subset R$ l'ensemble des plaquettes traversées par CH,
- . (R,L) un graphe orienté dont R est l'ensemble des sommets et tel que si l'on ignore son orientation on obtient le sous graphe de G' construit sur les sommets de R. L'orientation de (R,L) est définie de manière à ce que toute chemin de A vers B dans (R,L) donne une plus courte chaîne d'extrémités A et B dans G' et réciproquement. On identifiera donc, par abus de langage, chemin de A vers B dans (R,L) et plus courte chaîne d'extrémités A et B dans G' .

On dessine (R,L) en superposition sur le maillage et à tout arc $(\overrightarrow{p, p'})$ de L on associe l'arc $(\overrightarrow{p, p'})$ qui est l'arc de CH qui lui est "parallèle" ainsi que l'aimantation relative $a(\overrightarrow{p, p'})$ calculés sur les spins séparés

- . On indique le sens de chaque spin par son signe + ou -
- . CH est indiqué en trait gras.
- . Le chemin CH' est indiqué par 1 trait double sa longueur est -8.
- . L'aimantation des spins que l'on retourne quand on passe de CH à CH' est + 4 ; la variation de l'aimantation des spins de a_k est donc bien -8.

De ceci, il résulte que l'aimantation relative maximum (resp. minimum) des spins de a_k est obtenue en choisissant la plus courte chaîne d'extrémités A et B qui donne le plus long (resp. le plus court) chemin de A vers B dans (R,L) pour la distance d.

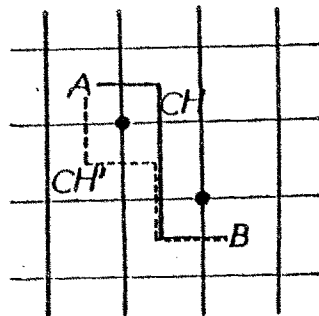
L'aimantation maximum, A_{MAX} , correspond à l'aimantation relative de plus grande valeur absolue :

$$A_{MAX} = \max \left[|AR_{MIN}|, |AR_{MAX}| \right]$$

Théorème 1 : Tous les nombres de valeur absolue paire compris entre $\gamma^{(k)}$ et $\gamma^{(k)}$ sont des valeurs d'aimantation relative possibles pour le kième amas.

Démonstration : Lorsqu'on a une plus courte chaîne CH entre les deux plaquettes A et B qui déterminent l'amas k, on peut toujours obtenir, par une opération très simple qui consiste à contourner un spin "voisin" de CH par "l'autre côté", une autre chaîne CH' telle que si β est l'aimantation relative du kième amas correspondant au choix de CH et si β' est celle correspondant au choix de CH', on a $\beta' = \beta \pm 2$ ou encore $|\beta - \beta'| = 2$.

Exemple :



- . CH est indiqué en trait gras, CH' en pointillé.
- . Les spins marqués d'un point sont les spins "voisins" de CH. De tels spins existent toujours car l'arête (A,B) détermine un amas.

Cette opération élémentaire, qui consiste en fait à retourner un seul spin sans changer l'énergie du système, donne, si on la réitère suffisamment de fois, toutes les plus courtes chaînes possibles d'extrémités A et B et par suite toute les aimantations comprises entre $\gamma^{(k)}$ et $\gamma'^{(k)}$. De plus la différence entre deux aimantations relatives successives étant ± 2 , tous les nombres de valeur absolue paire compris entre $\gamma'^{(k)}$ et $\gamma^{(k)}$ sont des valeurs possibles d'aimantation relative du kième amas.

Corollaire 1 : L'aimantation absolue minimum est :

- . Soit 0 si $A_{\text{MIN}} \leq 0 \leq A_{\text{MAX}}$
- . Soit A_{MIN} si $0 \leq A_{\text{MIN}} \leq A_{\text{MAX}}$
- . Soit $-A_{\text{MAX}}$ si $A_{\text{MIN}} \leq A_{\text{MAX}} \leq 0$.

III-2-3 - Recherche d'une ligne de fracture:

Toujours dans l'objectif de mettre en évidence l'existence d'une transition de phase, on va essayer de déterminer une concentration critique de liaisons négatives à partir de laquelle il n'existe plus d'ordre de longue distance (les spins d'un bord peuvent être inversés dans une configuration du fondamental sans que l'énergie du système ne change).

Définition de la fracturation d'une plaque finie ou infinie:

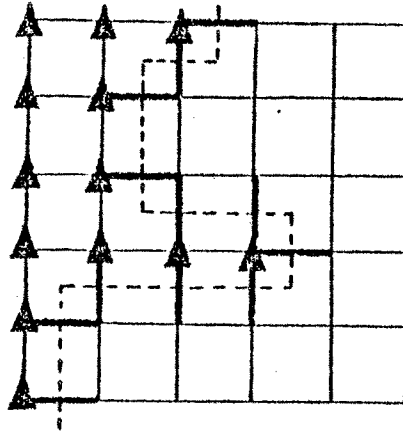
Etant donnée une configuration des spins, σ^1 , d'énergie minimum, on définit un poids v sur les arêtes du graphe $G = (S, E)$ associé au maillage :

$$\forall e \in E, v(e) = \begin{cases} -1 & \text{si } e \text{ correspond à une liaison violée} \\ +1 & \text{sinon} \end{cases}$$

Une LIGNE DE FRACTURE SUR LA PLAQUE FINIE est un cocycle élémentaire $\Omega(S_1) = \Omega(S_2)$ de poids $v(\Omega(S_1))$ nul et qui déconnecte lorsqu'on l'enlève, deux bords parallèles de la plaque.

Remarque 1 : Le nom de "ligne de fracture" vient du fait que lorsqu'on remplace chaque arête du cocycle par son homologue dans le dual G' de G dessiné en superposition sur le maillage, on obtient une ligne qui traverse toute la plaque.

Exemple :



Les spins de S_1 sont marqués \blacktriangle et les arêtes de la ligne de fracture sont en trait gras.

On dira qu'une plaque finie $P^{(N,x)}$ est FRACTURÉE si elle admet une ligne de fracture.

On définit la probabilité $PR(P^{(N,x)})$ pour qu'une plaque finie $P^{(N,x)}$ soit fracturée comme suit :

$$PR(P^{(N,x)}) = \begin{cases} 1 & \text{si } P^{(N,x)} \text{ est fracturée} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On considère toute plaque infinie $P_\infty^{(x)}$ comme étant la limite lorsque N tend vers l'infini d'une suite de plaques finies $P^{(N,x)}$ imbriquées ; ce que l'on note :

$$P_\infty^{(x)} = \lim_{N \rightarrow \infty} (P^{(N,x)}) \quad \text{avec } \forall N, P^{(N,x)} \subset P^{(N+1,x)}$$

On dira qu'une plaque infinie $P_\infty^{(x)}$ est fracturée ou admet une ligne de fracture s'il existe une suite de plaques finies $P^{(N,x)}$ imbriquées telle que :

$$P_\infty^{(x)} = \lim_{N \rightarrow \infty} (P^{(N,x)})$$

$$\text{et } PR(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} (PR(P^{(N,x)})) = 1$$

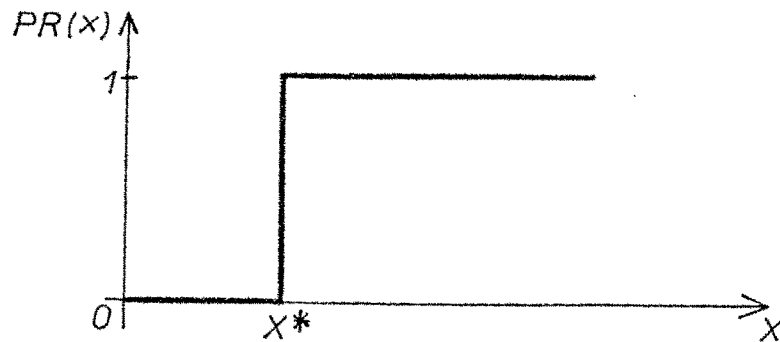
Remarque 2 : On peut en général extraire d'une plaque infinie admettant une ligne de fracture une plaque finie ne possédant pas de ligne de fracture.

Problèmes rencontrés pour décider si une plaque infinie $P_{\infty}^{(x)}$ est fracturée :

1 - Problèmes de simulation :

On ne peut étudier la plaque infinie $P^{(x)}$ qu'en simulant des plaques finies $P^{(N,x)}$ avec N relativement petit ($N \leq 22$).

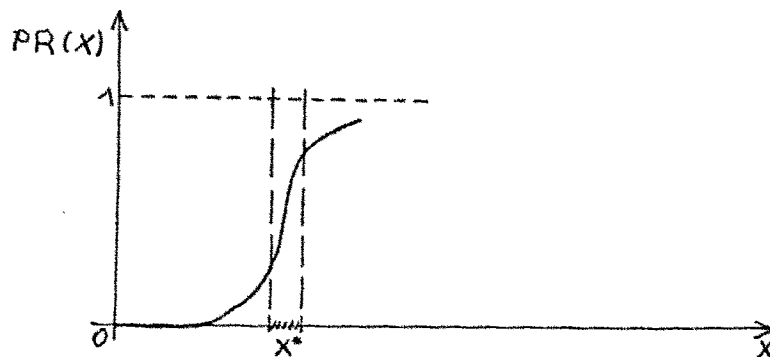
On pense que s'il existe une transition de phase au seuil x^* , la courbe théorique de $PR(x)$ en fonction de x a l'allure suivante :



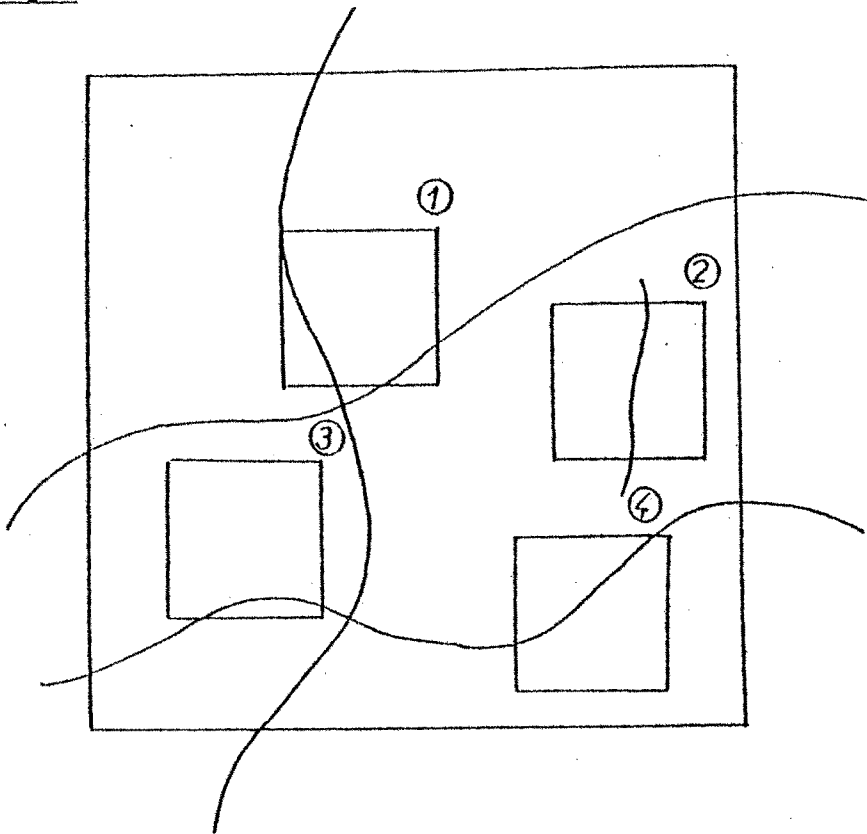
On estimera $PR(x)$ par le pourcentage de plaques $P^{(N,x)}$ fracturées pour N fixé (on a pris $N = 22$). Cette estimation sera très perturbée par la petite taille des plaques simulées. En effet, considérons chaque plaque $P^{(N,x)}$ comme étant ce que l'on verrait de la plaque infinie à travers une lucarne de taille $N \times N$. Pour des valeurs de x très peu inférieures à x_c il est très probable de voir à travers la lucarne une ligne de fracture de $P^{(N,x)}$ qui n'est en fait qu'une ligne de fracture finie. De même pour des valeurs de x très peu supérieures à x_c la densité des lignes de fracture étant faible on peut ne pas voir une ligne de fracture infinie apparaître en tant que ligne de fracture de $P^{(N,x)}$.

On ne peut donc espérer qu'une courbe amortie par rapport à la courbe caractéristique d'une transition de phase.

Courbe que l'on peut espérer (et que l'on a obtenue (Chap. IV) !)



Exemple :



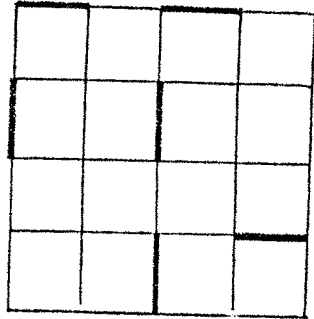
On ne voit une ligne de fracture que dans les échantillons (1) et (2). Dans l'échantillon (2), ce n'est pas une ligne de fracture de la grande plaque. Les échantillons (3) et (4) sont traversés par une ligne de fracture, mais on ne le remarque pas.

Problèmes mathématiques rencontrés :

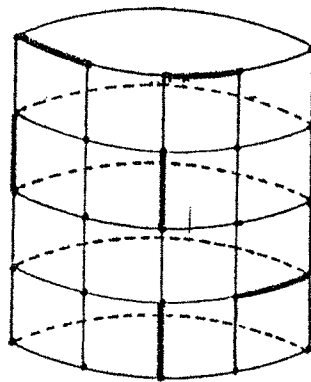
Pour trouver une ligne de fracture sur une plaque finie $N \times N$, il suffit de savoir imposer l'orientation des spins d'un bord par rapport à celle des spins du bord parallèle et de rechercher une configuration d'énergie minimale dans ces nouvelles conditions. Pour cela, on transforme la plaque $N \times N$ en un cylindre en rajoutant N liaisons parallèles, nonviolables et qui connectent deux bords opposés.

Exemple :

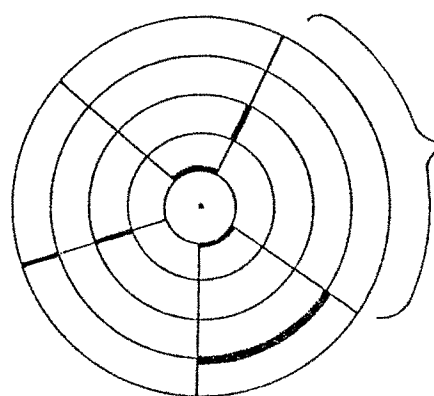
A partir de la plaque $N \times N$ suivante ($N = 4$) :



On construit le cylindre $C(N)$:



qui donne le dessin planaire suivant :



N liaisons rajoutées non violables .

Le graphe associé au maillage restant étant planaire, on sait encore trouver une configuration d'énergie minimum en recherchant un couplage parfait de poids minimum des plaquettes frustrées dans le graphe dual associé à la représentation planaire donnée.

Méthode :

- (1) - Rechercher une configuration σ^O d'énergie minimum E_O sur la plaque finie, $P(N)$. Poser $k = 1$.
- (2) - Construire le cylindre $C(N)$.
- (3) - A chaque liaison $e = (i, j)$ rajoutée pour passer de la plaque au cylindre donner la valeur : $\gamma_{ij} = -\sigma_i^O \sigma_j^O$.
On ne change pas la valeur γ_e des autres liaisons.
- (4) - Rechercher une configuration d'énergie minimum, E_k , sur le nouveau maillage en interdisant de violer les liaisons propres au cylindre (ceci peut se faire en attribuant, dans le calcul des longueurs des plus courtes chaînes, des poids suffisamment grands à ces liaisons).
- (5) - Si $E_O \neq E_k$ et $k = 1$, aller en (6).
Sinon terminer : si $E_O = E_k$ il existe une ligne de fracture, sinon il n'en existe pas.
- (6) - Construire un nouveau cylindre en reliant les deux autres bords de la plaque.
Poser $k = 1$ et en aller en (3).

On aimerait pouvoir trouver, dans une même simulation, une approximation de E^* ainsi qu'une ligne de fracture.

On a vu que pour trouver E^* , il était meilleur, car cela supprimait l'effet de bord, de simuler un tore.

Sur le tore, pour rechercher une ligne de fracture, il faudrait savoir tenir compte de la frustration de deux cycles de base perpendiculaires, de taille N et qui apparaissent quand on passe de la plaque au tore ; ce qui n'est pas le cas car alors le concept de chaînes reliant deux cycles de base frustrés n'est plus valable, une liaison pouvant être adjacente à trois cycles de la base de G qu'on est amené à considérer dans sa totalité.

Au lieu d'un tore, on a simulé un cylindre ce qui diminue les effets de bords de la plage finie et présente l'avantage de donner un graphe G planaire où la base de cycles que l'on considère est constituée par l'ensemble des plaquettes dessinées sur le corps du cylindre auquel on rajoute les deux cycles formés par les bases (un seul suffirait mais on rajoute les deux afin d'assurer la parité du nombre de faces frustrées).

Remarque 2 : D'après la définition même d'une ligne de fracture, à toute ligne de fracture, il correspond, dans le graphe complet K des plaquettes frustrées, un cycle alterné de poids ω^* nul. Une condition nécessaire mais hélas non suffisante pour qu'il existe une ligne de fracture sur le tore est donc qu'il existe une composante connexe du graphe partiel K^* de K construit sur les arêtes ω -utiles qui traverse tout l'échantillon.

On pourra remarquer sur les courbes données plus loin (Ch. IV) la très forte corrélation qui existe entre la proportion moyenne de spins appartenant à un amas et la fréquence d'apparition d'une ligne de fracture.

CHAPITRE IV

PLAN D'EXPERIENCE ET RESULTATS PHYSIQUES

IV-1 - PLAN D'EXPERIENCE:

IV-1-1 - Taille des échantillons simulés :

Dans le modèle de la frustration, le réseau est, comme on l'a vu au chapitre I, infini. En décidant de simuler des réseaux finis de taille $N \times N$, on a supposé implicitement que l'espérance de l'énergie par spin

$\frac{\bar{E}^P(N,x)}{N^2}$ converge lorsque N tend vers l'infini. D'après le théorème 1 du

Chapitre III, on sait que s'il y a convergence la limite est aussi égale à

la limite de la quantité $\frac{\bar{E}^T(N,x)}{N^2}$ et l'on ne simulera donc que des pseudo-tors

afin de réduire l'effet de bord de la plaque finie.

Bien que l'on ne dispose pas de preuve mathématique de cette convergence en dehors du cas d'Ising (ferro-magnétique), elle paraît très probable au vu de nos résultats numériques. Il sera toutefois important d'étudier l'évolution de $\frac{\bar{E}^T(N,x)}{N^2}$ en fonction de N dans l'espoir de déterminer une taille N à partir de laquelle cette quantité ne fluctue pas trop et qui ne soit pas trop grande afin que les temps de simulation restent "raisonnables".

D'autre part, on a vu que la taille N des maillages simulés peut introduire un biais non négligeable sur les résultats trouvés lors de la recherche d'une concentration critique de liaisons négatives à laquelle il pourrait y avoir une transition de phase. Il n'est pas du tout inconcevable que l'effet de taille ne soit pas constant sur toutes les grandeurs mesurées.

IV-1-2 - Nombre d'échantillons à simuler :

L'objet de ce paragraphe est de déterminer le nombre $s(x,N)$ d'échantillons à simuler (x et N fixes) afin d'obtenir pour l'énergie moyenne par spin $\frac{\bar{e}(x,N)}{N^2}$ un intervalle de confiance à 95%.

Pour cela, pour chaque valeur de (x,N) on fait un nombre t fixé (et petit) de simulations d'un tore $T(N,x)$ qui permettent de calculer t réalisations de la variable aléatoire $\frac{E^T(N,x)}{N^2}$.

Cette variable suit une loi

- d'espérance $\frac{\bar{e}(x,N)}{N^2}$, estimée par la moyenne $\bar{E}(x,N)$ des t réalisations ;
- d'écart-type $s(x,N)$, estimée par l'écart-type $\sigma(x,N)$ des t réalisations.

Alors $\frac{\bar{E}(x,N) - \frac{\bar{e}(x,N)}{N^2}}{\sqrt{E} \sigma(x,N)}$ suit approximativement une loi de student à t-1 degrés de libertés.

Sous ces hypothèses, l'intervalle de confiance pour $\frac{\bar{e}(x,N)}{N^2}$ est donné par

$$I_t = [\bar{E}(x,N) - \Delta E(t), \bar{E}(x,N) + \Delta E(t)] \text{ où}$$

$$\left[\begin{array}{l} \Delta E(t) = \frac{\sigma(x,N)}{\sqrt{t}} \delta_t \\ \delta_t \text{ est la constante telle que si } S \text{ est une variable aléatoire de loi de Student à } t-1 \text{ degrés de libertés on a } P(-\delta_t \leq S \leq +\delta_t) = 0.95. \end{array} \right.$$

Les valeurs de δ_t sont tabulées;

Si maintenant, on fixe ΔE est si l'on cherche $s(x,N) \geq t$, $\delta(s)$ étant une fonction décroissante de s, on a :

$$s(x,N) = s = \frac{(\sigma(x,N))^2}{(\Delta E)^2} \cdot (\delta(s))^2 \leq \frac{(\sigma(x,N))^2}{(\Delta E)^2} \cdot (\delta(t))^2$$

ou encore :

$$s \leq t^2 \left(\frac{\Delta E(t)}{\Delta E} \right)^2$$

Tableau des résultats : On calcule $s(x,N)$ pour deux valeurs de ΔE , 1% et 0,5%

x = 0.10
t = 6

| N | $\bar{E}(x,N)$ | $\Delta E(t)$ | $S_1 (\Delta E=10^{-2})$ | $S_2 (\Delta E=510^{-3})$ |
|----|----------------|---------------|--------------------------|---------------------------|
| 12 | 0.183 | 0.017 | 108 | 432 |
| 14 | 0.189 | 0.014 | 66 | 266 |
| 16 | 0.191 | 0.0088 | 27 | 111 |
| 18 | 0.190 | 0.0089 | 28 | 113 |
| 20 | 0.190 | 0.0035 | 3 | 15 |
| 22 | 0.1847 | 0.0017 | 1 | 4 |

N = 22, $\Delta E(10) = 0.0012$

x = 0.2
t = 6

| N | $\bar{E}(x,N)$ | $\Delta E(t)$ | $S_1 (\Delta E=10^{-2})$ | $S_2 (\Delta E=510^{-3})$ |
|----|----------------|---------------|--------------------------|---------------------------|
| 10 | 0.277 | 0.0215 | 216 | 867 |
| 14 | 0.264 | 0.0108 | 42 | 169 |
| 18 | 0.274 | 0.0068 | 16 | 66 |
| 20 | 0.271 | 0.0052 | 9 | 38 |
| 22 | 0.276 | 0.0081 | 23 | 95 |

N = 22, $E(10) = 0.0055$

x = 0.3
t = 6

| N | $\bar{E}(x,N)$ | $\Delta E(t)$ | $S_1 (\Delta E=10^{-2})$ | $S_2 (\Delta E=510^{-3})$ |
|----|----------------|---------------|--------------------------|---------------------------|
| 12 | 0.301 | 0.0149 | 80 | 320 |
| 16 | 0.2955 | 0.0176 | 111 | 447 |
| 18 | 0.301 | 0.0144 | 75 | 300 |
| 20 | 0.288 | 0.0158 | 89 | 359 |
| 22 | 0.299 | 0.0107 | 41 | 164 |

N = 22, $E(10) = 0.0073$

En fonction de ces résultats et sans oublier que l'on voulait étudier d'autres grandeurs que l'énergie (apparition d'une ligne de fracture), on a décidé de simuler, pour chaque concentration x, 10 échantillons de taille 22 x 22. La précision sur l'énergie sera certes plus grande à x petit qu'à x grand mais c'est aux faibles concentrations qu'on risque le plus de ne pas voir une ligne de fracture existante.

IV-2 - RESULTATS

IV-2-1 - Effet du tirage des liaisons négatives pour la construction d'un échantillon

Pour un tore de dimension $N \times N$ (ou échantillon), on a tiré au hasard et dans une proportion x donnée des liaisons négatives. Ce tirage s'est fait à l'aide d'un générateur de nombres pseudo-aléatoires qui ne peut nous garantir d'un biais sur nos échantillons, surtout si le nombre d'échantillons simulés est faible. Pour diminuer le risque d'avoir une série d'échantillons pour laquelle la répartition des liaisons négatives ne serait pas uniforme, on a appliqué la procédure de compensation suivante :

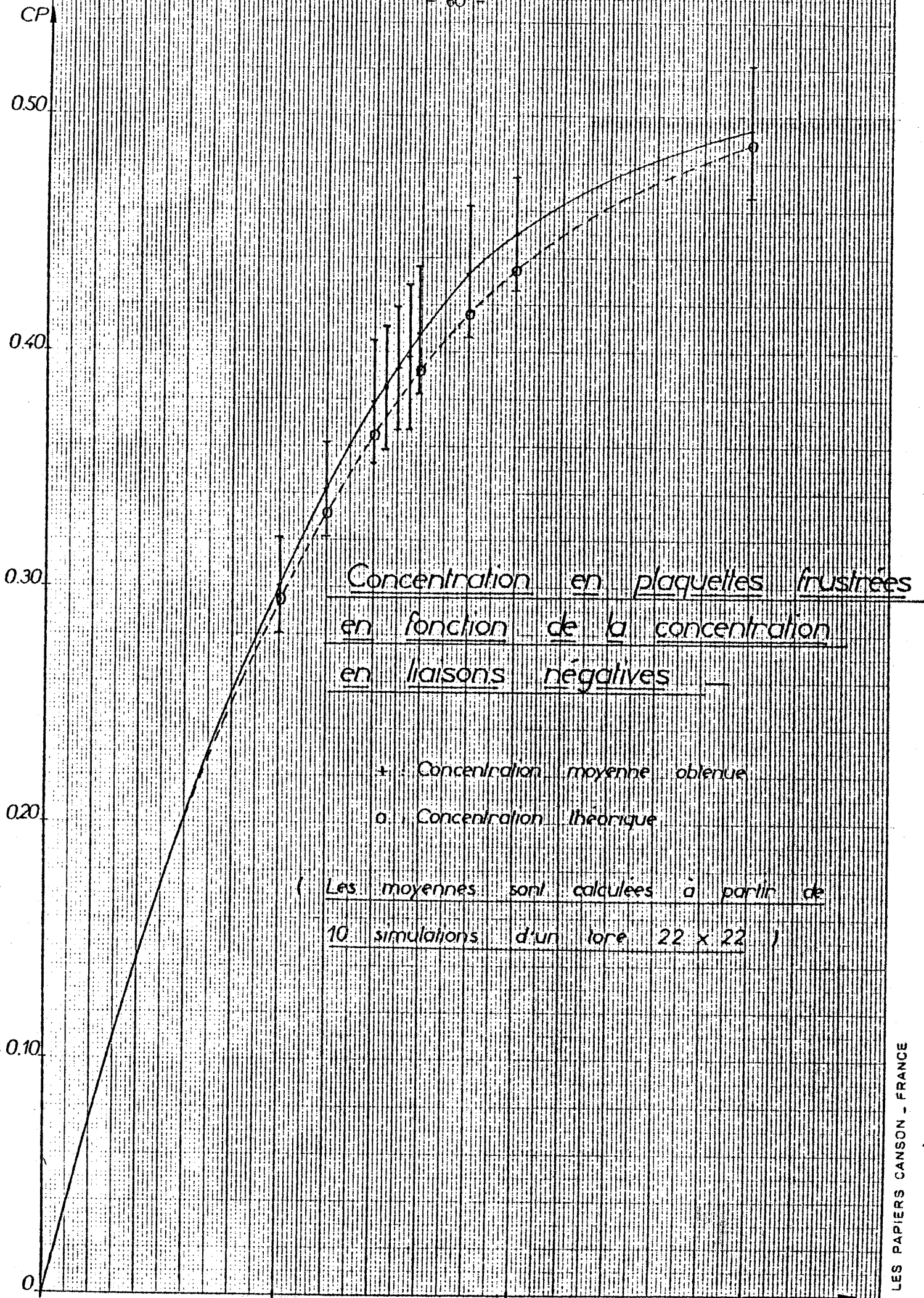
- * Pour chaque liaison du tore, on tire au hasard un nombre compris entre 0 et 1. Ce tirage permet d'ordonner de 1 à N^2 les liaisons suivant leurs valeurs p croissantes.
 - * On construit un premier échantillon en prenant comme négatives les $2N^2x$ premières liaisons, puis, un second échantillon en prenant comme négatives $2N^2x$ dernières liaisons.
- L'expérience a prouvé que cette méthode réduit fortement la variance de l'estimation de l'espérance de l'énergie minimum sur ces échantillons mais hélas elle a introduit un biais non négligeable sur la variable aléatoire $C_p(x)$ qui représente la probabilité pour qu'une plaquette soit frustrée dans un maillage carré régulier.

Calcul de $C_p(x)$:

$C_p(x)$ est égale à la probabilité qu'une plaquette ait dans son contour exactement une ou trois liaisons négatives. Les liaisons négatives étant réparties uniformément, la probabilité pour qu'une liaison soit négative étant x et chaque plaquette étant limitée par exactement 4 liaisons, on a :

$$C_p(x) = 4[x(1-x)^3 + x^3(1-x)]$$

$C_p(x)$ représente aussi l'espérance de la concentration en plaquettes frustrées.



Concentration en plaquettes frustrées
en fonction de la concentration
en liaisons négatives

+ : Concentration moyenne obtenue
o : Concentration théorique

(Les moyennes sont calculées à partir de
10 simulations d'un tore 22 x 22)

Sur notre courbe, on voit apparaître un biais non négligeable entre l'espérance de la concentration en plaquettes frustrées calculée (C_p) et la concentration estimée à partir de nos échantillons. Ceci vient certainement du tirage particulier de nos échantillons qui sont deux à deux très dépendants. En effet, à la limite $x = 50\%$, notre méthode nous donne deux échantillons complémentaires pour les types des liaisons mais identiques en ce qui concerne les plaquettes frustrées. Ce qui a pour effet que si l'on tire un premier échantillon où la concentration en plaquettes frustrées est supérieure à C_p , l'échantillon suivant aura le même biais. Théoriquement, notre méthode n'aurait pas dû introduire un biais sur l'estimation de C_p mais le nombre d'échantillons simulés (10) est très faible compte-tenu de leur corrélation. Cependant, le biais que l'on a étant toujours positif, il nous semble qu'il suffit d'utiliser la courbe comme courbe de correction de la valeur de x .

Effet de la taille des échantillons sur l'estimation de l'énergie :

Energie par spin en fonction de $1/N$ A X fixée

(Les échantillons ne sont pas indépendants en fonction de N, ils sont imbriqués -)

0.30

0.25

0.20

X = 0.12

X = 0.14

$\frac{1}{22}$ $\frac{1}{20}$ $\frac{1}{18}$ $\frac{1}{16}$ $\frac{1}{14}$ $\frac{1}{12}$ $\frac{1}{10}$ $\frac{1}{N}$

E

0.30

0.25

0.20

X = 0.16

X = 0.18

X = 0.30

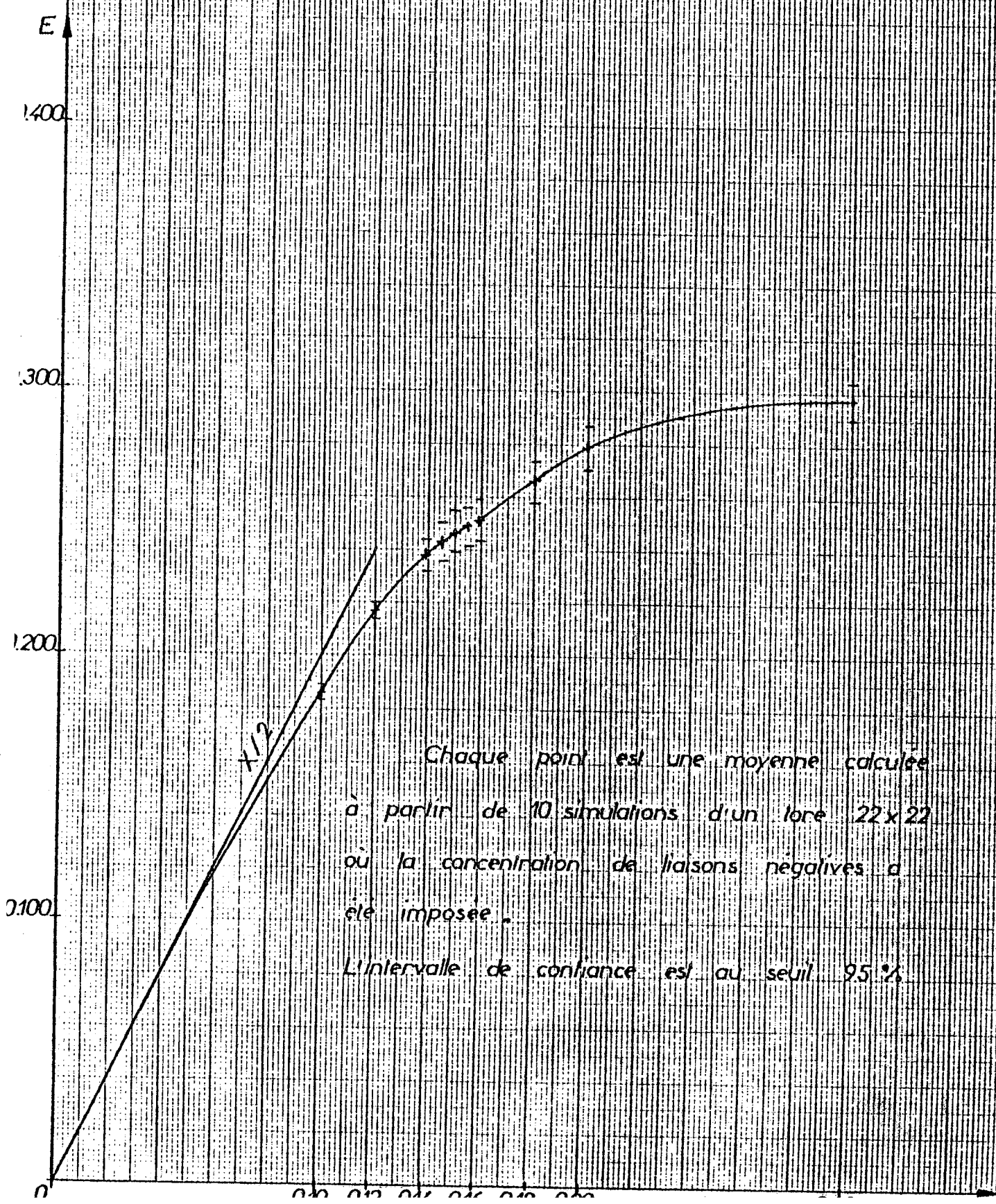
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

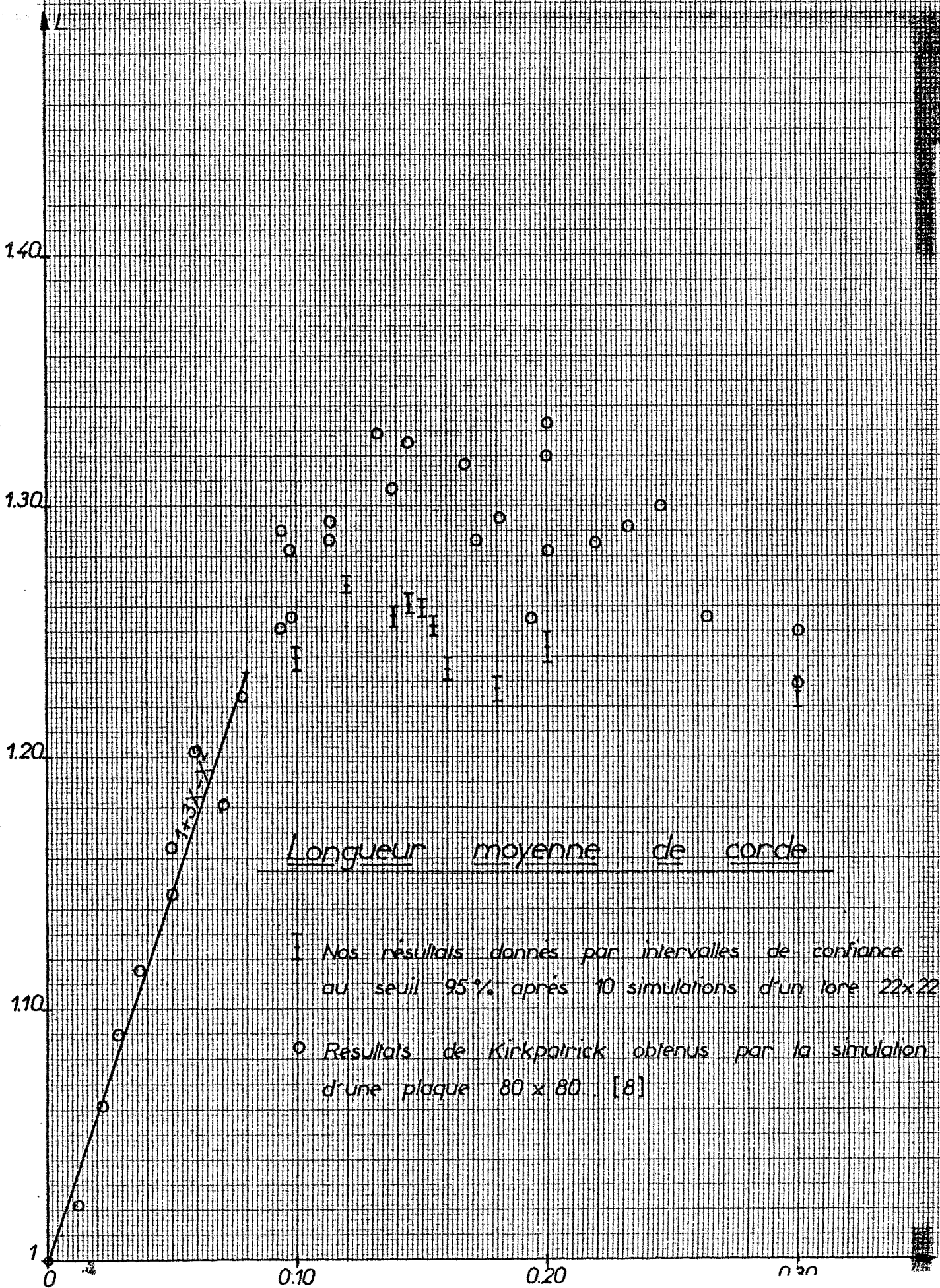
Pour chaque concentration x de liaisons négatives, on remarque les fluctuations de l'énergie par spin en fonction de la taille N des échantillons simulés avec une certaine stabilisation à partir de $N = 18$ ou 20 . On remarque également que ces fluctuations sont moins importantes pour x grand (20 ou 30%) que pour x petit. Ceci pourrait être l'indice d'une transition de phase mais les simulations ne sont pas assez nombreuses pour pouvoir conclure.

Espérance de l'énergie par spins en fonction de la concentration en liaisons négatives sur des échantillons 22×22 :

Il semblerait que la courbe ci-contre présente une discontinuité pour valeur de x comprise entre 14 et 16%. Cependant, il faut être prudent dans ce que l'on pourrait conclure car les intervalles de confiance calculés sous l'hypothèse d'une loi de Student permettent "d'effacer" cette discontinuité. Contentons-nous d'une forte présomption de transition de phase !

Energie par spin en fonction de la concentration
x de liaisons négatives





Longueur moyenne de corde

I Nos résultats donnés par intervalles de confiance
au seuil 95% après 10 simulations d'un tore 22x22.

o Résultats de Kirkpatrick obtenus par la simulation
d'une plaque 80x80 [8]

Cette courbe de la longueur moyenne d'une chaîne de frustration en fonction de x présente un maximum pour une valeur de x comprise entre 12 et 15% ce qui ne peut que confirmer notre idée de transition de phase.

Si l'on compare nos résultats à ceux obtenus par

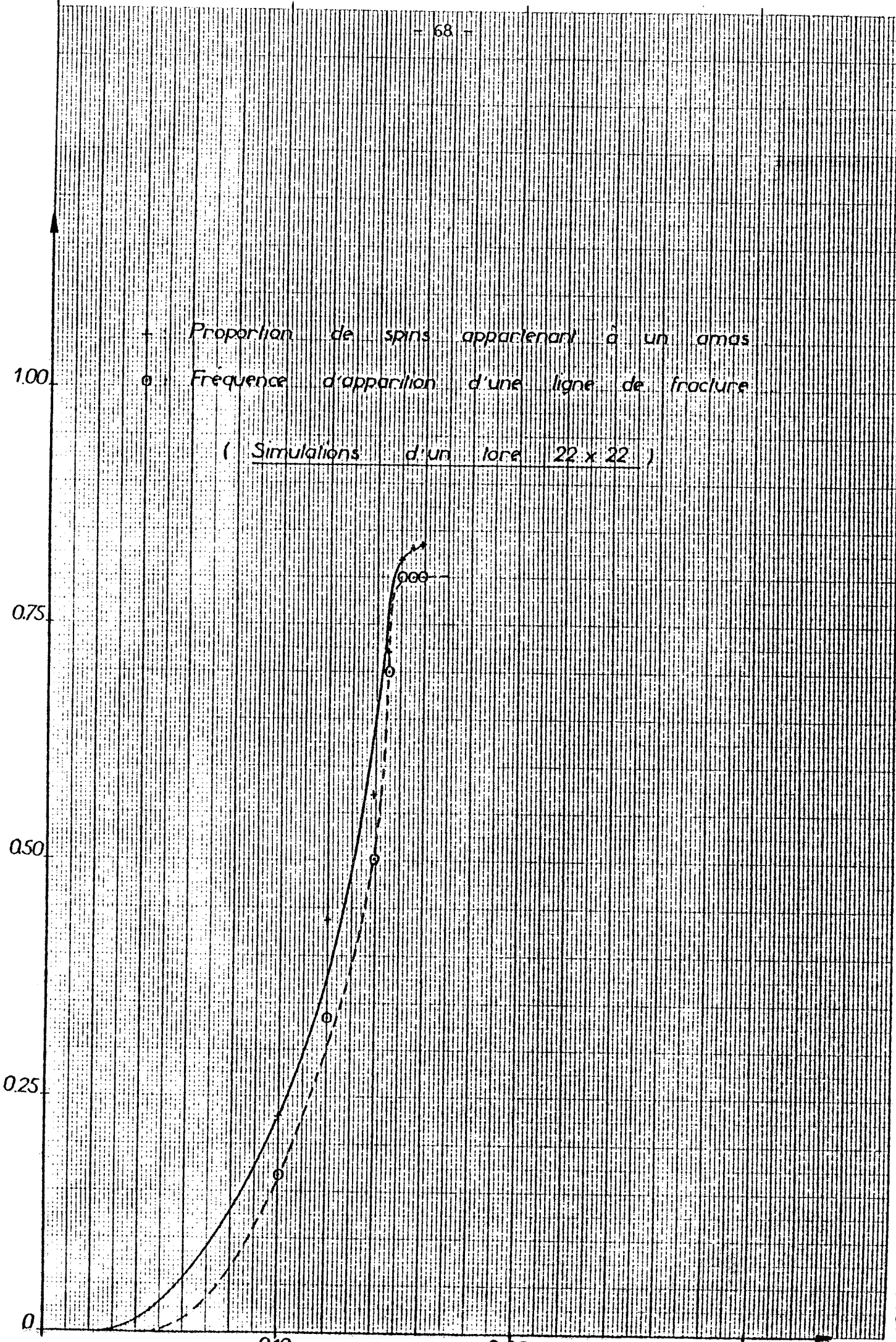
S. Kirkpatrick [8] par des simulations de type Monte-Carlo sur des échantillons 80×80 , on constate que notre maximum est bien inférieur au sien. Ceci peut avoir deux causes :

- La première est sûre et vient du fait que notre méthode donne toujours une configuration du fondamental, alors qu'une simulation Monte-Carlo (qui consiste, à chaque pas, à retourner avec une probabilité p un spin choisi au hasard ; p vaut 1 si le retournement fait diminuer l'énergie, $1/2$ si l'énergie ne change pas et est très faible sinon) n'aboutit pas nécessairement à une configuration d'énergie minimum (on peut se bloquer sur un minimum local de l'énergie).
- La seconde raison de la différence des maxima pourrait être en partie le biais que l'on a introduit sur la concentration de plaquettes frustrées. Cependant, ceci nous semble improbable, car le biais a augmenté la concentration et par ce que ceci ne peut, à notre sens, que faire diminuer la concentration de liaisons négatives à laquelle apparaît le maximum.

Dégénérescence de l'état fondamental

mental :

Recherche de la transition de phase sur d'autres mesures que l'énergie du fonda-



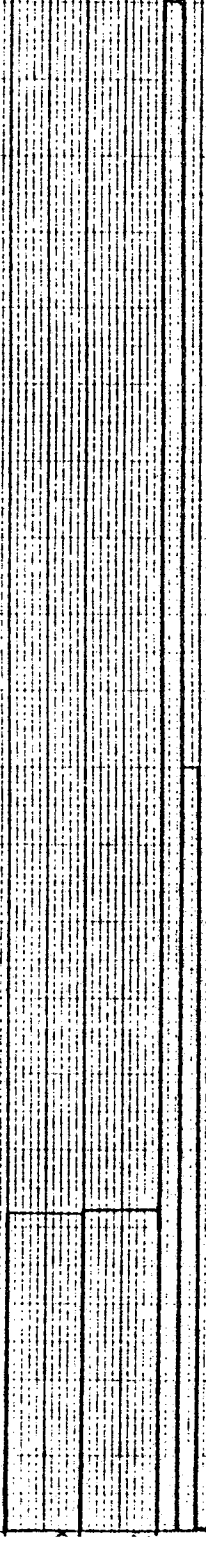
On remarque la très forte ressemblance de ces deux courbes. Elles présentent toutes les deux la même augmentation brutale de la pente présentée dans la courbe suivante avec cependant un décalage (qui était prévisible) de la valeur de x où l'augmentation se produit. De plus, il est tout à fait normal que la courbe du pourcentage de spins appartenant à un amas soit plus "amortie" que celle de la fréquence d'apparition d'une ligne de fracture car on a tenu compte des petits amas de type 1 qui n'ont pas grande signification en ce qui concerne la dégénérescence de l'état fondamental.

Notons que la valeur 1 n'est pas atteinte car il s'agit d'une valeur asymptotique qui n'est atteinte que pour $N = \infty$.



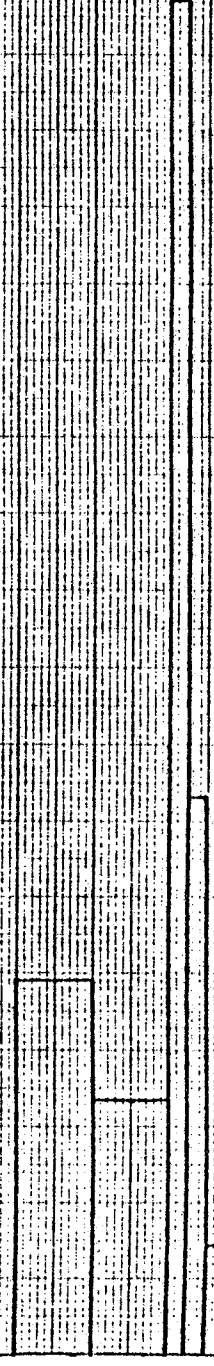
Variations de la fréquence d'apparition d'une ligne de fracture

(Simulations d'un tore 22 x 22)



Variations du pourcentage de spins appartenant à un amas

(Simulations d'un tore 22 x 22)

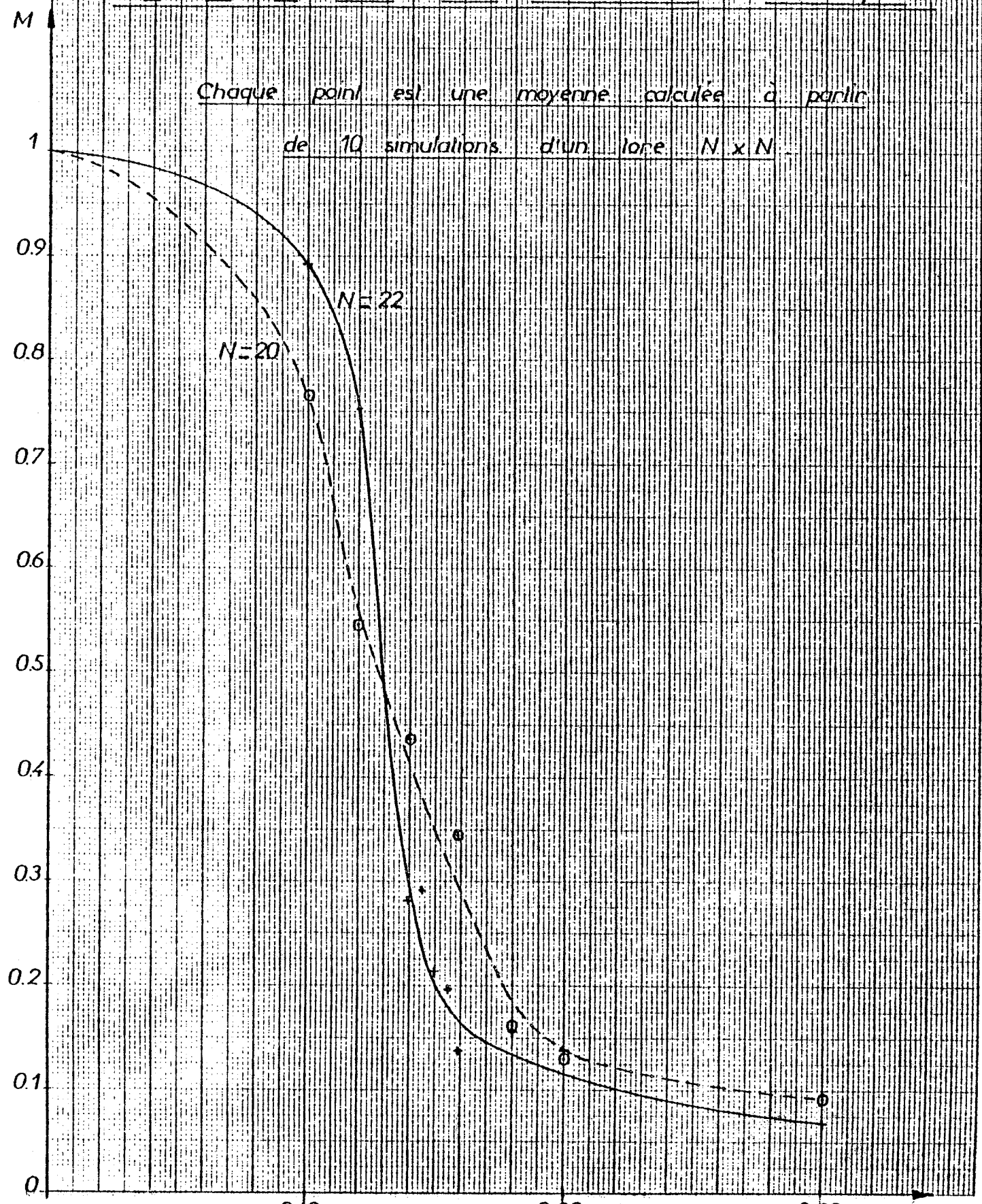


Nous pensons que cette courbe met en évidence l'existence d'une transition de phase à une concentration critique x_c comprise entre 13 et 15%. Pour x inférieur à x_c , il existe un ordre à longue distance qui confère une certaine rigidité au système alors que pour x supérieur à x_c le système ne serait régi que par un ordre local, l'influence de l'ordre local étant limitée aux amas minimaux.

. Aimantation moyenne par spin

Aimantation par spin en fonction
de la concentration en liaisons négatives
et de la taille des échantillons (N=20,22)

Chaque point est une moyenne calculée à partir
de 10 simulations d'un tore N x N



Etant donnée la très grande dispersion des points, on ne peut que dire qu'il y a bien une chute brutale de la valeur de l'aimantation, ce qui confirme le résultat précédent, et qu'il faudrait simuler des échantillons plus grands.

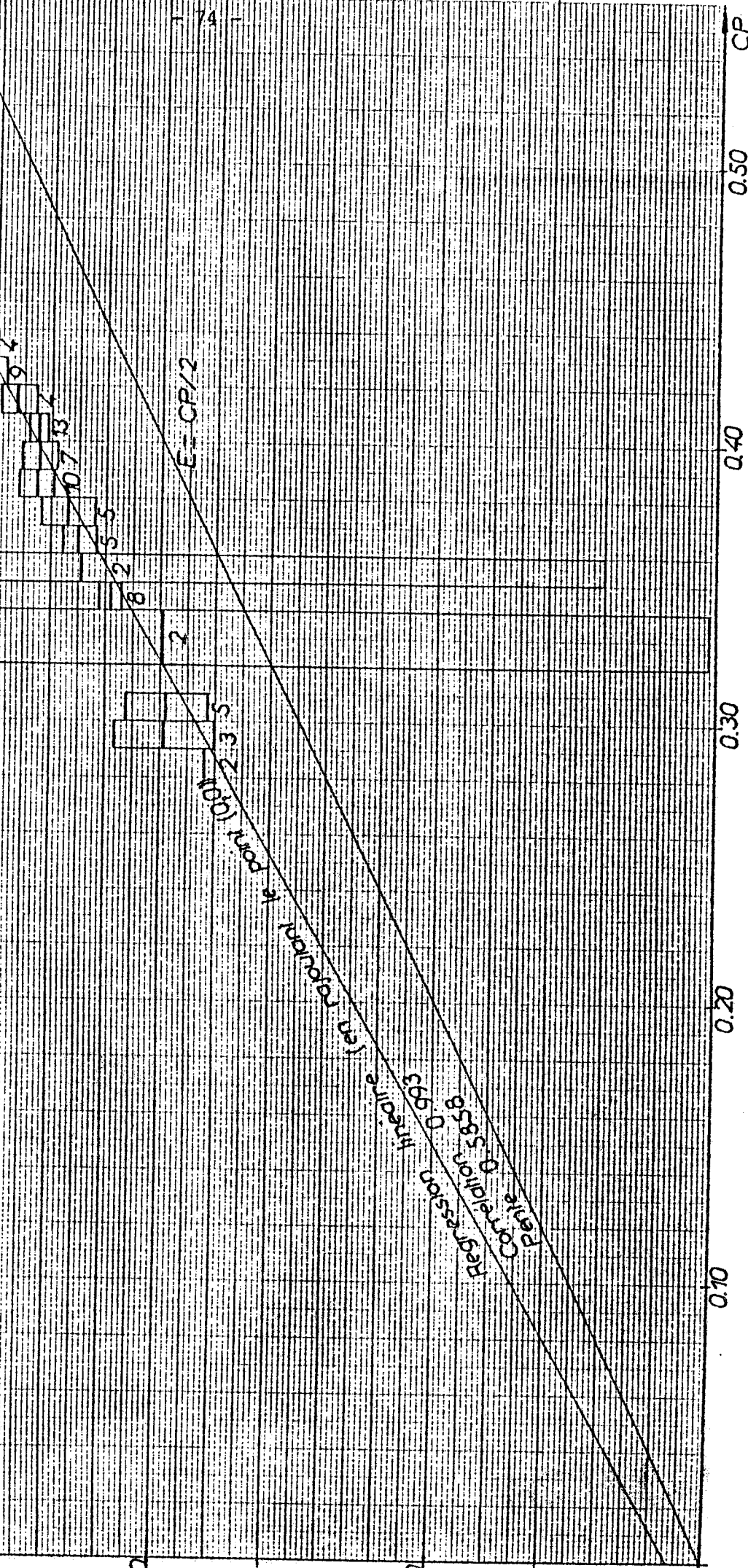
Courbes en fonction de la concentration en plaquettes frustrées

Les zones de confiance sur la courbe suivante sont à juger avec prudence car elles ne correspondent pas toutes au même nombre d'échantillons simulés ; ce nombre est indiqué pour chaque zone.

Aux vues des résultats de la régression linéaire faite sur les mesures (coefficient de corrélation de 99.3%), il semble que cette courbe soit une droite passant par l'origine et de pente 0.5858 et il n'y aurait donc pas d'effet apparent de la transition de phase sur l'énergie par spin.

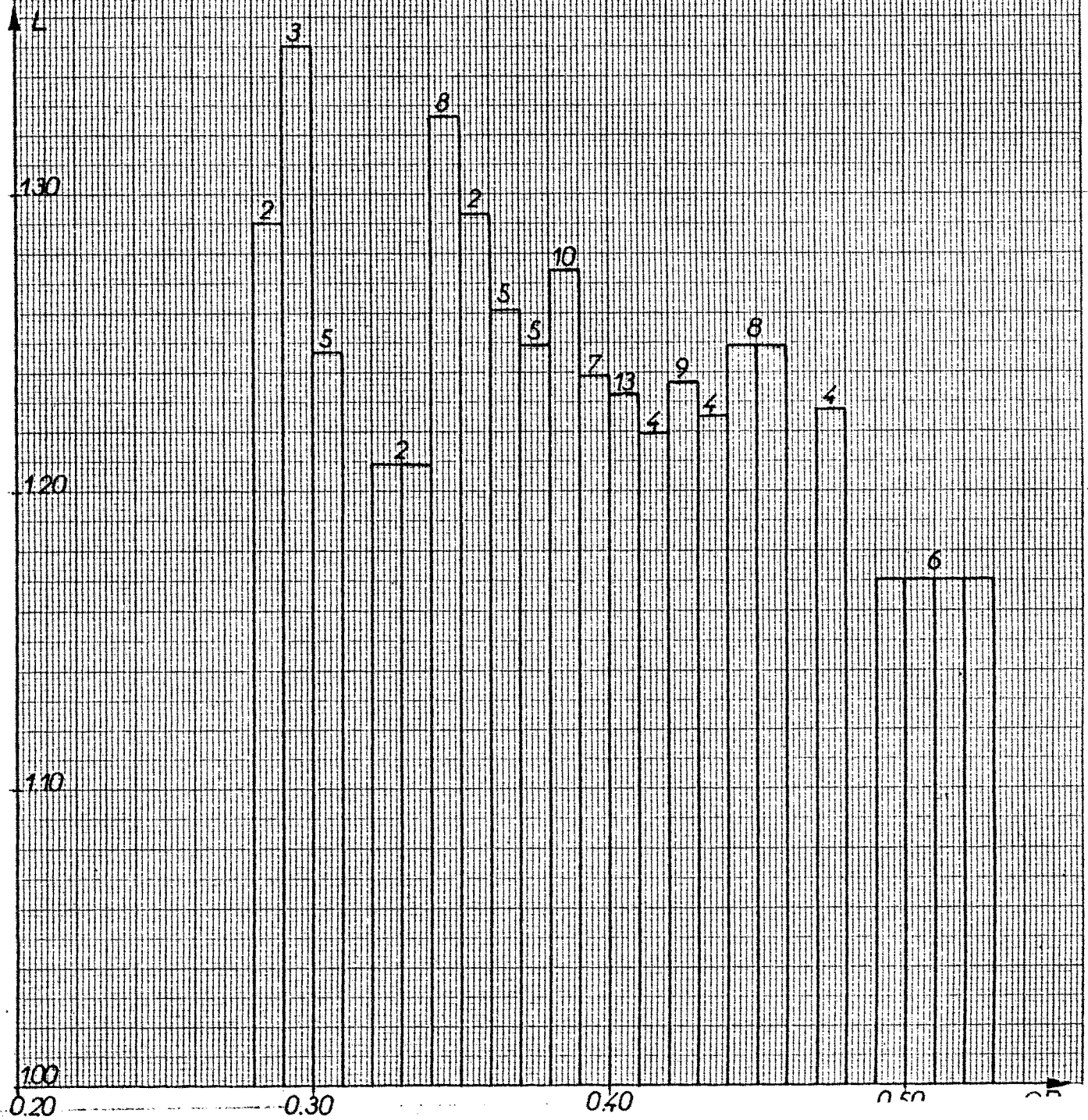
Energie par spin en fonction de la concentration des plaquettes frustrées

(Simulations d'un lore 22x22)



Longueur moyenne de corde en fonction de la
concentration en plaquettes frustrées

(Simulations d'un tore 22 x 22)



Cette courbe semble traduire l'existence d'une perturbation du système pour des concentrations en plaquettes frustrées comprises entre 29 et 35%. Remarquons que la longueur moyenne de corde maximum est ici de l'ordre de 1.35 ce qui est du même ordre de grandeur que le résultat de S. Kirkpatrick [8].

CHAPITRE V

ALGORITHMES DE COUPLAGE OBTENUS AU COURS DE CETTE ETUDE

V-1 - RECHERCHE HEURISTIQUE D'UN COUPLAGE PARFAIT DE POIDS MINIMUM : UN ALGORITHME DE DECOMPOSITION

La taille des graphes où l'on recherche un couplage parfait de poids minimum étant assez grande (graphe théoriquement complet pouvant avoir jusqu'à 200 sommets) et le nombre de graphes à traiter étant lui aussi très grand, on a d'abord songer, en s'inspirant de [7], à l'heuristique présentée ici et qui permet d'avoir à chaque pas de l'algorithme une borne supérieure décroissante de l'énergie du fondamental.

Notations, définitions et propriétés :

1 - Soit $G = (V, E)$ un graphe non orienté, fini et sans boucle où $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$.

On note $D(G)$ le graphe biparti obtenu à partir de G en dédoublant ses sommets de la manière suivante :

$$D(G) = (Y, F)$$

avec $Y = \{v_1, v_2, \dots, v_n\} \cup \{v_{n+1}, v_{n+2}, \dots, v_{2n}\}$

$$F^1 = \{(v_i, v_{j+n}) \mid (v_i, v_j) \in E \text{ et } i < j\}$$

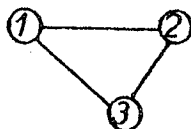
$$F^2 = \{(v_{i+n}, v_j) \mid (v_i, v_j) \in E \text{ et } i < j\}$$

$$F = F^1 \cup F^2$$

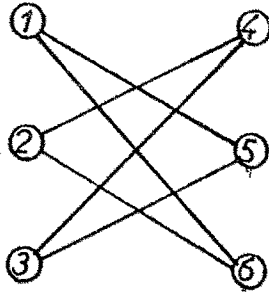
On remarque que F^1 et F^2 sont en bijection avec l'ensemble E .

Exemple :

On se donne le graphe G suivant :



Le graphe D(G) est :



Chaque arête (i,j) de G où $i < j$ donne deux arêtes $(i,j+3) \in F^1$ et $(i+3,j) \in F^2$.

2 - Soit A la matrice d'incidence aux arêtes d'un graphe $G = (V,E)$

On note D(A) la matrice d'incidence aux arêtes du graphe biparti D(G).

En rangeant les colonnes de D(A) de telle sorte que les premières correspondent aux arêtes de F^1 et les dernières aux arêtes de F^2 , on peut décomposer D(A) en 4 sous matrices ayant les mêmes dimensions que A et telles que l'on ait :

$$D(A) = \begin{bmatrix} A^1 & A^2 \\ A^2 & A^1 \end{bmatrix} \quad \text{avec } A^1 + A^2 = A$$

3 - Si S est une partie de l'ensemble X des sommets d'un graphe $G = (V,E)$, on note E(S) l'ensemble des arêtes du sous-graphe de G engendré par S.

V-1-1 - Formulation du problème

J. EDMONDS a montré que le problème de couplage parfait de poids minimum s'écrit comme le programme linéaire suivant :

$$(P) \begin{cases} (1) Ax = 1_n \\ (2) \forall S \subset X, |S| = 2k+1 \geq 3 \quad \sum_{e \in E(S)} x_e \leq k = \frac{|S|-1}{2} = b_S \\ (3) x \geq 0 \\ (4) \omega \cdot x = W(\text{MIN}) \end{cases}$$

Au problème (P), on associe le problème (P') suivant :

$$(P') \begin{cases} Ax = 1_n \\ x \geq 0 \\ \omega \cdot x = W'(\text{MIN}) \end{cases}$$

Toute solution entière de (P') étant le vecteur d'incidence d'un couplage parfait de G est solution de base du problème (P).

On sait d'autre part que le problème (P') n'a pas toujours une solution optimale entière (si le graphe G n'est pas biparti) mais que toute solution de base de (P') est un vecteur de $\{0, 1, 1/2\}^m$ et que les arêtes correspondant aux x_i valant 1/2 forment des cycles impairs disjoints.

V-1-2 - Résolution du problème (P')

- Cette résolution se fait en cherchant une affectation de poids minimum dans D(G) ; c'est à dire en résolvant le programme linéaire (P'') suivant :

$$(P'') \begin{cases} D(A) x'' = 1_{2n} \\ (\omega, \omega) \cdot x'' = W'' \text{ (MIN)} \\ x'' \geq 0 \end{cases}$$

On décompose x'' en deux sous-vecteurs x^1 et x^2 correspondant respectivement aux arêtes de F^1 et de F^2 .

D(A) s'écrivant, comme on l'a vu lors de sa définition, $D(A) = \left[\begin{array}{c|c} 1 & A^2 \\ \hline A^2 & 1 \end{array} \right]$

avec la relation matricielle $A^1 + A^2 = A$, (P'') peut aussi s'écrire :

$$(P'') \begin{cases} A^1 x^1 + A^2 x^2 = 1_n \\ A^2 x^1 + A^1 x^2 = 1_n \\ (\omega \cdot x^1 + \omega \cdot x^2 = W'' \text{ (MIN)}) \\ x^1 \geq 0 \text{ et } x^2 \geq 0 \end{cases}$$

Soit (D'') le programme linéaire dual de (P''). On note u le vecteur des variables duales associées aux sommets v_1, \dots, v_n de Y et u^2 le vecteur des variables duales associées aux sommets v_{1+n}, \dots, v_{2n} de Y.

(D'') s'écrit :

$$(D'') \begin{cases} u A^1 + u^2 A^2 \leq \omega \\ u A^2 + u^2 A^1 \leq \omega \\ 1_n \cdot u + 1_n \cdot u^2 = T'' \text{ (MAX)} \\ u \geq 0 \text{ et } u^2 \geq 0 \end{cases}$$

- Si x' est une solution de (P'), le vecteur $x'' = \begin{pmatrix} x' \\ x' \end{pmatrix}$ est une solution de (P'') et l'on a $W''(x'') = 2 \cdot W'(x')$. En effet, calculons $D(A) \cdot x''$:

$$D(A) x'' = \begin{bmatrix} A^1 x' + A^2 x' \\ A^2 x' + A^1 x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (A^1 + A^2) x' \\ (A^2 + A^1) x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A x' \\ A x' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1_n \\ 1_n \end{bmatrix} = 1_{2n}$$

x'' est donc bien une solution réalisable. De plus, la relation $w''(x'') = 2w'(x')$ est évidente.

De même, si $x'' = \begin{bmatrix} x''^1 \\ x''^2 \end{bmatrix}$ est une solution de (P'') , le vecteur x' donné par :

$$\forall e \in E, x'_e = \frac{1}{2} (x''^1_e + x''^2_e)$$

est solution de (P') et l'on a : $w'(x') = \frac{1}{2} w''(x'')$.

La relation sur les fonctions objectifs étant évidente, on va se contenter de prouver la réalisabilité de x' :

$$\begin{aligned} A(x''^1 + x''^2) &= (A^1 + A^2) (x''^1 + x''^2) \\ &= (A^1 x''^1 + A^2 x''^2 + A^2 x''^1 + A^1 x''^2) \end{aligned}$$

D'après l'hypothèse faite sur x'' , on a :

$$A(x''^1 + x''^2) = 1_n + 1_n$$

On en déduit immédiatement que x' est une solution réalisable de (P') .

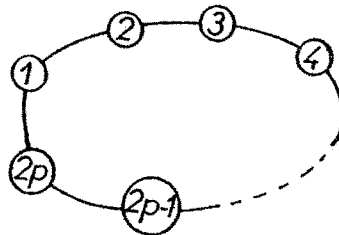
De ces deux derniers résultats, il résulte que si l'une des solutions x' et x'' est optimale, celle qui s'en déduit l'est aussi.

Remarque : On a une démonstration indirecte du résultat énoncé quant aux solutions de base du problème (P') :

Le graphe $D(G)$ étant biparti, le problème (P'') admet toujours (quelque soit le poids) une solution x'' optimale entière. La formule $x'_e = \frac{1}{2} (x''^1_e + x''^2_e)$ montre que le programme linéaire (P') admet toujours une solution optimale dans $\{0, 1, \frac{1}{2}\}^m$.

- Lorsqu'on résout (P'') et que l'on passe à une solution x de (P') l'ensemble des arêtes correspondant aux y_i valant $1/2$ se partage en deux classes : celle des arêtes qui forment des cycles impairs et celle des arêtes qui forment des cycles pairs.

Considérons un ensemble de $2p$ arêtes formant un cycle pair :



$$(a_1, a_2, \dots, a_{2p-1}, a_{2p})$$

Si l'on pose :
$$\left\{ \begin{array}{l} x_{(a_{2i+1}, a_{2i+2})} = 0 \text{ pour } i = 0, 1, \dots, (p-1) \\ \text{et } x_{(a_{2i+2}, a_{2i+3})} = 1 \end{array} \right.$$

avec la convention $a_{2p+1} = a_1$, on obtient une nouvelle solution de (P') qui donne la même valeur de la fonction objectif.

Il en est de même si l'on pose :
$$\left\{ \begin{array}{l} x_{(a_{2i+1}, a_{2i+2})} = 1 \text{ pour } i = 1, \dots, (p-1) \\ \text{et } x_{(a_{2i+2}, a_{2i+3})} = 0 \end{array} \right.$$

On voit que l'on peut toujours trouver une solution de (P') pour laquelle les x_i valant 1/2 forment des cycles impairs disjoints.

- La résolution de (P'') est faite par un algorithme primal dual qui donne aussi une solution (u, u^2) de D''.

Pour toute arête (i, j) de E $(i < j)$, on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} u_i + u_{j+n}^2 \leq (i, j) \\ \text{et } u_{i+n}^2 + u_j \leq (i, j) \end{array} \right.$$

On en déduit que le vecteur y de R^n donné par

$$\forall i \in X \quad y_i = \frac{1}{2} (u_i + u_{i+n}^2)$$

est une solution réalisable du dual (D') de (P').

V-1-3 - Principe de l'algorithme et algorithme :

Principe :

- (1) - Résoudre (P') ; on obtient une solution x .
- (2) - Si la solution x de (P') n'est pas entière, on pénalise les arêtes des cycles impairs et l'on recommence en (1).

Sinon, on vérifie que les cycles impairs pénalisés au cours de l'algorithme sont "saturés" (i.e., vérifient la relation (2) avec égalité) ; s'ils le sont tous, on est à l'optimum sinon on dépénalise légèrement ceux qui ne sont pas saturés et l'on recommence en (1).

Remarque : Il n'y a aucune preuve de finitude de cet algorithme sauf si, [6], à chaque itération k , la pénalisation ou dépenalisation est ϵ_k où $\{\epsilon_k\}$ est une suite telle que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \lim_{k \rightarrow \infty} \epsilon_k = 0 \\ \text{et } \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon_k = +\infty \end{array} \right.$$

Algorithme :

(0) - Constuire $D(G)$

Poser : $x = 0$ et $\delta = 0$ ($\forall e \in E \quad x_e = 0$ et $\delta_e = 0$).

VS partie impaire de X , poser : $Z_S = 0$.

(1) - Résoudre P' en utilisant la valeur courante de x .

1.1 : Si x est entier, aller en (3).

1.2 : Sinon

- . Eliminer les cycles pairs en trouvant une solution équivalente.
- . Détecter les cycles impairs S_1, \dots, S_k et les rajouter à la liste des cycles impairs de variable duale Z_S définie.
- . Si aucun cycle impair n'a été détecté, aller en (3), sinon aller en (2).

(2) - 2.1 : Pour $i = 1, 2, \dots, k$ faire

. Pour chaque arête e de $E(S_i)$, poser :

$$\omega_e = \omega_e + \epsilon$$

$$x_e = 0$$

$$\delta_e = \delta_e - \epsilon$$

. Poser $Z_{S_i} = Z_{S_i} - \epsilon$

2.2 : Aller en (1) avec la valeur courante de x .

(3) - 3.0 : Poser : Fin = Vrai.

3.1 : Vérifier la saturation des cycles impairs de variable duale non nulle:

Pour tout S de la liste des cycles impairs rencontrés et tels que $Z_S < 0$ faire :

- . Calculer $b_S(x) = \left| \{e \in E(S) \mid x_e = 1\} \right|$
- . Si $b_S(x) < b_S = \frac{S-1}{2}$ alors poser : Fin = Faux

$$Z_S = Z_S - \epsilon$$

$$\forall e \in E(S) \quad \begin{cases} \omega_e = \omega_e + \epsilon \\ \delta_e = \delta_e - \epsilon \\ x_e = 0 \end{cases}$$

3.2 : Si Fin = Faux, aller en (1).

Sinon aller en (4).

(4) - x est le vecteur d'incidence d'un couplage parfait de poids maximum //
Sortir le couplage.

Terminer.

Interprétation :

. Soit (D) le dual de (P) ;

(D) s'écrit :

$$(D) \quad \begin{cases} yA + zB \leq \omega \\ 1.y + b.z = T(\text{MAX}) \end{cases} \quad y \geq 0 \quad z \geq 0$$

. Lorsqu'au pas (1) on résout P' dans D(G), l'algorithme d'EDMONDS employé donne pour chaque sommet i 2 variables duales u_1 et $u_{1+n} = u_1^2$.

. Soit ω' le poids courant sur les arêtes au pas (1)

$$(P'') \quad \begin{cases} A^1 x_1 + A^2 x_2 = 1_n \\ A^2 x_1 + A^1 x_2 = 1_n \\ \omega' x_1 + \omega' x_2 = Z'(\text{MIN}) \end{cases} \quad (D'') \quad \begin{cases} uA^1 + u^2 A^2 \geq \omega' \\ uA^2 + u^2 A^1 \geq \omega' \\ 1_n u + 1_n u^2 = T'(\text{MAX}) \end{cases}$$

Au pas (1) on obtient une solution de P'', $\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$ d'une solution de (D''), $\begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \end{bmatrix}$.

. La pénalisation des arêtes de E(S) au pas 2.1 revient à augmenter la variable duale, Z_S , associée à l'ensemble impair S :

Soit $e = (i, j) \in E$, on a $\omega'_e = \omega_e - \delta_e$.

On vérifie facilement la relation $\delta_e = \sum_{\{S \mid e \in E(S)\}} Z_S$

Au pas (1) on a :

$$\begin{cases} u_i + u_{j+n} \leq \omega_e = \omega_e + \delta_e \\ \text{et } u_{i+n} + u_j \leq \omega_e = \omega_e + \delta_e \end{cases}$$

d'où :

$$\frac{1}{2} (u_i + u_{i+n}) + \frac{1}{2} (u_j + u_{j+n}) \leq \omega_e + \delta_e$$

On pose :

$$y_i = \frac{1}{2} (u_i + u_{i+n}) \quad \text{et} \quad y_j = \frac{1}{2} (u_j + u_{j+n})$$

On a :

$$y_i + y_j + \sum_{\{S \mid (i,j) \in E(S)\}} z_S \leq \omega_e$$

A la fin de chaque pas (1), on a une solution de (D) :

$$\begin{array}{l} y_i = \frac{1}{2} (u_i + u_{i+n}) \\ \text{et } z_S \end{array}$$

On a un vecteur x donné par : $\forall e \in E, x_e = \frac{1}{2} (x_1^e + x_2^e)$

. Au pas (3), tout se passe comme si au pas (1) on avait trouvé une solution entière à condition d'éliminer correctement les cycles pairs (i.e. x est solution de (P)).

Au pas 3.1, la vérification de la saturation des blossoms revient à vérifier que la solution x de (P) et la solution (y,z) de (D) vérifient le théorème des écarts complémentaires.

$$\text{On a : } \omega'x = \sum_{e \in E} \omega_e' x_e = \sum_{e \in E} (\omega_e - \delta_e) x_e = \omega \cdot x - \sum_{e \in E} \delta_e x_e$$

$$\omega'x = \omega \cdot x - \sum_{e \in E} \sum_{\{S \mid e \in Z_S\}} z_S x_e = \omega \cdot x - \sum_{\{S\}} z_S \cdot b_S(x)$$

Si $\forall S \exists z_S < 0, b_S(x) = b_S$. On a : $\omega'x = \omega \cdot x - bZ = 1 \cdot y$

et x est bien un couplage parfait de poids maximum

Sinon soit S l'ensemble des parties impaires $\exists z_S < 0$ et $b_S(x) < b_S$.

On a alors : $\omega'x = \omega \cdot x - b_S(x) \cdot Z < \omega \cdot x - bZ = 1 \cdot y$ et x n'est pas une solution optimale de (P).

L'algorithme ainsi décrit n'est pas toujours fini mais on peut toujours fixer un nombre maximum de passage au pas (1) NPAS1. Au pas (3.2) on ira en (4) si fin a la valeur "vrai" ou si le nombre de passage en (1) vaut NPAS1. Dans le cas où fin est faux, on peut évaluer l'erreur par défaut sur le poids d'un couplage parfait : $\sum_S (b-b_S(x)) Z_S$.

Conclusion : Cette heuristique a été abandonnée pour l'exploitation car il s'est avéré qu'elle ne convergeait pas toujours très bien. En effet, on se "bloquait" souvent avec une partition des sommets du graphe en deux cycles impairs. Par exemple, dans le cas de la simulation d'un cylindre où l'on recherchait une configuration périodique et une configuration aperiodique des spins, on s'est souvent trouvé dans la situation suivante : dans l'un des deux cas, l'algorithme convergeait très mal et était dans la situation de blocage décrite ci-dessus et pour la recherche de l'autre configuration des spins on avait un algorithme très performant. En moyenne l'algorithme d'EDMONDS a donné de bien meilleurs résultats.

V-2 - ALGORITHME PRIMAL DE RECHERCHE D'UN COUPLAGE PARFAIT DE POIDS MINIMUM

Note : Pendant la rédaction de cette thèse, nous avons appris que W.H. CUNNINGHAM avait publié un algorithme tout à fait semblable en 1978 [2]. Nous maintenons ce paragraphe car cet algorithme nous semble être l'algorithme de couplage optimum le mieux adapté à la recherche de l'énergie minimum dans un verre de spins. En effet, on connaît souvent un couplage parfait des plaquettes frustrées de poids quasiment minimum (surtout si la concentration en liaisons négatives est faible).

V-2-1 - Position du problème

On considère un graphe G simple, non orienté et connexe où l'on a défini une forme linéaire, ω , de l'ensemble de ses arêtes dans R que l'on appellera "poids sur les arêtes de G".

On note : $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ l'ensemble des sommets de G et
 $E = \{e_1, e_2, \dots, e_m\}$ celui de ses arêtes.

Sur ce graphe $G = (V, E)$, on se propose de trouver un couplage parfait de poids minimum.

Ce problème a déjà été résolu de manière duale par J. EDMONDS [6]. La méthode primale que l'on présente ici se distingue par le fait que tout au long de l'algorithme, on connaît un couplage parfait dont on améliore le poids.

V-2-2 - Notations et définitions

. Un couplage de G sera donné soit par l'ensemble M de ses arêtes, soit par une fonction SAT définie sur V par :

$$\begin{cases} \forall v \in V, & \text{SAT}(v) = v' \iff (v, v') \in M \\ \forall v' \in V \end{cases}$$

. Dans $G = (V, E)$ où l'on a défini un couplage de M , un blossom, B , est une partie impaire de V de cardinalité supérieure à 1 et telle qu'il existe un sous-ensemble E_B de $E(B)$ vérifiant :

a - Le graphe (B, E_B) est un cycle pas forcément élémentaire.

b - Le cardinal de $M_B = E_B \cap M$ est exactement $\frac{|B|-1}{2}$.

L'unique sommet de B laissé insaturé par $M \cap E(B)$ est appelé "la base du blossom B ".

. Opération de réduction :

Soient $G = (V, E)$ un graphe et B une partie de V .

Réduire G par rapport à B , c'est remplacer, dans G , B par un seul sommet, $b = B/B$.

- i.e. . les arêtes de $E(B)$ disparaissent
- . les arêtes (v, v') de E telles que v est dans B mais pas v' deviennent des arêtes (b, v')
- . les autres arêtes de E sont inchangées.

Le graphe obtenu en réduisant G par rapport à B est noté G/B . Le sommet B/B est appelé pseudo-sommet (PS).

V-2-3 - Algorithme

(1) - Poser . $K = 0$

. $G^0 = (V^0, E^0, \omega^0) = G = (V, E, \omega)$

. Trouver un couplage parfait M^0 dans G^0

- Trouver un système de poids u^O sur les sommets de G^O tel que

$$\forall (i, j) \in M^O \quad u_i^O + u_j^O = \omega_{ij}^O$$

Par exemple, poser : $\forall i \in V^O \quad u_i^O = \frac{1}{2} \omega_{i, SAT(i)}^O$

ou bien $\forall i \in V^O \quad u_i^O = \begin{cases} \omega_{i, SAT(i)}^O & \text{si } i < SAT(i) \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$

- Aller en (2)

(2) - Pour toute arête (i, j) de E^k calculer

$$\Delta_{ij}^k = u_i^k + u_j^k - w_{ij}^k = \Delta_{ji}^k$$

- Si $\forall (i, j) \in E^k \quad \Delta_{ij}^k \leq 0$ alors M^k est un couplage parfait de poids minimum de G^k , aller en (7).

- Sinon . choisir i et j dans V^k tels que $\Delta_{ij}^k > 0$
 . aller en (3).

(3) - Marquer i avec la marque $(-, \emptyset)$

- Si i est pseudo-sommet B_p/B_p , poser $\delta = \min(\Delta_{ij}^k, u_i^k - u^p)$
 Sinon, poser $\delta = \Delta_{ij}^k$

(3-1) Si tous les sommets marqués ont été traités, aller en (5).

Sinon . soit L est un sommet marqué non traite

. si L est marqué $-$, aller en (3-2)

. sinon, aller en (3-3).

(3-2) . Poser : $s = SAT(L)$

. Si $S = J$, aller en (6)

. Sinon . marquer S avec $(+, L)$

. indiquer que le label $-$ de L est traité

. aller en (3-1)

(3-3) . Poser $\delta = \text{INF} \left\{ \begin{array}{l} \delta, \text{MIN}(-\Delta_{LS}^k), \text{Min}(-\frac{\Delta_{LS}^k}{2}), \text{MIN}(u_S^k - u^p) \\ \{S | \Delta_{LS}^k < 0 \text{ et } S \text{ non} \} \text{ marqué } + \\ \{S | \Delta_{LS}^k < 0 \text{ et } S \} \text{ marqué } + \\ \{S = B_p/B_p | \Delta_{LS}^k = 0\} \end{array} \right.$

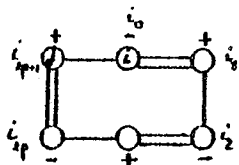
- . Pour tout $S \neq \text{SAT}(L)$ tel que $\Delta_{LS}^k = 0$ faire :
 - . si S est déjà marqué +, aller en (4)
 - . sinon marquer $S : (-, L)$
 - . Indiquer que le label + de L est traité.
 - . Aller en (3.1).

- (4) - . Revenir en arrière à partir de la marque de L puis à partir de celle de S . On met ainsi en évidence un "blossom" que l'on note B_k .
 - . Constuire $G^{k+1} = G^k / B_k$ et poser $v_{k+1} = B_k / B_k$.
 - . Poser $U_{v_{k+1}}^{k+1} = u^k = \text{MIN}_{v \in B_k} (u_v^k)$
 - . Toute arête $e = (s_1, s_2)$ de E^k ayant une seule extrémité, s_1 , dans B_k devient une arête $e = (v_{k+1}, s_2)$ de G^{k+1} de poids :

$$w_e^{k+1} = w_e^k + u^k - u_{s_1}^k$$
 - . Marquer v_{k+1} comme la base de B_k
 - . Si J est dans B_k , poser $J = v_{k+1}$
 - . Si J est marqué +, aller en (6)
 - . Aller en (3).

- (5) - . Pour tout sommet L marqué +, poser : $u_L^k = u_L^k + \delta$
 - . Pour tout sommet M marqué -, poser : $u_L^k = u_L^k - \delta$
 - . Etendre tous les pseudo-sommets, $s = B_p / B_p$, tels que $u^p = u_s^k$
 - . Si i était un pseudo-sommet qui vient d'être étendu, appeler à nouveau i la nouvelle extrémité de (i, j) et recalculer Δ_{ij}^k
 - . Si $\delta < \Delta_{ij}^k$, poser :
 - . si i n'est pas un pseudo-sommet $\delta = \Delta_{ij}^k - \delta$
 - . sinon $\delta = \text{MIN}(\Delta_{ij}^k - \delta, u_i^k - u^p)$ si $i = B_p / B_p$.
 - . indiquer que les marques + des sommets adjacents à des arêtes (S, L) telles que Δ_{SL}^k vient de s'annuler sont non traitées.
 - . aller en (3-1).
 - . Sinon . effacer les marques
 - . aller en (2).

(6) - δ J a été marqué + δ



On a mis en évidence dans G^k un cycle alterné de diminution du poids du couplage $(i_0, i_1, \dots, i_{2p+1})$ $i_0 = i$, $i_{2p+1} = j$.

$$\text{On a : } u_{i_0}^k + u_{i_1}^k + \dots + u_{i_{2p}}^k + u_{i_{2p+1}}^k = w^k(M^k_{nC}) < w^k(SM^k_{nC})$$

$$\text{car } u_{i_0}^k + u_{i_{2p+1}}^k < w_{i_0, i_{2p+1}}^k$$

Pour avoir le droit de diminuer le poids du couplage, il faut modifier u_i^k ou u_j^k afin que Δ_{ij}^k s'annule. Ceci n'est pas immédiat si i et j sont des PS B_p/B_p et B_q/B_q tels que $(u_i^k - u^p) + (u_j^k - u^p) < \Delta_{ij}^k$ auquel cas il faudra d'abord étendre i ou j :

. Si i et j sont des PS : Soit q tel que $j = B_q/B_q$

. Poser $u_j = u^q$

. Étendre $j = B_q/B_q$ (Soit G'^{k-1} le graphe obtenu)

L'arête (i, j) devient (i, ℓ) dans G'^{k+1} où $\ell \in B_q$.

La chaîne alternée paire joignant dans B_q ℓ à la racine de B_q plus les arêtes du cycle mis en évidence dans G_k donne un nouveau cycle de diminution du poids du couplage dans G'^{k-1} .

. Poser $u_\ell^k = u_\ell^q - w_{\ell i}^q = u_\ell^q - (w_{ij}^k - u^q + u_\ell^q)$

. Identifier la suite G' à la suite G ($G'^{k-1} \sim G^{k-1}$)

Poser $k = k-1$

. Diminuer le couplage.

. Si i ou j n'est pas un PS : soit ℓ un de ces 2 sommets qui n'est pas un PS

. Poser $u_\ell^k = u_\ell^k - \Delta_{ij}^k$

. Diminuer le couplage.

. Effacer les marques

. Étendre les PS, $s = B_p/B_p$ tels que $u_{v^{p+1}}^k = u^p$

. Aller en (2).

(7) - Poser $k^* = k$

(7-1) . Etendre v_k pour retrouver G^{k-1}

. Chercher un couplage, $M(B_{k-1})$, maximum dans B_{k-1} et "compatible" avec M_k .

. Poser : $M_{k-1} = M_k \cup M(B_{k-1})$

$$d_{k-1} = u^{k-1} - u_{v_k}^k$$

. Faire $k = k-1$

. Si $k < 0$, aller en (7-1), sinon terminer.

V-2-4 - Justification de l'algorithme

. Finitude et évaluation

. Finitude : L'algorithme construit, pour chaque arête ij non duale-réalisable un arbre alterné.

La construction d'un arbre s'arrête

- soit quand l'arête est devenue réalisable mais n'entre pas dans le couplage,

- soit quand on a diminué le poids du couplage auquel cas l'arête devient aussi réalisable et rentre dans le couplage.

A chaque passage au pas (2), le nombre d'arêtes non duale-réalisables diminue d'au moins une unité.

. Evaluation :

. On note $N(p)$ le nombre de passages au pas (p) de l'algorithme.

. L'algorithme sera polynomial si $N(2) \cdot N(3-1)$ est borné par un polynôme en fonction de n ou de m .

. $N(2)$ est au plus égal au nombre d'arêtes (i,j) telles que $\Delta_{ij} > 0$

$$\text{On a donc } N(2) \leq m - \frac{n}{2} \leq \frac{n^2}{2} - n$$

. Cherchons une borne supérieure de $N(3-1)$:

On arrive en (3-1)

Soit depuis (3), une seule fois

Soit depuis (3-2), (3-3) ou (4), au plus n fois

Soit depuis (5), au plus $m - \frac{n}{2}$ fois

$$\text{On a donc : } N(3-1) \leq n(m - \frac{n}{2}) \leq n(\frac{n^2}{2} - n)$$

. On en déduit : $N(2) \cdot N(3-1) \leq \frac{n^5}{2} - n^4 + n^3$

L'algorithme est donc bien polynomial.

. Optimalité : A partir de la suite des graphes G^k construite au cours de l'algorithme, des u^i et du couplage M^0 trouvé au pas (7), on construit une solution de (P) et une solution de (D) vérifiant le théorème faible des écarts complémentaires.

$$(P) \left\{ \begin{array}{l} (1) \forall e \in E \quad x_e \geq 0 \\ (2) \forall v \in V \quad \sum_{e \in A(v)} x_e = 1 \\ (3) \forall S \subset V \text{ impaire et de cardinalite } > 1 \quad \sum_{e \in E(S)} x_e \leq \frac{|S|-1}{2} \\ (4) \sum_{e \in E} \omega_e x_e = \omega(x) \text{ (MIN)} \end{array} \right.$$

$$(D) \left\{ \begin{array}{l} (5) \sum_{v \in V} y_v + \sum_{\{S \subset V | \text{impaire}\}} \frac{|S|-1}{2} z_S = T(y, z) \text{ (MAX)} \\ (6) \forall S \subset V \text{ impaire } z_S \leq 0 \\ (7) \forall e = (v_1, v_2) \in E \quad y_{v_1} + y_{v_2} + \sum_{\{S | e \in E(S)\}} z_S \leq \omega_e \end{array} \right.$$

Le théorème faible des écarts complémentaires donnent les 2 courbes suivantes sur les solutions :

$$(a) \forall e = (v_1, v_2) \text{ tq } x_e > 0 \quad y_{v_1} + y_{v_2} + \sum_{\{S | e \in E(S)\}} z_S = \omega_e$$

$$(b) \forall S \text{ impaire tq } z_S < 0 \quad \sum_{e \in E(S)} x_e = \frac{|S|-1}{2}$$

. Solution :

$$\forall e \in E \quad x_e = \begin{cases} 1 & \text{si } e \in M^0 \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

. Pour tout ensemble B_k trouvé au pas (7), on pose :

$$d_k = u^k - u_{v_{k+1}}^{k+1} \text{ et } z_{B_k} = 2 \cdot d_k$$

. Pour tout ensemble S impair différent d'un B_k , on pose $z_S = 0$

. $\forall v \in V$, on pose :

$$y_v = u_v^0 - \sum_{\{k | v \in B_k\}} d_k$$

. Réalisabilité de la solution (y,z)

Condition 6 : . $\forall S \neq B_k \quad \forall k \quad Z_S = 0$

. Si $S = B_k \quad Z_S = 2.d_k$ et $d_k = u^k - u_{v_{k+1}}^{k+1}$

$U_{v_{k+1}}^{k+1}$ est initialisé à la valeur u^k et chaque fois que

l'on marque - le sommet v_{k+1} on met à jour δ afin d'avoir

$$\delta \leq u_{v_{k+1}}^{k+1} - u^k.$$

A la fin de l'algorithme on a donc $d_k \leq 0$ d'où $Z_{B_k} \leq 0$.

Condition 7 : $e = (v_1, v_2)$

Soit j l'indice du graphe d'indice le plus élevé où e apparaît avec ses 2 extrémités éventuellement modifiées.

On a j tel que : (1) Soit $j = K^*$

Soit e^j a ses 2 extrémités dans B_j et est absorbée dans v_{j+1}

(2) $\forall k < j, B_k$ ne peut contenir à la fois v_1^k et v_2^k

(3) $\forall k \geq j \quad v_1^k \in B_k \iff v_2^k \in B_k$

- Si $k < j$, quand on passe de G^k à G^{k+1} , 3 cas sont possibles :

CAS 1 : $v_1^k \notin B_k$ et $v_2^k \notin B_k$

$$\Rightarrow \omega_e^{k+1} = \omega_e^k$$

CAS 2 : $v_1^k \in B_k$ ($\Rightarrow v_2^k \notin B_k$)

$$\omega_e^{k+1} = \omega_e^k + u^k - u_{v_1}^k = \omega_e^k + d_k + u_{v_{k+1}}^{k+1} - u_{v_1}^k$$

CAS 3 : $v_2^k \in B_k$

$$\omega_e^{k+1} = \omega_e^k + d_k + u_{v_{k+1}}^{k+1} - u_{v_2}^k$$

On somme ces équations pour $k = 0, \dots, (j-1)$:

$$\omega_e^j = \omega_e^0 + u_{v_1}^j + u_{v_j}^j - u_{v_1}^0 - u_{v_3}^0 + \sum_{\{k | v_1 \text{ ou } v_2 \in B_k\}} d_k$$

$$\text{Or } y_{v_1} = u_{v_1}^0 - \sum_{\{k|v_1 k\}} d_k = u_{v_1}^0 - \sum_{\{k < j | v_1 \in B_k\}} d_k = \sum_{\{k \geq j | v_1 \in B_k\}} d_k$$

$$y_{v_2} = u_{v_2}^0 - \sum_{\{k < j | v_2 \in B_k\}} d_k - \sum_{\{k \geq j | v_2 \in B_k\}} d_k$$

D'après la définition de j , on a :

$$\begin{aligned} y_{v_1} + y_{v_2} &= u_{v_1}^0 + u_{v_2}^0 - \sum_{\{k < j | v_1 \text{ ou } v_2 \in B_k\}} d_k - \sum_{\{k \geq j | e \in E(B_k)\}} d_k \\ &= u_{v_1}^0 + u_{v_2}^0 - \sum_{\{k < j | v_1 \text{ ou } v_2 \in B_k\}} d_k - \sum_{\{k | e \in E(B_k)\}} z_k \end{aligned}$$

On a donc :

$$\omega_e^0 = (\omega_e^j - u_{v_1}^j - u_{v_2}^j) + y_{v_1} + y_{v_2} + \sum_{\{k | e \in E(B_k)\}} z_k$$

Si $j = k^*$, on a $\omega_e^j - u_{v_1}^j - u_{v_2}^j \geq 0$

Si $j < k$, on a $\omega_e^j - u_{v_1}^j - u_{v_2}^j = 0$

D'où $\omega_e^0 \geq y_{v_1} + y_{v_2} + \sum_{\{k | e \in E(B_k)\}} z_k$

. Optimalité : Condition a : Vérifiée pendant tout l'algorithme

Condition b : si $z_k < 0$, S est un certain B_k et les arêtes de B_k qui sont dans M_0^S sont les arêtes de $M(B_k)$ trouvé au pas (7)

On a $|M(B_k)| = \frac{|B_k| - 1}{2}$ car $M(B_k)$ est un couplage maximum d'un cycle impair.

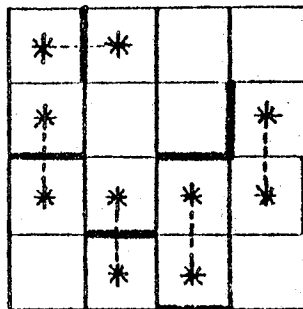
CHAPITRE VI

PROLONGEMENTS POSSIBLES DE CETTE ETUDE

VI-1 - CE QUE PERMETTRAIT UNE BONNE PROGRAMMATION D'UN ALGORITHME PRIMAL DE COUPLAGE

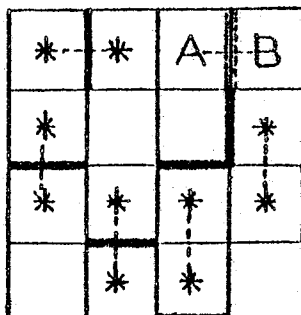
Lorsque, sur le maillage, on rajoute une seule liaison négative, les modifications sur l'ensemble des plaquettes frustrées sont minimales et surtout locales (déplacement, suppression ou addition de 1 ou 2 plaquettes frustrées). Ceci a pour conséquence que le couplage que l'on avait pour les plaquettes frustrées de l'ancien maillage donne un couplage des plaquettes frustrées du nouveau maillage dont le poids est très proche du minimum.

Exemple : Soit le maillage suivant (les liaisons négatives sont en trait gras et les plaquettes frustrées sont marquées d'un astérisque ; un couplage optimum est indiqué en pointillé).



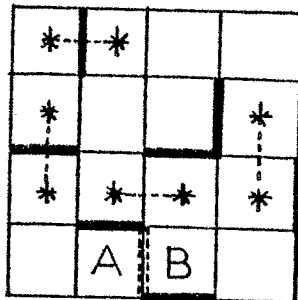
On rajoute une liaison négative, 3 cas peut se produire :

Cas 1 : Addition de 2 plaquettes frustrées A et B



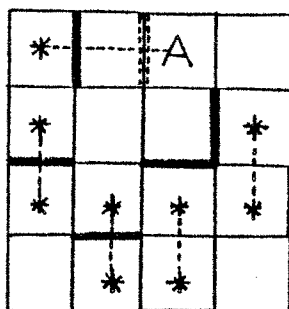
En gardant l'ancien couplage et en couplant les deux nouvelles plaquettes, on obtient un couplage parfait qui ici est optimal.

Cas 2 : Suppression de deux plaquettes frustrées A et B



En conservant les arêtes de l'ancien couplage qui existent encore et en couplant entre elles les deux plaquettes insaturées, on obtient ici un couplage optimum des plaquettes du nouveau maillage.

Cas 3 : Décalage d'une plaquette frustrée A



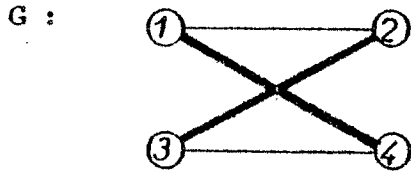
L'ancien couplage donne ici un couplage optimum des plaquettes du nouveau maillage.

Aux vues de cet exemple, il serait tout à fait abusif de conclure que l'on obtient toujours un couplage optimum mais l'on peut raisonnablement conjecturer qu'après au plus une amélioration du couplage, on obtient presque toujours un couplage optimum.

Dans l'algorithme dual de J. Edmonds que l'on a utilisé, on ne peut choisir un couplage initial quelconque ; en effet, pour certaines initialisations maladroites du couplage, on ne peut pas toujours trouver une solution réalisable du programme linéaire dual (D) telle que toute arête du couplage soit dans le graphe d'égalité, par exemple ceci se produit si le couplage initial est parfait et non optimum.

Exemple : Soit le graphe biparti $G = (\{1,2,3,4\}, \{(1,2), (2,3), (3,4), (4,1)\})$
où le poids w défini sur les arêtes est tel que :

$$w_{12} + w_{34} > w_{14} + w_{23}$$



G admet un seul couplage parfait de poids minimum, à savoir $M^0 = \{(1,4), (2,3)\}$. Si par mégarde, on choisit le couplage parfait $M^1 = \{(1,2), (3,4)\}$ comme couplage initial et si l'on donne des poids u_i à chaque sommet i de façon à assurer les égalités :

$$u_1 + u_2 = w_{12}$$

et $u_3 + u_4 = w_{34}$

On ne peut avoir $\begin{cases} u_2 + u_3 \leq w_{23} \\ \text{et } u_1 + u_4 \leq w_{14} \end{cases}$

car on a supposé $w_{14} + w_{23} < w_{12} + w_{34}$

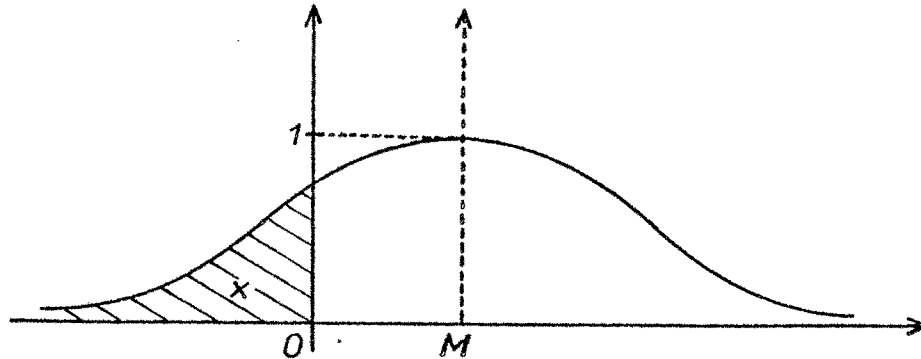
Un bon algorithme primal dont le principe serait de trouver à chaque pas un couplage parfait de poids inférieur permettrait d'obtenir, à faible coût, des familles de courbes de l'énergie par spin du fondamental en fonction de la concentration x de liaisons négatives, chaque courbe correspondant à un tirage initial de liaisons négatives.

VI-2 - "AMELIORATION" DU MODELE DE LA FRUSTRATION

Dans le modèle que l'on a simulé, l'énergie d'interaction entre deux spins voisins est une variable aléatoire valant $\pm J$ où J est une constante positive et où la probabilité d'avoir $-J$ est x . On pourrait envisager de simuler un nouveau modèle où l'énergie d'interaction serait une variable aléatoire γ de loi symétrique, d'écart type $J > 0$ et d'espérance M telle que la probabilité que γ soit négative soit égale à x .

Exemple de calcul de M quand γ suit une loi normale $G(M,J)$

On représente la fonction de répartition de γ ; on sait que M doit être tel que la partie fracturée ait une surface égale à x .



Posons $g = \frac{\gamma - M}{J}$; γ étant de loi normale $G(M,J)$, g est de loi normale $G(0,1)$.

On a de plus l'équivalence :

$$\gamma < 0 \iff \frac{\gamma - M}{J} < -\frac{M}{J}$$

car J est supposé strictement positif.

Une table de la fonction de répartition de loi normale $G(0,1)$ donne la valeur λ_x telle que la probabilité que g soit inférieure à λ_x soit exactement x .

On déduit la relation entre M et λ_x :

$$M = - J \cdot \lambda_x$$

La formulation mathématique du problème de la recherche d'une configuration des spins de l'état fondamental reste tout à fait valable bien que le maillage ne soit plus forcément carré régulier, certaines liaisons d'énergie nulle étant supprimées. Dans la résolution, il suffit d'insérer un algorithme de recherche de plus courts chemins entre les plaquettes frustrées pour donner des poids aux arêtes du graphe complet $K = (F,A)$.

Dans ce modèle, on va certainement perdre la multiplicité des solutions dues aux amas mais il semble que l'on se rapproche plus du verre de spins réel.

VI-3 - PROBLEMES MATHÉMATIQUES SOULEVÉS

VI-3-1 : Nous avons vu lors de l'étude des amas de type 2 qu'il serait intéressant de connaître les arêtes w-utiles appartenant à un couplage parfait de poids minimum. Pour cela, il suffit de calculer, pour chaque arête, le couplage parfait de poids minimum dans le graphe obtenu par suppression des extrémités de l'arête, d'y ajouter l'arête et de comparer avec un couplage optimal du graphe initial. Un tel algorithme, bien que polynomial, serait parfaitement impraticable mais nous conjecturons l'existence d'un algorithme en $O(n^3)$ pour résoudre ce problème.

VI-3-2 : On a vu que nous ne savons pas trouver de "bons" algorithmes pour résoudre le problème de l'énergie minimum quand le graphe n'est plus planaire. Ceci tient au fait que, dans sa généralité, le problème est N-P complet. Néanmoins, on peut se poser la question sur certains graphes particuliers. Ainsi sur le tore "vrai" ou sur le maillage cubique, on pourrait essayer de prouver que le problème est N-P complet.

ANNEXE 1

DESCRIPTION DE L'ALGORITHME DE RECHERCHE D'UN COUPLAGE PARFAIT
DE POIDS MINIMUM PROPOSE PAR J. EDMONDS [5], [6]

On se donne un graphe (simple) non orienté $G = (V, E)$ avec $V = \{v_1, \dots, v_n\}$ et $E = \{e_1, \dots, e_m\}$.

On appelle A la matrice de $\{0,1\}^{n \cdot m}$ d'incidence aux arêtes de G :

$$A_{i,j} = \begin{cases} 1 & \text{si l'arête } e_j \text{ est incidente au sommet } v_i \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

On définit une forme linéaire w sur E que l'on appellera poids sur les arêtes de G .

PROGRAMMATION LINEAIRE ET COUPLAGE PARFAIT DE POIDS MINIMUM

Le problème de la recherche d'un couplage parfait de poids minimum dans un graphe $G = (V, E)$ de matrice d'incidence aux arêtes A peut être formulé comme le programme linéaire en nombres entiers, (PNE_G) suivant :

$$(PNE_G) : \begin{cases} x \in \{0,1\}^n \\ Ax = 1 \\ wx = W(\text{Min}) \end{cases}$$

Notations :

1 - A tout sommet v de V on associe l'ensemble $A(v)$ des sommets du graphe adjacents à v :

$$A(v) = \{v' \in V \mid (v, v') \in E\}$$

2 - Pour toute partie S de sommets de V , on note $E(S)$ l'ensemble des arêtes du graphe couvertes par S :

$$E(S) = \{(v, v') \in E \mid v \in S \text{ et } v' \in S\}$$

3 - Etant donnée une partie S de V , $|S|$ désigne sa cardinalité.

Théorème (J. Edmonds) : Le programme linéaire (P_G) suivant :

$$(P_G) : \left\{ \begin{array}{l} (1) \quad \forall e \in E, x_e \geq 0 \\ (2) \quad \forall v \in V, \sum_{e \in A(v)} x_e = 1 \\ (3) \quad \forall S_k \subset V, |S_k| = 2k+1, k \in \mathbb{N}^* \quad \sum_{e \in E(S_k)} x_e \leq k = \frac{|S_k|-1}{2} \\ (4) \quad \sum_{e \in E} w_e x_e = wx = W(\text{Min}) \end{array} \right.$$

(où la contrainte (2) s'écrit $Ax = 1$)

admet toujours (quelque soit le poids w choisit sur les arêtes de G) une solution optimale entière en 0 et 1 qui est le vecteur d'incidence d'un couplage parfait de poids minimum de G .

CRITERE D'OPTIMALITE DU POIDS D'UN COUPLAGE PARFAIT

Soit (D_G) le programme linéaire dual de (P_G) ;

(D_G) s'écrit :

$$(D_G) : \left\{ \begin{array}{l} (5) \quad \left\{ \begin{array}{l} \forall v_i \in V \quad u_i \geq 0 \\ \forall S_k \subset V, |S_k| = 2k+1, k \in \mathbb{N}^* \quad z_{S_k} \leq 0 \end{array} \right. \\ (6) \quad \forall e = (v_i, v_j) \in E \quad u_i + u_j + \sum_{\{S_k \subset V | e \in E(S_k)\}} z_{S_k} \leq w_e \\ (7) \quad \sum_{v_i \in V} u_i + \sum_{\{S_k \subset V | |S_k|=2k+1, k \in \mathbb{N}^*\}} k \cdot z_{S_k} = T(\text{MAX}) \end{array} \right.$$

Le critère d'optimalité que l'on va énoncer et qui est le fil conducteur de l'algorithme d'Edmonds est une adaptation au problème posé du théorème faible des écarts complémentaires de la théorie de dualité en programmation linéaire.

Critère d'optimalité

$M \subset E$ de vecteur d'incidence x est un couplage parfait de poids minimum du graphe $G = (V, E)$ si et seulement si x est une solution réalisable de (P_G) et s'il existe une solution (u, z) de (D_G) telle que les deux conditions (C_1) et (C_2) suivantes soient réalisées :

$$(C_1) : e = (v_i, v_j) \in M \iff x_e = 1 \Rightarrow u_i + u_j + \sum_{\{S | e \in E(S)\}} z_S = w_e$$

$$(C_2) : z_S < 0 \Rightarrow \sum_{e \in E(S)} x_e = \frac{|S|-1}{2}$$

PRINCIPE DE L'ALGORITHME

(0) - Initialisation :

. Poser $G^0 = G$ et $k = 0$.

. Trouver une solution réalisable (u, z) du programme linéaire D_G .

Par exemple : $\forall S \subset V \quad z_S = 0$

$$\forall v_i \in V \quad u_i = \frac{1}{2} \cdot \min_{v_j \in A(v_i)} (w_{(v_i, v_j)})$$

. Trouver un couplage M , éventuellement vide, tel que les conditions (C_1) et (C_2) soient réalisées.

(1) - Construction d'un graphe \bar{G}^k , graphe d'égalité, associé à la solution duale courante (u, z) :

. Enlever à G^k toutes les arêtes qui ne vérifient pas la condition (C_1) et appeler \bar{G}^k le graphe partiel ainsi obtenu.

(2) - Amélioration du couplage :

. Trouver dans \bar{G}^k un couplage de cardinalité maximum telle que la condition (C_2) soit réalisée. Soit M^k un tel couplage.

(3) - Modification de la solution duale (u, z) ou arrêt :

. Si M^k est un couplage parfait de \bar{G}^k , le couplage M induit par M^k dans G est, d'après le critère d'optimalité énoncé précédemment, un couplage parfait de poids minimum du graphe G ; terminer.

. Sinon modifier la solution (u, z) de (D_G) de façon à rajouter au graphe d'égalité \bar{G}^k des arêtes adjacentes à des sommets insaturés tout en respectant les conditions (C_1) et (C_2) pour le couplage M . Si ceci est impossible conclure que le graphe G n'admet pas de couplage parfait et terminer sinon retourner en (1).

On voit que l'algorithme se ramène, au pas (2), à la recherche d'un couplage maximum dans le graphe d'égalité associé à la solution duale courante.

DESCRIPTION DE L'ALGORITHME DE J. EDMONDS DE RECHERCHE D'UN COUPLAGE DE CARDINAL
MAXIMUM DANS UN GRAPHE G

La notion de bouton et l'opération de réduction par rapport à un bouton utilisées ici sont décrites dans le chapitre III au paragraphe III-2-1.

L'algorithme utilise une technique de marquage bivalent des sommets :

Une marque $(+,i)$ affectée à un sommet p indique qu'il existe une chaîne alternée paire (vide si $i = \emptyset$) entre ce sommet p et un sommet insaturé par le couplage courant ; chaîne dont le premier maillon est l'arête (i,p) .

Une marque $(-,p)$ affectée à un sommet i indique qu'il existe une chaîne alternée impaire entre ce sommet i et un sommet insaturé dont le premier maillon est l'arête (i,p) .

Exemple : On se donne le graphe suivant avec un couplage dont les arêtes sont indiquées d'un trait double.

Algorithme de recherche d'un couplage de cardinalité maximum dans un graphe

$G^K = (V,E)$

(0) - Initialisation du couplage :

. Trouver un couplage M^K de G^K . - M^K peut être vide.

(1) - Initialisation du marquage :

- . Marquer $(+,\emptyset)$ chaque sommet insaturé par M .
- . Appeler P l'ensemble des sommets que l'on vient de marquer +.
- . Poser $I = \emptyset$.

(2) - . Si P n'est pas vide, choisir $p \in P$ et aller en (3.1)

. Si I n'est pas vide, choisir $i \in I$ et aller en (3.2)

. Sinon, tous les sommets marqués ont été traités, le couplage M^K courant est de cardinalité maximum, terminer.

(3) - Traitement des marques des sommets :

(3.1) : Traitement de la marque + de p :

- . Tant qu'il existe des sommets adjacents à p non traités, appliquer la procédure suivante :
- . Choisir un sommet i adjacent à p et non traité,
- . Si i est couplé à p par M^K , ne rien faire
- . Si i est marqué $-$, ne rien faire
- . Si i est marqué $+$, aller en (4)
- . Si i n'est pas marqué, le marquer avec $(-,p)$ et poser $I = I \cup \{i\}$
- . Poser $P = P - \{p\}$
- . Aller en (2).

(3.2) Traitement de la marque $-$ de $i \in I$:

- . Soit p le sommet couplé à i par M^K
- . Si p est marqué, aller en (4)
- . Sinon marquer p avec $(+,i)$ et poser $P = P \cup \{p\}$
- . Poser $M = M - \{i\}$
- . Aller en (2).

- (4) :
- . Remonter les marques des deux sommets i et p jusqu'à des sommets insaturés marqués $(+, \emptyset)$.
 - . Soient r_i et r_p les sommets atteints et CH_i et CH_p les chaînes alternées par rapport à M^K ainsi mises en évidence respectivement entre les sommets i et r_i et les sommets p et r_p .
 - . Si r_i est différent de r_p , la réunion de CH_i , CH_p et de l'arête (i,p) est une chaîne alternée d'augmentation de la cardinalité du couplage ; aller en (5).
 - . Sinon la réunion de CH_i , CH_p et de l'arête (r,p) contient un bouton ; aller en (6).

(5) - Augmentation de la cardinalité du couplage :

- . Soit CH la chaîne alternée d'augmentation mise en évidence au pas (4).
- . Poser $M^k - M^k \Delta CH$ (différence symétrique).
- . Étendre les pseudo-sommets, corriger éventuellement le couplage dans les boutons obtenus et décrémenter correctement K .
- . Effacer les marques.
- . Aller en (1).

(6) : Réduction de G^K par rapport à un bouton :

- . Soit B le bouton mis en évidence au pas (4) et soit b sa base.
- . Poser $G^{K+1} = G^K/B$ et $K = K+1$.
- . Donner au pseudo-sommet B/B de G^K la marque que possédait b.
- . Indiquer que la marque de B/B n'est pas traitée en l'ajoutant suivant la nature de sa marque à P ou à I.
- . Aller en (2).

MODIFICATION DE LA SOLUTION DUALE (u,z) AU PAS (3) DE L'ALGORITHME DE RECHERCHE D'UN COUPLAGE DE POIDS MINIMUM

A la fin du pas (2) de cet algorithme, le graphe d'égalité dont on connaît un couplage maximum M^K est éventuellement modifié (réductions par rapport à des boutons) et ses sommets sont marqués.

On choisit $\epsilon > 0$ aussi grand que possible de telle sorte que si l'on augmente de ϵ les u_i associés aux sommets marqués + ou aux sommets réduits dans un pseudo-sommet marqué +, si l'on diminue de ϵ les u_i associés aux sommets marqués - ou aux sommets réduits dans un pseudo-sommet marqué -, si l'on diminue de $\frac{\epsilon}{2}$ les Z_B associés aux boutons B réduits dans un pseudo-sommet marqué + et si enfin on augmente de $\frac{\epsilon}{2}$ les Z_B associés aux boutons B réduits dans un pseudo-sommet marqué -, la nouvelle solution (u,z) reste réalisable.

Si ϵ n'est pas limité ($\epsilon = +\infty$) on déduit que le graphe n'admet pas de couplage parfait et l'on arrête l'algorithme, sinon on modifie effectivement la solution (u,z) et l'on poursuit l'algorithme au pas (1).

ANNEXE 2

RECHERCHE D'UN COCYCLE DE POIDS MINIMUM DANS UN GRAPHE SIMPLE
NON ORIENTE ET PLANAIRE

On généralise ici la méthode développée dans [3] pour la recherche d'un cocycle de cardinalité maximum.

On se donne un graphe simple, $G = (V, E)$, non orienté, planaire et sur les arêtes duquel a été défini un poids γ .

Définition : Un isthme de G est une arête qui forme à elle seule un cocycle.

Lemme 1 : Si l'arête e de G est un isthme, e appartient à tout cocycle de poids minimum si et seulement si $\gamma(e) < 0$ et e n'appartient à aucun cocycle de poids minimum si et seulement si $\gamma(e) > 0$.

Ce résultat est une conséquence directe du fait que tout cocycle est une somme disjointe de cocycles élémentaires et permet de supposer dans la suite que le graphe G est sans isthme.

On pose : $N = \{e \in E \mid \gamma_e < 0\}$

$P = \{e \in E \mid \gamma_e \geq 0\}$

Lemme 2 : Si $P = E$, l'ensemble vide est un cocycle de poids minimum de G .

On va donc supposer que N n'est pas vide.

A une représentation planaire de G , on associe son graphe dual $\Gamma = (S, A)$ et l'on appelle b la bijection de E sur A . Le fait que G soit sans isthme implique que Γ n'a pas de boucle.

A chaque arête $a = b(e)$ on donne les poids $\delta_a = \gamma_e$ et $\bar{\delta}_a = |\delta_a|$.

Dans S , on distingue l'ensemble F des sommets adjacents à un nombre impair d'arêtes de poids δ strictement négatif.

On va montrer comment la recherche d'un cocycle de poids minimum dans un graphe simple planaire peut se ramener à la recherche d'un ensemble de plus courtes chaînes de Γ joignant deux à deux les sommets de F et n'ayant en commun aucune arête. On appellera désormais Q un tel ensemble de chaînes.

Définition 1 : On appelle pseudo-cycle d'un graphe tout ensemble d'arêtes tel que, dans le graphe partiel qu'il engendre, tout sommet soit de degré pair. Un pseudo-cycle peut aussi être défini comme étant la somme disjointe de cycles élémentaires.

Théorème 1 : Le graphe G étant un graphe simple, planaire et sans isthme, une condition nécessaire et suffisante pour qu'un ensemble Ω d'arêtes de G soit un cocycle de G est que l'ensemble $b(\Omega)$ d'arêtes de Γ soit un pseudo-cycle de Γ .

Ce théorème est une conséquence directe du théorème suivant démontré dans [1] :

Soient $G = (X, V)$ un graphe planaire, $\Gamma = (S, A)$ un dual de G et b la bijection de V sur A .

Ω est un cocycle élémentaire de G si et seulement si $b(\Omega)$ est un cycle élémentaire de Γ .

Corollaire 1 : Un cocycle Ω de G est de poids minimum si et seulement si $b(\Omega)$ est un pseudo-cycle de Γ de poids minimum.

Dans ce qui suit, on va donc rechercher un pseudo-cycle de Γ de poids minimum.

Lemme 3 : Si Q est un ensemble de chaînes de Γ joignant deux à deux les sommets de F et n'ayant en commun aucune arête, la différence symétrique $Q_{\Delta} b(N)$ est un pseudo-cycle de Γ .

Démonstration : Les chaînes de Q n'ayant pas d'arête en commun, on définit q comme étant le vecteur d'incidence de l'ensemble des arêtes des chaînes de Q . Soit n le vecteur d'incidence de $b(N)$.

Pour tout sommet s de S , on note $q(s)$ le vecteur d'incidence des arêtes des chaînes de Q adjacentes à s et $n(s)$ le vecteur d'incidence des arêtes de $b(N)$ adjacentes à s .

Pour montrer que $Q_{\Delta} b(N)$ est un pseudo-cycle, il suffit de prouver que pour tout sommet s de S , on a :

$$D(s) = \sum_{a \in A} (q_a(s) \ominus n_a(s)) = 0$$

$$D(s) = \sum_{a \in A} (q_a(s)) \ominus \sum_{a \in A} n_a(s)$$

Or, d'après la définition de F et de Q, on a les deux relations suivantes :

$$(1) \sum_{a \in A} n_a(s) = 1 \iff \sum_{a \in A} q_a(s) = 1$$

et

$$(2) \sum_{a \in A} n_a(s) = 0 \iff \sum_{a \in A} q_a(s) = 0$$

On en déduit immédiatement $D(s) = 0$.

Lemme 4 : Si C est un pseudo-cycle de Γ , la différence symétrique $C_{\Delta} b(N)$ est un ensemble Q.

Démonstration : On appelle D, q et n les vecteurs d'incidence de C, $C_{\Delta} b(N)$ et N. On définit comme dans la démonstration du Lemme 3 les vecteurs d'incidence D(s), q(s) et n(s) associés à chaque sommet s de S.

q et q(s) sont donnés par : $\forall a \in A \ q_a = D_a \ominus n_a$ et $q_a(s) = D_a(s) \ominus n_a(s)$

$C_{\Delta} b(N)$ est un ensemble Q si et seulement si les relations (1) et (2) sont réalisées ou encore si et seulement si on a :

$$(3) \forall s \in S \sum_{a \in A} n_a(s) = \sum_{a \in A} q_a(s).$$

On a :

$$\sum_{a \in A} q_a(s) = \sum_{a \in A} (D_a(s) \ominus n_a(s)) = \sum_{a \in A} (D_a(s)) \ominus \sum_{a \in A} (n_a(s))$$

D'après la définition de C, on a $\sum_{a \in A} D_a(s) = 0$.

Il résulte donc : $\sum_{a \in A} q_a(s) = \sum_{a \in A} n_a(s)$ et $C_{\Delta} b(N)$ est bien un ensemble Q.

Théorème 2 : Q est de poids minimum pour le poids $\bar{\delta}$ si et seulement si $C = Q_{\Delta} b(N)$ est un pseudo-cycle de poids minimum pour le poids δ .

Démonstration : D'après le lemme 3, à un ensemble Q, on peut associer le pseudo-cycle $Q_{\Delta}b(N)$ de poids

$$\delta(Q_{\Delta}b(N)) = \bar{\delta}(Q) + \delta(b(N)). \quad (3)$$

En effet :

$$\delta(Q_{\Delta}b(N)) = \frac{1}{2} \sum_{a \in A} [q_a (\delta_a + \bar{\delta}_a) + (1 - q_a) (\delta_a - \bar{\delta}_a)]$$

$$\delta(Q_{\Delta}b(N)) = \frac{1}{2} \sum_{a \in A} [2q_a \bar{\delta}_a + (\delta_a - \bar{\delta}_a)]$$

$$\delta(Q_{\Delta}b(N)) = \bar{\delta}(Q) + \delta(B(N))$$

De même, d'après le Lemme 4, à un pseudo-cycle C, on peut associer un ensemble $Q = C_{\Delta}b(N)$ de poids

$$\bar{\delta}(C_{\Delta}b(N)) = \delta(C) + \bar{\delta}(b(N)) \quad (4)$$

$Q_{\Delta}b(N)$ étant égal à Q , de la relation (3), on déduit la condition nécessaire ; de même, de la relation (4) on déduit la condition suffisante.

Une méthode pour trouver un ensemble Q de poids minimum :

(Cf. résolution du postier chinois par J. Edmonds 4).

On construit un graphe complet sur l'ensemble des sommets de F, K.

A toute arête (f_1, f_2) de K on donne le poids $\ell(f_1, f_2)$ égal à la longueur, pour le poids $\bar{\delta}$, d'une plus courte chaîne joignant, dans F, f_1 et f_2 . Tout ensemble de type Q donne un couplage parfait de K.

On recherche dans K un couplage parfait de poids minimum M.

A chaque arête (f_1, f_2) de M, on associe une plus courte chaîne de F joignant f_1 et f_2 .

Les poids $\bar{\delta}_a$ étant positifs et M étant un couplage parfait de K de poids minimum, l'ensemble des chaînes ainsi obtenues constitue un ensemble Q. On a de plus :

$$\delta(Q_{\Delta}b(N)) = \ell(M) + \delta(b(N)).$$

Ce qui permet de déduire que si M est de poids minimum, $Q_{\Delta}b(N)$ et Q le sont aussi pour les poids respectifs δ et $\bar{\delta}$.

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] BERGE C., "Graphes et hypergraphes", Dunod, PARIS.
- [2] CUNNINGHAM W.H., "A primal algorithm for optimum matching", Mathematical Programming Study 8(1978), 50-72.
- [3] DORFMAN G. and ORLAVA G.I., "Finding the maximum cut in a graph", Engrg. Cybernetics 10(1972), 502-506.
- [4] EDMONDS J., "The chinese postman problem", Operations Research, 13, Suppl. 1 (1965), 373.
- [5] EDMONDS J., "Paths, trees and flowers", Canad. J. Math., 17(1965), 449-467.
- [6] EDMONDS J., "Maximum matching and a polyhedron with 0,1-vertices", J. Res. Nat. Bur. Standards 69 B(1965), 125-130.
- [7] HELD, P. ; WOLFE, M. and CROWDER, H.P., "Validation of subgradient optimization", Math. Programming, 6(1974), 62-88.
- [8] KARP R.M., "Reducibility among combinatorial problems", R.E. Miller and J.W. Thatcher (eds) (1972), 85-104.
- [9] KIRKPATRICK S., "Frustration and ground state degeneracy in Spin glasses", Physical Review B, Volume 16, Number 10, (15 november 1977).
- [10] LAWLER E.L., "Combinatorial Optimization", Holt-Rinehart-Winston, New-York (1976).
- [11] TOULOUSE G., Commun. Phys. Lett. A 56, (1976) 421.

ERRATUM

- Page 7 : au lieu de E_σ énergie interne
lire E_σ l'énergie interne
- au lieu de configuration E_σ
 lire configuration σ
- Page 8 : au lieu de par Ising lui-même dans le cas d'un réseau à deux dimensions
 lire par Ising lui-même dans le cas d'un réseau à une dimension
- Page 13 : au lieu de de vecteur d'incidence $y \in \{0,1\}^n$
 lire de vecteur d'incidence $y \in \{0,1\}^m$
- Page 38 : au lieu de
 lire
- (P) $\left\{ \begin{array}{l} (5) \\ (6) \\ (7) \\ (8) \end{array} \right.$
- (D) $\left\{ \begin{array}{l} (5) \\ (6) \\ (7) \\ (8) \end{array} \right.$
- Page 48 : au lieu de on idique
 lire on indique
- Page 54 : au lieu de restant étant planaire
 lire restant planaire
- au lieu de effet de baord
 effet de bord
- Page 55 : au lieu de plage
 lire plaque

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 26 Avril 1979

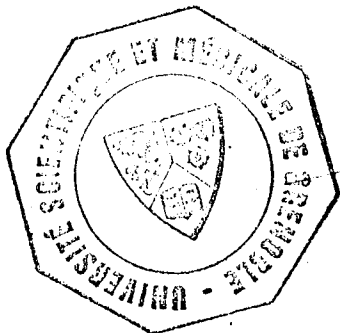
Le Président de la thèse

Alc. Kanou

Vu, et permis d'imprimer,

Grenoble, le 7 mai 1979

Le Président de l'Université
Scientifique et Médicale



Alc. Cau

D^r G. CAU