

Rapport de Stage

Daniel LÉVESQUE

28 septembre 2012

Table des matières

1	EA 1D avec champ magnétique	3
1.1	Définition du système	3
1.2	Matrices de transfert	4
1.3	Calcul de la fonction de partition	4
1.4	Énergie libre	5
1.5	Transition de phase	6
1.6	Condition à la frontière	6
2	EA 2D sans champ magnétique	8
2.1	Définition du système	8
2.1.1	Réseau de spins en tant que graphe simple, non orienté et planaire	8
2.2	Quelques propriétés du réseau de taille finie	9
2.2.1	Proposition 1	9
2.2.2	Proposition 2	10
2.2.3	Proposition 3	10
2.2.4	Proposition 4	11
2.3	Algorithme qui génère l'état fondamental	12
2.3.1	Appariement dans un graphe	12
2.3.2	Graphe dual et plaquettes frustrées	12
2.3.3	Identification de l'état fondamental par un appariement parfait de poids minimal	14
2.3.4	Algorithme pour déterminer l'état fondamental	17
2.3.5	Exemple de l'application de l'algorithme sur un petit réseau	17
2.3.6	Définition du problème d'appariement parfait de poids minimal	19
2.3.7	Différences et difficultés rencontrées lors de l'élaboration de l'algorithme	21

Sommaire

Dans ce rapport sera présenté le modèle d'Edwards-Anderson (EA) en une et deux dimensions. Ce modèle, aussi nommé verre de spins, est une variante plus complexe du modèle de spins d'Ising. Le but de l'analyse de ce modèle est d'arriver à savoir si une transition de phase se produit dans le cas bidimensionnel.

Il sera d'abord question de la détermination rigoureuse de la fonction de partition du modèle EA en une dimension. Ensuite, une étude du modèle EA en deux dimensions sur un réseau fini ainsi qu'un algorithme donnant les états fondamentaux du système seront présentés.

Chapitre 1

EA 1D avec champ magnétique

1.1 Définition du système

Le modèle d'EA a pour origine la modélisation des matériaux qui présentent un comportement magnétique particulier. Plus précisément, on cherche à comprendre les matériaux ferromagnétiques qui contiennent des impuretés tels que 1% de Mn ou Fe dilué dans du Cu ou Au [1]. Ces matériaux sont représentés par un réseau où les points désignent des particules (par exemple des atomes) et les lignes les reliant représentent l'interaction entre chacune d'elles. La propriété fondamentale d'une particule qui nous intéresse est son moment cinétique intrinsèque, familièrement nommé spin¹.

Pour ce chapitre, le réseau est une chaîne sur laquelle les spins sont distribués uniformément. En d'autres termes, la distance entre chaque spin est la même, disons de une unité, et chacun d'eux est lié à la fois au précédent et au suivant sur cette chaîne. Nous noterons σ_i le $i^{\text{ème}}$ spin de la chaîne. L'interaction entre les $i^{\text{ème}}$ et $j^{\text{ème}}$ spins est notée par J_{ij} . Nous dirons que deux spins sont voisins lorsqu'ils interagissent. De surcroît, nous poserons $J_{ij} = 0$ pour toutes les paires de spins σ_i et σ_j pour lesquelles $|i - j| \neq 1$ ². Donc, σ_i et σ_j sont voisins si $J_{ij} \neq 0$. Ainsi, l'énergie du système contenant N spins est donnée par l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = - \sum_{(\sigma_i, \sigma_j) \text{ voisins}} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \sum_{i=1}^N h \sigma_i. \quad (1.1)$$

Ce que dit (1.1) est que l'énergie totale du système est donnée par l'énergie d'interaction entre un spin, ses voisins et un champ magnétique externe représenté par la constante h , sommée sur tous les spins. Précisons que $\sigma_i \in \{-1, 1\}$. On remarque que la relation (1.1) est très générale, car elle ne fait pas explicitement référence à la dimension du système. De plus, tout au long de notre étude nous prendrons $J_{ij} \in [-1, 1]$ distribuée de manière identique et indépendante (i.i.d.) suivant une loi gaussienne tronquée d'espérance zéro et d'écart type 1.

-
1. À partir d'ici nous utiliserons le mot spin pour référer à un atome ou toute autre particule dans le matériau.
 2. L'interaction entre les spins de ce modèle est dite de courte portée. D'autres modèles à longue portée existent.

Une quantité fondamentale dans l'étude rigoureuse de (1.1) est la fonction de partition :

$$\mathcal{Z} = \sum_{\forall \sigma \in \{-1,1\}^{|N|}} e^{-\beta \mathcal{H}} \quad (1.2)$$

où $\beta = 1/kT$ avec k étant la constante de Boltzmann et T la température du système. Notons également que $\sigma = \{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\}$ désigne un état du système, i.e. l'ensemble des N spins du réseau auxquels on a donné une valeur dans $\{-1, 1\}$. En mécanique statistique, la probabilité de trouver un système dans un état d'énergie (1.1) est donnée par la mesure de Gibbs [2] :

$$\mathcal{P} = e^{-\beta \mathcal{H}} / \mathcal{Z}. \quad (1.3)$$

où $e^{-\beta \mathcal{H}}$ est le facteur de Gibbs. Donc, (1.2) sert à normaliser (1.3). Bien que (1.3) ne nous intéresse pas particulièrement pour l'instant, (1.2) est un atout précieux dans le calcul des propriétés du système considéré.

1.2 Matrices de transfert

L'idée de matrice de transfert, développée par Kramers et Wannier (1941) [3], apparaît naturellement lorsqu'on développe (1.2) dans le cadre du modèle d'Ising. La différence principale avec le modèle d'Ising et celui d'EA est le fait que $J_{ij} \in \{-1, 1\}$ soit i.i.d. suivant une loi gaussienne. On doit donc adapter la méthode de Kramers et Wannier à cette différence.

Premièrement, on réécrit (1.1) sous une forme symétrique et adaptée au cas unidimensionnel :

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N [J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} + \frac{h}{2} (\sigma_i + \sigma_{i+1})]. \quad (1.4)$$

Sans perdre de généralité, nous imposerons une condition cyclique à la frontière (i.e. $\sigma_{N+1} \equiv \sigma_1$). Ensuite, on associe à chaque valeur de couplage $J_{i,i+1}$ une matrice de transfert. Chaque élément d'une matrice de transfert est un facteur de Gibbs. La valeur des spins σ_i et σ_{i+1} des facteurs de Gibbs dépendent de leur position dans la matrice. Ainsi, puisque chaque spin peut prendre deux valeurs (-1 ou 1), chaque matrice aura deux colonnes et deux lignes ; dans une colonne (et une ligne) les premier et deuxième éléments correspondent respectivement à une valeur de spin -1 et +1. Voici la matrice de transfert associée à une valeur arbitraire $J_{i,i+1}$:

$$\begin{bmatrix} e^{\beta(J_{i,i+1}+h)} & e^{-\beta J_{i,i+1}} \\ e^{-\beta J_{i,i+1}} & e^{\beta(J_{i,i+1}-h)} \end{bmatrix}.$$

Les valeurs propres de cette matrice sont :

$$\lambda_{1,2}^{(i)} = e^{\beta J_{i,i+1}} \cosh \beta h \pm \sqrt{e^{2\beta J_{i,i+1}} \sinh^2 \beta h + e^{-2\beta J_{i,i+1}}}$$

1.3 Calcul de la fonction de partition

Cette section présente les étapes clés dans le calcul de la fonction de partition du modèle d'EA unidimensionnel en présence d'un champ magnétique externe. Chaque matrice de transfert associée

à $J_{i,i+1}$ est notée $T_{i,i+1}$. On notera les éléments de cette matrice entre parenthèses : $T_{i,i+1}(\sigma_i, \sigma_{i+1})$. Par exemple, $T_{i,i+1}(-1, 1)$ correspond à l'élément de la première ligne deuxième colonne $e^{-\beta J_{i,i+1}}$. Ainsi, (1.2) prend la forme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i=1}^N T_{i,i+1}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \\
&= \sum_{\sigma_1 \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma_2 \in \{-1,1\}} \dots \sum_{\sigma_N \in \{-1,1\}} \prod_{i=1}^N T_{i,i+1}(\sigma_i, \sigma_{i+1}) \\
&= \sum_{\sigma_1 \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma_N \in \{-1,1\}} [T_{1,2} \times T_{2,3} \times \dots \times T_{N-1,N}](\sigma_1, \sigma_N) T_{N,1}(\sigma_N, \sigma_1) \\
&= \sum_{\sigma_1 \in \{-1,1\}} \sum_{\sigma_N \in \{-1,1\}} \left[\prod_{i=1}^N T_{i,i+1}(\sigma_1, \sigma_1) \right] \\
&= \text{tr} \left(\begin{bmatrix} \prod_{i=1}^N \lambda_1^{(i)} & 0 \\ 0 & \prod_{i=1}^N \lambda_2^{(i)} \end{bmatrix} \right)
\end{aligned}$$

Et on obtient ainsi que

$$\mathcal{Z} = \prod_{i=1}^N \lambda_1^{(i)} + \prod_{i=1}^N \lambda_2^{(i)} \tag{1.5}$$

1.4 Énergie libre

L'énergie libre est une donnée fondamentale d'un système en mécanique statistique. Celle-ci nous renseigne sur la capacité d'un système à faire un travail. Plus précisément, l'énergie libre que possède un système est celle que celui-ci peut rendre (ou dépenser). Cette énergie libre \mathcal{F} est liée à (1.2) par

$$\mathcal{F} = -\frac{\log \mathcal{Z}}{\beta} \tag{1.6}$$

À ce stade nous nous intéressons à l'énergie libre par spin. Pour cette raison, nous allons prendre la limite suivante de (1.6) :

$$\mathcal{F} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{\log \mathcal{Z}}{\beta N}$$

En utilisant le résultat (1.5) et en supposant s.p.d.g. que $\lambda_2^{(i)} > \lambda_1^{(i)} \forall i$ on obtient que

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \lambda_1^{(i)}$$

Pour terminer le calcul on utilise la loi des grands nombres [4] qui dit que pour une suite de N variables aléatoires indépendantes (ici $\log \lambda_1^{(i)}$) la moyenne arithmétique tend vers l'espérance de cette variable lorsque $N \rightarrow \infty$. On a donc

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \langle \log \lambda_1^{(i)} \rangle$$

Finalement, en développant l'expression pour $\lambda_1^{(i)}$ et en utilisant le fait que $J_{i,j}$ suit une loi gaussienne d'espérance zéro on trouve

$$\mathcal{F} = -\frac{1}{\beta} \log(\cosh \beta h). \quad (1.7)$$

1.5 Transition de phase

On définit une phase comme la tendance qu'ont les spins du système à s'aligner dans la même direction. Une transition de phase survient lorsque les spins du système passent d'un état désordonné à un état où les spins ont tendance à s'aligner dans une certaine direction. On remarque dans (1.1) que l'énergie dépend directement des spins. Donc, si le système arrive au point où une transition de phase se produit, dit point critique, on doit s'attendre à pouvoir l'observer dans (1.7). Plus précisément, un point critique est associé à une singularité dans (1.7).

Puisque nous connaissons la forme analytique de l'énergie libre, nous pouvons maintenant déterminer si le modèle d'EA unidimensionnel possède une transition de phase. On rappelle qu'une transition de phase apparaît comme une singularité dans (1.7). Toutefois, on voit clairement que (1.7) ne possède pas de point singulier. On en déduit donc que le modèle d'EA unidimensionnel ne possède aucune transition de phase. Cette particularité n'est pas si surprenante. En effet, l'unidimensionnalité du système fait en sorte que chaque spin a deux voisins, comparativement à quatre pour le modèle bidimensionnel. Puisque l'interaction se limite à ces deux voisins, on comprend que la dimension du système n'est pas assez élevée pour que les spins aient tendance à s'influencer.

1.6 Condition à la frontière

Une dernière remarque s'impose. On rappelle que tout au long de notre analyse, on a imposé une condition périodique à la frontière. Il est intéressant de se demander si le résultat obtenu en (1.7) dépend de la condition à la frontière. L'observation clef est de remarquer que comme à la section précédente, la variation de la condition à la frontière est étroitement liée à la dimension du système. En d'autres termes, imposer une condition périodique à la frontière a pour effet de permettre au premier et dernier spin de la chaîne d'être voisins. Donc, logiquement, si l'unidimensionnalité du problème est une condition trop faible pour permettre une transition de phase alors de simplement permettre à deux spins de s'influencer induit un effet encore plus faible et doit être à toutes fins pratiques négligeable.

Plus techniquement, on observe que d'enlever la condition périodique n'a pour effet que de réduire de N à $N - 1$ l'indice limite des produits dans (1.5). Cette différence apparaît comme suit une fois que l'on passe à la limite de (1.6) :

$$\mathcal{F} = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta(N-1)} \sum_{i=1}^{N-1} \log \lambda_1^{(i)}$$

Le changement de variable $M = N - 1$ donne le résultat suivant :

$$\mathcal{F} = \lim_{M \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta M} \sum_{i=1}^M \log \lambda_1^{(i)}$$

ce qui est le même résultat que pour le cas avec la condition périodique, puisque $M \rightarrow \infty$ veut dire la même chose que $M + 1 \rightarrow \infty$.

Chapitre 2

EA 2D sans champ magnétique

2.1 Définition du système

Dans ce chapitre, on considère un réseau uniforme bidimensionnel sur lequel aucun champ magnétique externe n'agit ($h = 0$). Donc, chaque spin interagit avec quatre voisins (sauf peut-être à la frontière) et (1.1) prend la forme suivante :

$$\mathcal{H} = - \sum_{(\sigma_i, \sigma_j) \text{ voisins}} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.1)$$

L'allure plus simple de (2.1) par rapport à (1.1) n'est qu'une illusion ; dépendamment de la manière dont on définit le réseau, on obtient une double sommation. Dans ce qui suit, il sera utile et instructif de se référer à la théorie des graphes ([5], [6]) pour exprimer le modèle d'EA.

2.1.1 Réseau de spins en tant que graphe simple, non orienté et planaire

Un graphe simple non orienté G est une paire d'ensembles (V, E) où E est un sous-ensemble de $V \times V$. Les éléments de $V = V(G)$ sont les points de G (nommés les sommets du graphe) et ceux de $E = E(G)$ les arêtes. Donc, chaque arête de E lie deux sommets du graphe G . Le fait que le graphe soit simple et non orienté signifie respectivement qu'un sommet ne peut pas être lié à lui-même ou partager deux arêtes avec le même sommet et qu'on ne donne pas de direction aux arêtes. De plus, nous imposons à ce graphe d'être planaire : on doit pouvoir en dessiner une représentation dans le plan où aucune arête n'en croise une autre.

Dans ce qui suit, nous dénoterons par Λ l'ensemble des sommets qui représentent les spins σ_i et par \mathcal{J} l'ensemble des arêtes (i, j) qui représentent les couplages $J_{i,j}$ du réseau. Donc, si G est le graphe qui représente le réseau alors $G = (\Lambda, \mathcal{J})$. Il est important de faire la distinction entre Λ et σ . Bien que les deux réfèrent aux spins σ_i du réseau, σ est une fonction qui associe à chaque sommet du graphe (les spins σ_i) une valeur dans $\{-1, 1\}$ et Λ est l'ensemble des sommets du même graphe.

Définition 1. *Un état fondamental sur Λ , noté σ^* , est une configuration σ de spins qui minimise (2.1) sur l'ensemble Λ , i.e. $\sigma^* = \arg \min_{\sigma} \mathcal{H}_{\Lambda}(\sigma)$.*

Définition 2. La frontière de $A \subseteq \Lambda$, notée ∂A , est l'ensemble de toutes les arêtes qui lient un sommet dans A et un sommet à l'extérieur de A . En d'autres termes $\partial A = \{(i, j) : (i \in A \text{ et } j \notin A) \text{ ou } (i \notin A \text{ et } j \in A)\}$.

Remarque 1. L'ajout de l'indice Λ à \mathcal{H} est pour dénoter que l'énergie est calculée sur ce réseau fini. Ce fait est important puisque dans le cas d'un réseau infini (2.1) est mal défini.

2.2 Quelques propriétés du réseau de taille finie

Dans cette section, on présente certaines propriétés importantes que possède le modèle d'EA bidimensionnel sur un réseau fini.

2.2.1 Proposition 1

Pour le reste de cette discussion, nous parlerons que de réseaux finis. Donc, l'ensemble Λ est toujours fini et on notera le nombre d'éléments qu'il contient par $|\Lambda| = N$. On dit que le réseau contient N spins.

Proposition 2.2.1.1. Si $J_{ij} \in \mathcal{J}$ est i.i.d. gaussienne, alors l'état fondamental sur Λ est unique avec probabilité 1.

Preuve. Supposons, au contraire, $\tilde{\sigma}^*$ et $\hat{\sigma}^*$ soient deux états fondamentaux différents. Alors il existe un sous-ensemble fini de Λ qui contient les spins pour lesquels $\tilde{\sigma}^*$ et $\hat{\sigma}^*$ diffèrent. On peut donc construire deux ensembles de paires de spins voisins (i.e. (i, j) t.q. $J_{i,j} \in \mathcal{J}$) : $S_1 = \{(i, j) \mid \tilde{\sigma}_i^* \tilde{\sigma}_j^* = -\hat{\sigma}_i^* \hat{\sigma}_j^*\}$ et $S_2 = \{(i, j) \mid \tilde{\sigma}_i^* \tilde{\sigma}_j^* = \hat{\sigma}_i^* \hat{\sigma}_j^*\}$.

Par la suite, on a

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_\Lambda(\hat{\sigma}^*) &= - \sum_{(i,j) \in S_1 \cup S_2} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \\ &= - \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j - \sum_{(i,j) \in S_2} J_{ij} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j \\ &= \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j - \sum_{(i,j) \in S_2} J_{ij} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j \\ &= 2 \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j + \mathcal{H}_\Lambda(\tilde{\sigma}^*). \end{aligned}$$

On obtient la formule suivante pour l'écart d'énergie entre les deux états :

$$\mathcal{H}_\Lambda(\hat{\sigma}^*) - \mathcal{H}_\Lambda(\tilde{\sigma}^*) = 2 \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j \quad (2.2)$$

On doit avoir que $\mathcal{H}_\Lambda(\hat{\sigma}^*) - \mathcal{H}_\Lambda(\tilde{\sigma}^*) = 0$ car $\tilde{\sigma}^*$ et $\hat{\sigma}^*$ sont deux états fondamentaux et par définition ils minimisent \mathcal{H}_Λ . Donc, ceci implique que

$$2 \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j = \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} (\tilde{\sigma}_i \tilde{\sigma}_j - \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j) = 0$$

ce qui est impossible puisque la probabilité d'obtenir ce résultat sur une distribution continue est de zéro. En d'autres termes, pour que (2.2) soit nulle peu importe S_1 (fini) on doit avoir que soit $J_{ij} = 0$ ou bien soit $J_{ij} = \pm J_{i'j'}$. Puisque la probabilité d'obtenir J_{ij} égale exactement 0 ou $\pm J_{i'j'}$ est nulle, alors (2.2) est nulle avec probabilité zéro. C'est-à-dire que l'état fondamental sur Λ est unique avec probabilité 1. \square

2.2.2 Proposition 2

Proposition 2.2.2.1. σ^* est un état fondamental sur $\Lambda \iff \forall A \subseteq \Lambda \sum_{(i,j) \in \partial A} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* \geq 0$.

Preuve. Comme à la proposition 2.2.1.1 on définit pour deux états σ^* et σ les ensembles $S_1 = \{(i,j) \mid \sigma_i \sigma_j = -\sigma_i^* \sigma_j^*\}$ et $S_2 = \{(i,j) \mid \sigma_i \sigma_j = \sigma_i^* \sigma_j^*\}$.

La condition est suffisante :

Si σ^* est un état fondamental sur Λ , alors $\forall \sigma \in \{-1, 1\}^{|\Lambda|=N}$ on a par (2.2) que $\mathcal{H}_\Lambda(\sigma) - \mathcal{H}_\Lambda(\sigma^*) > 0$, car σ^* est unique. De plus, $\forall \sigma \in \{-1, 1\}^N$, $\exists A \subseteq \Lambda$ t.q. $S_1 = \partial A$. En effet, une manière de générer des états différents de l'état fondamental à partir de σ^* est de piger des sous-ensembles A de Λ et de modifier les valeurs correspondantes de spins dans σ^* . De cette manière, la frontière de A est composée exactement des paires de spins dont l'un est identique pour les deux états et l'autre est différent, ce qui définit exactement l'ensemble S_1 . Donc, on peut affirmer, toujours selon (2.2), que

$$\sum_{(i,j) \in \partial A} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* = \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* \geq 0$$

et ce $\forall \sigma \in \{-1, 1\}^N$. Puisqu'un tel ensemble A existe pour chaque configuration σ possible, alors on couvre ainsi tous les sous-ensembles A de Λ .

La condition est nécessaire :

Prenons σ^* tel que $\sum_{(i,j) \in \partial A} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* \geq 0 \forall A \subseteq \Lambda$ et $\sigma \neq \sigma^*$. Comme on vient de le voir, il est possible de choisir un ∂A qui correspond à S_1 pour σ choisi. Par (2.2) on a

$$\sum_{(i,j) \in \partial A} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* = \sum_{(i,j) \in S_1} J_{ij} \sigma_i^* \sigma_j^* = \frac{\mathcal{H}_\Lambda(\sigma) - \mathcal{H}_\Lambda(\sigma^*)}{2} > 0.$$

Et donc $\mathcal{H}_\Lambda(\sigma) > \mathcal{H}_\Lambda(\sigma^*)$ peu importe σ , i.e. σ^* est l'état fondamental de Λ . \square

2.2.3 Proposition 3

Nous allons maintenant aborder la notion de cycle frustré.

Définition 3. Un cycle est un graphe composé d'un ensemble de points $V = \{v_1, v_2, v_3, \dots, v_p\}$ et d'un ensemble d'arêtes E tel que $E = \{(v_1, v_2), (v_2, v_3), (v_3, v_4), \dots, (v_p, v_1), \}$.

Remarque 2. Un cycle est donc une boucle qui se ferme sur elle-même sans que ses arêtes ne se croisent.

En ce qui concerne la notation, si Λ représente l'ensemble des spins du réseau, alors $\Lambda_C \subset \Lambda$ désigne l'ensemble des spins du cycle C et $\mathcal{J}_C \subset \mathcal{J}$ l'ensemble de ses arêtes.

Définition 4. Un cycle \mathcal{C} est frustré $\Leftrightarrow \prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_\mathcal{C}} J_{ij} < 0$.

Remarque 3. De manière équivalente, \mathcal{C} est frustré si le nombre de $J_{ij} \in \mathcal{J}_\mathcal{C}$ négatif est impair.

Proposition 2.2.3.1. Si \mathcal{C} est un cycle frustré, alors $\forall \sigma \in \{-1, 1\}^{\text{card}(\Lambda_\mathcal{C})} \exists x, y \in \Lambda_\mathcal{C}$ tels que $\sigma_x \sigma_y J_{xy} < 0$.

Preuve. Prenons le cycle frustré \mathcal{C} et posons $\Lambda_\mathcal{C} = \{1, 2, \dots, M\}$ où $M < N$. Le fait d'avoir indexé les éléments de $\Lambda_\mathcal{C}$ de 1 à M n'indique pas que l'on a pris les M premiers spins de Λ . Cette identification rendra plus facile l'exposition de cette preuve. On aura alors que $\mathcal{J}_\mathcal{C} = \{(1, 2), (2, 3), \dots, (M-1, M), (M, 1)\}$.

Notre but est de construire un cycle frustré et de trouver quelle paire (σ_x, σ_y) est telle que $\sigma_x \sigma_y J_{xy} < 0 \forall \sigma \in [-1, 1]^M$. Pour ce faire, supposons, en toute généralité, que les M premières paires de spins soient telles que $\sigma_i \sigma_j J_{ij} > 0$ (sinon on a la paire de spins qu'on cherche et la preuve est faite) et montrons qu'alors la dernière paire (σ_M, σ_1) est celle que l'on cherche. C'est-à-dire que nous n'aurons pas le choix d'inclure une telle paire dans le cycle.

Puisque \mathcal{C} est frustré alors $\exists k = 2l - 1$ valeurs de $\mathcal{J}_\mathcal{C}$, pour $l \in \mathbb{N}$, qui sont négatives. Pour chacune des M premières paires de spins, on doit avoir $\sigma_i \sigma_j < 0$ si $J_{ij} < 0$ et $\sigma_i \sigma_j > 0$ si $J_{ij} > 0$, par construction. De plus, en progressant dans le cycle à partir de σ_1 , à chaque fois que $J_{ii+1} < 0$ on doit avoir que $\sigma_i = -\sigma_{i+1}$. Pour la dernière paire (σ_M, σ_1) deux cas se présentent : i) $J_{M1} > 0$ ou ii) $J_{M1} < 0$.

i) si $J_{M1} > 0$, alors toutes les valeurs de $\mathcal{J}_\mathcal{C}$ négatives sont distribuées dans les M premières paires. Donc on a que $\sigma_M = (-1)^k \sigma_1 = -\sigma_1$ et donc la paire cherchée est $x = M$ et $y = 1$.

ii) si $J_{M1} < 0$, alors étant arrivé au bout du cycle, il y a $k - 1$ valeurs de $\mathcal{J}_\mathcal{C}$ négatives de distribuées dans les M premières paires. Donc, on a que $\sigma_M = (-1)^{2l-2} \sigma_1 = \sigma_1$ et donc la paire cherchée est encore $x = M$ et $y = 1$.

Il y a donc toujours au moins une paire de spins pour laquelle $\sigma_x \sigma_y J_{xy} < 0$ lorsque \mathcal{C} est frustré.

□

Définition 5. On dit que l'arête (i, j) est insatisfaite si $\sigma_i \sigma_j J_{ij} < 0$.

2.2.4 Proposition 4

Proposition 2.2.4.1. Si le cycle \mathcal{C} n'est pas frustré, alors $\exists \sigma \in \{-1, 1\}^{\text{card}(\Lambda_\mathcal{C})}$ t.q. $\sigma_i \sigma_j J_{ij} > 0 \forall \sigma_i, \sigma_j \in \Lambda_\mathcal{C}$.

Preuve. On suit une démarche très semblable à celle utilisée à la proposition 2.2.3.1.

Si \mathcal{C} n'est pas frustré, il y a un nombre pair de $J_{ij} \in \mathcal{J}_\mathcal{C}$ négatifs. Supposons en toute généralité que $\text{card}(\Lambda_\mathcal{C}) = M$ et posons $\Lambda_\mathcal{C} = \{1, 2, \dots, M\}$ où $M < N$. Encore une fois, le fait d'avoir indexé les éléments de $\Lambda_\mathcal{C}$ de 1 à M n'indique pas que l'on a pris les M premiers spins de Λ ; cette identification rendra plus facile l'exposition de cette preuve. On aura alors que $\mathcal{J}_\mathcal{C} = \{(1, 2), (2, 3), \dots, (M-1, M), (M, 1)\}$.

Puisque \mathcal{C} n'est pas frustré alors $\exists k = 2l$ valeurs de $\mathcal{J}_\mathcal{C}$, pour $l \in \mathbb{N}$, qui sont négatives. Pour chacune des M premières paires de spins du cycle, on peut poser $\sigma_i \sigma_j < 0$ si $J_{ij} < 0$ et $\sigma_i \sigma_j > 0$ si $J_{ij} > 0$. De plus, en progressant dans le cycle à partir de σ_1 , à chaque fois que $J_{ii+1} < 0$ on doit avoir que $\sigma_i = -\sigma_{i+1}$. Pour la dernière paire (σ_M, σ_1) deux cas se présentent : i) $J_{M1} > 0$ ou ii) $J_{M1} < 0$.

i) si $J_{M1} > 0$, alors toutes les valeurs de $\mathcal{J}_\mathcal{C}$ négatives sont distribuées dans les M premières paires. Donc on a que $\sigma_M = (-1)^k \sigma_1 = \sigma_1$ et donc on a que $\sigma_i \sigma_j J_{ij} > 0 \forall i, j \in \Lambda_\mathcal{C}$.

ii) si $J_{M1} < 0$ il y a $k - 1$ valeurs de \mathcal{J}_C négatives de distribuées dans les M premières paires. Donc on a que $\sigma_M = (-1)^{2l-1} \sigma_1 = -\sigma_1$ et donc on a que $\sigma_i \sigma_j J_{ij} > 0 \forall i, j \in \Lambda_C$.

□

2.3 Algorithme qui génère l'état fondamental

Nous proposons maintenant d'appliquer une méthode employée en théorie des graphes afin de trouver l'état fondamental pour le modèle d'EA sur un réseau fini. Nous suivrons la démarche illustrée dans [1], que nous pouvons retrouver plus en détails dans [7]. Nous serons en mesure d'appliquer cette méthode à un système simple et ensuite nous verrons quels sont les outils nécessaires pour étendre cette méthode au cas général. Avant d'en dire plus au sujet de cette méthode, voyons quelques définitions.

2.3.1 Appariement dans un graphe

Définition 6. Le degré du sommet $i \in \Lambda(G)$ d'un graphe $G = (\Lambda, \mathcal{J})$ désigne le nombre d'arêtes qui est incident à ce sommet. On note ce degré $d_A(i)$ où $A \subseteq \mathcal{J}$ est l'ensemble d'arêtes sur lequel on considère le degré du sommet i .

Par exemple, dans un cycle $\mathcal{C} = (\Lambda_C, \mathcal{J}_C) \subseteq G$, où chaque sommet est lié à exactement deux autres sommets par les arêtes de \mathcal{C} , on aura $d_{\mathcal{J}_C}(i) = 2$ pour tout $i \in \Lambda_C$.

Définition 7. L'appariement¹ $M \subseteq \mathcal{J}(G)$ d'un graphe G est un sous-ensemble d'arêtes qui donne un degré inférieur ou égale à 1 à tous les sommets du graphe. En d'autres termes, $\forall i \in \Lambda(G)$ on a que $d_M(i) \leq 1$.

Définition 8. On dira du sommet i qu'il est saturé par M si $d_M(i) = 1$ et qu'il est insaturé si $d_M(i) = 0$.

Définition 9. Un appariement est dit parfait s'il sature tous les sommets du graphe sur lequel il est défini. Donc, un appariement M du graphe G est parfait si et seulement si $d_M(i) = 1 \forall i \in \Lambda(G)$.

Une manière plus intuitive d'illustrer un appariement parfait est d'imaginer un graphe pour lequel chaque sommet est lié uniquement et exactement à un autre sommet : chaque sommet du graphe fait partie exactement d'une paire unique de sommets .

2.3.2 Graphe dual et plaquettes frustrées

Pour la suite, nous devons définir des éléments fondamentaux d'un réseau : les plaquettes frustrées. Tout d'abord, les plaquettes sont les sommets d'un graphe au même titre que les spins d'un réseau. En fait, nous verrons que les plaquettes et les liens entre elles forment le graphe dual du graphe qui représente le réseau de spins. On rappelle que le graphe $G = (\Lambda, \mathcal{J})$ que nous considérons pour représenter le réseau de spins est simple, non orienté et planaire. Dans ce qui suit, nous imposerons des conditions aux frontières libres (non périodiques). Ainsi, pour chaque sommet $i \in \Lambda$ qui ne fait pas partie de la frontière, on a que $d_{\mathcal{J}}(i) = 4$. On peut donc voir G comme un maillage rectangulaire uniforme fini. Ceci nous inspire la définition suivante de frontière :

1. Le terme couplage est aussi employé en théorie des graphes. Toutefois, puisque nous avons déjà fait référence à ce terme pour désigner les éléments J_{ij} , nous éviterons de l'utiliser.

Définition 10. La frontière d'un réseau fini $\mathcal{F} \subset \mathcal{J}$ est composée de toutes les arêtes qui lient tous les sommets i pour lesquels $d_{\mathcal{J}}(i) < 4$.

Ensuite, nous introduisons la notion de graphe dual :

Définition 11. Le graphe dual G' du graphe G est obtenu de la manière suivante :

1. On définit un sommet i' pour chaque composante connexe (ou maille) qui est délimité par quatre arêtes de G . Ces sommets forment l'ensemble des sommets de G' . On doit considérer l'extérieur du graphe G comme étant un sommet de G' dans le cas où la frontière du réseau (fini) n'est pas soumise à une condition périodique.
2. Ensuite, on définit l'arête (i', j') si les deux composante connexes que i' et j' représentent partagent une arête dans G .

Suivant cette prescription, on obtient un graphe G' dont la structure est la même que celle de G : G' sera un graphe simple, non orienté et planaire que l'on pourra également voir comme un maillage rectangulaire uniforme fini. De surcroît, les arêtes de G' sont les mêmes que celles de G : si on superpose les dessins des deux graphes, alors les arêtes de G' croisent celles de G et sont égales une par une. On remarque aussi que toutes les arêtes qui sont incidentes à un même sommet dans G' forment un cycle dans G : on appellera ces cycles dans G les *plaquettes*² de G . Ensuite, puisqu'une plaquette est un cycle (par définition) alors on peut déterminer si elle est un cycle frustré (voir la définition 4) ; si c'est le cas on dira que la plaquette est frustrée. Finalement, on aura aussi que le dual de G' est G .

Les plaquettes frustrées sont intéressantes, car une fois que les poids J_{ij} sont distribués sur toutes les arêtes (i, j) du graphe G , peu importe l'état dans lequel se trouve le système, les plaquettes frustrées seront fixées dans le réseau. Ceci est évident puisque la définition d'un cycle frustré ne dépend aucunement de la configuration σ des spins du réseau.

En regardant la définition 10 on comprend que \mathcal{F} est aussi un cycle et qu'on peut donc déterminer s'il est frustré ou non. On soulève ce fait car il est important de comprendre que \mathcal{F} est en quelque sorte un cycle élémentaire du réseau au même titre que les plaquettes. C'est le plus petit cycle du graphe qui contient tous les autres. De plus, on voit aussi dans la définition 11 que l'on doit considérer l'extérieur du graphe G comme un point du graphe dual G' . Ainsi, si à chaque point de G' correspond une plaquette de G (un cycle élémentaire) alors il semble naturel d'en faire autant pour la frontière.

Une autre propriété intéressante, et en fait essentielle à la réalisation de la méthode présentée, est que les plaquettes frustrées viennent en paires de deux. En effet, lorsqu'une plaquette frustrée apparaît on est certains d'en trouver une autre. Ceci s'illustre bien intuitivement à l'aide de l'exemple suivant. Supposons que nous ayons un réseau ne possédant aucune plaquette frustrée et essayons d'en frustrer une seule. Par la définition 4, on doit alors modifier une des valeurs de couplage J_{ij} de G qui se trouve dans le cycle qui définit la plaquette. Ainsi, on aura soit une ou trois valeurs de J_{ij} négatives. On vient alors de frustrer la plaquette. Toutefois, on vient également de frustrer la plaquette voisine qui partage la même arête dont on vient tout juste de modifier la valeur. Il semble donc qu'à chaque fois que l'on crée une plaquette frustrée une autre doit lui être associée. On expose cette propriété dans la proposition suivante :

2. Il y a donc une bijection entre les plaquettes de G et les sommets de G' . Pour cette raison nous utiliserons le terme plaquette pour parler aussi des sommets de G' .

Proposition 2.3.2.1. Soit $G = (\Lambda, \mathcal{J})$ le graphe qui représente le réseau (fini) de spins avec des conditions aux frontières libres. Si $G' = (\Lambda', \mathcal{J}')$ est le graphe dual de G et que l'on note par $\Lambda'_f \subset \Lambda'$ l'ensemble des sommets qui représentent les plaquettes frustrées, alors $|\Lambda'_f|$ est un nombre pair.

Preuve. Notons par $\Lambda'_f = \{p_1, p_2, p_3, \dots, p_m\}$ l'ensemble des plaquettes frustrées. Alors $\Lambda'_f \subset \Lambda' = \{1, 2, 3, \dots, M\}$ et donc $m < M$. Par la définition 4 on a que pour toute plaquette frustrée $p_k \in \Lambda'_f$, $\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_{p_k}} J_{ij} < 0$ où \mathcal{J}_{p_k} désigne l'ensemble des arêtes associées à la plaquette frustrée p_k . Aussi, on aura $\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_l} J_{ij} > 0$ où \mathcal{J}_l est l'ensemble des arêtes associées à la plaquette (non frustrée) $l \in \Lambda' \setminus \Lambda'_f$.

Nous voulons montrer que m doit être un nombre pair. Pour y arriver, supposons qu'au contraire m est impair et considérons l'expression suivante :

$$\prod_{q=1}^M \left(\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_q} J_{ij} \right) = \left[\prod_{k=1}^m \left(\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_{p_k}} J_{ij} \right) \right] \left[\prod_{l \in \Lambda' \setminus \Lambda'_f} \left(\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_l} J_{ij} \right) \right]$$

Par hypothèse on voit que ce produit doit être négatif. Comme mentionné plus haut, en considérant le terme de droite de l'équation, chaque terme du produit entre les crochets de gauche est négatif et il y en a un nombre m impair et chaque terme du produit entre les crochets de droite est positif. Toutefois, chaque arête est présente dans exactement deux cycles (plaquettes) et on peut donc réécrire l'expression précédente de la manière suivante :

$$\prod_{q=1}^M \left(\prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}_q} J_{ij} \right) = \prod_{J_{ij} \in \mathcal{J}} (J_{ij})^2$$

On voit clairement que le produit ne peut jamais être négatif. Il y a donc une contradiction et notre hypothèse doit être fausse : m doit être un nombre pair et ainsi la proposition est vérifiée.

Il faut préciser que pour pouvoir écrire le produit comme on l'a fait on doit considérer la frontière \mathcal{F} comme une plaquette ; soyons rassurés car c'est précisément ce que l'on a fait en définissant les plaquettes comme étant les sommets du graphe dual . □

2.3.3 Identification de l'état fondamental par un appariement parfait de poids minimal

Nous avons en main toutes les définitions nécessaires à la compréhension de l'idée fondamentale du fonctionnement de la méthode expliquée dans [1]. Cette section ne prétend pas expliquer rigoureusement les idées de cette méthode, mais simplement en donner un aperçu.

On commence par se poser la question suivante : comment faire pour trouver l'état fondamental sur un réseau représenté par le graphe G ? La réponse est de trouver la configuration de spins σ^* qui correspond à la définition 1, i.e. qui minimise l'énergie du système. On doit donc minimiser la contribution des termes positifs dans (2.1) : les arêtes insatisfaites (voir la définition 5) doivent être de poids minimal puisque ce sont elles qui contribuent à faire augmenter l'énergie du système. Comme le démontre la proposition 2.2.2.1, pour un état fondamental la somme des termes $\sigma_i \sigma_j J_{ij}$ pour les arêtes de n'importe quel cycle doit être positive ; on veut donc chercher à minimiser la contribution des termes qui font augmenter l'énergie. Puisqu'un spin ne peut prendre que les valeurs ± 1 , le poids d'une arête insatisfaite dépend directement de la valeur de J_{ij} . Si on cherche

à construire un état fondamental on aura donc intérêt à choisir, autant que possible, les arêtes insatisfaites en fonction du poids J_{ij} de cette arête afin de minimiser leur contribution à augmenter l'énergie.

Proposition 2.3.3.1. *L'état fondamental (sur un réseau fini représenté par le graphe $G = (\Lambda, \mathcal{J})$) est celui pour lequel les termes d'énergie des arêtes insatisfaites sont minimisés.*

Preuve. *Ceci découle directement de la définition 1 et de l'équation (2.1). En effet, la définition 1 indique que l'état fondamental σ^* sur Λ est celui pour lequel l'équation (2.1) est minimisée :*

$$\sigma^* = \arg \min_{\sigma} \left(\mathcal{H}_{\Lambda}(\sigma) \right) = \arg \min_{\sigma} \left(\sum_{(\sigma_i, \sigma_j) \text{ voisins}} -J_{ij} \sigma_i \sigma_j \right)$$

On doit donc minimiser les termes dans la somme, i.e. les termes d'énergie $-J_{ij} \sigma_i \sigma_j$. D'après la définition 5 l'arête (i, j) est insatisfaite si $-J_{ij} \sigma_i \sigma_j > 0$ et donc contribue à augmenter l'énergie. Par définition, les arêtes insatisfaites de l'état fondamental seront celles pour lesquelles les termes d'énergie $-J_{ij} \sigma_i \sigma_j > 0$ seront aussi minimales que possible. \square

Théorème 1. (Théorème 2 [1]) *Pour une configuration σ^* qui minimise l'énergie du système représenté par le graphe G , il existe une partition des arêtes dans G' en $\frac{1}{2}|\Lambda'_f|$ chaînes, dont chacune joint deux éléments de Λ'_f et qui n'ont aucune arête en commun.*

Preuve. *La proposition 2.3.2.1 nous assure que $\frac{1}{2}|\Lambda'_f|$ est bien un nombre entier puisque $|\Lambda'_f|$ est toujours un nombre pair. On définit une chaîne comme un ensemble de sommets et d'arêtes dont exactement deux sommets ont un degré 1 (les bouts de la chaîne) et les autres un degré 2 (les sommets intermédiaires) et dont les arêtes lient tous ces sommets entre eux. Puisque dans le graphe dual G' chaque sommet a un degré 4 (ou plus pour le sommet qui représente la frontière de G) alors il existe au moins 3 possibilités de direction que peut prendre une chaîne à partir de chaque sommet intermédiaire. En d'autres mots, il existe plus de chaînes que de sommets à lier. Il est donc possible de choisir un ensemble d'arêtes dans G' qui lient les sommets de Λ'_f deux par deux sans avoir à emprunter la même arête deux fois. \square*

Ce que ce théorème dit est simplement que pour un état fondamental σ^* , on pourra toujours trouver un appariement parfait sur Λ'_f par un sous-ensemble de \mathcal{J}' . De plus, le corollaire qui suit le théorème 2 dans [1] prouve que tout σ^* qui minimise l'énergie du système est donné par un appariement parfait de poids minimal sur Λ'_f par un sous-ensemble de \mathcal{J}' :

Corollaire 2.3.3.1. *La configuration σ^* qui minimise l'énergie du système représenté par le graphe G est donnée par l'appariement de poids minimal $M \subseteq \mathcal{J}'$ sur Λ'_f .*

Preuve. *Le théorème précédent nous assure qu'un appariement parfait dans G' sera toujours possible. Ensuite, la proposition 2.3.3.1 nous indique que σ^* est obtenue en minimisant le poids des arêtes insatisfaites. Ce qui nous reste à montrer est que les chaînes de poids minimal qui constituent les appariements parfaits dans G' sur Λ'_f sont composées précisément des arêtes insatisfaites.*

On doit donc montrer 1) que les arêtes insatisfaites composent les chaînes d'appariement et 2) que ces chaînes doivent être de poids minimal.

1. *L'observation importante que l'on doit faire est la suivante : pour une configuration σ^* qui minimise l'énergie on doit réduire à un minimum la présence d'arêtes insatisfaites et ce nombre*

minimum d'arêtes insatisfaites est égal au nombre d'arêtes dans les chaînes d'appariement. Selon la définition 4 le nombre de terme de couplage $J_{ij} < 0$ pour une plaquette frustrée est impaire. Donc pour une plaquette frustrée on pourra avoir une ou trois arêtes insatisfaites. Toutefois, d'après la proposition 2.3.3.1 l'énergie doit être minimisée et donc une arête insatisfaite est la condition privilégiée par la contrainte énergétique. Ainsi, pour la configuration σ^* chaque plaquette frustrée doit au minimum avoir une arête insatisfaite. D'un raisonnement similaire on comprend qu'une plaquette qui n'est pas frustrée peut ne pas avoir d'arêtes insatisfaites, en avoir deux ou en avoir quatre. La condition privilégiée par la contrainte énergétique est évidemment aucune arête insatisfaite. De ce point de vue on voit qu'alors les plaquettes frustrées agissent comme sources d'arêtes insatisfaites, i.e. que la présence d'une telle plaquette implique nécessairement la présence d'au moins une arête insatisfaite. De surcroît, la proposition 2.3.2.1 nous assure qu'elles viennent en paires. En poursuivant dans cet optique on voit aussi que les plaquette non frustrée transmettent les arêtes insatisfaites. En effet, si une plaquette non frustrée partage une arête insatisfaite avec une plaquette frustrée, alors forcément cette plaquette non frustrée contient une ou trois autres arêtes insatisfaites de plus car elle ne peut qu'en compter un nombre pair. Le même raisonnement s'applique à n'importe quelle autre plaquette non frustrée qui partage une arête insatisfaite avec d'autres plaquettes. On comprend donc que pour minimiser le nombre d'arêtes insatisfaites dans le réseau cette transmission d'arêtes insatisfaites ne peut que commencer et se terminer avec deux plaquettes frustrées. Ainsi, chaque chaîne qui apparie deux plaquettes frustrées doit passer par des plaquettes non frustrées (si les premières ne partagent pas une arête) et chaque arête de cette chaîne sera une arête insatisfaite.

2. La contrainte énergétique impose que chaque chaîne soit de poids minimal : les termes énergétiques des arêtes insatisfaites $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j$ doivent être aussi minimales que possible. Ceci correspond exactement à la définition d'un appariement de poids minimal si on considère que le poids de chaque arête est $|J_{ij}|$ puisqu'on sait que les valeurs de σ_i et σ_j seront telles que $-J_{ij}\sigma_i\sigma_j > 0$. Donc, le poids de chacune de ces chaînes que l'on cherche à minimiser est $\sum_{\mathcal{C} \subset \mathcal{J}'} |J_{ij}|$ où \mathcal{C} est une chaîne composée d'arêtes dans \mathcal{J}' .

□

Dans les prochaines sections, on voit plus en détails l'algorithme qui permet d'appliquer le résultat du corollaire 2.3.3.1 et ainsi calculer σ^* .

Remarque 4. Dans le cas original traité en exemple dans [1], les couplages J_{ij} prennent les valeurs ± 1 avec une certaine probabilité. Dans ce cas, le poids minimal d'une chaîne qui apparie deux plaquettes frustrées est tout simplement la distance entre ces deux plaquettes (car $|J_{ij}| = 1$), i.e. le nombre d'arêtes qui joignent ces plaquettes dans G' . On comprend donc que l'état fondamental n'est pas toujours unique et qu'il peut même en exister un grand nombre si l'appariement est constitué de plaquettes très éloignées. Ceci est dû au fait que plus deux plaquettes sont éloignées, plus il existe de chaînes de mêmes longueurs qui les unissent. Dans le cas où le couplage J_{ij} est choisi entre $+1$ et -1 selon une distribution continue, la probabilité que deux chaînes aient exactement le même poids est nulle. Donc, il n'existe qu'une seule chaîne de poids minimal qui lie deux plaquettes. Ceci implique qu'il n'y a aucune dégénérescence de l'état fondamental (dans le cas d'un réseau fini), ce qui est en accordance avec la proposition 2.2.1.1.

2.3.4 Algorithme pour déterminer l'état fondamental

Pour résumer la section précédente, si l'on veut trouver l'état fondamental sur un réseau fini, voici l'algorithme qu'il faut suivre :

1. À l'aide des valeurs de couplage J_{ij} du réseau on identifie l'emplacement des plaquettes frustrées.
2. Une fois les plaquettes frustrées identifiées, on détermine la chaîne de poids minimal entre chaque paire de plaquettes frustrées. À ce moment on obtient un graphe complet³ dont les sommets sont les plaquettes frustrées (i.e. les sommets de G' correspondants) et dont les arêtes portent le poids de la chaîne de poids minimal qui les lie.
3. Ensuite, on trouve l'appariement parfait de poids minimal dans ce graphe complet (la prochaine section explique comment on peut faire ceci pour un graphe en cas général).
4. Finalement, une fois les chaînes d'arêtes de poids minimal identifiées, on distribue les valeurs ± 1 aux spins du réseau de telle manière à ce que seulement les arêtes dans les chaînes identifiées soient insatisfaites.

2.3.5 Exemple de l'application de l'algorithme sur un petit réseau

Afin d'illustrer le fonctionnement et l'efficacité de la méthode expliquée à la dernière section, voyons un exemple sur un réseau carré de 9 spins avec des conditions aux frontières libres. Si on doit s'imaginer la distribution des spins dans le réseau, on dira que les 9 spins occupent respectivement les positions $(0,0)$, $(0,1)$, $(0,2)$, $(1,0)$, $(1,1)$, $(1,2)$, $(2,0)$, $(2,1)$, $(2,2)$ dans le plan cartésien. Pour simplifier la discussion, on nomme ces points de σ_1 à σ_9 en partant du point $(0,2)$ et en descendant de gauche à droite et en finissant par le point $(2,0)$. Ce sont les sommets du graphe G . Pour les arêtes, seuls les sommets qui sont situés au-dessus/au-dessous ou à gauche/à droite d'un autre sommet seront couplés (pas de couplage en diagonale). Pour chaque couplage on dessine une arête qui joint les deux sommets. Par exemple, le sommet σ_1 est lié seulement aux sommets σ_2 et σ_3 respectivement par les arêtes (σ_1, σ_2) et (σ_1, σ_3) . Les plaquettes (sommets de G') sont situées aux points $(1/2, 3/2)$, $(3/2, 3/2)$, $(1/2, 1/2)$, $(3/2, 1/2)$ et celle qui représente l'extérieure de G à $(-1/2, 1/2)$. On nommera ces plaquettes respectivement par p_1 , p_2 , p_3 , p_4 , et p_0 .

Ensuite, on utilise Matlab pour générer des valeurs de couplage J_{ij} i.i.d. suivant une loi gaussienne d'espérance zéro et d'écart type 1 tronquée pour livrer des valeurs entre -1 et 1. On obtient les valeurs suivantes : $J_{12} = 0.2748$, $J_{14} = 0.4400$, $J_{23} = 0.9105$, $J_{47} = -0.6169$, $J_{45} = 0.6011$, $J_{25} = -0.6086$, $J_{56} = 0.8671$, $J_{58} = -0.7371$, $J_{78} = 0.0923$, $J_{36} = 0.8985$, $J_{89} = -0.0799$, $J_{69} = 0.1837$. Le graphe contenant ces informations est présenté à la figure 2.1.

La prochaine étape est de repérer les plaquettes frustrées. Une manière rapide de le faire est de dessiner G en inscrivant seulement les signes de J_{ij} sur l'arête correspondante. On voit clairement que les seules plaquettes pour lesquelles le produit des signes de J_{ij} est négatif sont p_1 et p_2 . On n'a donc que deux plaquettes frustrées. Ceci rend triviale l'étape de l'appariement des plaquettes frustrées : il n'y a qu'une possibilité, la chaîne composée de l'arête $J_{25} = -0.6086$. Ceci veut dire que la seule arête qui devra être insatisfaite est J_{25} . On peut maintenant distribuer des valeurs aux spins σ_i . Pour commencer, choisissons la valeur +1 pour tous les σ_i . Dans cette configuration, l'arête J_{25} est bien insatisfaite. Ensuite, on trouve les arêtes qui ont un couplage négatif et on inverse

3. Dans un graphe complet de k sommets, chaque sommet est lié au $k - 1$ autres. On aura donc que le degré de chaque sommet de ce graphe est de $k - 1$.

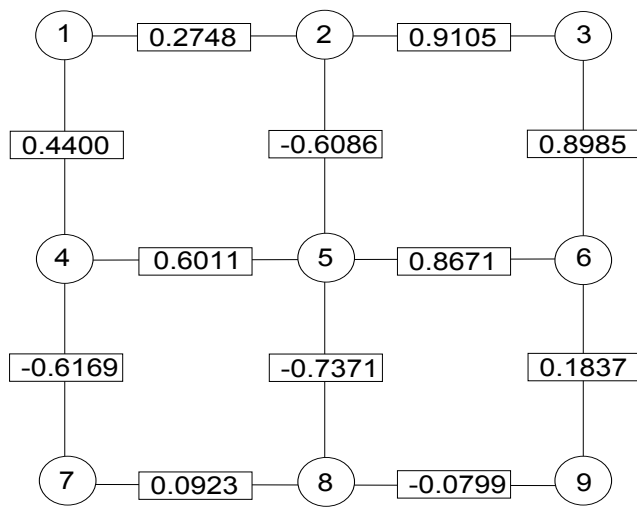


FIGURE 2.1 – Graphe G représentant le réseau carré de 9 spins avec conditions aux frontières libres. Chaque spin est identifié par un nombre entre 1 et 9 et les valeurs des couplages J_{ij} sont affichés sur les arêtes correspondantes.

les bon spins pour satisfaire les arêtes insatisfaites : on doit poser $\sigma_8 = \sigma_9 = -1$. Et voilà, l'état fondamental σ^* est trouvé : $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = \sigma_7 = +1$ et $\sigma_8 = \sigma_9 = -1$.

On s'assure de bien avoir trouvé l'état fondamental simplement en constatant que pour tout cycle dans G , on a que la somme des termes $\sigma_i \sigma_j J_{ij}$ est positive. En effet, la seule valeur négative est $\sigma_2 \sigma_5 J_{25} = -0.6086$ et n'est pas suffisamment grande en valeur absolue pour rendre n'importe quelle somme sur n'importe quel cycle négative. Donc, selon les propositions 2.2.1.1 et 2.2.2.1, on a bien trouvé l'état fondamental σ^* et il est unique⁴.

2.3.6 Définition du problème d'appariement parfait de poids minimal

Dans l'exemple de la section précédente il est très facile de trouver l'appariement parfait de poids minimal entre les deux seules plaquettes frustrées du réseau. On réalisera vite que pour des réseaux de plus grande taille, cette tâche est beaucoup moins triviale. Dans cette section, on va donc poser le problème d'un appariement parfait de poids minimal dans un contexte plus général.

Le problème d'un appariement parfait est très bien connu et bien étudié. Le modèle qui est suivi dans [1] est celui établi par Jack Edmonds et qui est très bien détaillé dans [8].

La première condition à l'obtention d'un appariement parfait est la parité du nombre de sommets dans le graphe. Évidemment, on ne peut pas avoir d'appariement parfait avec un nombre impair de sommets. Toutefois, ceci ne sera pas un problème pour nous puisque nous avons vu plus tôt que les plaquettes frustrées viennent en paires.

Pour solutionner ce problème, on se tourne vers la programmation linéaire. Supposons que nous sommes arrivés à obtenir un graphe complet dont les sommets sont les plaquettes frustrées du réseau et dont les arêtes portent un poids égal au poids de la chaîne de poids minimal qui les lient. Nommons ce graph $K = (V, E)$ et le poids de chaque arête W_{ij} . Voici à quoi ressemble notre problème dans ce langage :

$$(P) \quad \begin{array}{ll} x_{ij} \in \{0, 1\} & \forall (i, j) \in E \\ \sum_j x_{ij} = 1 & \forall i \in V \\ \sum_{ij} x_{ij} W_{ij} & \text{à minimiser} \end{array}$$

Ici, la variable x_{ij} prend la valeur 1 si l'arête (ij) est dans l'appariement et 0 sinon. Donc, la fonction à minimiser est bien le poids total de l'appariement. Sur la deuxième ligne, on voit que la somme de x_{ij} pour un sommet i , sur tous les autres sommets, doit être égale à 1. Ceci veut simplement dire que si $M \subseteq E$ est l'appariement cherché, alors $d_M(i) = 1 \forall i \in V$: c'est la définition d'un appariement parfait. Le problème avec (P) est que la première condition, $x_{ij} \in \{0, 1\}$, rend la solution beaucoup trop difficile à trouver. On la remplace donc par la condition moins stricte $x_{ij} \geq 0$.

Toutefois, on doit payer un prix pour cette simplification. En effet, en tentant d'obtenir une solution on s'aperçoit maintenant que les variables x_{ij} peuvent prendre la valeur⁵ $1/2$. Ceci permet d'attribuer à certains sommets un degré égal à $1/2$ et donc de pouvoir l'apparier avec plus d'un sommet. Une solution possédant ce genre de valeurs n'est pas admissible, car on cherche un appariement parfait.

La clef est de remarquer que cette situation se produit avec des graphes particuliers. Pour vous convaincre que cette situation peut bien se produire, essayez ceci : dessinez deux cycles de trois

4. σ^* est unique au sens où $-\sigma^*$ est aussi un état fondamental.

5. $x_{ij} \geq 0$ veut bien évidemment dire que x_{ij} peut prendre la valeur $1/2$, mais cette valeur précise est d'un intérêt particulier comme nous le verrons plus bas.

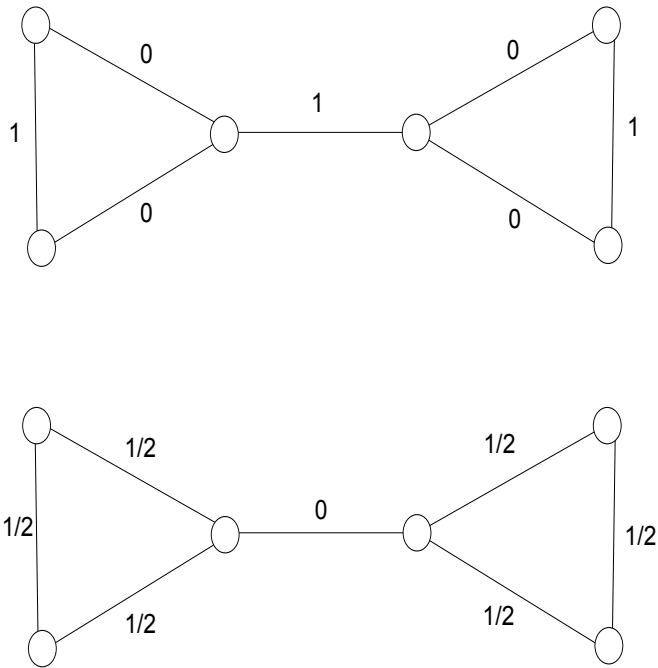


FIGURE 2.2 – Exemple de graphe où une solution entière et une solution fractionnaire sont possibles. Les deux graphes illustrent la distribution des poids sur chaque arête pour les deux solutions.

sommets et liez ces deux cycles par une arête. Maintenant, essayez de distribuer les poids 0 et 1 à chaque arête de manière à ce que chaque sommet touche exactement une arête avec un poids de 1. On réussit seulement en donnant le poids 1 à l'arête qui lie les deux cycles et aux deux arêtes qui joignent les sommets qui ont un degré 2 (dans ce graphe 4 sommets ont un degré 2 et 2 sommets ont un degré 3). C'est la seule solution qui satisfasse aux conditions de (P). Qu'arrive-t-il si on se permet de donner un poids 1/2 aux arêtes ? Peut-on trouver une solution ? Avec les deux mêmes cycles de trois sommets, on trouve en effet une solution si on assigne le poids 1/2 à toutes les arêtes de chaque cycle et le poids 0 à l'arête qui joint ces cycles. Cette solution ne satisfait (P) que si l'on remplace la première condition par $x_{ij} \geq 0$. Les deux solutions de cet exemple sont présentées à la figure 2.2.

Cet exemple illustre un cas simple d'une problématique beaucoup plus générale. On aurait pu remplacer les deux cycles de trois sommets par n'importe quels cycles qui contiennent chacun un nombre impair de sommets. Ces cycles portent le nom de blossom⁶ et augmentent considérablement la difficulté de l'élaboration d'un algorithme lorsqu'ils sont présents dans un graphe. Malheureusement, les graphes complets dans lesquels nous voulons effectuer un appariement parfait de poids minimal contiennent nécessairement des cycles impairs (un cycle de trois sommets est impair et est complet) et nous risquons de tomber très souvent sur ce genre de situations problématiques. Dans cet optique, les graphes se séparent en deux familles : les graphes bipartis, qui ne contiennent pas de cycle impairs et les graphes non bipartis, qui eux contiennent des cycles impairs.

Afin de palier à cette difficulté, Edmonds a proposé d'ajouter une condition supplémentaire à (P) qui tient compte des cycles impairs. Il a ainsi prouvé que (P) est équivalent au problème suivant :

$$\begin{array}{ll}
 \text{(P')} & \begin{array}{l} x_{ij} \geq 0 \\ \sum_j x_{ij} = 1 \end{array} & \begin{array}{l} \forall (i, j) \in E \\ \forall i \in V \end{array} \\
 & \sum_{\{(ij) \in E(S) | i \in S \text{ et } j \in S\}} x_{ij} \leq \frac{1}{2}(|S| - 1) & \forall S \subseteq V \\
 & \sum_{ij} x_{ij} W_{ij} & \text{à minimiser}
 \end{array}$$

Ici, S dénote un sous-ensemble impair de sommets de V . Il suffira de mentionner que pour résoudre (P'), qu'on appelle le primal, on doit résoudre son dual (D'). Puisque (P') est un problème de minimisation, alors (D') sera un problème de maximisation. Cette technique est courante en programmation linéaire car c'est seulement en solvant (P') et (D') qu'on sait si la solution obtenue est optimale. On trouve dans [1] et [8] tous les détails nécessaires à l'élaboration de cette solution.

2.3.7 Différences et difficultés rencontrées lors de l'élaboration de l'algorithme

Nous soulignerons dans cette section quels sont les points plus difficiles à surveiller dans l'algorithme et quelles sont les différences à prendre en compte avec le cas traité dans [1]⁷.

La première différence vient à l'étape 2 de l'algorithme. Comme il a été indiqué à la remarque 4, afin d'obtenir le graphe complet nécessaire au début de l'étape d'appariement (l'étape 3), on doit trouver quelle chaîne possède le poids minimal entre chaque paire de plaquettes frustrées. Or,

6. La définition d'un blossom est un peu plus complexe et doit être établie avec un langage plus détaillé que celui présenté ici. Il suffit de dire que la situation décrite à l'aide des deux petit cycles capture bien la nature du problème.

7. On rappelle que dans [1], seul le cas pour $J_{ij} = \pm 1$ est présenté. Toutefois, il est clairement affirmé que cette méthode fonctionne pour tout autre distribution de cette variable.

il ne suffit plus de trouver la chaîne qui possède un poids égal à la longueur minimale entre les plaquettes. On doit maintenant calculer suffisamment de chaînes et s'assurer que l'on a bien trouvé celle qui possède le poids minimal. Comme expliqué à la remarque 4, on sait à l'avance que cette chaîne sera unique, c'est sa valeur qu'on ne sait pas à l'avance.

Ensuite, la difficulté la plus grande se trouve certainement à la troisième étape de l'algorithme. Trouver l'appariement parfait de poids minimal sur un graphe biparti se fait bien, mais pour un graphe non biparti la situation est plus compliquée et il faut y consacrer plus de temps. Heureusement, c'est un problème bien documenté (voir [8]).

Somme toute, afin d'adapter la démarche illustrée dans [1] au cas où les couplages J_{ij} suivent une distribution continue, on doit modifier la manière dont on calcule le poids des chaînes d'arêtes entre les plaquettes frustrées du graphe dual au graphe qui représente le réseau de spins. Ensuite, on doit porter une attention particulière au cas des graphes non bipartis lors de la recherche d'un appariement parfait de poids minimal, car cette tâche nécessite plusieurs élaborations au cas plus aisé des graphes bipartis.

Bibliographie

- [1] I Bieche, R Maynard, R Rammal, and J P Uhry. On the ground states of the frustration model of a spin glass by a matching method of graph theory. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 1980.
- [2] Anton Bovier. *Statistical Mechanics of Disordered Systems : A Mathematical Perspective*. Cambridge University Press, 2006.
- [3] Colin J. Thompson. *Classical Equilibrium Statistical Mechanics*. Oxford University Press, 1988.
- [4] Yakov G. Sinai. *Probability Theory*. Springer-Verlag, 1992.
- [5] Richard J. Trudeau. *Introduction to Graph Theory*. Dover, 1993.
- [6] Béla Bollobás. *Modern Graph Theory*. Springer, 1998.
- [7] I Bieche. *La combinatoire : un outil pour l'étude d'une transition de phase magnétique en physique du solide*. PhD thesis, Université Scientifique et Médicale de Grenoble, Institut National Polytechnique de Grenoble, 1979.
- [8] Eugene L. Lawler. *Combinatorial Optimization : Networks and Matroids*. Holt, Rinehart and Winston, 1976.