ORSAY

Numéro d'ordre:

Université Paris-Sud
UFR Scientique d'Orsay

Thèse présentée pour obtenir

Le grade de docteur en science

de l'Université Paris XI Orsay

par

Jérôme HOUDAYER

Verres de Spins
et
Optimisation Combinatoire

Soutenue le 3 septembre 1999 devant la commission d'examen composée de

M. Jean-Philippe	Bouchaud	Rapporteur
M. Robert	Cori	
M. Enzo	Marinari	Rapporteur
M. Olivier	Martin	Directeur de thèse
M. Jean	Vannimenus	

Remerciements

Je tiens à remercier ici, tous ceux qui ont rendu possible l'aboutissement de mon travail de thèse :

- En premier lieu bien sûr, **Olivier Martin** qui a été mon directeur de thèse pendant ces trois ans. Je le remercie beaucoup de tout le temps qu'il m'a consacré, de la patience dont il a fait preuve, de sa gentillesse et de la chaleur de nos relations. J'ai beaucoup apprécié ses grandes compétences scientifiques et son étonnante capacité à prendre du recul.

- Je remercie également **Jacques Boutet de Monvel** pour notre courte collaboration, **Oriol Bohigas**, **Henk Hilhorst**, **Rémi Monasson** et **David Dean** pour les intéressantes discussions que nous avons eues. Je remercie tout particulièrement **Jean-Philippe Bouchaud** pour l'intérêt et l'aide qu'il m'a apportée. Je remercie également tous les autres membres de mon jury pour avoir accepté cette tâche : **Enzo Marinari**, **Robert Cori** et **Jean Vannimenus**.

- Je remercie toutes celles et tous ceux qui ont contribué aux très bonnes conditions de travail que j'ai eues : **Nadine Rohart** et **Martine Thouvenot** du secrétariat, **Christophe Diarra** et **Jean-François Rabasse** du service informatique et **Xavier Campi** et **Alain Comtet** les directeurs successifs du laboratoire.

Je tiens aussi à remercier toutes celles et tous ceux qui ont contribué à rendre ma vie plus agréable pendant ces trois ans :

- Tout d'abord tous les membres du LPTMS ainsi que **Marie-Thérèse Commault** pour l'ambiance sympathique et chaleureuse du laboratoire. Et tout particulièrement **Christophe Texier** pour son amitié et pour avoir accepté de relire ma thèse. Je remercie également **Frédéric van Wijland** pour son amitié.

– Je remercie l'ensemble de ma famille (et en particulier ma cousine **Corinne**) ainsi que tous mes amis et notamment **Nathalie**, **Chloé**, **Laure** et **Marjorie**.

Tous ceux que j'ai honteusement oublié de citer ici se reconnaîtront, je les prie de me pardonner et je les remercie de leur indulgence.

À tous un grand **MERCI**.

Table des matières

Remerciements **iii**

Table des matières **v**

1 Introduction **1**
1.1 Généralités 1
1.1.1 La vie est dure : désordre et frustration 1
1.1.2 Éléments de physique statistique 4
1.1.3 Les effets du désordre 8
1.1.4 Plan de la thèse 10
1.2 Verres de spins 11
1.2.1 Introduction aux verres de spins 11
1.2.2 Phase verre de spins 13
1.2.3 Théorie de champ moyen 15
1.2.4 Théorie des gouttelettes 18
1.3 Problèmes combinatoires 19
1.3.1 Théorie de la complexité 19
1.3.2 Optimisation combinatoire 21
1.3.3 Liens avec la physique statistique 23
1.4 Enjeux et motivations 24
1.4.1 La controverse théorique 24
1.4.2 Le paysage d'énergie 25
1.4.3 Mon apport personnel 25

2 Couplage minimal **27**
2.1 Présentation du modèle 27
2.1.1 Problème du couplage minimal 27
2.1.2 Cas biparti 28
2.1.3 Version stochastique 29
2.2 Intérêt du modèle, liens avec les verres de spins 30
2.3 Approximation de champ moyen 32

2.3.1 Définition du modèle champ moyen 32
2.3.2 Résultats analytiques connus 33
2.4 Étude numérique du fondamental 34
2.4.1 Résultats 34
2.4.2 Test de la conjecture de Parisi 37
2.5 Étude des excitations 39
2.5.1 Description des excitations 39
2.5.2 Étude du premier état excité 40

3 Approche numérique pour le couplage 47
3.1 Détermination de l'état fondamental 47
3.1.1 Problème dual 47
3.1.2 Algorithme hongrois 48
3.2 Mise en œuvre pratique 49
3.2.1 Approximation aux voisins proches 49
3.2.2 Réduction de variance 50
3.2.3 Effets de taille finie 51
3.3 Détermination des états excités 52
3.3.1 Algorithme hongrois et ré-optimisation 52
3.3.2 Détails de l'algorithme 53

4 Verres de spins 57
4.1 Controverses sur les verres de spins 57
4.1.1 Vue d'ensemble 57
4.1.2 Aspects expérimentaux 58
4.1.3 Aspects numériques 59
4.2 À la recherche de la ligne AT 61
4.2.1 Ce que je mesure 61
4.2.2 Le modèle à connectivité fixe 64
4.2.3 Le modèle EA à 2, 3 et 4 dimensions 66
4.3 Nature des interfaces 71
4.3.1 Par changement des conditions aux bords 71
4.3.2 Recherche directe 72
4.3.3 Mesure de la topologie 74

5 Optimisation par renormalisation 77
5.1 Méthodes heuristiques 77
5.1.1 Méthode glouton 77
5.1.2 Recherche locale 78
5.1.3 Recuit simulé 78
5.1.4 Algorithmes génétiques 79

5.2 Une nouvelle approche : l'ARG 79
5.3 Application au voyageur de commerce 80
5.3.1 Processus de renormalisation 80
5.3.2 Insertion dans un algorithme génétique 81
5.3.3 Résultats 83
5.4 Application aux verres de spins 84
5.4.1 Implémentation 84
5.4.2 Résultats 86
5.4.3 Détermination de grandes excitations 87
5.5 Forces et faiblesses de l'ARG 88
5.5.1 Forces 88
5.5.2 Faiblesses 88
5.5.3 Perspectives 89

6 Conclusions et perspectives 91
6.1 Bilan de la thèse 91
6.1.1 Des techniques numériques prometteuses 91
6.1.2 Une situation théorique ambiguë 91
6.2 Perspectives d'avenir 93
6.2.1 Développement des techniques numériques 93
6.2.2 Une controverse à suivre 93

A Implémentation de l'ARG 95
A.1 Partie indépendante du problème 95
A.1.1 Algorithme génétique 95
A.1.2 Autres procédures 98
A.2 La renormalisation 99
A.3 La recherche locale 100
A.4 Améliorations possibles 100

B Articles 103

Bibliographie 129

Index 137

Résumé 139

Chapitre 1

Introduction

1.1 Généralités

1.1.1 La vie est dure : désordre et frustration

À chaque instant de la vie, chacun d'entre nous doit résoudre des problèmes et prendre des décisions. Petites décisions que ce soit pour savoir ce que l'on mange ce soir ou comment l'on s'habille ce matin; ou grandes décisions s'il faut organiser une chaîne de production ou décider d'aller bombarder la Serbie. Dans tous les cas le problème est le même : il s'agit de faire au mieux vues les circonstances, et les circonstances sont souvent difficiles. En effet, la plupart du temps les différents éléments d'un problème nous poussent dans des directions opposées et aucune solution n'est vraiment satisfaisante. On doit alors se résoudre à choisir la moins mauvaise, mais la question n'est pas résolue pour autant car encore faut-il savoir laquelle est la moins mauvaise. Car nous sommes écrasés par la quantité de paramètres à prendre en compte, par le dédale des contraintes et des incertitudes.

Finalement tous nos problèmes se résument en un seul mot : la *complexité*. Malheureusement nommer un concept ne suffit pas à résoudre les problèmes...

Pour attaquer ce genre de questions, il faut savoir démarrer humblement et commencer par des choses simples. Je vais m'intéresser à deux concepts qui, pris ensemble, conduisent à un niveau certain de complexité (et je ne prétends nullement faire le tour de la question ainsi). Ces deux concepts que j'ai mis en scène dans le premier paragraphe sont les suivants :

- Premièrement, la quantité des paramètres, leurs variétés, leurs liens éventuels et leurs incertitudes, bref en un mot : le *désordre*.

- Deuxièmement le fait que ces paramètres, ces contraintes, tirent dans des directions opposées nécessitant de faire des compromis et engendrant ainsi de la *frustration* (impossibilité de satisfaire toutes les contraintes).

Il existe de très nombreuses situations où ces deux éléments sont présents. Voyons quelques exemples de problèmes dans différentes disciplines scientifiques.

En informatique

L'informatique est très souvent utilisée dans l'aide à la décision car l'ordinateur est particulièrement bien adapté pour prendre en compte un très grand nombre de données. Il n'est alors pas étonnant que l'informatique se pose des problèmes complexes.

Un premier exemple associant désordre et frustration et sur lequel je vais revenir tout au long de cette thèse est la recherche opérationnelle et plus particulièrement l'optimisation combinatoire où il s'agit d'optimiser sous contrainte une fonction donnée sur un ensemble discret (voir section 1.3).

En biologie

La biologie est le royaume de la complexité par excellence. Le premier exemple de système biologique complexe qui vienne à l'esprit est le cerveau. Les réseaux de neurones justement présentent désordre et frustration car chaque neurone est relié de manière (relativement) aléatoire à un grand nombre d'autres neurones qui envoient des stimuli souvent contradictoires.

Un autre exemple de système biologique complexe est le système immunitaire où la production des différents anticorps est régulée par un système très compliqué de rétroactions positives et négatives. Dans le même genre d'idée, on peut aussi citer les mécanismes d'expression ou de suppression des gènes encodés dans l'ADN.

Et bien d'autres

On peut finalement citer comme dans l'introduction de [MPV87] les drames shakespeariens où parmi l'ensemble des personnages qui s'aiment et se détestent tout le monde est déchiré de voir ceux qu'ils aiment se détester entre eux (une version française serait "Le Cid" (Corneille)).

Quelques modèles en physique statistique

L'étude de tous ces problèmes est assez récente et les résultats généraux assez rares. La physique statistique s'intéresse également à ce genre de problèmes depuis une vingtaine d'années. Elle a su développer des méthodes et des concepts qui ont fait avancer les choses de manière significative. Voyons quelques uns des modèles les plus étudiés (je me limiterai aux systèmes classiques, une difficulté à la fois !)

Les verres de spins C'est l'archétype du système désordonné et frustré en physique statistique et notamment le modèle d'Edwards et Anderson [EA75] : sur un réseau cubique (pour fixer les idées) on place des spins d'Ising $S_i = \pm 1$ (pour simplifier) qui interagissent de manière ferro ou antiferro-magnétique entre plus proches voisins et l'hamiltonien est :

$$H[S_i] = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j \tag{1.1}$$

où la somme porte sur les paires de plus proches voisins du réseaux et les J_{ij} sont des variables aléatoires fixées une fois pour toutes (c'est ce qu'on appelle du *désordre gelé*). Je ne m'étendrai pas davantage pour le moment sur ce modèle que j'étudie longuement dans la suite (voir section 1.2).

Le modèle d'Ising à champ aléatoire Le modèle d'Ising à champ aléatoire (*random field Ising model*) est formellement semblable aux verres de spins, c'est un modèle d'Ising ($S_i = \pm 1$) ferro-magnétique classique auquel on ajoute un champ aléatoire (encore du désordre gelé), ce qui correspond à l'hamiltonien suivant

$$H[S_i] = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \tag{1.2}$$

où $J > 0$ et les h_i sont des champs aléatoires fixés de signe quelconque. Malgré des similitudes avec les verres de spins, ce modèle possède des propriétés assez différentes, qui s'expliquent sans doute par la simplicité de son paramètre d'ordre (l'aimantation) comparé aux verres de spins. Pour plus de détail je conseille les revues sur le sujet dans [You98].

Les hétéro-polymères et notamment les bio-polymères comme l'ADN ou les protéines. Dans ces dernières par exemple les monomères hydrophobes cherchent à se mettre à l'intérieur lors du repliement alors que les monomères hydrophiles ont tendances à se placer à la surface. Les modèles les plus courants sont décrits par un hamiltonien constitué de deux termes, le premier décrit la contrainte de chaîne (c'est-à-dire la séquence des monomères de la chaîne) et le second décrit les interactions entre les différents monomères. Le désordre gelé est ici dans la nature des différents monomères le long de la chaîne. On pourra également consulter la revue sur le sujet dans [You98].

Les verre de vortex C'est un modèle provenant de la supraconductivité (pour les supras de type II). En champ magnétique, il apparaît des vortex magnétiques contenant un demi quantum de flux. Ces vortex se repoussent et ont ainsi tendance à s'organiser en réseau (le réseau d'Abrikosov). En présence d'impuretés, les vortex sont attirés par les impuretés ce qui crée désordre et frustration.

1.1.2 Éléments de physique statistique

Avant d'aller plus loin, je rappelle rapidement quels sont les principaux concepts de la physique statistique et les méthodes utilisées pour résoudre les questions qu'elle se pose.

Les bases

En physique statistique, un système est décrit par sa fonction énergie ou hamiltonien $H(\mathcal{C})$ qui est une fonction de la configuration microscopique $\mathcal{C}$ du système. Cette configuration est définie par la position des particules, leur vitesse, leur état... Dans la suite, je suppose que l'ensemble des configurations est un ensemble discret. L'hypothèse de base est que si l'on attend suffisamment longtemps on atteint l'état d'*équilibre* qui est un état macroscopique stationnaire stable, décrit par la probabilité $P(\mathcal{C})$ qu'a le système d'être dans une configuration donnée. Cette probabilité est déterminée par la deuxième hypothèse de base qui consiste à dire que cette distribution $P(\mathcal{C})$ maximise le "désordre", c'est-à-dire qu'elle maximise l'*entropie* définie par

$$S = -\sum_{\mathcal{C}} P(\mathcal{C}) \ln P(\mathcal{C}) \tag{1.3}$$

L'entropie est essentiellement le logarithme du nombre d'états accessibles au système. Très souvent on a des informations sur le système et en particulier on connaît son énergie, dans ce cas il faut maximiser S sous contrainte ce qui conduit à l'introduction d'un multiplicateur de Lagrange β et à la maximisation de

$$S - \beta U \tag{1.4}$$

où

$$U = \langle H \rangle = \sum_{\mathcal{C}} H(\mathcal{C}) P(\mathcal{C}) \tag{1.5}$$

est l'énergie interne (la moyenne thermique de H notée $\langle H \rangle$). Ceci est équivalent à la minimisation de l'énergie libre F définie par

$$F = U - TS \tag{1.6}$$

où $T = 1/\beta$ est la température, paramètre qu'on suppose habituellement connu. Un calcul aisé montre alors que

$$P(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(\mathcal{C})} \tag{1.7}$$

où Z, la *fonction de partition*, est définie par

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} e^{-\beta H(\mathcal{C})} \tag{1.8}$$

et on a la relation fondamentale suivante

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z. \tag{1.9}$$

On sait calculer toutes les fonctions thermodynamiques à partir de F et de ses dérivées. Par exemple

$$U = \frac{\partial(\beta F)}{\partial \beta} \tag{1.10}$$

et

$$S = \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta} \tag{1.11}$$

Dans la mesure où dans la nature les systèmes rencontrés sont très grands (le nombre de constituants est de l'ordre du nombre d'Avogadro $\mathcal{N} = 6.02\ 10^{23}$) et que cela facilite grandement les calculs, on se place toujours dans ce que l'on appelle la *limite thermodynamique*, c'est-à-dire la limite où la taille du système tend vers l'infini.

Transitions de phase

La notion de transition de phase est l'une des plus importante de la physique statistique. On parle de transition de phase quand une observable thermodynamique est discontinue ou diverge en fonction de paramètres extérieurs (comme la température, la pression, le champ magnétique...). Comme toute grandeur thermodynamique peut s'exprimer en fonction de l'énergie libre F, cela revient à dire que F n'est pas analytique en ce point. Ceci n'est possible qu'à la limite thermodynamique car en volume fini F est analytique en tout point (d'après les équations 1.9 et 1.8). On distingue différents types de transitions en fonction de l'ordre de la dérivée de F qui est singulière. Si c'est une dérivée première de F qui a une singularité on parlera de transition de phase du premier ordre, si c'est une dérivée seconde qui est singulière on parlera de transition de second ordre et ainsi de suite (on notera qu'il n'existe pas de transition d'ordre 0 car F est toujours continue).

Typiquement une transition de phase de premier ordre a une énergie interne discontinue et possède donc une chaleur latente; c'est ce qui se passe dans une transition liquide/gaz (sauf au point critique). Ce genre de transition est "brutale", à 0.01°C l'eau est liquide mais rien n'annonce qu'elle va geler si on refroidit (d'ailleurs en s'y prenant bien on peut réussir à abaisser la température sous 0°C sans qu'elle gèle, c'est la surfusion). Dans une transition de second ordre c'est par exemple la chaleur spécifique ou la susceptibilité magnétique qui sont singulières; c'est le cas pour la transition ferro-magnétique. Dans ce cas la transition est plus progressive : les quantités singulières croissent jusqu'à diverger à la transition.

Une transition de second ordre est décrite par un *paramètre d'ordre*, c'est une observable qui est identiquement nulle avant la transition et qui est différente de zéro après. Pour la transition ferro-magnétique l'aimantation est le paramètre d'ordre, elle est nulle pour une température supérieure à celle de Curie et non nulle en dessous. Une autre caractéristique essentielle d'une transition de deuxième ordre est la divergence de la longueur de corrélation (des fluctuations thermiques). Ainsi, contrairement à celles de premier ordre, les transitions de second ordre sont associées à des phénomènes collectifs à l'échelle du système tout entier.

Renormalisation, universalité

Un des concepts les plus intéressants en physique statistique est l'idée de *renormalisation*. La renormalisation consiste à intégrer localement les degrés de liberté. Cette opération donne naissance à un système possédant moins de degrés de liberté que l'on approxime par un système semblable au système d'origine mais avec une échelle différente (et donc des paramètres différents). En quelque sorte, on calcule des paramètres effectifs pour cette échelle. On obtient donc un *flot de renormalisation* dans l'espace des paramètres qui caractérise la façon dont changent ces paramètres en fonction de l'échelle. Comme une transition de phase de second ordre a une longueur de corrélation infinie, le système devrait alors être invariant d'échelle. On s'intéresse donc aux points fixes du flot de renormalisation qui correspondent aux transitions de phases du second ordre.

Ceci nous amène à la notion d'*universalité* car en intégrant les degrés de liberté locaux on perd la mémoire des détails microscopiques du système, c'est-à-dire que (si la renormalisation marche) deux systèmes suffisamment semblables se comporte de la même façon. Ainsi de nombreux systèmes sont dans la même *classe d'universalité* et pour les étudier on peut simplement s'intéresser à n'importe quel système se trouvant dans cette même classe. Typiquement la forme du réseau ou la nature exacte des interactions est sans effet alors que la dimension de l'espace et la nature des symétries présentes ont une influence. Un gros effort de la physique statistique porte sur l'étude et la classification de ces différentes classes d'universalité, en particulier on s'intéresse souvent aux *exposants critiques* qui caractérisent comment les grandeurs telles que la longueur de corrélation ou la chaleur spécifique divergent à la transition.

Brisure de symétrie, brisure d'ergodicité, état pur

Une autre notion importante est celle de *brisure de symétrie* : l'hamiltonien du système possède une certaine symétrie sans que l'état dans lequel se trouve le système ait lui même cette symétrie. Par exemple dans le cas du ferro-magnétisme l'hamiltonien est invariant par rotation et pourtant le système possède une aiman-

tation qui brise cette symétrie. Toutefois cette notion semble en contradiction avec ce que j'ai exposé précédemment car les équations 1.7 et 1.8 sont symétriques...

Le problème vient de la limite thermodynamique car tout ce qu'on peut faire en pratique c'est traiter un système avec une taille finie puis prendre la limite de grand volume après. Or dans un système de taille finie il n'y a ni transition de phase, ni brisure de symétrie, ces effets n'apparaissent qu'à la limite thermodynamique. Dans le cas du modèle d'Ising à basse température, le système peut avoir une aimantation soit positive, soit négative. Mais plus le système est grand plus le temps qu'il faut pour changer le signe de l'aimantation devient grand et à la limite le système est piégé d'un côté. Il y a *brisure d'ergodicité*, c'est-à-dire que l'état du système à l'équilibre dépend de la condition initiale.

Il y a deux façons de régler ce problème. Une approche plus physique qui consiste à dire que l'équilibre n'est pas tout à fait comme je l'ai expliqué précédemment mais plutôt qu'il faut se restreindre aux configurations accessibles en pratique par le système dans les équations 1.7 et 1.8. Ceci peut se faire par exemple en fixant des conditions aux limites particulières ou en ajoutant un champ qui sélectionne les états accessibles. Par exemple dans le modèle d'Ising on peut ajouter un champ magnétique infinitésimal qui va sélectionner les états qui ont une aimantation dans un certain sens. L'autre approche, plus mathématique, consiste à ne pas changer les définitions 1.7 et 1.8, mais ceci pose quelques difficultés pour passer à la limite thermodynamique. On a alors une distribution d'équilibre qui est une combinaison linéaire de différents *états purs*. Ces états purs représentent les différentes états d'équilibre et sont caractérisés par le fait que les corrélations disparaissent à grande distance (propriété de "clustering" des foncions de corrélation). Dans le modèle d'Ising à basse température, on a deux états purs, qui correspondent aux deux aimantations possibles.

Il est important de savoir quel point de vue on utilise dans la mesure où les résultats peuvent être différents. Par exemple, considérons l'aimantation moyenne du modèle d'Ising à basse température. Cette aimantation va être non nulle dans la première approche alors que par symétrie elle est nulle dans la deuxième. Cela signifie que l'observable n'est peut être pas tout à fait adéquate. En effet si on considère l'aimantation carrée moyenne, les deux résultats sont identiques. La première approche peut sembler plus simple et plus sure mais elle nécessite de connaître à priori la nature des phases en présence.

Approximation de champ moyen, dimensions critiques

L'approximation de champ moyen est l'une des premières choses que l'on peut faire pour étudier un système. Elle est souvent facile à mettre en place et permet souvent d'obtenir des résultats pertinents. L'approximation de champ moyen, comme son nom l'indique, consiste à approximer une certaine grandeur par sa va-

leur moyenne (thermique) et donc à négliger ses fluctuations ou ses corrélations. Prenons l'exemple du modèle d'Ising où chaque spin est couplé à plusieurs autres spins. Au lieu d'essayer de prendre en compte l'influence de tous ces spins, on va simplement considérer leur aimantation moyenne. On en déduit ensuite une équation auto-cohérente pour cette valeur moyenne.

On dit souvent du champ moyen que c'est une approximation de grande dimension car en grande dimension chaque degré de liberté est couplé à beaucoup d'autres ce qui fait que leurs fluctuations se compensent d'autant mieux (à condition bien sûr que les corrélations ne soient pas trop importantes). D'autre part l'approximation de champ moyen peut souvent être vue comme le premier terme d'un développement suivant une méthode du col et peut donc être la base d'un développement perturbatif.

En règle générale, les résultats du champ moyen ont le comportement suivant. Au dessus d'une certaine dimension dite *dimension critique supérieure*, le champ moyen donne qualitativement le diagramme de phase et exactement les exposants critiques. En dessous de cette dimension, les exposants critiques donnés par le champ moyen ne sont plus corrects mais le diagramme de phase lui est toujours bon. Finalement en dessous d'une autre dimension dite *dimension critique inférieure* même le diagramme de phase n'est plus correct. Pour le modèle d'Ising, par exemple, ces dimensions sont respectivement 4 et 2.

Dans la suite, je parle souvent, de *modèle champ moyen*. C'est un modèle pour lequel l'approximation de champ moyen est exacte. Quand on a un modèle trop compliqué à étudier au premier abord, on lui associe un modèle champ moyen que l'on va résoudre à sa place. Le choix est un peu arbitraire et rien n'assure que les résultats du modèle champ moyen s'appliquent au modèle de départ. Un modèle champ moyen est parfois appelé modèle de dimension infinie. Pour ma part, je crois plutôt qu'il faudrait parler de modèle sans géométrie car dans certains cas ces modèles approximent un système avec une dimension bien déterminée. C'est le cas des modèles de champ moyen que j'utilise dans cette thèse : le modèle à liens aléatoires pour le couplage minimal et le modèle à connectivité finie pour le verre de spins.

1.1.3 Les effets du désordre

Désordre et limite thermodynamique

En présence de désordre, les choses sont un peu plus compliquées, car alors l'hamiltonien dépend non seulement de la configuration mais aussi du désordre que je représente globalement par $\mathcal{J}$ (ainsi $H = H(\mathcal{C}, \mathcal{J})$). Il s'agit ici de désordre gelé, c'est-à-dire que le désordre est fixé et ne dépend pas de l'état du système. Toutes les quantités définies précédemment dépendent à leur tour du désordre

($U_{\mathcal{J}}$, $S_{\mathcal{J}}$, $F_{\mathcal{J}}\ldots$) ce qui pose deux problèmes. Premièrement, il faudrait connaître entièrement le désordre pour pouvoir écrire quoique ce soit et être capable de calculer avec cette quantité phénoménale de paramètres. Deuxièmement, on aimerait pouvoir dire des choses génériques, qui soient indépendantes de la réalisation particulière du désordre.

Ce qui nous intéresse donc ce sont les quantités "indépendantes" du désordre (dans la limite de grand volume). On dit d'une telle quantité quelle est *auto-moyennante* (*self-averaging*) ce qui signifie que les fluctuations provenant du désordre tendent vers zéro (relativement) dans la limite thermodynamique. Pour pouvoir parler de fluctuations il faut une mesure statistique pour le désordre. Dans ce qui suit on a donc un désordre décrit par une probabilité $P(\mathcal{J})$. D'un point de vue plus mathématique, on peut distinguer deux façons d'être auto-moyennant. La première, la plus faible, consiste à dire qu'une quantité A est auto-moyennante si son écart type relatif tend vers zéro (mais on peut imaginer des situations pathologiques où $\overline{A}$ (la moyenne de A) n'a pas de limite thermodynamique). Alors que la deuxième, plus forte, nécessite que A converge vers une valeur non aléatoire. À priori, c'est cette deuxième propriété qui nous intéresse, mais la première est souvent beaucoup plus facile à démontrer.

Supposons que l'énergie libre soit auto-moyennante, $F_{\mathcal{J}}/N$ tend alors vers une valeur indépendante de $\mathcal{J}$ à la limite thermodynamique. Le plus simple pour obtenir cette valeur est de calculer (la barre représente la moyenne sur le désordre)

$$\overline{F_{\mathcal{J}}} = \sum_{\mathcal{J}} P(\mathcal{J}) F_{\mathcal{J}} \tag{1.12}$$

Il existe un argument [Bro59] pour dire que les quantités extensives doivent être auto-moyennantes : on considère qu'un système macroscopique peut être découpé en une infinité de sous-systèmes macroscopiques. Pour peu que les interactions soient à courte portée, les effets de bords deviennent négligeables et la quantité extensive en question est essentiellement la somme des contributions des différents sous-systèmes et le théorème de la limite centrale permet de conclure.

Il faut bien remarquer que Z n'est en général pas auto-moyennant et donc $\ln \overline{Z_{\mathcal{J}}} \neq \overline{\ln Z_{\mathcal{J}}}$. La quantité d'intérêt est $\overline{F_{\mathcal{J}}}$ et c'est donc $\overline{\ln Z_{\mathcal{J}}}$ qu'il faut calculer. On appelle

$$\overline{Z_{\mathcal{J}}} = \sum_{\mathcal{C},\mathcal{J}} P(\mathcal{J}) e^{-\beta H(\mathcal{C},\mathcal{J})} \tag{1.13}$$

la fonction de partition *recuite* car elle correspond à un système où le désordre $\mathcal{J}$ n'est plus gelé, mais subit lui aussi l'agitation thermique ($\mathcal{J}$ et $\mathcal{C}$ ont des rôles équivalents).

Méthode des répliques

Calculer $\overline{F_{\mathcal{J}}}$ est un problème délicat car il faut calculer $\overline{\ln Z_{\mathcal{J}}}$ qui est une moyenne de logarithmes. Une méthode consiste à utiliser l'identité suivante

$$\ln x = \lim_{n \to 0} \frac{x^n - 1}{n} \tag{1.14}$$

et donc

$$\overline{\ln Z_{\mathcal{J}}} = \lim_{n \to 0} \frac{\overline{Z_{\mathcal{J}}^n} - 1}{n}. \tag{1.15}$$

Or pour n entier $Z_{\mathcal{J}}^n$ est la fonction de partition d'un système composé de n répliques identiques et indépendantes du système (d'où le nom de la méthode). En prenant la moyenne $\overline{Z_{\mathcal{J}}^n}$, les n répliques deviennent couplées mais ne sont plus désordonnées (prendre la moyenne correspond à recuire le désordre). Tout le problème consiste alors à prendre la limite $n \to 0$. L'idée est de faire un prolongement analytique de la fonction $\overline{Z_{\mathcal{J}}^n}$ que l'on ne connaît qu'aux valeurs entières de n. Cette procédure est loin d'être simple et nécessite parfois de briser la symétrie par permutation des différentes répliques, j'y reviendrai...

Autres difficultés liées au désordre

Outre les difficultés dont je viens de parler, on peut également évoquer des problèmes d'ordre plus fondamental. Le premier problème est encore celui de la limite thermodynamique. Il n'est en fait pas encore clair que celle-ci puisse être définie proprement : certes l'énergie libre est à priori auto-moyennante, mais il n'est pas clair que ses dérivées le soient aussi. D'autre part, on peut s'intéresser aux fonctions de corrélation ou à d'autres observables non thermodynamiques et il faut alors avoir accès à la distribution d'équilibre dont l'existence n'est pas évidente, pas plus que celle des d'états purs.

D'autre part, la notion d'universalité a fait ses preuves pour les modèles sans désordre, mais il n'est pas clair qu'elle soit encore valable dans le cas des systèmes désordonnés. Si ça ne devait pas être le cas, cela remettrait en cause beaucoup de choses : l'existence des classes d'universalité, l'intérêt des exposants critiques et les méthodes de renormalisation.

1.1.4 Plan de la thèse

Dans la suite de cette introduction je présente les deux aspects sur lesquels sont centrés ma thèse : les verres de spins (section 1.2) et l'optimisation combinatoire (section 1.3). Le lien entre les deux n'est pas immédiat et nécessite d'abord une petite introduction à ces deux domaines. J'espère que le lecteur me pardonnera de ne pas expliciter ce lien tout de suite et saura patienter jusqu'à la section 1.3.3. Pour

finir l'introduction (section 1.4), je présente les enjeux et les questions ouvertes, auxquels j'essaye de répondre dans le corps de cette thèse, ainsi que les méthodes que j'emploie.

Suivent ensuite quatre chapitres. Les deux premiers concernent le problème du couplage minimal qui est un problème d'optimisation combinatoire. Ce problème peut être vu comme une sorte de modèle jouet pour les verres de spins. Dans le chapitre 2 je commence par présenter le modèle et son lien avec les verres de spins. Je présente ensuite le modèle champ moyen et les résultats connus. Et je termine par les résultats numériques que j'ai obtenus. Dans le chapitre 3, je présente l'ensemble des méthodes numériques que j'ai utilisées et développées pour le couplage minimal : le calcul du fondamental, les détails pratiques et le calcul des excitations. Les deux chapitres suivants concernent les verres de spins : le chapitre 4 est consacré à l'ensemble des résultats que j'ai obtenus alors que le chapitre 5 est consacré à la nouvelle méthode numérique que j'ai développée pour le calcul des états fondamentaux : l'algorithme de renormalisation génétique. Je montre son fonctionnement et sa généralité en l'appliquant non seulement aux verres de spins mais aussi au voyageur de commerce.

Finalement je conclus au chapitre 6. Mes articles [HBM98, HM98, HM99b, HM99a] sont inclus en annexe ainsi que les détails de l'algorithme du chapitre 5.

1.2 Verres de spins

Passons maintenant à une introduction du sujet essentiel de ma thèse, les verres de spins.

1.2.1 Introduction aux verres de spins

Je ne vais pas faire ici un historique exhaustif des verres de spins ni une revue complète des résultats expérimentaux, théoriques ou numériques. Pour cela je conseille au lecteur de se reporter à différentes revues sur le sujet. En particulier on pourra regarder [BY86b, MPV87, FH91, You98].

Expérimentalement les premiers verres de spins furent des alliages métalliques tels que CuMn, AuFe ou AgMn où des impuretés magnétiques (Mn et Fe dans les exemples précédents) sont diluées avec une concentration de l'ordre du pourcent dans des matériaux non magnétiques (ici Cu, Ag ou Au). On a remarqué dans les années 60 que ces matériaux avaient des propriétés particulières au nombre desquelles on peut citer un terme linéaire dans la chaleur spécifique à basse température, une aimantation rémanente dépendante du temps et un pic dans la susceptibilité magnétique.

Un premier modèle a été présenté basé sur des interactions de type RKKY (Ruderman, Kittel, Kasuya et Yoshida). Ces interactions entre les moments magnétiques des impuretés sont dues à la polarisation des électrons de conduction et sont de la forme

$$J_{ij} = \frac{V_0 \cos(2k_F r_{ij} + \phi)}{r_{ij}^3} \tag{1.16}$$

où V_0 et ϕ sont des constantes, k_F est le vecteur d'onde de Fermi et r_{ij} est la distance entre les deux impuretés concernées. Les impuretés étant distribuées au hasard dans l'échantillon, il est clair que l'on a désordre et frustration puisque les interactions peuvent être aussi bien ferro qu'antiferro-magnétiques (voir plus loin). Ce genre de modèle est très difficile à étudier. Il a fallu attendre 1975 pour que les choses fassent un grand pas en avant avec la théorie d'Edwards et Anderson (EA) [EA75]. Dans le modèle EA, le désordre de position a été remplacé par un désordre dans les interactions. Je me limiterai au cas de spins d'Ising (qui valent ± 1). Le modèle consiste en un réseau cubique où sur chaque nœud i se trouve un spin $S_i = \pm 1$ (on pourra penser à un spin comme une flèche pointant vers le haut (cas $+1$) ou vers le bas (cas -1)). L'hamiltonien s'écrit comme suit

$$H[S_i] = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j - B \sum_i S_i \tag{1.17}$$

où la somme porte sur les plus proches voisins, B est le champ magnétique extérieur et les J_{ij} sont des variables aléatoires gelées indépendantes distribuées suivant la loi gaussienne

$$P(J_{ij}) = \frac{e^{-J_{ij}^2/2}}{\sqrt{2\pi}} \tag{1.18}$$

Ainsi $\overline{J_{ij}} = 0$ et $\overline{J_{ij}^2} = 1$. Dans toute la suite je note N le nombre de spins et L la taille du réseau; en notant d la dimension de l'espace on a alors $N = L^d$.

Bien sûr, il n'est pas clair que ce modèle ait les mêmes propriétés que le précédent. Mais si on accepte l'argument d'universalité, les seules caractéristiques importantes sont le désordre et la frustration et ce modèle est alors beaucoup plus qu'une simple représentation d'un alliage et peut être pertinent pour de nombreux autres problèmes.

Maintenant que le modèle d'intérêt est fixé on peut revenir un peu sur la nature de la frustration. Il y a frustration quand un spin subit des influences contradictoires de ses différents voisins. Ceci va se produire quand on considère une boucle de spins $S_i, S_j, S_k, S_l \ldots$ et que les interactions vérifient

$$J_{ij} J_{jk} J_{kl} \ldots < 0 \tag{1.19}$$

car alors il n'y a pas de valeur des spins telle que chaque interaction soit satisfaite (une interaction J_{ij} est dite satisfaite si $J_{ij} S_i S_j > 0$). On peut le constater sur la

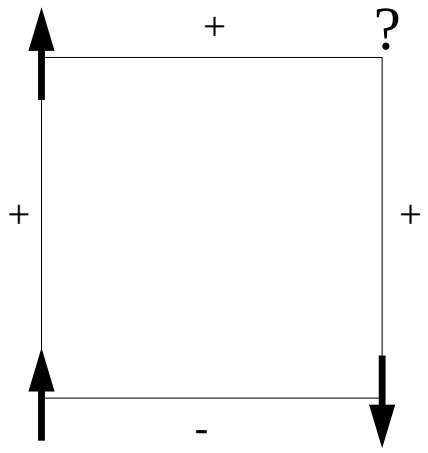

FIG. 1.1 – *Une plaquette frustrée*

figure 1.1. On peut ainsi parler de la frustration des plaquettes (i.e. des mailles) élémentaires du réseau. Dans le cas où les $J_{ij} = \pm 1$, la présence de la frustration induit une forte dégénérescence du fondamental.

1.2.2 Phase verre de spins

La propriété fondamentale des verres de spins est la présence d'une nouvelle phase, *la phase verre de spins*. Cette phase apparaît à basse température (je me limite pour l'instant au cas $B = 0$) en dessous d'une certaine température critique T_c et est caractérisée par plusieurs aspects.

Aspects dynamiques

Les aspects dynamiques sont ceux qui dominent expérimentalement. En effet à basse température une des caractéristiques des verres de spins est de ne jamais atteindre l'état d'équilibre : ils *vieillissent*, c'est-à-dire qu'ils évoluent indéfiniment. Ceci se traduit en particulier par des effets de mémoire : l'état du système ne dépend pas seulement des conditions présentes mais également de toute son histoire. De plus certaines propriétés d'équilibre ne sont pas satisfaites comme par exemple les relations de fluctuation/dissipation.

Aspects statiques

Il peut sembler académique de s'intéresser aux propriétés d'équilibre d'un système qui n'est jamais à l'équilibre. Cependant il faut bien comprendre que même

si les verres de spins ne sont pas à l'équilibre, ils ne cessent de s'en approcher; d'autre part il est intéressant de connaître la limite de cette évolution dans le temps. En effet connaître la nature de la phase verre de spins "statique" peut aider à comprendre les propriétés dynamiques.

La première question que l'on peut se poser concerne la présence de la phase verre de spins elle même. En effet expérimentalement, on n'a, à priori, accès qu'aux effets dynamiques et on ne peut donc affirmer que la présence d'une transition dynamique. Cependant, les théories dont je parle plus loin, s'accordent sur la présence d'une phase verre de spins à partir de la dimension 3 (et son absence en dimension 1 et 2). Qu'en est il des simulations numériques ? Le problème des simulations de type Monte Carlo tiennent en deux points : premièrement, elles rencontrent les mêmes effets de vieillissement que les expériences, et d'autre part, les effets de taille finie sont très importants et rendent l'extrapolation vers la limite thermodynamique très difficile. Néanmoins tout le monde s'accorde sur la présence de cette transition; pour ma part je trouve [PC99] particulièrement convainquant sur ce point.

Une fois admise l'existence de la phase verre de spins, il faut la caractériser par un paramètre d'ordre. À basse température un ordre apparaît et $m_i = \langle S_i \rangle \neq 0$. Une analogie avec le modèle d'Ising nous pousse à considérer l'aimantation

$$M = \frac{1}{N} \sum_i m_i, \tag{1.20}$$

mais ici il est clair que le désordre des interactions ne permet pas l'apparition d'un ordre de type ferro-magnétique. Ainsi le signe des m_i est quelconque et à toute température (en champ nul)

$$M = 0. \tag{1.21}$$

C'est pourquoi a été introduit le paramètre d'ordre d'Edwards et Anderson [EA75]

$$q_{EA} = \frac{1}{N} \sum_i m_i^2 \tag{1.22}$$

qui dépend à priori du désordre, mais qui se trouve être auto-moyennant. On peut avoir une image plus physique de ce paramètre d'ordre en terme de susceptibilité magnétique. En effet définissons la susceptibilité locale

$$\chi_{ij} = \frac{\partial m_i}{\partial h_j} \tag{1.23}$$

où h_j est un champ magnétique appliqué au site j. À l'équilibre, on a alors

$$\chi_{ij} = \beta(\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle) \tag{1.24}$$

et la susceptibilité magnétique s'écrit

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B} = \frac{1}{N}\sum_{i,j}\chi_{ij} \tag{1.25}$$

soit, en moyennant sur le désordre

$$\overline{\chi} = \frac{1}{N}\sum_{i}\overline{\chi_{ii}} = \beta(1 - q_{EA}) \tag{1.26}$$

On définit aussi habituellement la susceptibilité "verre de spins"

$$\chi_{SG} = \frac{\beta^2}{N}\sum_{i,j}\langle S_i S_j\rangle^2 \tag{1.27}$$

qui au dessus de T_c est égale à $\sum_{i,j}\chi_{ij}^2/N$ et diverge à la transition (car la longueur de corrélation diverge).

Une question fondamentale est de savoir quelle est la symétrie qui est brisée dans la phase verre de spins. Alors que dans le modèle d'Ising c'est simplement la symétrie par retournement de tous les spins qui est brisée, dans le cas des verres de spins la situation est bien plus complexe. Cette question est justement la pierre d'achoppement des deux théories que je vais maintenant présenter.

1.2.3 Théorie de champ moyen

Point de départ

La théorie de champ moyen est basée sur un modèle champ moyen, le modèle de Sherrington et Kirkpatrick (SK) [SK75]. Ce modèle diffère du modèle EA par le fait que l'espace n'a plus de géométrie euclidienne. Chaque spin interagit avec tous les autres indifféremment, plus précisément l'hamiltonien s'écrit

$$H[S_i] = \frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}S_iS_j - B\sum_i S_i \tag{1.28}$$

Afin que l´énergie soit extensive la distribution des interactions est fixée comme suit

$$P(J_{ij}) = \frac{e^{-J_{ij}^2/2N}}{\sqrt{2N\pi}} \tag{1.29}$$

Ainsi $\overline{J_{ij}} = 0$ et $\overline{J_{ij}^2} = 1/N$. L'intérêt du modèle SK comme approximation du modèle EA est assez controversé dans la mesure où dans le modèle SK chaque spin est couplé à un nombre macroscopique d'autres spins. Son intérêt essentiel à mes yeux est surtout le fait qu'il soit soluble. En fait il existe d'autres modèles

de champ moyen, en particulier on peut considérer les modèles de verres de spins dilués tels que le modèle de Viana et Bray (VB) [VB85] qui est également sans géométrie mais où chaque spin à une probabilité p/N d'être couplé à un autre spin donné. Ainsi en moyenne chaque spin est couplé à p autres spins. Dans le chapitre 4 je considère le modèle à connectivité fixe qui est équivalent au modèle VB à l'exception du fait que chaque spin est exactement couplé à p autres spins. Malheureusement, la théorie de champ moyen n'a pas encore conduit à la solution de tels verres de spins dilués.

C'est Parisi [Par79b, Par79a, Par80c, Par80b, Par80a, Par83] qui a réussi le premier à résoudre le modèle SK; je ne vais pas présenter ici les calculs mais simplement donner quelques idées (pour les détails se référer aux revues déjà citées). Le principe de base est d'utiliser la méthode des répliques présentée plus haut. On arrive alors relativement facilement à l'équation suivante

$$\overline{Z^n} = \int \prod_{a<b} \left(\mathrm{d}Q_{ab} \sqrt{\frac{N\beta^2}{2\pi}} \right) e^{-\beta N n f[Q]} \tag{1.30}$$

avec

$$f[Q] = -\frac{\beta}{4} + \frac{\beta}{2n} \sum_{a<b} Q_{ab}^2 - \frac{1}{\beta n} \ln \sum_{\{S_a\}} \exp \left(\beta^2 \sum_{a<b} Q_{ab} S_a S_b + \beta h \sum_a S_a \right) \tag{1.31}$$

et $1 \leq a, b \leq n$ sont les indices des répliques. L'idée est alors d'utiliser la méthode du col ce qui donne l'énergie libre spécifique du système sous la forme

$$f = \lim_{n \to 0} -\frac{\ln(\overline{Z^n})}{\beta N n} = \lim_{n \to 0} \min_Q f[Q] \tag{1.32}$$

Brisure de la symétrie des répliques

Reste à trouver le minimum de $f[Q]$. Malheureusement il est impossible de déterminer ce minimum par des techniques standards. Il est nécessaire de faire une hypothèse sur la forme de la matrice Q. Puisque toutes les répliques sont équivalentes il serait naturel de chercher une solution symétrique dans les répliques $Q_{ab} = q$. Mais il se trouve que ce n'est la bonne solution que si la température est suffisamment élevée ou le champ magnétique suffisamment fort. En effet il existe une ligne découverte par de Almeida et Thouless (AT) [dAT78] en dessous de laquelle (dans un diagramme en T et B) la solution symétrique est instable (elle ne correspond pas à un minimum de $f[Q]$) et c'est précisément à cet endroit qu'a lieu la transition et on a une phase verre de spins partout en dessous de cette ligne (voir figure 1.2).

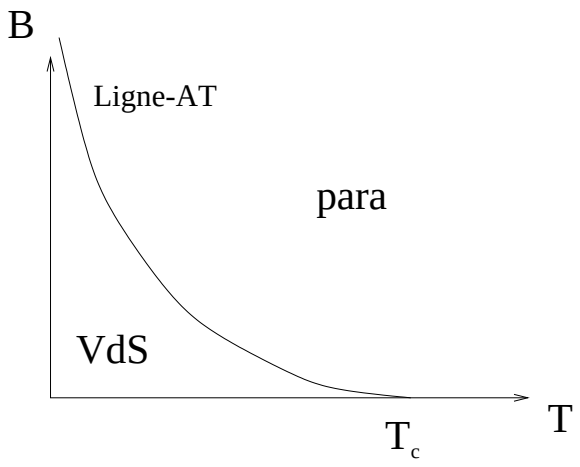

FIG. 1.2 – *Diagramme des phases du modèle SK*

Je ne vais pas détailler la façon dont on brise la symétrie des répliques, ce qu'il faut savoir c'est qu'elle se caractérise par un paramètre d'ordre qui est une fonction définie par

$$P(q) = \lim_{n\to 0} \frac{2}{n(n-1)} \sum_{a<b} \delta(Q_{ab} - q) \tag{1.33}$$

L'interprétation physique de ce paramètre d'ordre nécessite d'introduire le concept de *recouvrement*. Si on considère deux répliques (réelles cette fois) du système, on définit leur recouvrement (en notant par 1 et 2 les deux répliques)

$$q = \frac{1}{N} \sum_i S_i^1 S_i^2 \tag{1.34}$$

$P(q)$ peut alors s'interpréter comme la probabilité de recouvrement entre deux répliques du système indépendantes et à l'équilibre. Plus précisément, si on définit $P_{\mathcal{J}}(q)$ comme étant cette probabilité (dépendante du désordre), alors $P(q) = \overline{P_{\mathcal{J}}(q)}$.

On peut alors réécrire la susceptibilité magnétique comme

$$\overline{\chi} = \beta \int P(q)(1-q)\mathrm{d}q \tag{1.35}$$

et la susceptibilité verre de spins

$$\overline{\chi_{SG}} = N\beta^2 \int P(q)q^2 \mathrm{d}q. \tag{1.36}$$

En pratique on s'intéresse plutôt à la susceptibilité de recouvrement

$$\chi_q = N(\overline{q^2} - \overline{q}^2) \tag{1.37}$$

qui est identique à χ_{SG} à un facteur β^2 près au dessus de la transition.

Multiplicité des états purs, ultramétricité

La principale prédiction du champ moyen est que dans la phase verre de spins il n'y a pas seulement deux états purs comme dans le modèle d'Ising. En effet dans le modèle d'Ising à basse température, il y a deux états purs, un avec une aimantation positive et l'autre avec une aimantation négative, ces deux états se déduisent l'un de l'autre par la symétrie du problème et on peut sélectionner chacun de ces deux états en appliquant un champ magnétique infinitésimal dans la bonne direction. Dans le modèle SK, il y a une infinité d'états purs qui ne se déduisent les uns des autres par aucune symétrie.

De plus ces états sont organisés suivant une structure très particulière dite *ultramétrique*. C'est-à-dire que si l'on considère trois répliques indépendantes à l'équilibre et qu'on appelle q_1, q_2 et q_3 leurs recouvrements dans l'ordre croissant alors

$$q_1 = q_2 \leq q_3. \tag{1.38}$$

Cette structure peut s'expliquer en considérant que les états sont disposés suivant une structure en arbre. On peut se le représenter de la façon suivante, à haute température il n'y a qu'un seul état pur (l'état para-magnétique) puis à la température critique cet état se décompose en plusieurs états qui eux même à une température plus basse se décomposent à leur tour et ainsi de suite. On a alors un continuum de transitions de phase en dessous de la température critique.

1.2.4 Théorie des gouttelettes

La théories des gouttelettes (*droplets*) ou de "scaling" a été développée par McMillan [McM85], Bray et Moore [BM84, BM86] d'une part et Fisher, Huse et Sompolinsky [FS85, FH86, FH88] d'autre part. Cette théorie est basée sur des arguments de loi d'échelle et ne s'intéresse donc qu'aux verres de spins en dimension finie.

Les hypothèses de bases sont les suivantes : premièrement, il n'y a qu'un état pur (deux si on compte son symétrique). Bien sûr, cet état a une densité d'aimantation nulle et ne ressemble pas à celui du modèle d'Ising. Le rôle de l'état ordonné du modèle d'Ising est ici joué par le fondamental du système (qui est donc supposé unique à la symétrie près). La deuxième hypothèse porte sur la notion de gouttelette : une gouttelette est définie comme étant un domaine connexe de spins dont l'énergie de retournement est minimale (il n'y en a pas d'énergie plus faible, à l'endroit et de la taille que l'on considère). On suppose la loi d'échelle suivante : une gouttelette de taille L a une énergie typique L^θ ou θ est un exposant ne dépendant que de la nature du système.

Le signe de θ est alors le facteur déterminant pour avoir une phase verre de spins. Si $\theta < 0$ il existe des excitations de toute taille de très faible énergie et le

système se "désordonne" (il est para-magnétique) et il n'y a donc pas de phase verre de spins, c'est le cas en dimension $d = 2$ où la valeur estimée est $\theta \approx -0.3$. En revanche si $\theta > 0$ le système s'ordonne et la phase verre de spin existe, c'est le cas en $d = 3$ où $\theta \approx 0.2$. Cette théorie implique de plus l'absence d'une phase verre de spins dès que le champ magnétique est non nul.

1.3 Problèmes combinatoires

Je vais maintenant présenter le deuxième aspect de ma thèse qui provient directement de l'informatique. Son lien avec les verres de spins sera éclairci à la fin de cette section.

1.3.1 Théorie de la complexité

En informatique la notion de complexité est une notion importante et je vais m'y arrêter un peu avant d'en venir à ce qui nous intéresse ici, l'optimisation combinatoire.

Complexité algorithmique

Un *algorithme* est une suite finie d'instructions qui permet de résoudre un problème, c'est-à-dire qui permet de passer des données spécifiant un problème à la solution recherchée. La complexité d'un algorithme représente son efficacité, on la définit comme suit : c'est le nombre maximum d'opérations à effectuer pour résoudre une *instance* quelconque de taille donnée. Une instance est l'ensemble des données caractérisant une réalisation spécifique du problème (sa taille notée N, est l'espace mémoire nécessaire pour la stocker). En pratique, ce n'est pas le nombre exact d'opérations qui est intéressant mais plutôt la façon dont ce nombre dépend de N. Par exemple, si on veut trier un tableau de N nombres on peut utiliser l'algorithme du tri en tas (*heap sort*), dans le cas le pire cet algorithme nécessite un nombre d'opérations de l'ordre de $N \log N$, on dit alors que sa complexité est $N \log N$. On peut également utiliser un algorithme plus simple à programmer comme le tri à bulle (*bubble sort*) mais sa complexité est N^2. Pour une petite valeur de N le choix peut se porter sur le second qui est plus simple à mettre en place, mais si N est grand il faut choisir le premier sous peine de voir le programme mettre des années à s'exécuter.

On dit d'un algorithme qu'il est *polynômial* si sa complexité est inférieure à une loi de puissance (pour N assez grand), par exemple le tri en tas est polynômial car $N \log N < N^p$ dès que $p \geq 2$. Tous les autres algorithmes sont dits *exponentiels*. Par exemple un algorithme de tri exponentiel serait d'essayer toutes les permutations

des N éléments (soit $N!$) et de s'arrêter quand on a trouvé la bonne. Bien sûr les algorithmes polynômiaux sont beaucoup plus intéressants que les exponentiels car bien plus rapides.

On aimerait définir la complexité d'un problème comme étant la complexité du meilleur algorithme résolvant ce problème. Malheureusement une telle définition est inutilisable puisqu'en général on a aucun moyen de déterminer cette complexité pour la simple raison qu'on ne sait pas quel est le meilleur algorithme. Pour arriver à la notion de complexité d'un problème il est nécessaire d'aller un peu plus loin.

Problèmes décisionnels

Un problème décisionnel est défini par deux choses : un ensemble fini de *configurations* qui sont les états possibles du système et qui représentent les différentes alternatives du problème; et une propriété (vraie ou fausse) dépendant de la configuration. Le problème consiste alors à déterminer s'il existe une configuration pour laquelle la propriété est vraie.

L'archétype du problème décisionnel est le problème de la satisfaisabilité (*satisfiability*) (SAT) dont on verra l'importance théorique dans la sous-section suivante. Le problème de la satisfaisabilité s'énonce comme suit : on a N variables booléennes $x_1, x_2, \ldots, x_N$ (soit 2^N configurations) et une formule logique F faisant intervenir ces variables (avec ET, OU et NON). Existe-t-il une valeur des x_i telle que la formule soit vraie ? La formule est alors dite satisfaisable. La formule est habituellement donnée sous sa forme normale, c'est-à-dire sous la forme de la conjonction de M clauses, les clauses en question étant la disjonction d'un certain nombre de variables ou de leur négation. Quand toutes les clauses contiennent le même nombre k de variables, on parle de k-satisfaisabilité (k-SAT). Une formule typique de 3-SAT a l'allure suivante

$$F = (x_1 \vee \overline{x_4} \vee x_5) \wedge (\overline{x_2} \vee \overline{x_4} \vee x_7) \wedge \cdots \wedge (x_2 \vee x_4 \vee \overline{x_6}) \tag{1.39}$$

Les symboles $\wedge$, $\vee$ et le surlignement signifiant respectivement ET, OU et NON. Une inspection rapide de cette formule montre que pour que F soit vraie il faut que chaque clause soit vraie et donc qu'au moins une variable (éventuellement niée) dans chaque clause renvoie vrai.

Classes P, NP et NP-complet

On s'intéresse ici exclusivement aux problèmes de la classe NP (*non-deterministic polynomial*) : cette classe contient tous les problèmes décisionnels pour lesquels il existe un algorithme polynômial qui permet de déterminer si une configuration donnée est une solution du problème (il ne s'agit pas ici de trouver une solution du problème mais de la tester). Par exemple SAT est NP car pour

vérifier qu'une formule est vraie il faut un temps linéaire dans la longueur de la formule.

Une sous-classe de NP est la classe P (*polynomial*) : cette classe est constituée des problèmes "faciles" de NP, ce sont ceux pour lesquels il existe un algorithme polynômial (connu ou non) pour résoudre le problème. Il est conjecturé que P $\neq$ NP, mais il n'en existe pas de démonstration. Ceci signifie qu'il existe à priori des problèmes "durs" c'est-à-dire insolubles en temps polynômial.

Les problèmes "les plus durs" sont regroupés dans la classe NP-complet. Dire qu'un problème décisionnel est NP-complet signifie que si l'on trouve un algorithme polynômial pour le résoudre alors P = NP. Il a été démontré que SAT est NP-complet. Démontrer qu'un problème est NP-complet est très utile car alors on est quasiment sûr qu'il n'y a pas d'algorithme polynômial pour le résoudre et donc qu'il est inutile d'en chercher. D'autre part on sait alors quel genre d'algorithme il faut essayer, par exemple ceux par séparation et évaluation (*branch and bound*); on peut également essayer des méthodes de résolution approchée (voir chapitre 5).

1.3.2 Optimisation combinatoire

Passons maintenant à l'optimisation combinatoire. L'optimisation combinatoire est un domaine de l'informatique et de la recherche opérationnelle très développé car nombre de problèmes pratiques d'organisation et de gestion se formulent de cette façon. On peut citer par exemple la création de l'emploi du temps d'une école, le placement des puces sur un circuit intégré, les trajets des camions d'une entreprise de livraison...

Définition

Un problème d'optimisation combinatoire est définit par deux éléments : premièrement un ensemble fini de *configurations* comme pour les problèmes décisionnels et deuxièmement une *fonction de coût* qui, à chaque configuration, associe un coût représentant la valeur de l'alternative correspondante. Le problème d'optimisation combinatoire consiste à trouver la meilleure alternative c'est-à-dire la configuration pour laquelle la fonction de coût est minimale.

Problème du voyageur de commerce

Le plus célèbre de tous les problèmes d'optimisation combinatoire est le problème du voyageur de commerce (PVC) (*travelling salesman problem (TSP)*). Il se formule ainsi : N points sur une carte qui représentent les villes par lesquelles doit passer un voyageur de commerce pendant sa tournée. Il s'agit de trouver la

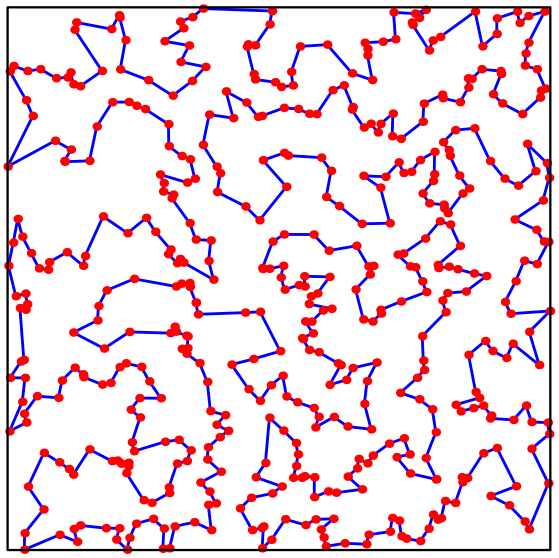

FIG. 1.3 – *Exemple de tournée minimale pour un PVC à 500 villes.*

tournée, c'est-à-dire un chemin fermé passant par chaque ville une fois et une seule, de longueur minimale (voir figure 1.3). Une configuration du problème est ici une tournée. L'ensemble des configurations est fini, mais très grand puisqu'il contient $(N-1)!/2$ tournées différentes. Le PVC sera étudié de manière plus approfondie au chapitre 5.

Problème décisionnel associé, complexité

À chaque problème d'optimisation combinatoire, on peut associer un problème décisionnel de manière très simple : au lieu de minimiser la fonction de coût, il faut déterminer s'il existe une configuration pour laquelle la fonction de coût est inférieure à une certaine valeur. Par exemple pour le PVC le problème décisionnel associé consiste à savoir s'il existe une tournée de longueur inférieure à une certaine longueur. Il est démontré que ce dernier problème est NP-complet, on dit alors que le PVC est NP-difficile, ce qui implique qu'il n'existe à priori aucun algorithme polynômial pour le résoudre.

Inversement si le problème décisionnel associé à un problème d'optimisation combinatoire est de classe P, alors le problème d'optimisation combinatoire peut être résolu en temps polynômial. Il suffit pour cela de trouver l'optimum par dichotomie (dans la mesure où la fonction de coût est discrète).

physique statistique	optimisation combinatoire
état fondamental	optimum
énergie du fondamental	coût de l'optimum
hamiltonien, énergie	fonction de coût
micro-état	configuration
espace de phase	ensemble des configurations
premiers états excités	configurations quasi optimales

TAB. 1.1 – *Correspondance physique statistique / optimisation combinatoire.*

1.3.3 Liens avec la physique statistique

Voyons maintenant quels sont les liens entre l'optimisation combinatoire et la physique statistique. Pour rendre ces liens clairs considérons un verre de spins d'Ising. Déterminer l'état fondamental de ce verre de spins revient à trouver la configuration de spins qui minimise l'énergie : c'est un problème d'optimisation combinatoire ! Plus généralement, tout problème de physique statistique avec un hamiltonien à température nulle peut être vu comme un problème d'optimisation combinatoire dont les configurations sont les micro-états et la fonction de coût l'énergie (voir table 1.1 pour un dictionnaire plus complet). Pour un système non désordonné comme le modèle d'Ising ce lien est peu intéressant car déterminer le fondamental est trivial; en revanche pour un verre de spins la situation est beaucoup plus complexe à cause du désordre et de la frustration.

Réciproquement tout problème d'optimisation combinatoire peut être vu comme un système de physique statistique, pour cela il suffit de considérer la fonction de coût comme l'hamiltonien du système. C'est précisément ce que je fais au chapitre suivant avec le problème du couplage minimal.

Optimisation combinatoire, version stochastique

En physique, on s'intéresse aux propriétés génériques des systèmes désordonnés et rarement aux propriétés spécifiques d'un échantillon donné. En fait, on veut connaître les caractéristiques statistiques sur l'ensemble des échantillons possibles (moyennes, écarts types, grandes déviations, etc.). Pour pouvoir utiliser l'optimisation combinatoire, il faut donc transposer cette notion d'ensemble statistique, c'est pourquoi on utilise les versions *stochastiques* des problèmes d'optimisation combinatoire. Par exemple pour le PVC au lieu de s'intéresser à une *instance* particulière, on va considérer un tirage aléatoire uniforme et décorrélé de N villes dans le carré unité. Ainsi, on ne veut plus connaître une solution particulière mais des propriétés statistiques comme la longueur moyenne du plus court chemin et

son écart type. Une caractéristique importante d'une observable est son caractère *auto-moyennant*. Il a été démontré, par exemple, que la longueur de la tournée minimale dans le PVC stochastique est auto-moyennante [BHH59].

En optimisation combinatoire stochastique, on peut s'intéresser aussi à la complexité typique (c'est-à-dire le temps de calcul pour une instance typique) plutôt qu'à la complexité que j'ai définie plus haut et qui correspond au cas le pire. D'un point de vue analytique, il est beaucoup plus dur de traiter la complexité typique car pour étudier la complexité on utilise habituellement des cas particuliers pathologiques ce qui n'est plus possible ici.

Interaction physique statistique / optimisation combinatoire

L'intérêt du lien entre physique statistique et optimisation combinatoire tient en trois points principaux :

- **Techniques pratiques** : Les techniques de l'optimisation combinatoire permettent de calculer l'état fondamental de nombreux systèmes désordonnés [Rie98, AS97], ce qui est l'objet principal de cette thèse. Inversement les méthodes de la physique peuvent parfois être transférées à l'optimisation combinatoire, on peut citer notamment le recuit simulé (*simulated annealing*) [KGV83], voir chapitre 5.

- **Concepts et méthodes théoriques** : Les méthodes analytiques des physiciens (méthodes des répliques, approximation de champ moyen, renormalisation, etc.) permettent de calculer certaines observables des systèmes d'optimisation combinatoire [MP85, Orl85]. Et le concept de transition de phase s'applique à certains problèmes [KS94]. Enfin dans mon travail, j'ai montré comment la renormalisation peut être extrêmement utile pour l'optimisation numérique (voir chapitre 5).

- **Transferts de modèles** : Les deux domaines offrent un grand nombre de modèles nouveaux à l'autre domaine, permettant souvent de progresser (cf. chapitre suivant).

1.4 Enjeux et motivations

1.4.1 La controverse théorique

Le but essentiel de cette thèse est d'apporter une contribution à la controverse théorique qui subsiste depuis bientôt 15 ans et qui peut se résumer ainsi : "Le champ moyen pour les verres de spins est-il pertinent en dimension finie et en particulier

en dimension 3 ?". Les deux points principaux de désaccord sont essentiellement d'une part l'existence ou non d'une multiplicité d'états purs (ayant éventuellement une structure ultramétrique), et d'autre part la subsistance de la phase verre de spins en présence d'un champ magnétique. Je développe plus longuement ce débat au début du chapitre 4.

1.4.2 Le paysage d'énergie

Je propose dans cette thèse une approche numérique différente de ce qui s'est fait jusqu'ici. Il ne s'agit plus de se frotter au problème des simulations Monte Carlo mais d'utiliser l'optimisation combinatoire pour étudier le système à température nulle. L'intérêt de cette approche est qu'elle ne se heurte pas aux problèmes de vieillissement typique des simulations Monte Carlo; d'autre part il semble (rétrospectivement) que les effets de taille finie soient beaucoup moins gênant à température nulle que près d'une transition.

L'idée est d'être capable d'appréhender directement la structure du paysage d'énergie, pour pouvoir trancher entre les deux théories. En effet, c'est en particulier par leur paysage d'énergie que les deux théories diffèrent. Le champ moyen affirme qu'il existe de nombreuses "vallées" et donc des excitations de grandes tailles et de faibles énergies. En revanche, la théorie des gouttelettes exclut la présence de telles excitations.

Il s'agit donc d'avoir accès à la structure du paysage d'énergie. La première étape consiste à trouver l'état fondamental du système par des méthodes d'optimisation combinatoire. Cela permet la comparaison quantitative des propriétés du fondamental avec les prédictions de champ moyen. Cela est certes intéressant mais ne permet pas de trancher. Il faut pour cela avoir accès aux excitations de faibles énergies. Deux approches ont été retenues dans la suite pour obtenir ces excitations : la première consiste en une recherche directe par des moyens d'optimisation combinatoire que j'ai dus développer et la seconde par l'observation de l'évolution du fondamental sous l'effet de la modification de certains paramètres extérieurs (le champ magnétique en l'occurrence).

1.4.3 Mon apport personnel

Afin que le lecteur puisse facilement apprécier mon apport personnel présenté dans cette thèse, voici les trois principaux axes de ma contribution :

(i) Le couplage minimal

- Implémentation d'un algorithme de calcul de l'optimum.

- Analyse numérique de l'optimum pour différentes tailles et différentes dimensions pour le couplage minimum simple et biparti, pour les modèles euclidiens comme pour les modèles à liens aléatoires. En particulier, j'ai étudié la distribution limite de la longueur, la dépendance en N et d, la validité de l'approximation de champ moyen. Et j'ai énoncé une nouvelle conjecture concernant la probabilité de couplage au k-ème voisin dans l'optimum.

- Test numérique de la conjecture de Parisi sur la longueur d'un couplage biparti.

- Développement d'un algorithme de calcul exact et exhaustif des excitations dans le couplage minimal.

- Analyse numérique de ces excitations et notamment de leur énergie et de leur taille. Ceci a permis de découvrir dans ce système l'existence de deux échelles, l'une macroscopique et l'autre microscopique.

(ii) Développement d'une nouvelle technique d'optimisation

- J'ai développé une toute nouvelle technique d'optimisation combinatoire basée sur le concept de la renormalisation. Je montre que cette technique est à la fois très efficace et très générale en la testant aussi bien sur les verres de spins que sur le voyageur de commerce. J'ose croire que cette nouvelle technique est un apport de la physique à l'optimisation combinatoire comparable au recuit simulé. C'est grâce à cette technique que j'obtiens mes résultats sur les verres de spins.

(iii) Les verres de spins

- Analyse numérique des variations du fondamental des verres de spins en fonction du champ magnétique. Cette analyse est conduite sur le modèle EA et sur le modèle à connectivité fixe. Elle montre deux choses très importantes : premièrement, les effets de taille finie à température nulle semblent assez petits et deuxièmement la phase verre de spins semble disparaître en présence de champ dans le modèle EA.

- Analyse numérique des interfaces, énergie et dimension fractale. Une analyse classique par changement des conditions aux bords est menée. D'autre part une recherche directe des excitations de faible énergie et de grande taille est entamée. Cette étude, bien qu'inachevée, semble déjà indiquer qu'il existe des excitations de grandes tailles d'énergie constante et que ces excitations ont une interface de dimension fractale strictement inférieure à 3.

Chapitre 2

Couplage minimal

Je présente dans ce chapitre le modèle du couplage minimal et les résultats le concernant.

2.1 Présentation du modèle

2.1.1 Problème du couplage minimal

Le problème du couplage minimal (PCM) (*minimum matching problem* [PS82]) est un problème d'optimisation combinatoire posé comme suit : on considère d'abord N points (N pair) dans un espace quelconque et on définit un *couplage* (*matching*) comme étant un ensemble de $N/2$ paires de ces points tel que chaque point apparaît dans une paire et une seule. Ainsi chaque point est couplé (ou apparié) à un unique autre point. Ensuite on a un poids $l_{ij} = l_{ji}$ associé à chaque paire (i, j) de points (on a donc un graphe pondéré symétrique) et on définit le poids d'un couplage comme étant la somme des l_{ij} associés à chaque paire du couplage. De manière plus formelle on caractérise un couplage en posant $n_{ij} = n_{ji} = 1$ si les points i et j sont appariés et $n_{ij} = n_{ji} = 0$ sinon (en particulier $n_{ii} = 0$). On a donc la contrainte

$$\sum_{i=1}^{N} n_{ij} = 1. \tag{2.1}$$

et le coût d'un couplage s'écrit

$$L = \sum_{i,j=1}^{N} n_{ij} l_{ij}. \tag{2.2}$$

Le PCM consiste à déterminer le couplage dont le poids est le plus petit. Dans la suite on note ce poids L_{MM} (MM pour minimum matching).

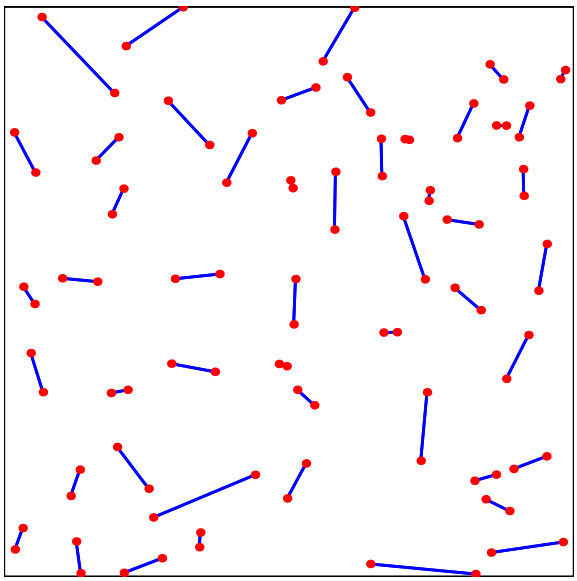

FIG. 2.1 – *Exemple de couplage minimal* ($d = 2$, $N = 100$)

Ce genre de modèle peut être pertinent dès qu'il s'agit de grouper des choses deux par deux. Par exemple, il peut s'agir de dimérisation dans un gaz ou encore de formation de binômes dans une classe (les poids représenteraient ici l'inverse des affinités entre élèves).

Je m'intéresse au cas particulier où les points se trouvent dans un espace euclidien de dimension d et où le poids l_{ij} est la distance séparant le point i du point j. C'est pourquoi dans la suite je ne parle plus de poids mais de longueur (d'où la notation). Un exemple de couplage minimal est présenté figure 2.1.

Le PCM se trouve être un problème de la classe P (cf. section 1.3.1). Il peut être résolu en un temps $O(N^3)$, voir chapitre 3 pour plus de détails.

2.1.2 Cas biparti

Le problème du couplage biparti minimal (PCBM) (*minimum bipartite matching problem* [PS82]) est une variante du problème précédent. Dans cette variante on a $2N$ points répartis entre deux sous-ensembles contenant chacun N points. Un couplage biparti est un ensemble de N paires constituées d'un point de chacun des deux ensembles. Chaque point est ainsi apparié à un unique point de l'autre ensemble. On note la longueur du couplage biparti minimal L_{MBM}. Une application est par exemple la formation d'une molécule composée de deux atomes différents ou encore la formation des couples par une agence matrimoniale.

Le PCBM étant un cas particulier du PCM, il fait également partie de la classe

P. Plus précisément il peut être résolu en un temps $O(N^2 \log N)$; le détail d'un algorithme est présenté au chapitre 3.

2.1.3 Version stochastique

Version stochastique, caractère auto-moyennant

Comme il est expliqué à la section 1.3.3 et afin de pouvoir considérer des quantités génériques, j'étudie une version stochastique du PCM, qui consiste simplement à considérer N points répartis aléatoirement, uniformément et indépendamment dans l'hyper-cube unité. La quantité qui m'intéresse ici est l'énergie du système physique associé, c'est-à-dire la longueur du couplage minimal L_{MM}. Cette quantité est auto-moyennante (propriété démontrée par Steele [Ste81, Ste97]).

Concernant le caractère auto-moyennant de la longueur du PCBM, le problème est plus complexe à cause des différences de densités locales entre les deux ensembles de points. En effet, si l'un des ensembles est plus dense que l'autre dans une zone donnée, certains points doivent être appariés en dehors de cette zone entraînant ainsi des fluctuations dans la longueur totale. Ces fluctuations sont d'autant plus fortes que la dimension est faible. Il est relativement aisé de vérifier que le PCBM n'est pas auto-moyennant en dimension un, car les points sont alors appariés de gauche à droite. En dimension deux, il n'existe à ma connaissance aucune démonstration (ni dans un sens, ni dans l'autre), en revanche on sait [AKT84] que la longueur est de l'ordre de $\sqrt{N \log N}$ au lieu de $\sqrt{N}$ (voir plus loin). On suppose dans la suite (les données numériques semblant le confirmer) que le PCBM est auto-moyennant en $d = 2$. Pour $d \geq 3$, le résultat a été démontré par Boutet de Monvel (cf. annexe B de [HBM98] en annexe).

Unités physiques

En thermodynamique, l'énergie d'un système est extensive (sauf en présence d'interactions à longue portée), c'est-à-dire proportionnelle à la taille du système. Quelle est la dépendance en N de L_{MM} ? Comme on a N points dans un volume unité, chaque point "occupe" en moyenne un volume $1/N$. Ainsi la distance typique entre plus proches voisins se comporte comme $N^{-1/d}$. Plus précisément la distance moyenne d'un point d_k à son k-ème voisin peut s'écrire (à des corrections exponentielles en N près)

$$d_k = \frac{\Gamma(k+1/d)}{\Gamma(k)} \frac{\Gamma(N)}{\Gamma(N+1/d)} B_d^{-1/d} \tag{2.3}$$

où

$$B_d = \frac{\pi^{d/2}}{(d/2)!} \tag{2.4}$$

est le volume de la boule unité à d dimensions (on peut remarquer que les dépendances en N et k sont découplées). On s'attend donc à ce que, quand $N \to \infty$,

$$L_{MM} \sim N^{1-1/d}. \tag{2.5}$$

La quantité extensive qui nous intéresse est donc $L_{MM}N^{1/d}$, ce qui correspond à considérer, non plus N points dans un hyper-cube unité, mais plutôt N points à densité constante égale à 1 dans un hyper-cube de coté $N^{1/d}$.

Les théorèmes sur le caractère auto-moyennant (voir plus haut) montrent qu'avec probabilité un

$$\lim_{N\to\infty} \frac{L_{MM}}{N^{1-1/d}} = \beta_{MM}(d) \tag{2.6}$$

où $\beta_{MM}(d)$ est une constante (non aléatoire) qui représente la densité d'énergie de l'état fondamental; cette constante est étudiée plus longuement par la suite.

Conditions aux limites

Afin de réduire les effets de taille finie dans l'étude de la constante $\beta_{MM}(d)$ ou d'autres quantités, on choisit de toujours travailler avec des conditions aux bords périodiques plutôt qu'ouvertes comme on a considéré jusqu'ici. C'est-à-dire que les points ne se trouvent plus dans un hyper-cube mais dans un hyper-tore à d dimensions obtenu en identifiant les faces opposées de l'hyper-cube. On admet que les résultats sur le caractère auto-moyennant sont encore valides bien qu'ils ne soient pas démontrés dans cette nouvelle géométrie. Dans la mesure où ce changement de conditions aux limites ne produit que des effets de bords, il est généralement admis que la constante $\beta_{MM}(d)$ ainsi que les autres propriétés d'intérêt demeurent inchangées. Cette supposition est physiquement raisonnable car elle revient à dire que les propriétés dans le volume (*bulk*) sont indépendantes des effets de bords.

2.2 Intérêt du modèle, liens avec les verres de spins

Maintenant que l'on a clairement défini le modèle, la question qui peut légitimement se poser est de savoir quel est son intérêt pour le physicien. Ce modèle, outre son intérêt en lui-même, possède quatre propriétés très intéressantes qui justifient son étude :

- Ce modèle est désordonné et frustré. Le désordre vient directement du fait qu'on s'intéresse à la version stochastique du problème. La frustration, elle, est due au fait que chaque point a tendance à s'apparier à son plus proche voisin, mais ce dernier n'est pas nécessairement libre. En fait, la majorité des problèmes d'optimisation combinatoire stochastiques sont désordonnés et

frustrés (pour des raisons analogues), ainsi constituent-ils tous des modèles jouets pour les verres de spins.

- Il existe un modèle de champ moyen associé pour lequel on a de très nombreux résultats analytiques (voir section 2.3). C'est d'autant plus intéressant que ce modèle de champ moyen est de manière effective à faible connectivité.

- De plus et c'est fondamental, ce modèle, contrairement aux verres de spins, est de classe P. Cette propriété permet de mener de manière exacte et extensive des simulations numériques (qui sont précisément l'objet de ce chapitre).

- Enfin, comme on va le voir tout de suite, il existe une correspondance directe entre un problème de couplage et des verres de spins à deux dimensions (avec conditions aux bords ouvertes). Cette propriété permet d'ailleurs de calculer rapidement l'état fondamental des verres de spins en dimension deux.

L'un des intérêts du PCM est qu'il existe une correspondance exacte entre un verre de spins à deux dimensions avec conditions aux bords ouvertes et un problème de couplage minimal [BMRU80]. Voyons en quoi consiste cette correspondance pour le modèle EA à deux dimensions. On dit qu'un lien entre deux spins est satisfait si $J_{ij}S_iS_j > 0$ et non satisfait dans le cas contraire. Ainsi une plaquette (i.e. une maille élémentaire du réseau) frustrée (resp. non frustrée) possède nécessairement un nombre impair (resp. pair) de liens non satisfaits. Les liens non satisfaits d'une configuration de spins donnée peuvent être représentés par un ensemble de chemins sur le réseau dual, ces chemins peuvent soit être fermés soit se terminer sur une plaquette frustrée (voir figure 2.2). Les chemins fermés ont toujours une énergie positive et peuvent donc être éliminés (cela correspond à retourner les spins à l'intérieur). Il ne reste donc plus qu'à apparier les plaquettes frustrées deux à deux (par construction il y en a toujours un nombre pair à condition de considérer le bord extérieur comme une plaquette). Il s'agit donc d'un problème de couplage minimal entre les plaquettes frustrées, la "distance" entre deux plaquettes étant définie comme l'énergie du chemin de plus faible énergie entre les deux plaquettes. Une fois résolu ce problème de couplage minimal la configuration des spins est complètement déterminée à un retournement global près.

Cette correspondance n'est pas spécifique au réseau carré, elle s'établit pour tout graphe planaire. En revanche, un réseau avec des conditions périodiques ne permet pas cette correspondance. En effet le point important est que chaque lien appartient exactement à deux plaquettes, dans le cas d'un réseau périodique il existe des plaquettes supplémentaires dont le bord fait le tour du système (ce serait les lignes horizontales ou verticales sur la figure 2.2), ainsi chaque lien appartient en fait à trois plaquettes. Le même problème apparaît dès que la dimension est

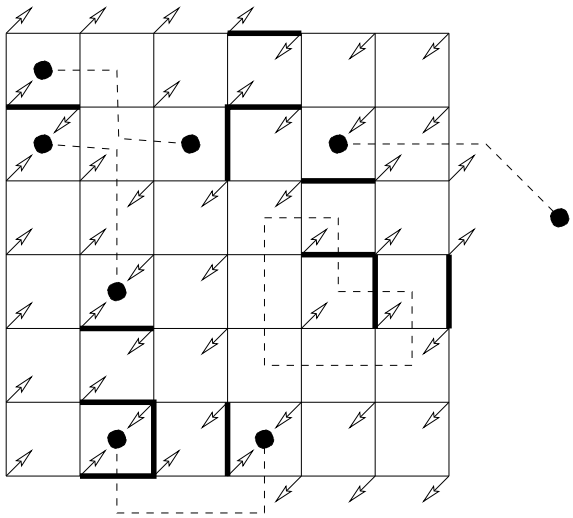

FIG. 2.2 – *Correspondance entre verre de spins et couplage minimal. Les points marquent les plaquettes frustrées, les lignes fines indiquent des interactions positives, les lignes grasses indiquent des interactions négatives. Les lignes pointillées coupent les liens non satisfaits. Le point à l'extérieur représente la plaquette (frustrée) constituée par le bord extérieur du système.*

supérieure à deux; par exemple en dimension trois, chaque lien appartient à quatre plaquettes.

2.3 Approximation de champ moyen

J'ai volontairement réduit cette section et celle qui suit à l'essentiel dans la mesure où l'article [HBM98] qui développe largement ces idées est joint à cette thèse.

2.3.1 Définition du modèle champ moyen

Le modèle de champ moyen ou *modèle à liens aléatoires* a été introduit dans [VM84] pour le PVC et dans [MP85] pour le PCM. Ce modèle consiste à choisir les points non plus dans un espace euclidien mais dans un espace abstrait. Pratiquement, les "distances" l_{ij} entre les points sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant une distribution donnée $\rho(l)$. Ainsi, il n'y a plus de corrélation entre les longueurs et en particulier plus d'inégalité triangulaire. L'avantage de ce modèle réside dans cette absence de corrélation qui

rend, comme on va le voir, nombre de calculs analytiques possibles. De la même façon, on peut définir le modèle à liens aléatoires pour le PCBM.

Bien sûr, on veut pouvoir faire le lien avec le modèle euclidien. Comme indiqué dans [VM84, MP86], on peut choisir $\rho(l)$ de façon que la distribution d'un l_{ij} soit la même dans les deux modèles (au moins à courte distance). On prends donc

$$\rho(l) = B_d l^{d-1} d \tag{2.7}$$

pour $l \to 0$ (et même pour tout $l < 1/2$) et B_d est défini par l'équation 2.4. Deux longueurs étant toujours décorrélées dans le modèle euclidien, la différence entre les deux modèles n'apparaît donc que pour les corrélations à trois longueurs et plus. Utiliser le modèle à liens aléatoires à la place du modèle euclidien revient donc à négliger ces corrélations. C'est l'approximation dite à liens aléatoires (approximation de champ moyen). Il est très important de noter que ce modèle à liens aléatoires est toujours paramétré par la dimension d; contrairement à l'habitude, l'approximation de champ moyen n'est pas ici une approximation de grande dimension. En quelque sorte le modèle à liens aléatoires est l'équivalent du modèle SK (ou mieux encore du modèle à connectivité fixe, cf. section 1.2.3) pour le modèle EA.

À partir de maintenant et afin de distinguer les deux modèles, les quantités relatives au modèle euclidien portent un exposant EU et celles relatives au modèle à liens aléatoire un exposant RL (pour *random link*). On note ainsi L_{MM}^{EU} et L_{MM}^{RL} les longueurs des solutions minimales.

Une question importante est de savoir si, comme L_{MM}^{EU}, L_{MM}^{RL} est automoyennant. On peut montrer que les fluctuations relatives tendent vers zéro [Bou96, Annexe E], mais pas (jusqu'à présent) que le β existe. On supposera qu'on peut définir $\beta_{MM}^{RL}(d)$ de manière analogue à l'équation 2.6. De la même façon, $L_{MBM}^{RL}(d)$ a des fluctuations relatives qui tendent vers zéro et on supposera qu'on peut définir $\beta_{MBM}^{RL}(d)$.

2.3.2 Résultats analytiques connus

Je vais maintenant présenter les résultats analytiques de Mézard et Parisi. Ils ont, grâce à la méthodes des répliques, pu calculer les valeurs de $\beta_{MM}^{RL}(d)$ et $\beta_{MBM}^{RL}(d)$ [MP85]. En faisant l'hypothèse de la symétrie des répliques (dont ils ont testé la stabilité pour $d = 1$ [MP87]), ils ont obtenu le résultat suivant (avec nos notations)

$$\beta_{MM}^{RL}(d) = \frac{B_d^{-1/d} d}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} G_d(x) e^{-G_d(x)} \mathrm{d}x \tag{2.8}$$

où $G_d(x)$ vérifie l'équation intégrale

$$G_d(x) = \int_{-x}^{+\infty} (x+y)^{d-1} e^{-G_d(y)} \mathrm{d}y. \tag{2.9}$$

Ces résultats ont été confirmés par la méthode de la cavité [MP86]. De plus, ils ont calculé la distribution $P_d(\tilde{l})$ de la longueur réduite $\tilde{l}_{ij} = N^{1/d} l_{ij}$ des liens compris dans le couplage minimal dans la limite où $N \to \infty$, et ont obtenu

$$P_d(\tilde{l}) = \tilde{l}^{d-1} d \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}G_d}{\mathrm{d}x}(x) e^{-G_d(x) - G_d(\tilde{l}-x)} \mathrm{d}x. \tag{2.10}$$

Pour $d = 1$, l'équation 2.9 peut être résolue analytiquement et on obtient $G_1(x) = \log(1 + e^x)$, $\beta_{MM}^{RL}(1) = \pi^2/24$ et $P_1(\tilde{l}) = 2(2\tilde{l} - e^{-2\tilde{l}} \sinh(2\tilde{l}))/\sinh^2(2\tilde{l})$. D'autre part, comme la symétrie des répliques n'est pas brisée, on s'attend à ce que la moyenne de L_{MM}^{RL} ait un développement en $1/N$

$$\frac{\langle L_{MM}^{RL} \rangle}{N^{1-1/d}} = \beta_{MM}^{RL}(d) \left(1 + \frac{A(d)}{N} + \frac{B(d)}{N^2} + \cdots \right). \tag{2.11}$$

Des calculs similaires ont été menés pour le PCBM [Orl85, MP85, MP86, MP87]. Suivant nos conventions (et c'est précisément leur intérêt), on obtient

$$\beta_{MBM}^{RL}(d) = 2\beta_{MM}^{RL}(d). \tag{2.12}$$

Plus généralement, le couplage biparti et le couplage simple mènent à des équations de col identiques (avec nos conventions). Ainsi la distribution $P_d(\tilde{l})$ est identique dans les deux modèles, ce qui explique l'équation 2.12 car le PCBM a deux fois plus de liens que le PCM. Pour finir, un développement à grand d est également possible [Bou96]

$$\beta_{MM}^{RL}(d) = \frac{(1/d)! B_d^{-1/d}}{2} \left[1 + \frac{1-\gamma}{d} + \frac{\pi^2/12 + \gamma^2/2 - \gamma}{d^2} + \cdots \right] \tag{2.13}$$

où $\gamma = 0.5772\ldots$ est la constante d'Euler.

2.4 Étude numérique du fondamental

Comme la précédente (et pour les mêmes raisons), cette section est réduite à l'essentiel. D'autre part, tout ce qui concerne les méthodes numériques est reporté au chapitre suivant.

2.4.1 Résultats

Voici les principaux résultats numériques présentés dans [HBM98] :

Limite $N \to \infty$ et théorème de la limite centrale

J'ai vérifié que la longueur du couplage minimal semble bien être auto-moyennante en mesurant la largeur de la distribution. Dans tous les cas cette largeur tend vers 0 quand $N \to \infty$. Je me suis intéressé à la façon dont la distribution de la longueur se concentre. En particulier, une question intéressante est de déterminer si le caractère auto-moyennant vient d'une sorte de théorème de la limite centrale (TLC). Le TLC prédit, pour une somme S de N variables indépendantes, que l'écart type relatif $\sigma = \sqrt{\langle S^2 \rangle - \langle S \rangle^2}/\langle S \rangle$ et l'asymétrie $s = \langle (S - \langle S \rangle)^3 \rangle / \sigma^3$ diminuent comme $1/\sqrt{N}$ quand $N \to \infty$. La longueur du couplage minimal étant une somme de N variables, on peut s'attendre à un tel comportement si ces variables ne sont pas trop fortement corrélées (Janson a démontré cette propriété pour un problème voisin, l'arbre couvrant minimal). On a effectivement observé ces lois d'échelle (de type TLC) dans tous les cas (PCM et PCBM, euclidien et liens aléatoires) à l'exception du PCBM euclidien où la distribution limite n'est pas gaussienne. De plus dans le cas à liens aléatoires, la distribution $P_1(\tilde{l})$ de la longueur des liens dans le couplage minimal étant connue, on peut, en négligeant les corrélations, estimer les valeurs limites de $\sigma\sqrt{N}$ et $s\sqrt{N}$. Les valeurs ainsi trouvées diffèrent respectivement de 10% et 30% de celles mesurées numériquement montrant ainsi que les corrélations ne sont pas négligeables sans pour autant être très grandes.

Vérification des résultats analytiques

J'ai par ailleurs de nouveau testé (voir [BKMP91] pour un premier test) les résultats analytiques pour le modèle à liens aléatoires. Les résultats sur $\beta_{MM}^{RL}(d)$ et sur $\beta_{MBM}^{RL}(d)$ sont parfaitement concluant dans la mesure où les prédictions analytiques sont toujours dans les barres d'erreur des mesures numériques bien que celles-ci aient été réduites jusqu'à des valeurs relatives de 10^{-4} (!).

Cependant (et ce n'est pas dans [HBM98]), j'ai également testé les prédictions pour $A(1)$ (cf. équation 2.11). Pour le PCM, j'obtiens $A_{MM}(1) = 0.066 \pm 0.005$ ce qui est compatible avec le résultat analytique [MP87] (corrigé dans [BKMP91]) qui donne $A_{MM}(1) \approx 0.13 \pm 0.05$. En revanche, pour le PCBM, j'obtiens $A_{MBM}(1) = 1.706 \pm 0.008$ qui est incompatible avec le résultat analytique $A_{MBM}(1) = -\pi^2/24 - \zeta(3) = 1.61329\ldots$. On verra à la section 2.4.2, pourquoi en fait on a presque certainement $A_{MBM}(1) = -1/2 - \zeta(3) = 1.70206\ldots$ ce qui est compatible avec le résultat numérique.

Approximation de champ moyen

Le but premier de toute cette étude est de tester l'approximation de champ moyen. On a donc mesuré $\beta_{MM}^{EU}(d)$ pour le comparer avec les résultats du champ moyen. On trouve que l'approximation de champ moyen est très bonne dans le sens que l'erreur faite en approximant $\beta_{MM}^{EU}(d)$ par $\beta_{MM}^{RL}(d)$ est petite. En effet cette erreur vaut 3.9% pour $d = 2$, 3.0% pour $d = 3$, et décroît quand d augmente. D'autre part, on a également mesuré la distribution $P_d(\tilde{l})$ et observé que cette distribution est très proche de celle du modèle à liens aléatoires.

L'efficacité de l'approximation de champ moyen peut sembler assez étonnante mais des résultats analogues ont été trouvés pour le voyageur de commerce [CBB+97]. On peut donc supposer que cette approximation donne de très bons résultats pour tous les problèmes d'optimisation à base de liens.

D'autre part, Mézard et Parisi ont également calculé des corrections euclidiennes au champ moyen en prenant en compte les corrélations à trois liens [MP88]. En ajoutant ces corrections à l'approximation de champs moyen on obtient des résultats excellents : l'erreur est divisée environ par dix, elle n'est plus que de 0.40% à $d = 2$ et de 0.33% à $d = 3$.

Limite $d \to \infty$

L'approximation de champ moyen devient souvent meilleure en grande dimension. Je me suis donc intéressé à la limite $d \to \infty$. À priori, on s'attend à ce que la probabilité $p_d(k)$ qu'un point soit couplé à son k-ème voisin (dans le couplage minimal) ait une limite à grand d et que les corrélations euclidiennes introduisent une correction d'ordre $1/d$ par rapport au modèle à liens aléatoires. Ceci a été vérifié numériquement. D'autre part, il est aisé de voir que la distance moyenne au k-ème voisin diffère d'une valeur d'ordre $1/d$ entre différentes valeurs de k. Ainsi l'approximation à liens aléatoires donne une erreur d'ordre $1/d^2$ pour $\beta(d)$ et $P_d(\tilde{l})$. On l'a de plus vérifié numériquement.

On pourrait penser que cette erreur en $1/d^2$ peut être calculée à partir des corrections euclidiennes que j'ai mentionnées au paragraphe précédent. Or il est relativement aisé de voir que les corrections euclidiennes prenant en compte les corrélations à k liens donnent une correction exponentielle en d. On a donc deux limites qui ne commutent pas : la limite de grand N et la limite de grand k (corrélations à grand nombre de liens). Ceci signifie que les corrélations à nombre infini de liens contribuent de manière non négligeable. Une autre indication de ce phénomène est l'existence d'excitations macroscopiques de faible énergie (voir section 2.5). En effet les excitations de taille infinie sont sensibles aux corrélations à nombre infini de liens et l´existence de telles excitations de faible énergie indique que le fondamental devrait lui aussi y être sensible.

Une nouvelle conjecture

Je termine ces résultats numériques en formulant une nouvelle conjecture. Cette conjecture provient d'une observation purement numérique sur $p_1(k)$ la probabilité pour un point d'être couplé à son k-ème voisin pour le PCM et le PCBM à liens aléatoires pour $d = 1$. Elle s'énonce comme suit :

$$p_1(k) = 2^{-k}. \tag{2.14}$$

De plus la correction à N fini semble être en $1/N$ comme on pouvait s'y attendre vu l'équation 2.11. La simplicité de ce résultat indique qu'il est probablement accessible par une méthode analytique directe.

2.4.2 Test de la conjecture de Parisi

Je vais maintenant discuter un peu de la conjecture de Parisi [Par98] et de ses implications. Cette conjecture porte sur le PCBM à liens aléatoires avec une distribution pour les distances donnée par

$$\rho(l) = e^{-l}. \tag{2.15}$$

Cette expression pour $\rho(l)$ correspond en fait à la dimension un à un facteur deux près (l'équation 2.7 donne $\rho(l) = 2$ en $d = 1$ et à la limite $N \to \infty$ seul compte le comportement de $\rho(l)$ en $l = 0$). Voici la conjecture de Parisi :

$$\langle L(N) \rangle = \sum_{k=1}^{N} \frac{1}{k^2}. \tag{2.16}$$

Le point important est que cette formule donne la valeur de la moyenne de la longueur du couplage à N *fini* et pas seulement à N infini. On peut vérifier cette formule pour $N = 1$, 2, 3 et 4 ainsi que pour $N = \infty$ (où on a $L(\infty) = \pi^2/6$).

Pour tester cette conjecture j'ai effectué deux sortes de calculs numériques, tout d'abord une mesure directe de L (voir table 2.1) qui montre que la conjecture est toujours dans les barres d'erreur. D'autre part Parisi a calculé, pour le coefficient du terme en $1/N$ (cf. équation 2.11) la différence entre le modèle exponentiel (celui de la conjecture) et le modèle avec $\rho(l) = 1$ (qui correspond à $d = 1$ à un facteur 2 près) et il trouve $2\zeta(3) = 2.40411\ldots$. J'ai vérifié numériquement cette valeur et ai trouvé 2.4015(23), ce qui confirme le calcul. Comme le terme en $1/N$ pour la conjecture vaut -1, celui pour le modèle à $d = 1$ vaudrait donc $(-1 - 2\zeta(3))/2 = -1/2 - \zeta(3)$ en accord avec la mesure.

N	conjecture	numérique	différence
2	1.25	1.25017(30)	0.6
3	1.361111	1.36115(30)	0.1
4	1.423611	1.42414(28)	1.9
5	1.463611	1.46334(26)	1.0
6	1.491389	1.49157(25)	0.7
7	1.511797	1.51188(23)	0.3
8	1.527422	1.52795(22)	2.4
9	1.539768	1.53971(21)	0.3
10	1.549768	1.54977(20)	0.0
20	1.596163	1.59564(32)	1.6
25	1.605723	1.60514(84)	0.7
35	1.616767	1.6165(10)	0.3
50	1.625133	1.62550(84)	0.4
75	1.631689	1.6299(11)	1.6
100	1.634984	1.63536(90)	0.4
200	1.639947	1.6401(13)	0.1

TAB. 2.1 – *Test de la conjecture de Parisi. Ce tableau présente les valeurs de* $\langle L(N) \rangle$ *prédites par la conjecture et mesurées numériquement ainsi que leur différence en unité de* σ *(la taille de la barre d'erreur). Ainsi les deux valeurs sont compatibles si cette différence est d'ordre un (ce qui est bien le cas ici).*

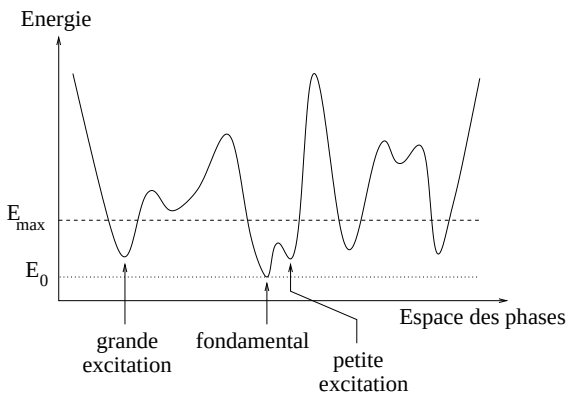

FIG. 2.3 – *Le paysage d'énergie du PCM*

2.5 Étude des excitations

L'étude du fondamental montre que le champ moyen donne de bonnes prédictions pour la densité d'énergie $\beta^{EU}(d)$ et la distribution $P_d(\tilde{l})$. Une autre question est de savoir si le champ moyen permet également d'accéder à l'ensemble des propriétés du paysage d'énergie du PCM (on ne se limite plus ici à l'étude du fondamental, mais je continue à appeler ce système PCM). Les résultats de cette section sont publiés dans [HM99a], article joint en annexe. C'est pourquoi je développe assez peu ici.

Une méthode pour étudier le paysage d'énergie et en particulier comprendre le fond des vallées, consiste à s'intéresser aux excitations de faible énergie. On observe bien sûr des excitations de petite taille qui correspondent à l'exploration du fond de la vallée où se trouve l'état fondamental. On peut également trouver des excitations de grande taille qui correspondent au fond des autres vallées. J'ai développé pour le PCM un algorithme (voir chapitre suivant) qui permet d'obtenir de manière *exhaustive* et *exacte* tous les états dont l'énergie est comprise entre E_0 l'énergie du fondamental et E_{max} une énergie quelconque donnée (voir figure 2.3).

2.5.1 Description des excitations

Avant de rentrer dans l'étude proprement dite des excitations, voyons d'abord quelle est la nature de celles-ci. Chaque point devant être apparié à un unique autre point, il est aisé de voir que deux couplages diffèrent par un ensemble de boucles constituées alternativement par un lien de chaque couplage (voir figure 2.4). Ces boucles par construction ne peuvent pas avoir de point en commun. On peut donc identifier les excitations du PCM avec les boucles construites sur l'état fonda-

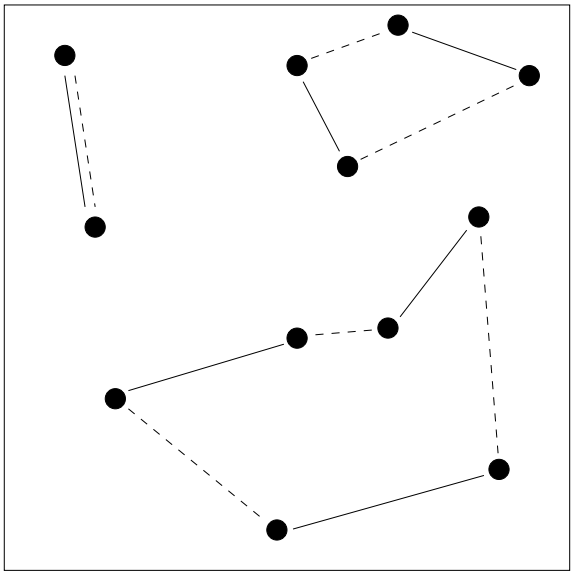

FIG. 2.4 – *Les excitations du PCM sont des boucles. Sur cette figure, sont représentés deux couplages, l'un en traits pleins et l'autre en pointillés. On voit ainsi que deux couplages diffèrent par un ensemble de boucles alternées (un lien d'un couplage, un lien de l'autre, etc.). Ici on a deux boucles de tailles respectives 4 et 6.*

mental. Chaque excitation a ainsi une énergie (positive) définie comme la somme alternée des longueurs des liens de la boucle. Finalement je définirais la *taille* ℓ d'une boucle comme étant le nombre de liens qui la constitue (à ne pas confondre avec son énergie). Le PCM peut ainsi être vu comme un gaz de boucles ayant chacune une énergie fixe. Il y a néanmoins des interactions car deux boucles ne peuvent pas être présentes simultanément dès qu'elles ont un point ou plus en commun. (De même, une boucle ne peut pas passer plus d'une fois par un même point.)

2.5.2 Étude du premier état excité

Je me concentre principalement sur l'étude du premier état excité dans la mesure où c'est le plus rapide à obtenir et qu'il permet à lui seul une étude assez poussée. Ce premier état excité est composé d'une boucle unique : celle de plus faible énergie. Cette boucle possède comme je l'ai déjà dit deux caractéristiques essentielles, une énergie E et une taille ℓ.

Comme pour le verres de spins on peut envisager deux approches différentes. Une première approche de type champ moyen affirme que les excitations du mo-

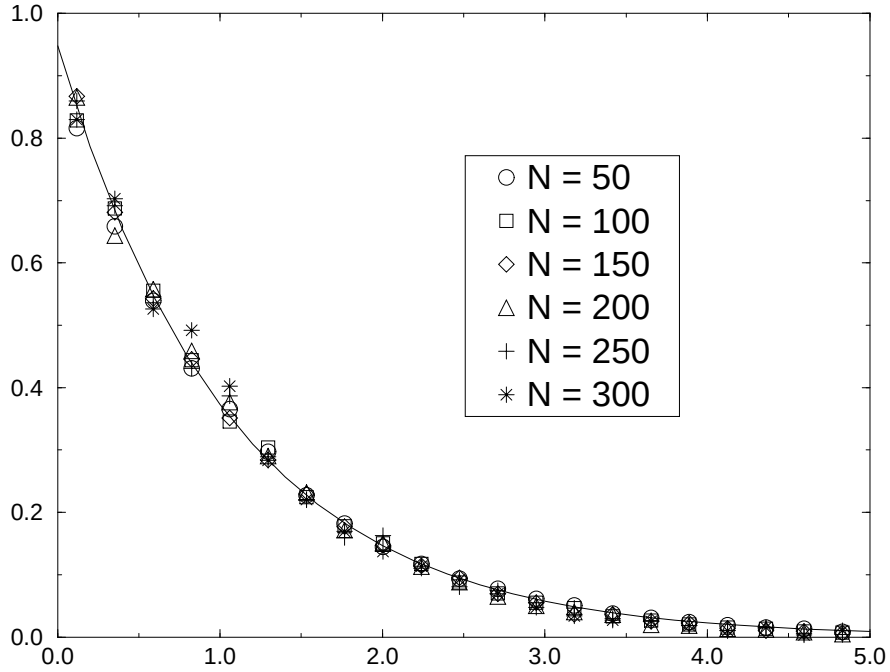

FIG. 2.5 – *Distribution de $E\sqrt{N}$ pour la première excitation du couplage à liens aléatoires en dimension 3. La courbe est un ajustement exponentiel de l'ensemble des données.*

dèle euclidien sont analogues à celles du modèle à liens aléatoires. Il est sans doute envisageable de mener des calculs analytiques pour déterminer l'énergie et la taille de ces excitations pour le modèle champ moyen mais c'est au delà de mes capacités. Je me contente donc de l'approche numérique pour comparer avec le modèle euclidien. Une seconde approche possible est celle de la théorie des gouttelettes qui consiste à dire que les boucles de taille ℓ de plus faible énergie passant par un point donné (on peut les appeler des "bouclettes") vérifient $E \sim \ell^\theta$.

Dans tout ce qui suit je présente les résultats pour les modèles de couplages euclidiens et à liens aléatoires en dimension 3. Cependant je trouve des résultats similaires en dimension 2 et 4 (et aussi en dimension 1 pour le modèle champ moyen). Il est raisonnable de supposer que ces résultats sont valides en toute dimension différente de 1. Je n'ai pas étudié le modèle biparti.

L'approche champ moyen

Je calcule le premier état excité pour le modèle à liens aléatoires pour des tailles allant de 50 à 300 avec un nombre d'instances allant de 40000 à 2500. Les distributions en énergie et en taille sont mesurées. Comme on peut le voir sur la figure 2.5 l'énergie E de la première excitation se comporte comme $E \sim 1/\sqrt{N}$ et

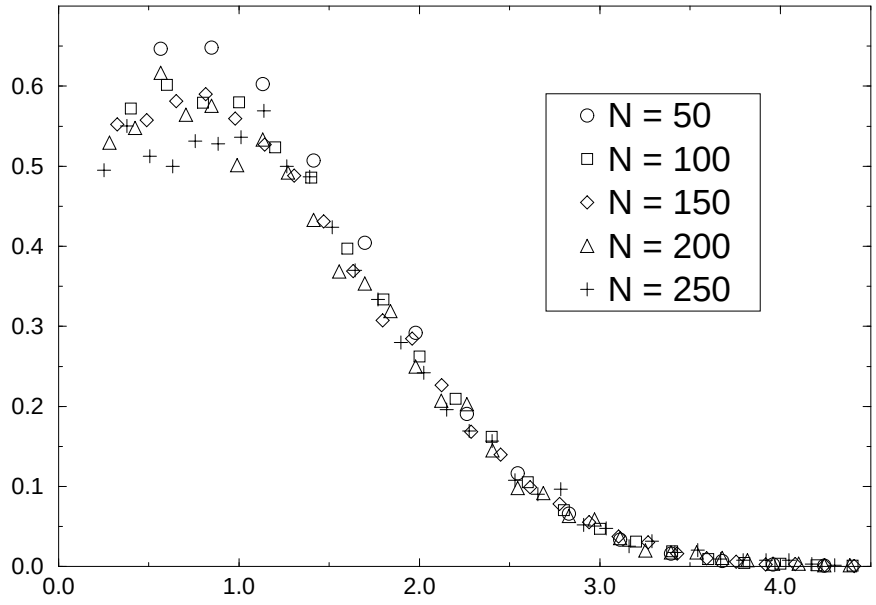

FIG. 2.6 – *Distribution de $\ell/\sqrt{N}$ pour la première excitation du couplage à liens aléatoires en dimension 3.*

est distribuée suivant une exponentielle. D'autre part la taille ℓ se comporte comme $\ell \sim \sqrt{N}$ comme le montre la figure 2.6. Finalement une mesure de la corrélation de E et ℓ semble indiquer que ces deux grandeurs ne sont pas corrélées.

Bien que je n'ai pas mené de calculs analytiques pour expliquer ces comportements on peut trouver quelques arguments heuristiques. On considère des chemins alternés de très faible énergie (un chemin alterné est une suite de liens qui sont alternativement dans et hors du fondamental, voir chapitre suivant). Pour construire un tel chemin on va supposer qu'on a, à chaque pas, un choix très limité de possibilités. On prend un point quelconque et on construit un de ces chemins alternés. Comme il n'y a pas de géométrie, la probabilité de retomber sur un point déjà visité est proportionnelle à ℓ/N où ℓ est la taille du chemin. En moyenne on obtient une intersection quand $\ell \sim \sqrt{N}$ et on a ainsi une boucle de taille $O(\sqrt{N})$. Pour estimer l'énergie d'un chemin, on considère le fondamental d'un système à N points et on rajoute deux nouveaux points. La différence entre les fondamentaux des systèmes à N et $N+2$ points est un chemin alterné (cf. chapitre suivant) et son énergie est d'ordre 1 (puisque l'énergie est extensive). Dans un système de taille N il est naturel de penser qu'on peut construire $O(\sqrt{N})$ tels objets de taille $\sqrt{N}$. Ainsi l'excitation de cette taille de plus faible énergie doit avoir une énergie de l'ordre de $1/\sqrt{N}$. Finalement le fait que l'énergie soit distribuée exponentiellement n'est pas très étonnant dans la mesure où on prend le minimum d'un ensemble aléatoire d'excitations, c'est l'indication qu'on est en présence d'un modèle dont

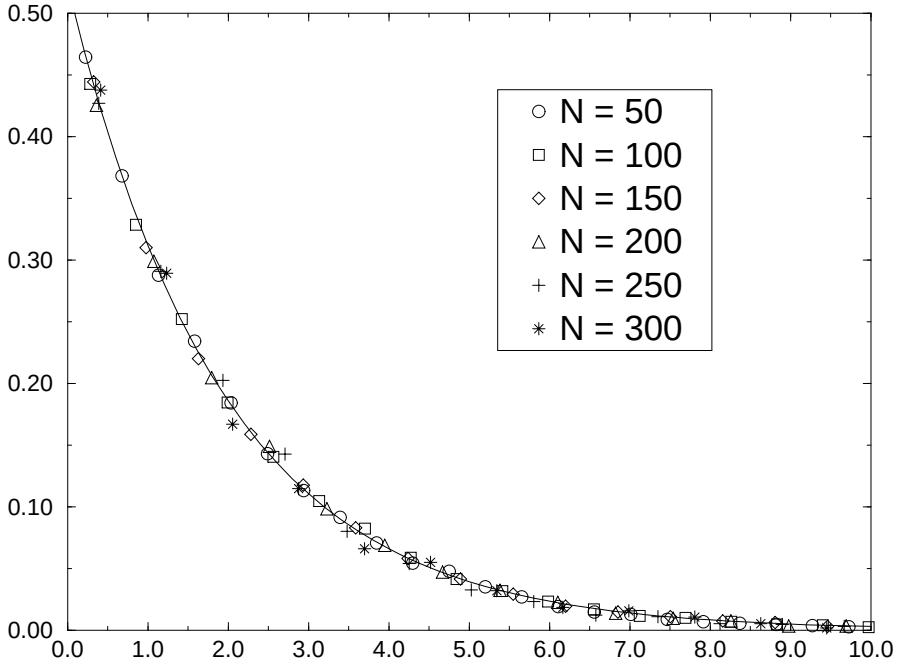

FIG. 2.7 – *Distribution de EN pour la première excitation du couplage euclidien en dimension 3. La courbe est un fit exponentiel de l'ensemble des données.*

les énergies des excitations sont indépendantes (contrairement au modèle à énergie aléatoire [Der81] où ce sont les états qui ont des énergies indépendantes).

L'approche "bouclettes"

Dans le cadre du modèle euclidien, on peut supposer que seules des excitations de taille finie (qui ne grandissent pas avec N) apparaissent et que leur énergie se comporte comme dans la théorie des gouttelettes (ici "bouclettes") : $E \sim \ell^\theta$. On obtient ainsi une prédiction pour la distribution en taille de la première excitation que l'on peut vérifier [HM98]. Concernant l'énergie, on peut faire le petit raisonnement suivant : une excitation de taille finie typique a une énergie en $O(1)$ (puisque un lien court a une longueur typique en $O(1)$). Donc si on considère l'excitation de plus faible énergie de taille ℓ passant par un point donné elle a une énergie d'ordre 1. Comme on peut en construire un nombre d'ordre N/ℓ, l'énergie de la plus faible va être en $O(1/N)$ (car il est facile de se convaincre que la densité de bouclettes d'énergie nulle est non nulle).

Je mesure l'énergie et la taille de la première excitation dans des conditions semblables à celles du modèles à liens aléatoires. Sur la figure 2.7 on constate bien que l'énergie de cette excitation est d'ordre $1/N$ et sa distribution est encore

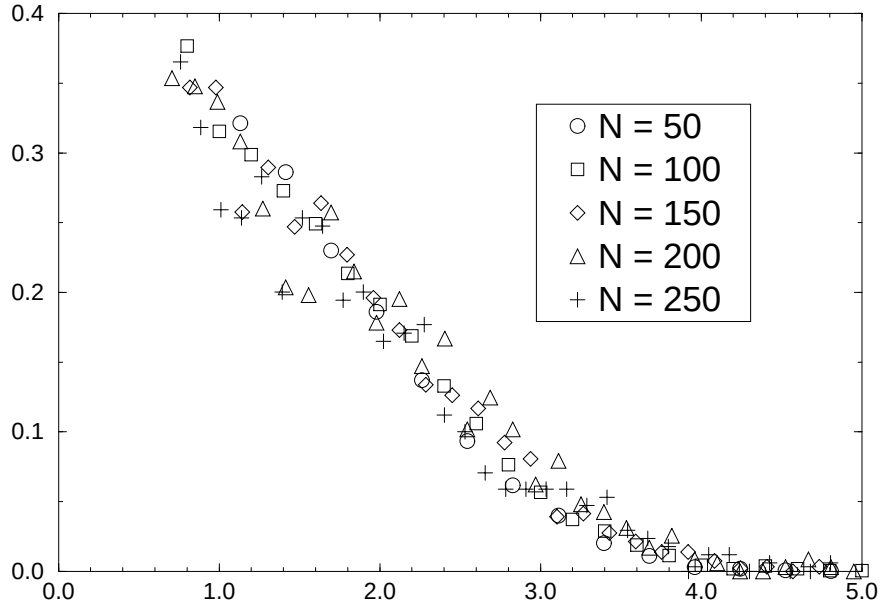

FIG. 2.8 – *Distribution de $\ell/\sqrt{N}$ pour la première excitation du couplage euclidien en dimension 3. Les distributions présentées ici ont été multipliées par $\sqrt{N}$ (voir texte).*

exponentielle.

Résultats pour le modèle euclidien

Dans le modèle euclidien on trouve des excitations de taille finie dont l'énergie est en $1/N$ et dont la distribution en taille peut probablement s'exprimer par une loi de puissance [HM98]. La question qui se pose est la suivante : retrouve-t-on également des grandes excitations comme dans le modèle champ moyen ? La réponse à cette question est oui comme on peut le voir sur la figure 2.8. Il faut remarquer que l'on cherche ici à observer une grande excitation dont l'énergie typique est $O(1/\sqrt{N})$ parmi des petites excitations d'énergie typique $1/N$. La probabilité que le premier état excité soit une grande boucle est donc en $O(1/\sqrt{N})$. Pour observer la loi d'échelle en taille il faut d'abord normaliser la probabilité en la multipliant par $\sqrt{N}$. Finalement, la situation se présente donc comme indiqué dans la figure 2.9

Dans [HM98] on peut trouver quelques résultats sur les états excités suivants qui confirment les conclusions obtenues à partir du premier état excité, je ne les rappelle pas ici.

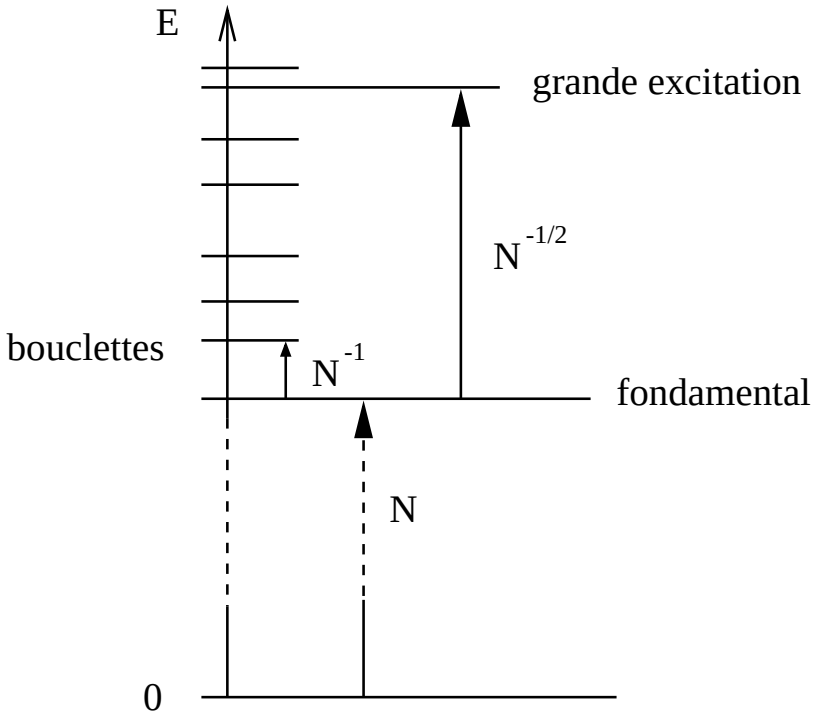

FIG. 2.9 – *Les excitations du couplage euclidien.*

Conclusion

Pour la première fois dans un système désordonné et frustré, il est possible d'avoir accès exactement à l'état fondamental et aux états excités. La situation obtenue ici est assez intéressante dans la mesure où elle est relativement inattendue. À priori, on pouvait s'attendre soit à trouver uniquement les grandes excitations prédites par le champ moyen, soit au contraire, à n'avoir que des excitations de taille finie correspondant à la théorie des gouttelettes (des bouclettes). Or la réalité est mixte : les deux types d'excitations sont présents (voir figure 2.9). On a d'une part des excitations de taille finie que l'on peut sans doute décrire par une théorie de type gouttelettes. D'autre part on a également des excitations de taille "infinie" (de taille $\sqrt{N}$) dont l'énergie est très faible ($O(1/\sqrt{N})$), et qui sont particulièrement bien prédites par le modèle de champ moyen.

Ainsi aucune des deux théories ne décrit entièrement la situation : elles ont chacune leur échelle de pertinence. Le champ moyen décrit la structure à grande échelle : le paysage d'énergie est constitué de grandes vallées qui diffèrent les unes des autres par un nombre de liens de l'ordre de $\sqrt{N}$ et une énergie (au fond des vallées) de l'ordre de $1/\sqrt{N}$. La théorie des bouclettes, elle, décrit la structure à petite échelle de chaque vallée. Le point clé est la non commutation des limites $N \to \infty$ et $\ell \to \infty$, les deux théories correspondant aux deux possibilités : le champ moyen revient à prendre la limite $\ell \to \infty$ en premier alors que les bouclettes prennent d'abord $N \to \infty$. Il peut sembler étonnant d'autre part que la structure en vallées ne soit pas associée à une brisure de symétrie des répliques. L'explication tient au fait que les vallées ne diffèrent que par $\sqrt{N}$ liens, ce qui correspond à un terme infinitésimal dans le recouvrement entre différentes vallées.

On peut imaginer pour les verres de spins une situation analogue à celle du couplage : la structure du paysage d'énergie à grande échelle serait décrite par le champ moyen et la théorie des gouttelettes serait valable pour toute échelle finie.

Chapitre 3

Approche numérique pour le couplage

Je présente dans ce chapitre les méthodes numériques mises en place pour traiter le couplage minimal et obtenir les résultats numériques du chapitre précédent.

3.1 Détermination de l'état fondamental

3.1.1 Problème dual

Pour déterminer l'état fondamental du couplage minimal on utilise des méthodes provenant de la théorie de la dualité pour les problèmes de programmation linéaire. La remarque fondamentale est la suivante : si on prend un couplage quelconque (voir équations 2.1 et 2.2) et une variable y_i en chaque point vérifiant les contraintes

$$y_i + y_j \leq l_{ij}, \tag{3.1}$$

on a alors

$$\sum_{i,j} n_{ij} l_{ij} \geq \sum_i y_i. \tag{3.2}$$

Il est clair qu'on ne peut avoir l'égalité dans l'équation 3.2 que si le couplage est minimal. On va donc essayer de construire un couplage et des variables y_i qui donnent l'égalité dans cette équation. On a alors les conditions suffisantes suivantes

$$n_{ij} = 0 \quad \text{ou} \quad y_i + y_j = l_{ij}. \tag{3.3}$$

Il se trouve (et ceci est démontré par l'existence de l'algorithme de la section suivante) que pour le PCBM il existe toujours des variables y_i qui donnent l´égalité dans l'équation 3.2 (avec le couplage minimal). Les contraintes 3.3 sont alors des conditions nécessaires et suffisantes de minimalité du couplage. Pour le PCM, ceci

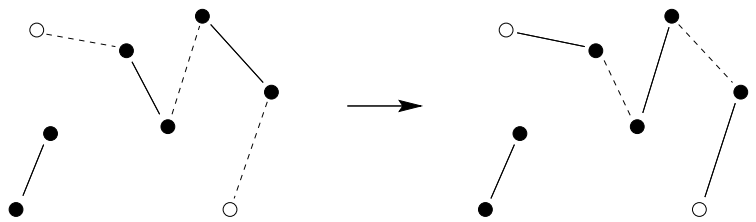

FIG. 3.1 – *Un chemin augmentant dans un couplage. Sur cette figure les liens appartenant au couplage sont dessinés en lignes pleines et les autres en lignes pointillées. Un chemin augmentant permet d'introduire deux nouveaux points (les extrémités du chemin) dans un couplage.*

n'est plus vrai et il faut utiliser des méthodes plus subtiles dans le détail desquelles je ne rentrerai pas (voir [BD83] pour plus d'information).

3.1.2 Algorithme hongrois

Je vais maintenant décrire l'algorithme (dit hongrois) qui permet de résoudre exactement le PCBM. Cet algorithme consiste, comme expliqué précédemment, à construire un couplage et des y_i vérifiant les équations 3.1 et 3.3.

Cet algorithme fonctionne par récurrence : à partir d'un couplage optimal et de y_i pour $2(N-1)$ points il construit un couplage optimal et des y_i pour $2N$ points. Supposons donc connu un couplage et des y_i pour $2(N-1)$ points, l'idée est de trouver un chemin augmentant (*augmenting path*) entre les deux points à ajouter (voir figure 3.1), tel que chaque lien de ce chemin vérifie $l_{ij} = y_i + y_j$. Ainsi en utilisant ce chemin pour ajouter les deux points au couplage on conserve les conditions d'optimalité et on a donc le couplage optimal des $2N$ points.

Pour construire ce chemin augmentant, on construit un arbre (dit hongrois) à partir d'un des points à rajouter au couplage tel que chaque lien de cet arbre vérifie encore $l_{ij} = y_i + y_j$ (voir figure 3.2). La difficulté est qu'il faut constamment satisfaire les équations 3.1. Pour ce faire, on définit tout d'abord les quantités suivantes

$$d_{ij} = l_{ij} - y_i - y_j. \tag{3.4}$$

Pour commencer l'arbre, on part d'un des points non couplés et on lui attribue un y_i tel que tous les d_{ij} soient positifs. Pour faire croître l'arbre on cherche le lien reliant un point de l'arbre marqué du signe + (voir figure 3.2) et un point hors de l'arbre tel que $\delta = d_{ij}$ soit le plus petit possible (on notera qu'on a toujours $\delta \geq 0$). Pour tous les points de l'arbre marqué du signe +, on ajoute δ à y et pour tous les autres (ceux marqués du signe -) on le retranche. Ainsi la contrainte 3.1 est toujours satisfaite pour tous les liens. C'est ce qui distingue le PCM du PCBM,

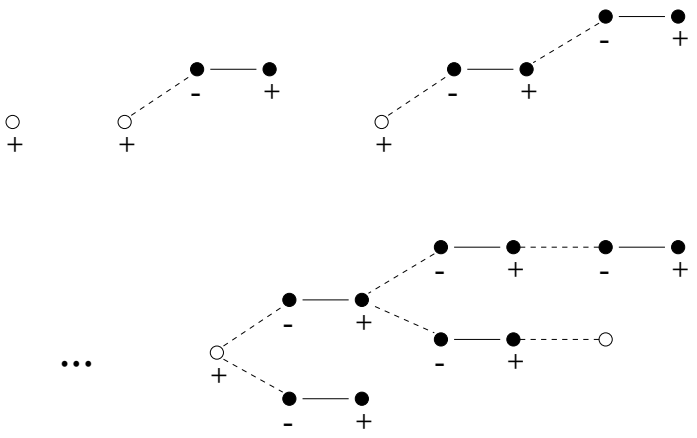

FIG. 3.2 – *Exemple de croissance d'un arbre hongrois. Les conventions de dessins sont ceux de la figure 3.1. En partant d'un point non encore couplé, on ajoute à l'arbre des paires de points couplés et finalement on ajoute le deuxième point non couplé. Le chemin entre les deux points non couplés est alors un chemin augmentant.*

dans le PCM il existe des liens entre les différents points de l'arbre marqués du signe + et pour ces liens la contrainte 3.1 n'est pas nécessairement satisfaite. Pour terminer cette étape de croissance de l'arbre on ajoute le lien choisi et le point associé à l'arbre ainsi que le point qui lui est couplé (s'il existe). Chaque lien du nouvel arbre ainsi construit vérifie bien $l_{ij} = y_i + y_j$. On répète alors l'opération jusqu'à ce que le point non couplé soit ajouté à l'arbre, et on a alors le chemin augmentant que l'on cherchait.

Pour le PCM, le même principe peut être utilisé, mais les conditions d'optimalité et l'algorithme sont alors plus complexes (le PCBM n'est alors qu'un cas particulier). Pour les détails, je renvoie à l'article sur lequel je me suis appuyé [BD83].

3.2 Mise en œuvre pratique

3.2.1 Approximation aux voisins proches

L'algorithme décrit dans [BD83] a une complexité en $O(NE\log(N))$ où N est le nombre de points et E le nombre de liens, donc a priori $E = O(N^2)$ et l'algorithme est en $O(N^3\log(N))$. Le choix de cet algorithme pourrait alors sembler peu judicieux puisqu'il existe d'autres algorithmes plus rapides en $O(N^3)$. En fait ce choix est intéressant à deux titres : premièrement en se limitant aux liens avec les premiers voisins de chaque point (approximation que je vais discuter) on a

$E = O(N)$ et l'algorithme est en $O(N^2 \log(N))$ ce qui fait de lui le meilleur du marché. Deuxièmement, cet algorithme a la propriété (exploitée dans le calcul des excitations) de pouvoir ré-optimiser le couplage optimal après le changement de la longueur d'un lien en un temps $O(E \log(N)) = O(N^2 \log(N))$ et en réutilisant l'approximation des plus proches voisins on obtient $O(N \log(N))$.

L'approximation aux voisins proches consiste à ne pas considérer tous les liens dans le calcul du fondamental (c'est-à-dire que certains points n'ont pas la possibilité d'être couplés ensemble). Bien sûr, on n'a plus la garantie d'obtenir la vraie solution dans la mesure où certains liens que l'on néglige peuvent faire partie du fondamental. Est-ce vraiment un problème? Voici la procédure que j'utilise pour savoir quels liens garder. Je choisis d'abord un entier k et je décide (arbitrairement) de garder les k liens les plus courts pour chaque points ainsi que ceux d'une longueur inférieure à d_k (voir équation 2.3). Pour un choix de $k = 15$, on commet une erreur typique relative de l'ordre de 10^{-5} sur la longueur du couplage minimal. Avec le nombre d'instances typique qu'on utilise, on obtient au mieux une erreur statistique relative de l'ordre de 10^{-4}. Ainsi l'erreur statistique domine largement et l'approximation est légitime.

3.2.2 Réduction de variance

Afin de diminuer l'erreur statistique, j'utilise une méthode de réduction de variance introduite précédemment par O. Martin [PM96, CBB+97]. Cette méthode repose sur le fait que la longueur L_{MM} du couplage minimal est fortement corrélée avec la longueur L_1 du graphe des premiers voisins (la somme des distances de chaque point à son premier voisin) dont la longueur moyenne est connue analytiquement (équation 2.3). On introduit un estimateur L_e de L_{MM} défini par

$$L_e = L_{MM} + \lambda(\langle L_1 \rangle - L_1) \tag{3.5}$$

où λ est un nombre à déterminer. Il faut remarquer d'abord que L_e est un estimateur non biaisé, dans le sens que $\langle L_e \rangle = \langle L_{MM} \rangle$. Comment choisir λ? On désire que l'écart type (que l'on notera σ) de L_e soit minimum, or on a

$$\sigma_{L_e}^2 = \sigma_{L_{MM}}^2 + \lambda^2 \sigma_{L_1}^2 - 2\lambda C \sigma_{L_{MM}} \sigma_{L_1}. \tag{3.6}$$

où C est le coefficient de corrélation de L_{MM} et L_1 défini par

$$C = \frac{\langle L_{MM} L_1 \rangle - \langle L_{MM} \rangle \langle L_1 \rangle}{\sigma_{L_{MM}} \sigma_{L_1}}. \tag{3.7}$$

Il est facile de voir que σ_{L_e} est minimum pour $\lambda = C\sigma_{L_{MM}}/\sigma_{L_1}$ et on a alors

$$\sigma_{L_e} = \sigma_{L_{MM}} \sqrt{1 - C^2}. \tag{3.8}$$

On voit donc que si L_{MM} et L_1 sont complètement corrélés (i.e. $C = 1$) on a $\sigma_{L_e} = 0$ et inversement si L_{MM} et L_1 sont complètement décorrélés (i.e. $C = 0$) alors $\sigma_{L_e} = \sigma_{L_{MM}}$. En pratique on trouve que $C \sim 0.85$ ce qui divise la variance (et donc le temps de calcul pour une précision équivalente) par un facteur compris entre 3 et 5. Dans le cas présent la réduction de variance est limitée par le fait que l'équation 2.3 (pour le calcul de $\langle L_1 \rangle$) n'est exacte que dans la limite $N \to \infty$, il y a une correction exponentielle qui correspond au fait que les voisins d'un point sont disposés dans un hyper-cube et non dans une hyper-sphère. Pour que cet effet soit négligeable il faut que la probabilité que le premier voisin d'un point ne soit pas dans l'hyper-sphère en question soit faible c'est-à-dire que

$$N \gg \frac{-1}{\log(1 - B_d 2^{-d})}. \tag{3.9}$$

Ceci n'est guère gênant à faible dimension (pour $d = 3$ il faut $N \gg 2$), mais en haute dimension cette contrainte ne peut être satisfaite, pour $d = 10$ par exemple il faut $N \gg 400$ et ceci pose déjà des problèmes à partir de la dimension 7. En pratique j'ai limité la réduction de variance aux cas $d \leq 6$. Cet effet vient du fait, non intuitif, que le volume de l'hyper-sphère inscrite dans l'hyper-cube unité devient vite très petit quand la dimension augmente, par exemple pour $d = 10$ ce volume vaut $\pi^5/122880 = 0.00249\ldots$.

3.2.3 Effets de taille finie

Une fois obtenue la moyenne de l'énergie du fondamental du PCM (ou du PCBM) pour différentes valeurs de N, il faut pouvoir en déduire une valeur pour β_{MM}. Il faut donc faire un ajustement (*fit*) des données de façon à extrapoler au cas $N \to \infty$. Le problème principal dans ce genre de situation est le choix de la fonction d'ajustement car pour peu qu'elle soit raisonnable, n'importe quelle fonction peut faire l'affaire en apparence. Heureusement, le problème ne se pose pas ici car la théorie nous donne la nature des effets de taille finie. Ici, comme la symétrie des répliques n'est pas brisée (ce qui semble être vrai également pour le cas euclidien) la dépendance en N est une série entière en $1/N$ (voir équation 2.11).

Voici la procédure que j'utilise: je mesure $\langle L_{MM} \rangle$ pour des valeurs de N allant de 50 à 1000 avec une statistique de 100000 à 1000 instances. Ceci permet d'obtenir pour chaque valeur de N et grâce à la réduction de variance une précision relative sur $\langle L_{MM} \rangle$ de l'ordre de 10^{-4}. Puis je fais un ajustement à trois paramètres avec une fonction de la forme $f(1/N) = a + b/N + c/N^2$. Le χ^2 obtenu est correct (de l'ordre du nombre de données moins le nombre de paramètres) et les coefficients sont stables si on ajoute un quatrième terme en $1/N^3$. Ceci confirme, en plus de l'argument théorique, que cette fonction d'ajustement est légitime. Pour obtenir une barre d'erreur sur β_{MM}, on force le paramètre a à changer et les limites de la

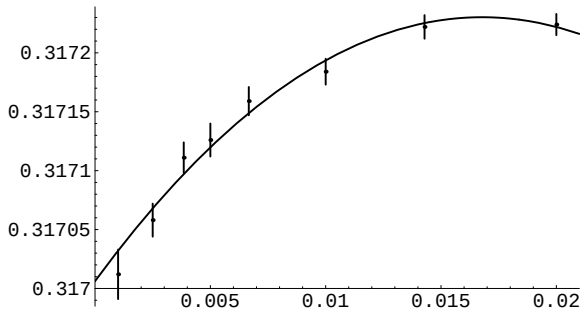

FIG. 3.3 – *Détermination de β_{MM} par ajustement. L'ajustement représenté ici concerne le PCM euclidien en dimension 3, $\chi^2 = 4.4$ et $\beta_{MM} = 0.31701 \pm 2\ 10^{-5}$.*

barre d'erreur sont atteintes quand le χ^2 a augmenté de 1. Voir figure 3.3, pour un exemple d'ajustement.

3.3 Détermination des états excités

L'avantage de l'algorithme hongrois et de sa généralisation au PCM par Ball et Derigs [BD83] est qu'il permet très rapidement de ré-optimiser le couplage minimal après le changement de la longueur d'un des lien.

3.3.1 Algorithme hongrois et ré-optimisation

Je décris maintenant comment l'algorithme hongrois permet d'y parvenir. On suppose qu'on a déjà calculé le fondamental avec l'algorithme hongrois, on connaît donc le couplage minimal et les y_i associés. Supposons maintenant que l'on veuille connaître le couplage minimal pour des l_{ij} légèrement différents. Si on change l'un des l_{ij}, on peut recalculer le couplage minimal très rapidement de la manière suivante : soit le lien dont la longueur a changé fait partie du couplage minimal d'origine et il suffit d'enlever les deux points correspondants et de les remettre grâce à l'algorithme hongrois (les autres liens formant alors un couplage minimal); soit ce lien ne fait pas partie du couplage minimal et il faut alors enlever quatre points : les deux extrémités du lien ainsi que les deux points qui leur étaient couplés. Et on les remet avec l'algorithme hongrois.

La méthode est semblable (bien que plus complexe) dans le cas du PCM. Le point important est que cette opération peut être exécutée très rapidement, en un temps $O(N \log(N))$ pour peu qu'on utilise l'approximation des plus proches

voisins. C'est cette rapidité qui permet l'étude exhaustive des excitations qui a été menée.

3.3.2 Détails de l'algorithme

Je présente maintenant l'algorithme que j'ai mis au point pour déterminer l'ensemble des couplages d'une longueur inférieure à un certain seuil. Ou, pour parler en termes plus physiques, l'ensemble des états ayant une énergie inférieure à ce seuil. L'idée de base est la suivante : on part du couplage minimal, on change la longueur d'un lien et on ré-optimise le système. On obtient alors un état excité du système original. En répétant ce genre d'opérations on va voir qu'on peut obtenir tous les états excités en dessous du seuil. On va faire une recherche en arbre de type séparation et évaluation (*branch and bound*). Au cours de cette recherche on aura un hamiltonien modifié par rapport à l'original et un couplage qui sera minimal pour cet hamiltonien modifié. Il est important de noter que l'énergie du couplage en cours sera toujours mesurée par rapport à l'hamiltonien d'origine, l'hamiltonien modifié ne servira que pour le calcul du couplage minimal. Voici les différentes opérations que l'on effectuera.

couper un lien consiste à donner à un lien du couplage une longueur infinie (simplement très grande en pratique) et à ré-optimiser le système (avec l'hamiltonien modifié) afin d'obtenir un nouveau couplage. Le lien coupé ne fait alors plus partie du couplage. Il faut noter qu'au cours de cette opération l'énergie (par rapport à l'hamiltonien d'origine) augmente nécessairement. Parfois, si beaucoup de liens ont déjà été coupés, il peut être impossible de trouver un couplage. ce cas devra être pris en compte.

geler un lien consiste à donner à un lien du couplage une longueur négative infinie afin que celui-ci reste dans le couplage quelque soit les autres opérations que l'on fasse. Cette opération ne change pas l'énergie (puisque le couplage ne change pas). Il faut remarquer que l'algorithme du calcul du fondamental ne permet pas les longueurs négatives. La solution consiste simplement à ajouter à tous les liens une constante positive suffisamment grande (ce qui ne change pas le couplage). D'autre part même si le couplage ne change pas il est tout de même nécessaire de lancer la procédure de ré-optimisation car les y_i doivent être mis à jour.

mémoriser un couplage consiste à mémoriser le couplage en cours ainsi que l'hamiltonien modifié afin de pouvoir le restaurer par la suite. Ceci signifie en particulier que les liens coupés et gelés sont également mémorisés (au travers de l'hamiltonien modifié).

restaurer un couplage consiste à restaurer le couplage et l'hamiltonien modifié suivant une configuration mémorisée précédemment. Cette opération diminue toujours l'énergie puisque toute opération qu'on a faite entre la mémorisation et la restauration a augmenté l'énergie.

sauver les boucles consiste à sauvegarder les boucles définies par la différence entre le fondamental et le couplage en cours. Si une boucle est sauvée plusieurs fois au cours de la recherche on ne la prendra en compte qu'une fois. On se contente de sauvegarder les boucles plutôt que les couplages car cela est suffisant pour décrire tous les couplages et prend beaucoup moins de mémoire. D'autre part il n'est pas utile de trouver tous les couplages possibles, il suffit de trouver toutes les boucles.

L'algorithme consiste donc tout d'abord à calculer le fondamental. Puis on appelle la procédure suivante avec le fondamental comme argument.

procédure Calculer_Boucles(*couplage*)
début
  si l'énergie du *couplage* est supérieur au seuil
    alors quitter
  sauver les boucles
  Définir l'ensemble S des liens du *couplage* à couper
  pour chaque lien B dans S
    mémoriser le *couplage*
    couper le lien B
    si la coupure a été possible
      appeler Calculer_Boucles sur le nouveau couplage
    restaurer le *couplage* (mémorisé ci-dessus).
    geler le lien B
  fin de pour
fin

Il reste encore à définir quel est l'ensemble S utilisé par cette procédure. Le choix le plus simple pour commencer consiste à définir S comme étant l'ensemble des liens du couplage en cours qui ne sont pas gelés. Dans ce cas je vais montrer que la procédure Calculer_Boucles permet de sauver les boucles de tous les couplages ayant une énergie inférieure au seuil et respectant les liens coupés et gelés du couplage de départ pour peu que le couplage de départ soit minimal. Et que chaque couplage vérifiant ces hypothèses n'est exploré qu'une seule fois.

La procédure fait une recherche en arbre (puisqu'elle s'appelle une ou plusieurs fois elle même). Je montre par récurrence que la procédure fonctionne (i.e. elle fait

ce que je prétends). La récurrence portera sur n la distance maximale (en nœuds de l'arbre) jusqu'à l'extrémité de l'arbre (les feuilles).

cas $n = 0$: Si on est dans une extrémité (une feuille) de l'arbre cela signifie soit que l'énergie du couplage est plus grande que le seuil auquel cas la procédure ne fait rien ce qui est correct car comme le couplage est minimal tout couplage ayant les mêmes liens coupés et gelés a nécessairement une énergie plus grande et ne doit pas être exploré, soit qu'aucun lien ne peut être coupé et dans ce cas la procédure ce contente de sauver les boucles du couplage en cours ce qui est également correct car si aucun lien ne peut être coupé il n'existe aucun autre couplage ayant les mêmes liens coupés et gelés que le couplage de départ.

$n \Rightarrow n + 1$: Supposons maintenant que la procédure fonctionne si on est à une distance maximale des feuilles de l'arbre inférieure ou égale à n, je vais alors montrer que c'est vrai pour $n + 1$. Puisque $n + 1 \neq 0$ cela signifie que l'énergie du couplage est inférieure au seuil, la procédure sauve les boucles du couplage en cours (correct) et rentre dans la boucle, elle commence par couper un premier lien et s'appelle récursivement, d'après l'hypothèse de récurrence ceci fonctionne bien et donc tous les couplages ayant ce lien coupé sont explorés une fois et une seule, puis le couplage est remis dans sont état initial et le premier lien est gelé, donc tous les couplages trouvés par la suite auront ce lien et seront donc différents de ceux déjà trouvés. Ensuite on coupe un deuxième lien, on trouve alors tous les couplages qui ont ce lien coupé (et le premier gelé) et ainsi de suite. En fin de compte on a trouvé tous les couplages possibles une fois et une seule car tout couplage différent de celui de départ a forcément un lien coupé par rapport à lui et on va donc le trouver quand on va essayer de couper ce lien.

Cet algorithme a malheureusement un gros défaut comme il explore tous les couplages possibles (en dessous du seuil) il va prendre beaucoup de temps. En effet pour chaque couplage trouvé il faut essayer de couper tous les liens ce qui donne au mieux $O(CN^2 \log(N))$ où C, le nombre de couplages à trouver, grandit exponentiellement avec le seuil. C'est lent, c'est beaucoup trop lent ! Il faut être plus malin...

L'idée est de ne pas chercher tous les couplages possibles mais plutôt toutes les boucles qui entrent en jeu (celles dont l'énergie est inférieure au seuil). Un meilleur choix pour le S de l'algorithme est le suivant. Si le couplage est le fondamental, on garde la définition précédente, sinon on définit S comme les liens (non gelés) du couplage qui n'appartiennent pas au fondamental. La démonstration du fonctionnement devient alors plus délicate. Il faut d'abord remarquer qu'au cours de la recherche au plus un lien du fondamental est coupé puisque les liens du fondamental n'appartiennent à S que quand on se trouve à la racine de l'arbre. J'appelle boucle principale du couplage en cours la boucle qui passe par ce lien coupé du fondamental. Il faut remarquer (contrairement à ce que j'avais crû tout d'abord) qu'il peut y avoir d'autres boucles dont la présence est due à des liens n'appar-

tenant pas au fondamental et qui ont été gelés plus haut dans l'arbre. En fait un choix encore meilleur de S consiste à se restreindre aux liens non gelés de la boucle principale et n'appartenant pas au fondamental et on peut aussi se contenter de ne sauver les boucles que quand il n'y a qu'une seule boucle dans le couplage. On peut montrer que la procédure Calculer_Boucles va sauver une fois et une seule toutes les boucles d'énergie inférieure au seuil compatibles avec les liens coupés et gelés du couplage de départ (je dis qu'une boucle est compatible avec ces contraintes si le couplage défini par cette unique boucle l'est). La démonstration est similaire, il suffit juste de prendre en compte le fait qu'on ne s'intéresse qu'aux couplages à une boucle. Cette méthode est beaucoup plus rapide, mais elle ne donne pas directement tous les états excités, elle ne donne que les boucles (à partir desquelles on peut bien sûr reconstruire les états excités).

Si on ne s'intéresse qu'aux p premières excitations on peut procéder comme suit : on appelle la procédure avec un seuil infini et dès qu'on a trouvé p excitations on fixe le seuil à l'énergie de la p-ème et à chaque fois que l'on trouve une nouvelle excitation on ajuste le seuil. Le défaut de cette méthode est qu'au début l'arbre atteint une profondeur au moins égale à p, on peut régler ce problème en ne prenant pas un seuil infini mais alors on n'est plus sûr de trouver p excitations. Si on ne s'intéresse qu'à la première excitation on peut procéder autrement : si on coupe un lien du fondamental on obtient une boucle, on peut obtenir ainsi en coupant les différents liens du fondamental jusqu'à $N/2$ boucles différentes (N dans le cas du PCBM). La première excitation en fait nécessairement partie et si il y en a plus qu'une la deuxième excitation aussi (en revanche la troisième peut ne pas y être).

Chapitre 4

Verres de spins

Dans ce chapitre je décris l'état des connaissances sur les verres de spins et je présente mes résultats. L'ensemble des méthodes numériques est reporté au chapitre suivant.

4.1 Controverses sur les verres de spins

Depuis maintenant 15 ans, de nombreuses controverses agitent le domaine des verres de spins. Ces controverses sont essentiellement dues au fait qu'aucune des théories existantes n'a pu être acceptée par l'ensemble de la communauté. Pourquoi ? Je vais essayer de faire rapidement l'état des lieux (on pourra également se référer à [MPRT+99]). Pour des revues plus générales sur les verres de spins voir [BY86b, MPV87, FH91, You98].

4.1.1 Vue d'ensemble

La théorie de champ moyen et la théorie des gouttelettes ont été présentées dans l'introduction. Rappelons rapidement quelques points.

La théorie de champ moyen, que tout le monde accepte pour le modèle SK, affirme essentiellement qu'il existe un grand nombre d'états purs, que ceux-ci sont organisés suivant une structure ultramétrique, que la phase verre de spins est caractérisée par une fonction $P(q)$ non triviale et qu'elle subsiste en champ magnétique en dessous de la ligne de de Almeida et Thouless (ligne AT). À l'opposé, la théorie des gouttelettes suppose qu'il n'existe que deux états purs, donc pas d'ultramétricité et pas de $P(q)$ non trivial et pas non plus de ligne AT.

Comment se fait-il qu'aucune de ces théories ne l'ait emporté depuis 15 ans ? Aucune de ces deux théories n'est complètement satisfaisante, car elles n'offrent pas une image complète et cohérente. D'un coté le champ moyen propose peu d'in-

terprétations dans l'espace physique : en particulier il ne dit pas grand chose de la nature *géométrique* des excitations, par exemple pour expliquer l'ultramétricité ou les corrélations entre spins dans l'espace. Par contraste la théorie des gouttelettes est très attrayante, physique, et est basée sur des idées simples de loi d'échelle. Mais, cette théorie ne permet pas raisonnablement d'expliquer de nombreux phénomènes observés, soit numériquement comme les mesures de recouvrement, soit expérimentalement comme les effets de mémoire. Assez étonnamment il y a assez peu de théories alternatives; on peut citer essentiellement des approches plus mathématiques comme celles de Newman et Stein [NS96, NS97, NS98a] ou de Guerra [Gue96] qui sont malheureusement d'un accès assez difficile.

Afin de mieux comprendre la controverse, on peut s'intéresser aux arguments utilisés par les uns et les autres pour contrer la théorie concurrente. L'un des arguments principaux de la théorie de champ moyen est l'observation numérique d'un $P(q)$ non trivial en $d = 3$. La réponse habituelle des tenants des gouttelettes tient en deux points : d'une part les effets de taille finie sont très importants (ils expliquent de plus l'observation d'un $P(q)$ non trivial en $d = 2$) et d'autre part un $P(q)$ non trivial peut être causé par des effets de bords dans un système où il n'y a qu'un seul état (et éventuellement son symétrique). C'est le cas dans un exemple de Fisher : un modèle d'Ising ferro-magnétique avec des conditions aux bords anti-périodiques. Inversement, l'argument essentiel de la théorie des gouttelettes, outre sa simplicité et son aspect plus physique, tient dans les mesures de θ par exemple avec des mesures d'interaction effective par changement de conditions aux bords. Ce genre d'arguments est contré de deux manières, premièrement les différentes mesures de θ ne sont pas toutes concordantes ce qui remet en cause l'existence même de θ et surtout ces mesures ne sont pas véritablement en contradiction avec la théorie du champ moyen.

4.1.2 Aspects expérimentaux

On pourrait penser que l'approche expérimentale aurait dû trancher la question, mais la situation est encore mitigée. Il y a deux raisons principales à cela. Premièrement les effets dynamiques sont ceux qui dominent dans les expériences sur les verres de spins. En effet dès que la température est suffisamment basse ($T \leq 1.05T_c$) le temps d'équilibration devient trop grand et les verres de spins vieillissent : ils évoluent indéfiniment (pour une revue sur le vieillissement voir [BCKM98]). Il existe de plus des effets de mémoire [JVH+98, NS98b, JNV+99], ainsi l'état du système dépend de toute son histoire et pas seulement des conditions présentes. Ces deux effets, vieillissement et mémoire, s'expliquent difficilement par la théorie des gouttelettes alors que la nature hiérarchique de la théorie du champ moyen peut en rendre compte.

Outre les propriétés dynamiques qui rendent l'étude des quantités statiques (à

l'équilibre) très difficile, un autre problème se pose : les différences entre les deux théories sont difficilement accessibles aux mesures, en particulier il n'est pas possible de mesurer la distribution $P(q)$ des recouvrements. La plupart des expériences passent par une mesure de la susceptibilité magnétique statique ou dynamique mais cela permet rarement de conclure. Diverses approches sont tout de même possibles pour essayer de trancher entre les deux théories. Par exemple, en mesurant la susceptibilité magnétique dynamique en fonction du champ et en faisant tendre la fréquence vers zéro on peut explorer le diagramme des phases : c'est ce qui a été fait dans [MJN+95, NS98b] et il semble qu'il n'y ait pas de ligne AT (au moins au dessus d'une certaine valeur du champ magnétique). Une autre technique a été proposée par Weissman [Wei98] consistant à mesurer les fluctuations de la résistivité pour sonder les retournements de spins; la théorie des gouttelettes ne semble pas rendre compte des résultats ainsi obtenus. Il n'y a pas eu encore d'expérience permettant vraiment de valider une des deux théories mais globalement la tendance serait plutôt contre la théorie des gouttelettes.

4.1.3 Aspects numériques

Vu les problèmes expérimentaux et la difficulté de construire une théorie à partir de rien, les études se sont naturellement tournées vers la simulation numérique. Jusqu'à maintenant, l'essentiel des simulations numériques sont de type Monte Carlo (à l'exception des mesures de l'exposant θ des gouttelettes [BM84, Har99]). Malheureusement ce type de simulation rencontre deux problèmes majeurs avec les verres de spins.

Premier problème, analogue au problème expérimental : le système s'équilibre très lentement dès qu'on s'approche de la phase verre de spins. Malgré la mise au point d'une nouvelle technique de simulation utilisant plusieurs répliques du système à des températures différentes [HN95] (voir aussi [SW86, MP92, MPR98]) qui a permis d'accélérer (de beaucoup) les simulations, les possibilités restent encore limitées. Le second problème est que les effets de taille finie sont très importants et assez mal compris autour de la transition. Il faudrait alors pour obtenir des données facilement interprétables aller jusqu'à des tailles très élevées ce qui est impossible à cause du premier problème.

Dans les simulations Monte Carlo statiques (je ne parlerais pas ici des simulations dynamiques hors d'équilibre), la majorité des mesures porte sur la fonction $P(q)$ où sur des observables dérivées telles que la susceptibilité verre de spins. Une autre possibilité est la mesure de la distribution $P_e(q_e)$ du recouvrement en énergie défini par

$$q_e = \frac{1}{Nd} \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^2 S_i^\alpha S_i^\beta S_j^\alpha S_j^\beta \tag{4.1}$$

où α et β désignent deux répliques indépendantes à l'équilibre. Une autre variante que je trouve particulièrement intéressante consiste à ne considérer le $P(q)$ que sur une petite fenêtre spatiale [MNZ+98b] ce qui permet de vérifier qu'un recouvrement non trivial n'est pas dû à un effet de conditions aux bords.

Je ne vais pas m'attarder trop longuement sur les nombreuses simulations en absence de champ magnétique; on pourra consulter [MPR98, MPZ99] et les références qui s'y trouvent pour tout ce qui concerne la brisure de symétrie des répliques, la conclusion globale étant que tout semble indiquer que la théorie de champ moyen est correcte ($P(q)$ non trivial...). Par exemple, les tests d'ultramétricité [Sou84, BY86a, CMP97, FRT99] sont tous plus ou moins positifs. Néanmoins, il est important de citer [MBD98] qui montre que pour un système où l'on sait que le $P(q)$ est trivial, on peut quand même observer numériquement un $P(q)$ non trivial à cause des effets de taille finie. Finalement, d'autres se sont plus particulièrement intéressées aux exposants critiques [BPC96, BLMC98, PC99]; ces simulations semblent indiquer qu'il n'y aurait pas d'universalité. D'une part ceci remet en cause toute approche de renormalisation et d'autre part il faudrait être beaucoup plus attentif aux modèles utilisés dans l'ensemble des simulations.

Voyons maintenant de manière plus spécifique les simulations effectuées en champ magnétique. Le problème est alors de détecter la présence éventuelle de la ligne AT. La technique de base consiste à mesurer la susceptibilité verre de spins χ_{SG} et de chercher pour quelles valeurs des paramètres B et T elle diverge (à l'exception des simulations de Grannan et Hetzel [GH91] où l'on suit les lignes $\chi_{SG} = 1$). Il existe relativement peu de travaux en dimension 3 (et pas de récents); on peut citer notamment [CPPS90, GH91, KI93]. En revanche il en existe davantage (et de plus récents) en dimension 4 [CPRR93, PR94, PR98, MPZ98, MNZ98a]. La raison en est qu'en dimension 4 les effets de tailles finie sont plus petits et les résultats un peu plus propres.

Toutes ces simulations sont compatibles avec la présence d'une ligne AT, mais elles sont malheureusement assez peu convaincantes à cause des effets de taille finie qui sont très importants. La présence de ces grands effets de taille finie peut être expliquée par deux éléments : premièrement, à cause des difficultés pratiques, on utilise des petits systèmes de sorte que la longueur de corrélation est plus grande que la taille du système. D'autre part, toujours à cause de ces mêmes difficultés, on se place à assez haute température, près de la transition de champ nul. On se retrouve ainsi doublement dans une région de *cross-over*, d'une part du point de vue de la taille du système et d'autre part du point de vue de la température. Il est alors très difficile d'identifier de manière efficace des lois d'échelle pour pouvoir extrapoler. S'ajoute à cela, le fait que si la ligne AT existe elle doit être tangente à l'axe $B = 0$ au point de transition et donc difficile à voir à haute température. Finalement toutes ces simulations utilisent le modèle $\pm J$ (pour des raisons de vitesse de calcul) ce qui repose le problème de l'universalité...

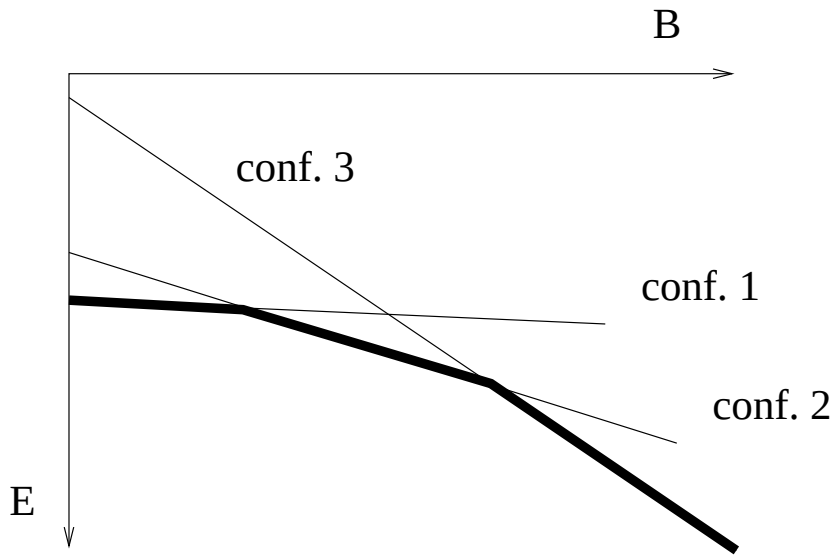

FIG. 4.1 – *Le fondamental en fonction du champ magnétique*

4.2 À la recherche de la ligne AT

Afin de faire avancer le débat je me suis intéressé à l'existence de la ligne AT pour laquelle je propose une nouvelle approche. Cette approche consiste à faire une série de mesures à température nulle afin de trouver le cas échéant l'intersection de la ligne AT avec la ligne $T = 0$. Ces résultats sont rassemblés dans [HM99a].

4.2.1 Ce que je mesure

L'approche que je suis consiste à calculer l'état fondamental d'un verre de spins pour de nombreuses valeurs du champ magnétique, l'idée étant d'être capable d'identifier au mieux les valeurs du champ magnétique pour lesquels un changement a lieu et la nature de ce changement. Ceci nécessite de pouvoir calculer l'état fondamental du système de manière exacte. J'explique au chapitre prochain comment je procède pour obtenir l'état fondamental avec une très grande probabilité (de l'ordre de $1 - 10^{-5}$).

L'avantage de cette approche est double, tout d'abord on évite complètement les problèmes de dynamique lente spécifiques aux simulations Monte Carlo puisqu'il ne s'agit pas ici de simulations de ce type, et deuxièmement il semble que les effets de taille finie soient beaucoup plus faibles à température nulle.

Les changements du fondamental

Considérons le fondamental d'un verre de spins en champ magnétique fort; tous les spins sont orientés suivant le champ. Puis on baisse le champ petit à petit. Il se produit alors une série de changements dans le fondamental (chaque fois que l'ancienne configuration cesse d'être le fondamental). Le croisement des différentes configurations en question est représenté sur la figure 4.1. Comme je me limite au cas où le désordre est continu, un changement consiste nécessairement en un retournement d'un ensemble connexe de spins (la probabilité de deux évènements distincts simultanés est nulle). Je distingue deux types d'évènements suivant le nombre de spins mis en jeu. Il y a les petits évènements, constitués d'un nombre fini de spins (en pratique les évènements à 1 ou 2 spins sont les plus courants). Ces petits évènements sont relativement peu intéressants car ils constituent en quelque sorte le changement continu du fondamental et ne permettent pas de trancher entre les différentes théories. D'autre part il y a les grands évènements où une fraction finie x du système se retourne, ce sont ces évènements qui m'intéressent. Je note s le nombre de spins qui se retournent simultanément, dans le premier cas $s = 1$, $2, 3\ldots$ dans le deuxième cas $s = xN$.

Prédictions théoriques

Dans le cadre de la théorie des gouttelettes en champ nul, l'énergie interfaciale d'une gouttelette de volume s est $s^{\theta/d}$ (où d est la dimension). Appliquons maintenant un champ magnétique infinitésimal B. La gouttelette devient instable si l'énergie magnétique, d'ordre $s^{1/2}B$, compense l'énergie d'interface. Or $\theta < (d-1)/2$ [FH88] donc $\theta/d < 1/2$ et il est donc clair que les gouttelettes les plus grandes sont les plus instables et se retournent pour un champ magnétique

$$B_{\min} \sim N^{\theta/d-1/2} \tag{4.2}$$

qui tend vers zéro dans la limite thermodynamique. En champ fini, le système à une aimantation finie proportionnelle à B et une gouttelette de taille s a donc une énergie magnétique d'ordre sB^2 défavorable au retournement. Ainsi seules les gouttelettes dont la taille est suffisamment faible peuvent se retourner car elles peuvent se trouver dans une fluctuation de l'aimantation locale suffisante. La théorie des gouttelettes prédit donc le comportement suivant pour les changements du fondamental : quand on applique un champ infinitésimal toutes les gouttelettes de grande taille instables se retournent. Dès qu'on est en champ fini, seules des gouttelettes de taille finie peuvent se retourner, et la taille caractéristique de ces retournements décroît quand le champ augmente.

Dans la théorie de champ moyen, en revanche, le paysage d'énergie a de nombreuses vallées même en champ fini. Quand le champ magnétique change, l'énergie

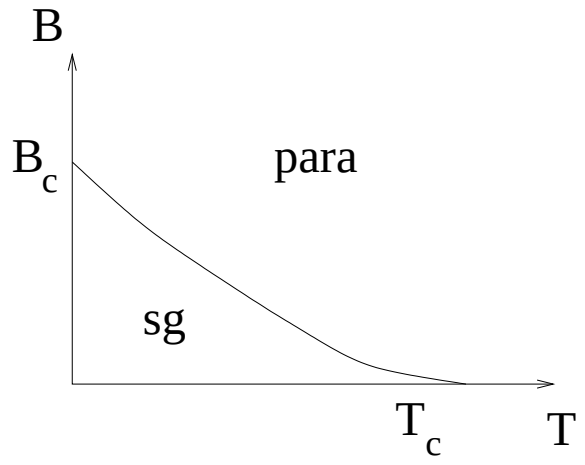

FIG. 4.2 – *Le diagramme de phase du modèle à connectivité finie*

de ces vallées change, conduisant inévitablement à des croisements de niveaux, si bien que le fondamental passe du fond d'une vallée à une autre très fréquemment. Ce passage correspond alors au retournement d'un amas infini de spins. En conclusion on peut donc dire que le retournement d'amas infinis dans le fondamental est, dans les deux théories, la signature de la phase verre de spins. On peut donc détecter cette phase par ce moyen.

Détails techniques

Je mesure le taux moyen $r(N, B, x)$ (par dB et par dx) de retournement de taille $s = xN$ spins au champ magnétique B pour un système de taille N. En pratique, je calcule le fondamental pour différentes valeurs du champ magnétique $B = 0$, ΔB, $2\Delta B$, $3\Delta B$, $4\Delta B$... Pour chaque intervalle je détermine quels sont les amas connexes qui se sont retournés. Je fixe $\Delta B = 0.1$ qui est suffisamment petit pour qu'une succession de petits retournements ne soit pas confondue avec un grand retournement. Je calcule ensuite l'histogramme des évènements de chaque taille dans chaque intervalle en moyennant sur un grand nombre d'instances (de 10^3 à 10^5 suivant la taille du système). Finalement l'estimateur pour $r(N, B, x)$ est obtenu pour chaque valeur du champ en sommant l'histogramme sur l'intervalle $s \in [(x - \Delta x/2)N, (x + \Delta x/2)N]$ et en divisant par $\Delta B \Delta x$. J'ai fixé $\Delta x = 0.1$, cette valeur est suffisamment grande pour avoir assez de statistique et suffisamment petite pour avoir une bonne résolution en x.

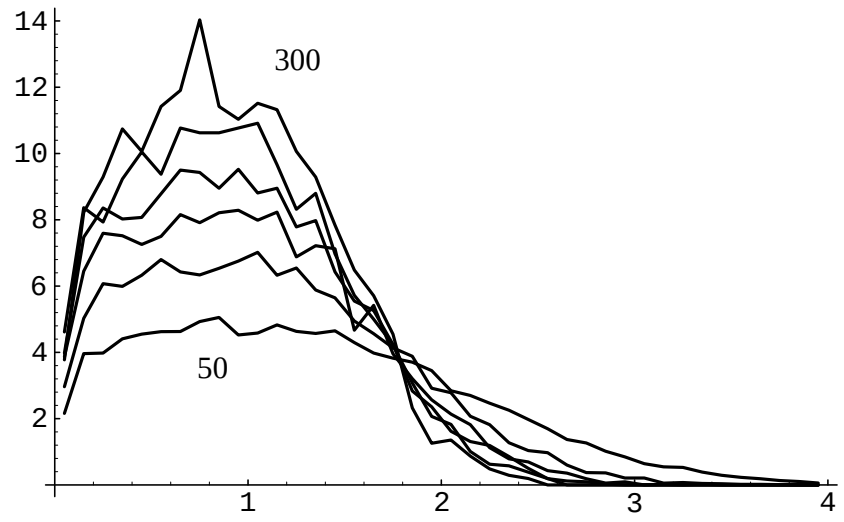

FIG. 4.3 – $r(N, B, 0.15)$ *en fonction de* B *pour le modèle à connectivité fixe pour les tailles 50, 100, 150, 200, 250 et 300.*

4.2.2 Le modèle à connectivité fixe

Avant d'aborder le modèle EA, il est prudent de tester cette méthode sur un modèle où on est sûr que le champ moyen est correct et qu'il y a une ligne AT. Un petit problème apparaît car le modèle SK qui serait le choix logique ne peut malheureusement pas être utilisé car la ligne AT ne croise pas l'axe de température nulle (voir figure 1.2). J'utilise donc le modèle à connectivité fixe dont j'ai déjà parlé dans l'introduction. Ce modèle, comme le modèle SK n'a pas de géométrie et chaque spin est lié aléatoirement à un nombre fini d'autres spins (que je fixe à 6 pour me rapprocher au mieux du modèle EA en dimension 3). Dans la mesure où ce modèle n'a pas de géométrie il semble raisonnable de penser qu'on retrouve ici les propriétés du modèle SK. D'autre part la connectivité étant finie, dès que le champ magnétique est suffisamment fort, tous les spins sont dans le sens du champ. Donc la phase verre de spins doit disparaître à grand champ et on a le diagramme de phase présenté dans la figure 4.2.

Sur la figure 4.3 on voit les résultats numériques pour $x = 0.15$. Cette valeur a été choisie pour avoir la plus grande lisibilité possible. Pour un x plus petit on voit le mélange avec les retournements de taille finie et pour un x plus grand la statistique est moins bonne. Néanmoins les données pour les autres valeurs de x sont semblables à celles de la figure 4.3. On constate clairement que toutes les courbes se croisent en un même point B_x^* ($B_{0.15}^* \approx 1.79$), ce qui indique qu'à la limite $N \to \infty$, $r(\infty, B, x)$ diverge pour $B < B_x^*$ et tend vers zéro pour $B > B_x^*$. On

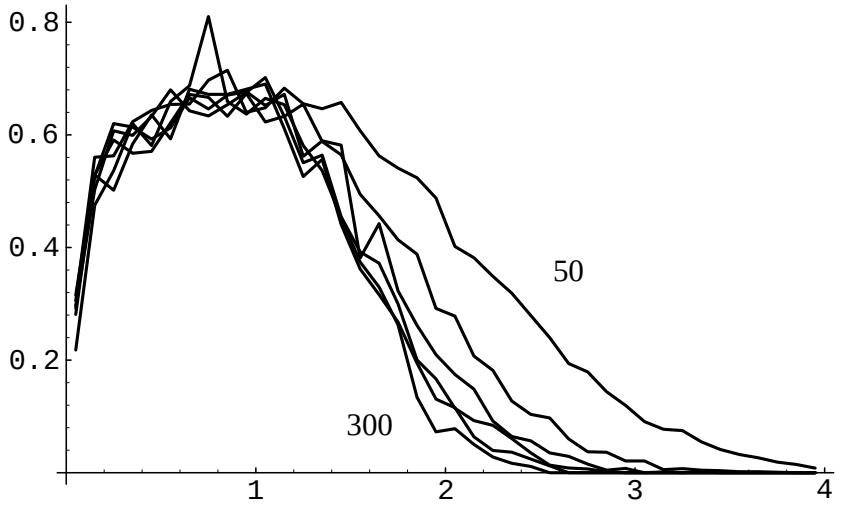

FIG. 4.4 – $r(N, B, 0.15)/\sqrt{N}$ *en fonction de* B *pour le modèle à connectivité fixe pour les tailles 50, 100, 150, 200, 250 et 300.*

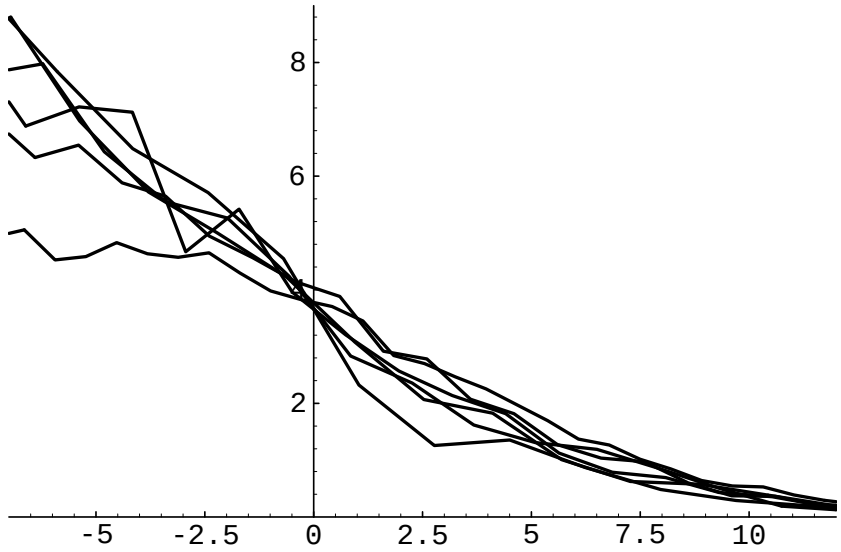

FIG. 4.5 – $r(N, B, 0.15)$ *en fonction de* $\sqrt{N}(B - B_x^*)$ *pour le modèle à connectivité fixe pour les tailles 50, 100, 150, 200, 250 et 300.*

peut analyser plus précisément la dépendance en N : pour $B < B_x^*$ la divergence semble être en $\sqrt{N}$ (voir figure 4.4), ainsi on a (pour $x < 0.5$)

$$r(N, B, x) \approx \sqrt{N} Q_x(B). \tag{4.3}$$

D'autre part on peut trouver une loi d'échelle autour de B_x^* de la forme

$$r(N, B, x) \approx T_x \left(\sqrt{N}(B - B_x^*)\right) \tag{4.4}$$

comme on peut le voir sur la figure 4.5.

Il apparaît que la valeur de B_x^* dépend de x. En fait, B_x^* décroît quand x augmente et atteint zéro pour $x = 1/2$. On définit donc le champ critique B_c comme étant le maximum de B_x^* atteint quand $x \to 0$. Ici on a $B_c \approx 2.1$. B_c s'interprète facilement comme le croisement de la ligne AT qui est très clair pour ce modèle. On peut remarquer d'autre part que les lois d'échelle sont valides dès la plus petite taille utilisée (50) ce qui indique que les effets de taille finie sont très faibles contrairement à ce qu'on aurait pu présupposer.

4.2.3 Le modèle EA à 2, 3 et 4 dimensions

Passons maintenant au modèle de dimension finie. J'ai étudié ce modèle pour les dimensions 2, 3 et 4 en suivant une approche semblable à celle présentée pour le modèle de champ moyen.

Le modèle EA en dimension 2

Dans la mesure où il est généralement admis qu'en dimension 2, il n'y a pas de phase verre de spins je ne m'étends pas trop sur ce cas. Sur la figure 4.6 on voit les résultats numériques pour le modèle EA en dimension 2 pour ($x = 0.25$). Il est clair que l'intervalle de champ magnétique pour lequel de grands renversements ont lieu diminue quand la taille du système augmente. Il est alors naturel de chercher une loi d'échelle de la forme

$$r(N, B, x) \approx N^{\mu} R_x(BN^{\lambda}) \tag{4.5}$$

Ici il semble que les exposants simples $\mu = \lambda = 1/2$ soient les bons comme on peut le voir sur la figure 4.7. Il faut bien remarquer que ces exposants sont apparemment indépendants de la valeur de x. Dans la mesure où il n'y a pas de prédiction théorique pour la forme des courbes, il est un peu difficile de définir des barres d'erreur pour les exposants μ et λ. On peut néanmoins les estimer à vue : la limite de la barre d'erreur est le point à partir duquel il est clair (visuellement) que les courbes ne se superposent pas pour une certaine valeur de x. On obtient ainsi $\mu = 0.50 \pm 0.05$ et $\lambda = 0.50 \pm 0.02$.

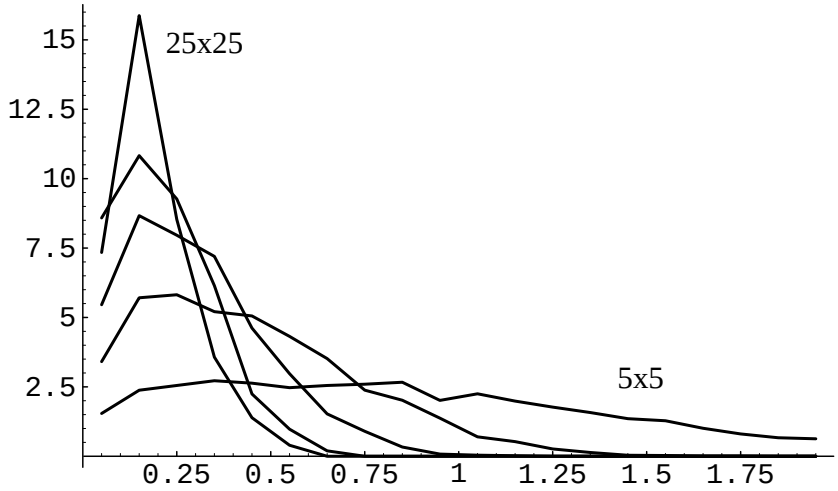

FIG. 4.6 – $r(N, B, 0.25)$ *en fonction de* B *pour le modèle EA en dimension 2 pour les tailles* 5^2, 10^2, 15^2, 20^2 *et* 25^2.

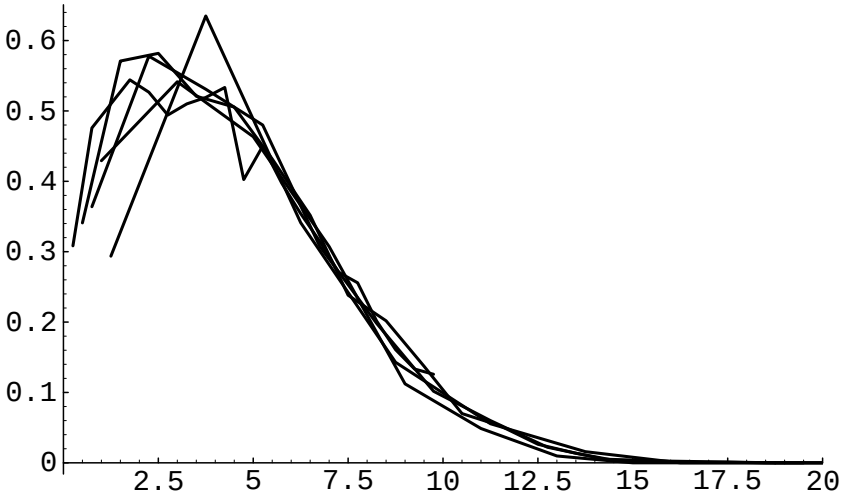

FIG. 4.7 – $r(N, B, 0.25)/\sqrt{N}$ *en fonction de* $B\sqrt{N}$ *pour le modèle EA en dimension 2 pour les tailles* 5^2, 10^2, 15^2, 20^2 *et* 25^2.

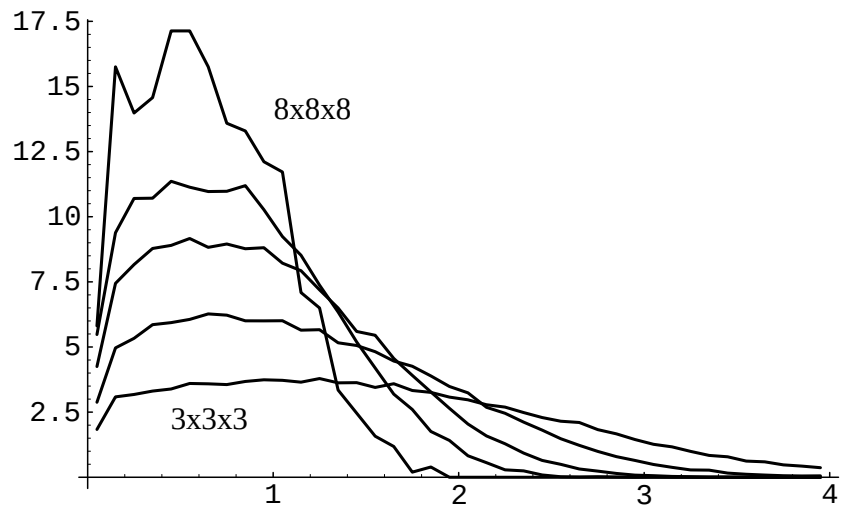

FIG. 4.8 – $r(N, B, 0.15)$ *en fonction de* B *pour le modèle EA en dimension 3 pour les tailles* 3^3, 4^3, 5^3, 6^3 *et* 8^3.

À la limite $N \to \infty$ il n'y a plus de grands retournement dès que $B \neq 0$. Dans la mesure où il n'y a pas de phase verre de spins en dimension 2, je ne commenterai pas davantage ces résultats.

Le modèle EA en dimension 3

Sur la figure 4.8, on a les résultats pour la dimension 3 (pour $x = 0.15$). Comme dans le cas de la dimension 2, l'intervalle en champ magnétique où de grands retournements ont lieu diminue quand $N \to \infty$. Comme pour la dimension 2 on utilise la loi d'échelle 4.5. Les exposants pour lesquels toutes les courbes se fondent en une courbe unique sont $\mu = 0.42 \pm 0.05$ et $\lambda = 0.30 \pm 0.02$ comme on le voit sur la figure 4.9. La taille 3^3 n'est pas représentée car les effets de taille finie sont visibles pour cette taille et la loi d'échelle ne s'applique pas encore. Les exposants μ et λ sont encore indépendants de x.

Le modèle EA en dimension 4

En dimension 4, on obtient des résultats analogues à ceux de la dimension 3, avec cette fois les exposants $\mu = 0.65 \pm 0.15$ et $\lambda = 0.24 \pm 0.04$ (voir figures 4.10 et 4.11).

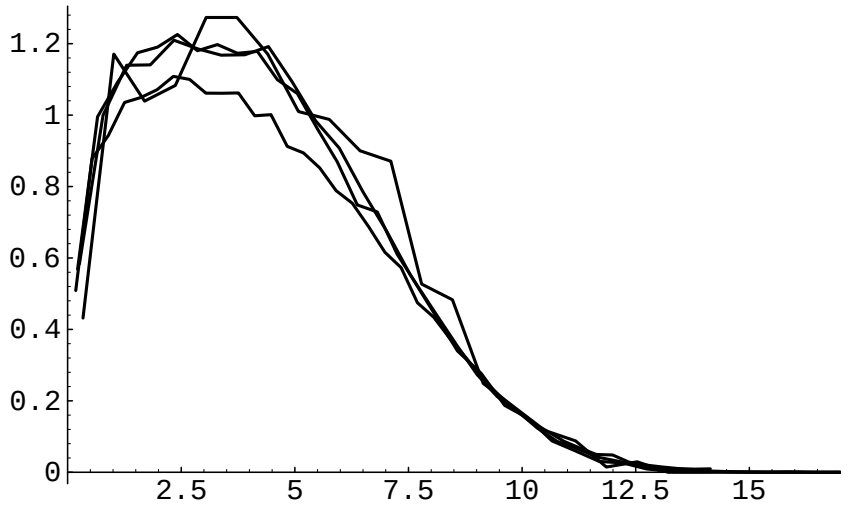

FIG. 4.9 – $r(N, B, 0.15)/N^{0.42}$ *en fonction de* $BN^{0.30}$ *pour le modèle EA en dimension 3 pour les tailles* 4^3, 5^3, 6^3 *et* 8^3.

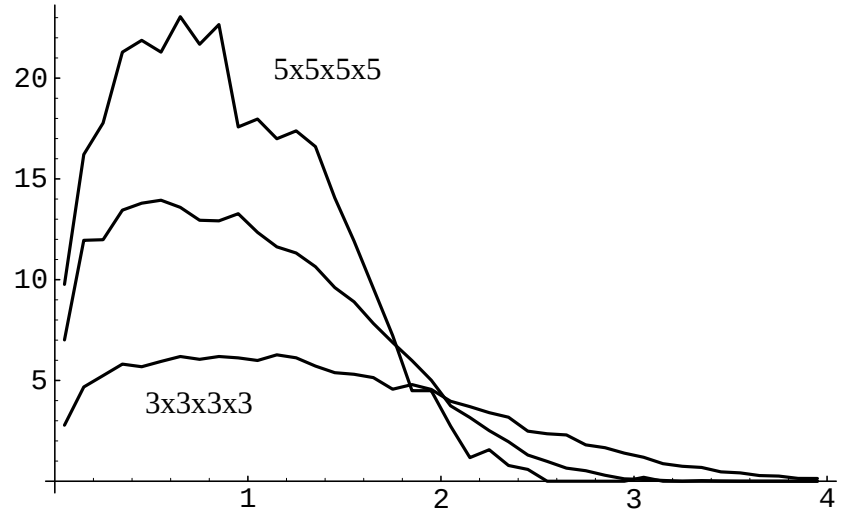

FIG. 4.10 – $r(N, B, 0.15)$ *en fonction de* B *pour le modèle EA en dimension 4 pour les tailles* 3^4, 4^4, 5^4.

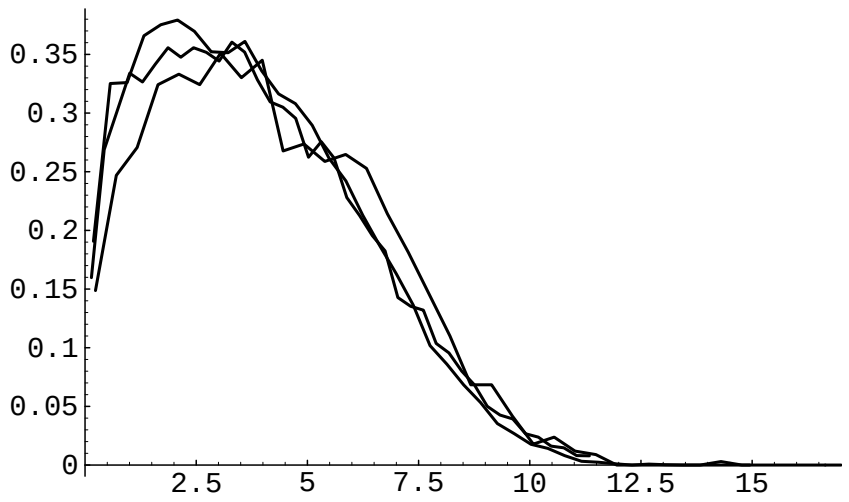

FIG. 4.11 – *$r(N, B, 0.15)/N^{0.65}$ en fonction de $BN^{0.24}$ pour le modèle EA en dimension 4 pour les tailles 3^4, 4^4, 5^4.*

Interprétation et discussion

On peut remarquer que pour les dimensions 3 et 4 l'exposant λ peut s'écrire

$$\lambda = \frac{\lambda_0}{d} \tag{4.6}$$

avec $\lambda_0 \approx 0.92$. Ceci revient à dire qu'en dimension 3 comme en dimension 4, il existe une longueur caractéristique $\ell \sim B^{-\lambda_0}$ indépendante de la dimension.

La plus simple façon d'interpréter les résultats numériques pour les dimensions 3 et 4 est la suivante : l'intervalle en champ magnétique où ont lieu les grands retournements dans le fondamental diminue quand $N \to \infty$ et la densité de ces retournements suit la loi 4.5. Ainsi, suivant l'interprétation des grands retournements donnée précédemment la phase verre de spins ne subsiste pas en champ magnétique et il n'y a donc pas de ligne AT. D'autre part, si on croit à la relation simple 4.6, il est naturel de croire que la ligne AT est absente en toute dimension.

À cette analyse on peut faire la critique suivante : il est connu que les effets de taille finie sont habituellement grands dans les verres de spins et le comportement observé pourrait n'être qu'un de ces effets. Cette possibilité existe. Néanmoins, on peut remarquer deux choses : premièrement le modèle de champ moyen ne semble pas souffrir d'effets de taille finie très importants (ils semblent même inexistants), d'autres part la loi d'échelle 4.5 est un peu trop simple pour des effets de taille finie. À mon avis, on rencontre habituellement de grands effets de taille finie dans

les verres de spins car on les observe toujours aux alentours de la température critique. Mais ici nous sommes à température nulle et il est fort concevable qu'il n'y ait alors quasiment aucun de ces effets. Deuxièmement le fait que l'exposant λ semble obéir à une loi simple en fonction de la dimension n'incite pas non plus à supposer qu'il s'agisse d'effets de taille finie.

Pour conclure, on notera que si le comportement observé semble incompatible avec la théorie de champ moyen, il pose également des problèmes à la théorie des gouttelettes. En effet, le champ magnétique typique où des grands retournements ont lieu est donné par l'équation 4.2, en comparant ceci avec la loi d'échelle 4.5 et l'équation 4.6 on obtient

$$\theta = \frac{d}{2} - \lambda_0. \tag{4.7}$$

Cette loi est incompatible avec les valeurs usuelles de θ (en dimension 3 par exemple $\theta \approx 0.2$ et ici je trouve 0.57). D'autre par la valeur de l'exposant λ en dimension 2 correspond à $\theta = -1/2$ ce qui n'est pas davantage compatible.

4.3 Nature des interfaces

Afin de mieux comprendre la nature du paysage d'énergie je me suis intéressé à la nature des excitations et des interfaces en champ magnétique nul. Pour cela j'utilise tout d'abord la méthode classique consistant à créer une interface en changeant les conditions aux bords du système.

4.3.1 Par changement des conditions aux bords

La méthode introduite dans [BM84, McM85] consiste à comparer une instance du modèle EA en champ nul avec des conditions aux bords périodiques et cette même instance avec des conditions anti-périodiques dans une direction (c'est-à-dire que les interactions reliant les bords en question ont le signe opposé). La mesure de la différence d'énergie entre les fondamentaux des deux systèmes est alors censée correspondre à une interaction effective à l'échelle de ce système. Cette méthode est à la base de la mesure de l'exposant θ des gouttelettes.

Quand on change les conditions aux bords de cette façon on crée une interface. Cette interface est constituée de l'ensemble des liens du réseau qui contribuent à la différence d´énergie entre les deux fondamentaux. Pour ces interfaces, je mesure deux choses : l'énergie et la surface (l'aire) que je moyenne sur un grand nombre d'instances.

Pour la dimension 2, j'ai utilisé les tailles 5^2, 10^2, 15^2, 20^2, 25^2 et 30^2 et j'ai moyenné sur un nombre d'instances allant de 20000 à 500 suivant la taille. Je trouve que la différence d'énergie et la surface suivent des lois de puissance en

fonction de la taille. Les exposants correspondants sont pour l'énergie $\theta = -0.28$ (compatible avec le résultat de [BM84]) et la dimension fractale de l'interface est $d_f = 1.28$ (i.e. la surface grandit comme L^{d_f}).

Pour la dimension 3 (toujours en champ nul), j'ai utilisé des tailles allant de 3^3 à 9^3 et un nombre d'instances allant de 20000 à 250. Je trouve $\theta = 0.16$ (ce qui est également compatible avec les mesures antérieures) et $d_f = 2.66$.

Je ne présente pas ici les données numériques, mais je peux dire que la mesure de la dimension fractale est assez précise et l'ajustement très bon. L'erreur sur d_f ne doit pas dépasser ± 0.05. Les mesures de θ sont (relativement) moins précises et donnent lieu à une erreur également de l'ordre de 0.05. Young et Palassini ont effectué un travail similaire [PY99] et ont obtenu des résultats analogues.

4.3.2 Recherche directe

Une autre possibilité pour étudier les excitations en champ nul consiste à faire une recherche directe. En pratique, durant la recherche du fondamental, l'algorithme que je décris au chapitre suivant trouve un grand nombre d'états excités. En comparant ces états avec le fondamental, on peut en déduire un grand nombre d'excitations. Je ne retiens parmi celles-ci que les amas de spins connexes de grande taille ayant une très faible énergie. On aimerait pouvoir trouver les gouttelettes (les excitations d'une taille donnée d'énergie minimale), mais je dois me contenter pour le moment de celles que je trouve de cette façon. Je m'intéresse de nouveau à l'énergie et à la surface de ces excitations. Je sélectionne les excitations dont la taille est comprise entre 10% et 20% de la taille totale du système et je ne retiens que celle de plus faible énergie.

Pour la dimension 2, j'utilise les tailles 10^2, 15^2, 20^2, 25^2 et 30^2 et de 5000 à 250 instances (et des conditions aux bords périodiques). Je trouve une énergie et une surface qui se comportent comme des lois de puissance avec la taille mais cette fois je trouve une énergie qui décroît plus vite qui correspondrait à $\theta = -0.36$. En revanche la dimension fractale reste la même à $d_f = 1.28$ (avec la même barre d'erreur qu'avant).

Pour la dimension 3, j'utilise des tailles de 3^3 à 9^3 et un nombre d'instances allant de 5000 à 100. Contrairement aux mesures par changement de condition aux bords, je trouve ici une énergie constante avec la taille du système (i.e. $\theta \approx 0$) comme on peut le voir sur la figure 4.12. Ce résultat est en contradiction avec la théorie des gouttelettes, en fait c'est exactement le résultat que prédit le champ moyen. Ce dernier semble donc assez pertinent en absence de champ magnétique. D'autre part, la dimension fractale, reste relativement inchangée à $d_f = 2.59$. On peut se demander pourquoi le changement des conditions aux bords ne permet pas d'obtenir ces excitations d'énergie constante : la réponse est que ces changements aux bords fixent une topologie qui ne correspond à aucune de ces excitations (même

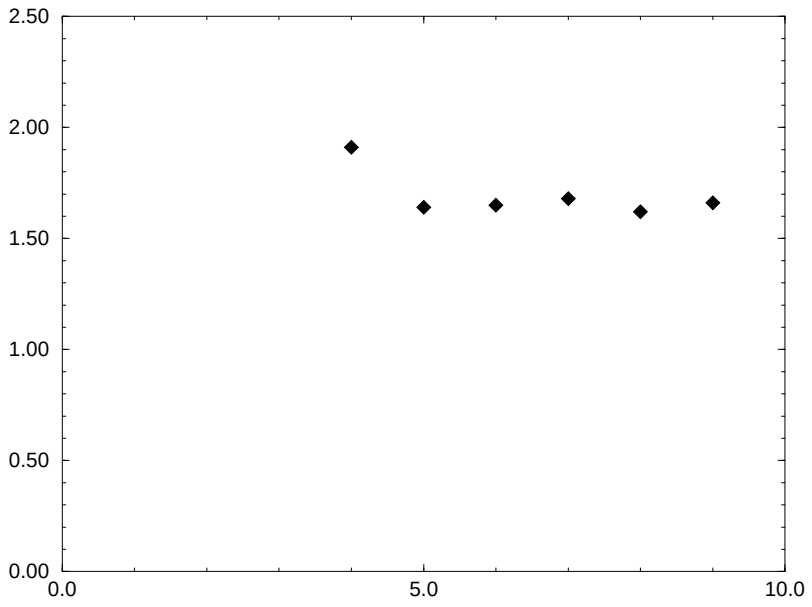

FIG. 4.12 – *Énergie minimale des excitations de taille 10 à 20% trouvées dans le modèle EA à 3 dimensions et en champ nul, en fonction de la taille du système.*

les changements aux bords aléatoires de [PY99] ne peuvent espérer y parvenir).

La méthode utilisée ici n'est pas très sure et mériterait d'être améliorée car on n'a aucun contrôle sur la probabilité de trouver certaines excitations et pas d'autres. Ainsi les conclusions sur l'énergie peuvent être discutées. Néanmoins, elles semblent indiquer que la mesure de l'exposant θ dépend de la manière dont on le mesure, ce qui remet sérieusement en cause l'hypothèse de la théorie des gouttelettes. Comme pour le modèle du couplage (section 2.5.2), on peut imaginer qu'il existe deux échelles : l'une microscopique où la théorie des gouttelettes pourrait être correcte et une échelle macroscopique où il apparaît des grandes excitations de faibles énergie. D'autre part, les mesures des dimensions fractales me semblent correctes dans la mesure où les deux techniques donnent des résultats comparables (avec des marges d'erreur assez faibles). J'interprète ceci ainsi : les interfaces de très faible énergie ont des propriétés locales universelles indépendantes des contraintes globales utilisées pour construire ces interfaces. Ces propriétés locales comprennent entre autres la dimension fractale qui se trouve donc être de l'ordre de 1.3 en dimension 2 et de 2.6 en dimension 3. Dans [Hus91], des mesures de la dimension fractale des murs de domaines à $T = 0.5$ donne une dimension fractale plus faible de 2.2.

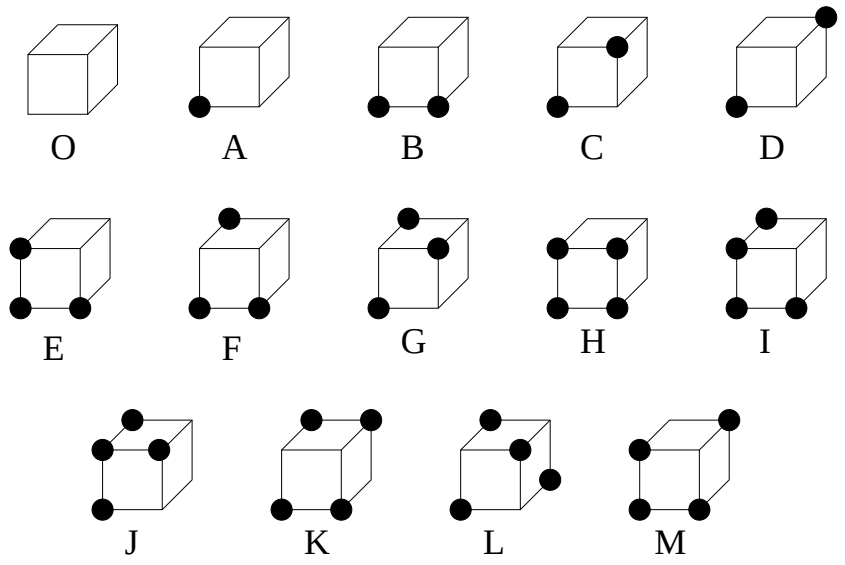

FIG. 4.13 – *Les différentes configurations d'un bloc de 8 sites.*

4.3.3 Mesure de la topologie

Il serait intéressant de pouvoir mesurer la topologie des excitations puisque la théorie des gouttelettes affirme que celles-ci sont compactes et que cela permettrait de mieux comprendre aussi la nature des interfaces. Je n'ai pas encore effectué de telles mesures, mais je présente ici la méthode que j'ai mise au point pour y parvenir (je ne prétends pas être particulièrement original ici, de telles mesures ont d'ailleurs déjà été faites près de la température critique [DPW+95]).

La méthode que je propose est basée sur la caractéristique d'Euler-Poincaré et sa connection avec la courbure locale. Plus précisément, pour toute variété S compacte (sans bord et en toute dimension) on a

$$\int_S R = 2\pi\chi \tag{4.8}$$

où R est la courbure locale de la surface (pour une sphère de rayon r, $R = 1/r^2$) et χ la caractéristique d'Euler-Poincaré de S. En dimension paire on a toujours $\chi = 0$, donc ma méthode ne s'appliquera en pratique qu'à la dimension 3. Or χ permet de compter le nombre de "trous" dans la surface. En dimension 3, χ vaut 2 pour la sphère, 0 pour le tore, -2 pour le tore à deux trous et plus généralement le nombre de trous est $1 - \chi/2$.

Ce qui m'intéresse ici c'est de mesurer χ pour une surface définie sur un réseau cubique comme la frontière d'un sous-ensemble de sites du réseau. L'idée est de mesurer la courbure locale sur chaque bloc de 8 sites et de sommer pour obtenir χ. La

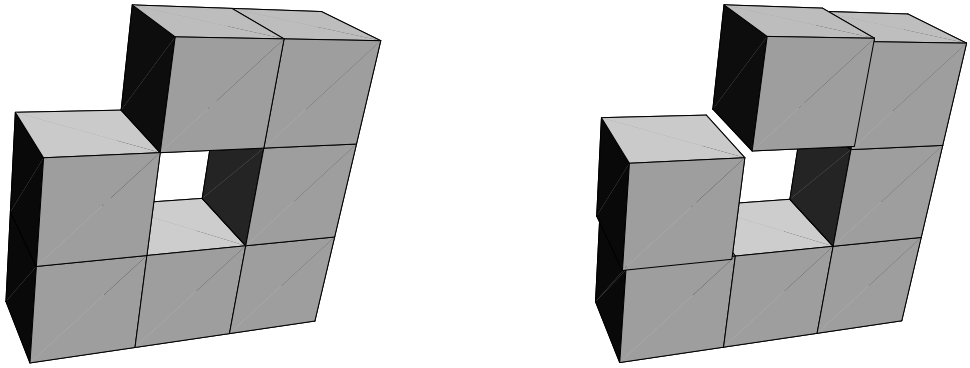

FIG. 4.14 – *On peut considérer les deux branches de cette configuration comme étant collées ou non. Dans le premier cas la topologie est celle du tore dans le second celle de la sphère.*

figure 4.13 présente les différentes configurations possibles pour un bloc de 8 sites, bien sûr deux configurations déduites l'une de l'autre par symétrie ou rotation sont équivalentes. D'autre part les configurations complémentaires (en échangeant les sites vides et les sites occupés) seront notées avec une barre, ainsi la configuration avec 7 sites occupés est notée $\overline{A}$. On peut remarquer que les configurations H à M sont égales à leurs complémentaires. Pour déterminer la contribution de chaque configuration de 8 sites, il suffit de considérer successivement des structures différentes dont on connaît à priori le χ et d'en déduire la contribution des différentes configurations : par exemple pour évaluer la contribution au χ de la configuration A on considère un seul site occupé, la surface a la topologie d'une sphère donc $\chi = 2$. Or le site occupé appartient à 8 blocs différents qui ont tous la configuration A, donc la contribution de A est $2/8 = 1/4$.

Avant de donner la contribution de chacune de ces configurations il faut remarquer qu'on a une ambiguïté sur la définition de la surface comme on peut le voir sur la figure 4.14. Cette ambiguïté pose un problème car on aimerait que la surface définie par un ensemble et son complémentaire soit la même. Or ceci est impossible car si l'on décide que les deux branches de la figure 4.14 se touchent alors les deux branches du complémentaire, pourtant dans une configuration similaire, ne se touchent pas. Cette ambiguïté touche les configurations de blocs C, D, F, G, K, L et M (et leurs complémentaires). Le choix que je fais consiste à dire qu'on est en quelque sorte entre les deux situations ainsi la configuration de la figure 4.14 aura $\chi = 1$ entre le tore ($\chi = 0$) et la sphère ($\chi = 2$), elle a 1/2 trou ! J'indique dans le tableau 4.1 la contribution de chaque configuration. À titre d'exemple, la configuration de la figure 4.14, comporte les blocs suivants : 10 A, 12 B, 2 C et 6

TAB. 4.1 – *Contribution de chaque configuration de 8 sites (voir figure 4.13). En cas d'ambiguïté j'ai indiqué en premier le cas où l'on suppose que les sites se touchent (c'est l'inverse pour les configurations complémentaires).*

configuration	nombre	contribution	ambiguïté
O, $\overline{O}$	1	0	
A, $\overline{A}$	8	1/4	
B, $\overline{B}$	12	0	
C, $\overline{C}$	12	0	$1/2, -1/2$
D, $\overline{D}$	4	0	$1/2, -1/2$
E, $\overline{E}$	24	$-1/4$	
F, $\overline{F}$	24	$-1/4$	$1/4, -3/4$
G, $\overline{G}$	8	1/4	$3/4, -1/4$
$H = \overline{H}$	6	0	
$I = \overline{I}$	24	$-1/2$	
$J = \overline{J}$	8	$-1/2$	
$K = \overline{K}$	6	0	0, 0
$L = \overline{L}$	2	1	1, 1
$M = \overline{M}$	24	0	0, 0

E (et bien sûr l'extérieur est composé de O). Et la somme des contributions donne $\chi = 10/4 + 12 \times 0 + 2 \times 0 - 6/4 = 1$.

Chapitre 5

Optimisation par renormalisation

5.1 Méthodes heuristiques

Quand on veut résoudre un problème d'optimisation combinatoire NP-difficile on est confronté au fait que toute méthode exacte de résolution a une complexité exponentielle et qu'on est donc restreint en pratique à des instances très petites. Ce problème peut être contourné si on peut se satisfaire d'un solution approchée ce qui est très souvent le cas dans les applications pratiques. Un algorithme donnant une solution approchée sera dit *heuristique*. Parmi ces algorithmes on peut distinguer deux catégories : les algorithmes déterministes qui, pour une instance donnée du problème, vont toujours trouver la même solution approchée et les algorithmes stochastiques (ou "randomizés") qui à chaque fois vont construire une solution différente (à priori). Je discute maintenant quelques unes des méta-heuristiques les plus courantes que j'illustre sur un exemple concret (on dit "méta" car elles ne sont pas spécifiques à un problème d'optimisation particulier).

5.1.1 Méthode glouton

La méthode glouton est la méthode déterministe la plus simple possible, il s'agit de fixer les degrés de liberté les uns après les autres en commençant par ceux qui sont à priori les plus pertinents. Par exemple dans le cas du PVC, on commence par trier tous les liens par ordre de longueur, puis on ajoute successivement à la tournée que l'on veut construire le lien le plus court possible et compatible avec le fait que l'on veut obtenir une tournée. Dans un verre de spins, il s'agit de fixer la position relative des spins reliés par des interactions en commençant par les interactions les plus fortes. Cette méthode est en général plutôt mauvaise. Son principal intérêt réside, en fait, dans sa simplicité qui permet de l'analyser et ainsi d'obtenir une borne supérieure rigoureuse sur la valeur de l'optimum.

Je discute maintenant des heuristiques stochastiques qui sont très souvent bien plus efficaces, ne serait ce que parce qu'on peut calculer autant de solutions approchées que l'on veut et prendre la meilleure.

5.1.2 Recherche locale

L'heuristique stochastique la plus naturelle est la recherche locale qui consiste à partir d'une solution quelconque du problème à considérer chacun des degrés de liberté et à les optimiser localement. On optimise donc par rapport à un nombre fini de degré de libertés. On répète l'opération jusqu'à ce qu'ils soient tous localement optimaux. Il existe de nombreuses variantes de cette méthode et je me contente ici de décrire la plus simple qui s'appelle 1-opt. Pour un verre de spins, il s'agit de considérer chaque spin l'un après l'autre et de retourner ce spin uniquement si cela fait diminuer l'énergie. On continue tant qu'il reste des spins que l'on peut retourner. On remarquera que cette procédure termine forcément car l'énergie ne fait que décroître. On peut améliorer le résultat en passant à 2-opt : on considère les spins deux par deux et on cherche à chaque fois la meilleure configuration pour ces deux spins. On peut même généraliser avec k-opt, pour lequel la solution trouvée est optimale pour tout retournement d'au plus k spins. On peut remarquer que la complexité de k-opt augmente très rapidement avec k ce qui en pratique ne permet pas d'aller au delà de $k = 2$ ou 3.

Cette méthode est assez simple à mettre en œuvre mais donne des résultats peu satisfaisants. Pour le verre de spins on obtient des solutions dont l'énergie est supérieure d'environ 20% à l'énergie minimale. Ceci est bien évidemment dû au fait que le système n'a été optimisé qu'aux petites échelles.

5.1.3 Recuit simulé

Le recuit simulé est une heuristique qui a été mis au point par des physiciens [KGV83] et qui consiste "simplement" à faire une simulation Monte Carlo en diminuant petit à petit la température. Quand la température atteint zéro, on doit obtenir le fondamental, pour peu que le Monte Carlo atteigne bien l'équilibre. En fait, on peut prouver rigoureusement que si l'on diminue la température logarithmiquement en temps (i.e. $T = 1/\log t$) on obtient avec probabilité un le fondamental. Malheureusement cette méthode est bien trop lente et on utilise habituellement une décroissance exponentielle (i.e. $T = e^{-\alpha t}$), on n'a plus alors de certitude sur la solution trouvée mais le résultat est tout de même très satisfaisant.

Dans tous les cas le résultat est meilleur qu'avec 1-opt puisque l'algorithme 1-opt est équivalent à un Monte Carlo à température nulle. S. Kirkpatrick dit de cette méthode que pour tout problème le recuit simulé est la deuxième meilleure méthode (la meilleure étant une méthode spécifique au problème) ce qui revient à

dire que c'est la meilleure méta-heuristique. Le recuit simulé fonctionne bien car il n'optimise pas seulement aux petites échelles, il recherche la solution préférentiellement dans les vallées larges du paysage d'énergie (qui à priori sont également profondes). En revanche le recuit simulé n'empêche pas les effets de dynamique lente (croissance de domaines, vieillissement...).

5.1.4 Algorithmes génétiques

Pour optimiser le système aux grandes échelles il faut pouvoir faire des changements non locaux. Malheureusement de tels changement sont difficiles à trouver. Une méthode pour y parvenir consiste à s'inspirer de la reproduction biologique. L'idée est, à partir de deux configurations (appelées *parents*), de construire une nouvelle configuration possédant les meilleures caractéristiques de chacun des deux parents. Prenons quelques exemples pour comprendre comment on peut procéder. Dans le PVC, on détermine quels sont les liens en communs dans les deux parents puis on essaye de les raccorder au mieux pour créer une nouvelle tournée. Dans le verre de spins on compare les deux parents et pour chaque domaine de spins sur lequel ils diffèrent on va choisir la meilleure orientation possible.

Globalement un algorithme génétique procède comme suit. On va maintenir au cours de l'exécution une *population* de configurations. On va choisir deux de ces configurations pour la reproduction et produire un enfant, éventuellement on pourra lui appliquer une optimisation locale. Puis l'enfant ainsi produit est replacé dans la population. D'autre part on va éliminer certaines configurations (les plus mauvaises par exemple). Et on répète le processus jusqu'à ce qu'un certain critère d'arrêt soit rempli.

Le défaut de cette technique est qu'à partir d'un certain temps, il n'y a plus d'amélioration car le processus de reproduction n'est pas assez bon et produit des enfants dont l'énergie n'est pas plus basse que celles de leurs parents. Le problème est qu'il faudrait pouvoir optimiser à toutes les échelles en même temps car la meilleure configuration à grande échelle dépend des échelles plus petites et réciproquement. Il faudrait pouvoir échanger de l'information entre les différentes échelles...

5.2 Une nouvelle approche : l'ARG

J'ai mis au point une nouvelle approche qui permet de régler le problème crucial de l'échange de l'information entre les différentes échelles et qui permet d'optimiser toutes les échelles simultanément donnant ainsi accès à des solutions approchées de bien meilleure qualité. L'idée principale est la suivante : en physique quand on considère un système où toutes les échelles entrent en jeu on utilise la renormali-

sation pour comprendre les relations entre ces échelles. On va faire la même chose pour l'optimisation combinatoire. Dans ce cadre la renormalisation va s'implémenter comme une *récursion* (c'est-à-dire une procédure qui s'appelle elle-même). Plus précisément dans le cadre d'un algorithme génétique on va produire les enfants en créant une instance renormalisée du problème grâce aux parents. Cette instance sera résolue récursivement pour déterminer l'enfant. J'appelle cette méthode : "Algorithme de renormalisation génétique" (ARG).

J'ai élaboré cette méthode pour le verre de spins où elle s'avère très efficace. Mais afin d'éprouver sa généralité, je l'ai également développée pour le PVC qui est l'archétype du problème NP-difficile. L'intérêt de l'étude du PVC est multiple : tout d'abord cela prouve la généralité de la méthode et permet de la confronter à un problème qui a déjà été très étudié, d'autre part on peut tester l'efficacité de la méthode dans la mesure où il existe des bibliothèques d'instances résolues, et finalement la simplicité du PVC permet une approche plus pédagogique.

Je montre dans la suite que cette approche innovante est à la fois très efficace et très générale et qu'elle est sans doute promise à un avenir fructueux. Je pense qu'on peut considérer cette nouvelle technique comme le troisième apport de la physique à l'optimisation combinatoire après le recuit simulé [KGV83] et la notion de transition de phase [KS94].

5.3 Application au voyageur de commerce

Au lieu d'essayer de décrire de manière abstraite le fonctionnement de l'ARG, je l'illustre directement sur le PVC.

5.3.1 Processus de renormalisation

Commençons par décrire le processus de renormalisation, l'idée de base est de construire un problème renormalisé à partir du problème de départ et d'un certain nombre de configurations. Ces configurations seront les parents dans l'algorithme génétique. Pour fixer les idées prenons une instance du PVC ainsi que deux tournées (voir figure 5.1). On verra dans la suite qu'on n'est pas restreint à seulement deux parents, en pratique on en prendra quatre ou cinq, mais pour la simplicité de l'exposé je me limiterai à deux.

On considère maintenant tous les liens qui sont en communs dans ces deux parents. Cette procédure n'est pas nouvelle [SFM+96], c'est l'emploi qu'on en fait qui fait la différence. On remplace ensuite chaque chaîne de liens en commun par un lien et deux extrémités, les points intermédiaires étant supprimés (voir figure 5.2). Ceci nous donne une instance renormalisée du PVC qui contient moins de points et dont certains degrés de liberté ont été gelés. Il faut remarquer qu'il

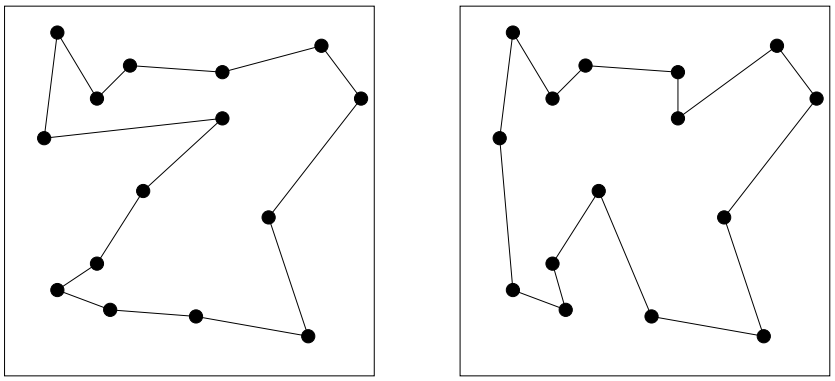

FIG. 5.1 – *Deux tournées pour renormaliser*

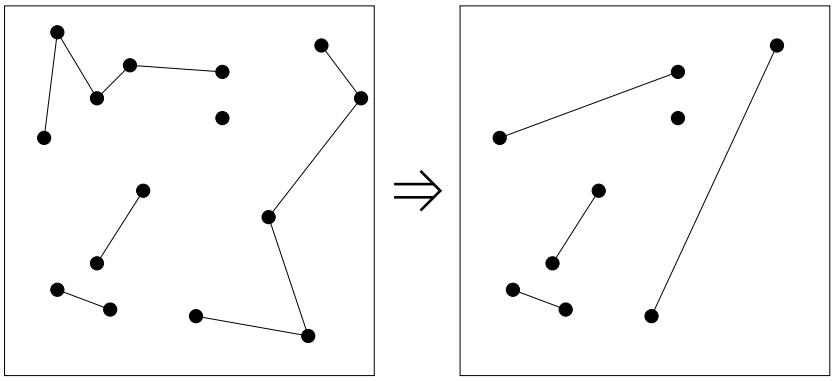

FIG. 5.2 – *Création du problème renormalisé*

existe nécessairement une solution au problème renormalisé car aux deux parents correspondent des tournées de ce nouveau problème.

Si on sait résoudre le problème renormalisé (on verra comment plus loin) on peut alors en déduire une solution du problème original (figure 5.3). L'efficacité de cette méthode se voit à l'œil nu, il n'est pas évident en effet à partir de la figure 5.1 de trouver une meilleure tournée alors que la résolution du problème renormalisé est dans cette exemple triviale. Bien sûr, plus les tournées de départ sont bonnes et plus la solution que l'on peut trouver par renormalisation est bonne.

5.3.2 Insertion dans un algorithme génétique

L'idée la plus simple pour utiliser cette renormalisation serait simplement de créer un certain nombre de tournées avec un algorithme d'optimisation locale et d'appliquer ensuite la renormalisation. Ceci ne nous permet malheureusement pas

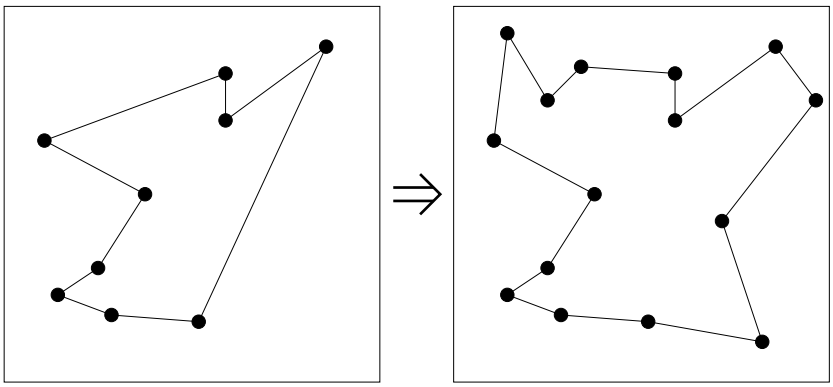

FIG. 5.3 – *Retour à l'échelle initiale*

d'aller bien loin, car la qualité de la solution obtenue est fortement tributaire de celle des tournées de départ. La bonne méthode consiste à réutiliser les solutions obtenues par renormalisation comme tournées de départ, ainsi on peut améliorer la qualité des solutions petit à petit.

Cette idée nous conduit directement à l'utilisation d'un algorithme génétique. On procède comme suit : on part d'une population de M tournées aléatoires que l'on optimise localement. On choisit répétitivement k parents et on fabrique un enfant par renormalisation puis optimisation locale et ceci jusqu'à avoir obtenu M enfants. Et on recommence avec cette nouvelle génération. Parfois plusieurs des enfants sont identiques, auquel cas on n'en garde qu'un seul exemplaire et on fixe M au nouveau nombre d'enfants, on élimine également les enfants ne présentant pas d'amélioration par rapport à leur plus mauvais parent. finalement, on s'arrête quand on a atteint $M = 1$ et la tournée ainsi obtenue est notre résultat.

Pour le moment je n'ai toujours pas dit comment je résous (approximativement) le problème renormalisé. Une méthode simple serait simplement d'utiliser une optimisation locale ou encore une méthode exacte (si le problème renormalisé n'est pas trop grand). Mais l'idée force de la renormalisation est qu'une fois intégrés les degrés de liberté à courte portée le système est de même type que celui d'origine mais avec des paramètres différents. On va donc traiter le problème renormalisé de la même manière que le problème original c'est-à-dire par la méthode que je viens de décrire (l'ARG). D'un point de vue informatique c'est une récursion, c'est-à-dire que la procédure implémentant l'ARG s'appelle elle même. Bien sûr, la récursion doit s'arrêter quelque part (il nous faut un *cut-off*), car plus on descend dans les niveaux de récursion et plus le système à traiter est petit. Il faut donc fixer une taille en dessous de laquelle une méthode directe est appliquée.

L'idée développée au paragraphe précédent est l'idée fondamentale, celle qui fait que ça marche, cependant on gagne beaucoup en efficacité en remarquant le

point suivant. À chacun des parents utilisés correspond une tournée du problème renormalisé; si le parent en question est déjà bien optimisé cette tournée du problème renormalisé est elle-même assez bonne, il serait donc dommage de ne pas s'en servir. Pour cela, il suffit de ne pas initialiser l'ARG (pour le problème renormalisé) avec M tournées aléatoires mais plutôt avec les k tournées correspondant aux parents plus $M-k$ tournées aléatoires. Il est alors très facile de voir que sous cette condition l'enfant créé est nécessairement au moins aussi bon que son meilleur parent ! Cette propriété est unique dans le cadre des algorithmes génétiques et permet de plus d'*assurer la convergence de l'algorithme.*

Il nous faut encore fixer les valeurs de M et k. Le choix de M dépend essentiellement de la taille N du problème, du temps de calcul dont on dispose et de la précision que l'on cherche à atteindre : plus M est grand et meilleure est la solution mais plus élevé est le temps de calcul. On remarque cependant qu'il vaut toujours mieux choisir un M plus grand que de lancer plusieurs fois le programme pour prendre la meilleure solution. Pour le choix de k, il faut être particulièrement attentif car le temps de calcul en dépend très fortement car k détermine le facteur de réduction entre le problème initial et le problème renormalisé et donc la profondeur de l'arbre de récursion. Si k est grand, le système renormalisé est plus grand et donc plus long à résoudre mais la solution trouvée est meilleure. En pratique je fixe k dynamiquement (au cours de l'exécution) de manière à avoir un taux de réduction du problème fixé.

5.3.3 Résultats

Je ne vais pas m'étendre trop longuement sur les résultats pour le PVC dans la mesure où ce n'est pas mon objectif principal et que ceux-ci ont déjà été présentés dans un article joint à cette thèse [HM99b].

Il faut d'abord préciser davantage les détails de l'implémentation. Je fixe $M = 50$ pour le niveau supérieur de la récursion et $M = 8$ pour les niveaux intérieurs; k est fixé dynamiquement de façon que le nombre de degrés de liberté d'un problème renormalisé représente au plus 10% de ceux du problème original. La recherche locale utilisée est une version simplifiée de l'algorithme de Lin et Kernighan (LK) [LK73] (vu la puissance de l'ARG il n'est pas nécessaire d'avoir une très bonne optimisation locale si cela doit se faire au dépend de la vitesse). Finalement il faut décrire ce que l'on fait pour les petits problèmes (ici de taille inférieure à 25 degrés de liberté). J'ai choisi de prendre le meilleur résultat sur 4 occurrences de l'application de LK sur les tournées correspondant aux parents (ou à défaut sur des tournées aléatoires). L'ensemble des détails techniques est rassemblé dans l'Annexe A.

Pour tester l'efficacité de l'ARG, j'utilise cinq instances résolues et disponibles sur Internet [Rei91]. J'ai choisi ces instances le plus diversement possible aussi

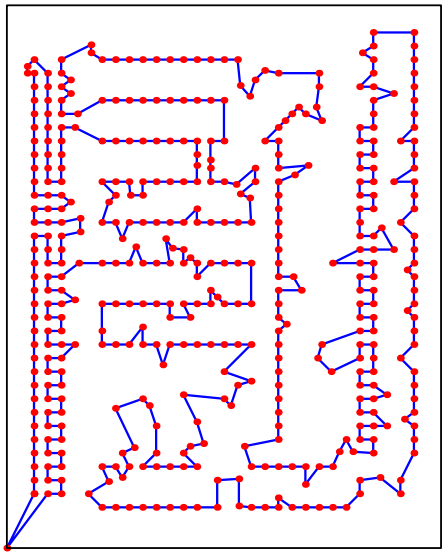

FIG. 5.4 – *Exemple d'instance utilisée pour tester l'ARG ($N = 442$)*

bien en taille (de 442 à 5915 points) qu'en structure (points aléatoires, connections d'un circuit intégré, répétition de motifs...); on peut voir une de ces instance sur la figure 5.4. Sur toutes ces instances l'ARG commet une erreur d'au plus 0.02% en longueur (alors que LK fait une erreur de 2% en moyenne et même 15% sur une certaine instance) et trouve la tournée optimale avec une probabilité non négligeable jusqu'aux tailles de l'ordre de 3000 points, la tournée optimale étant trouvée de manière systématique pour les tailles inférieures à 1000 (pour les détails voir [HM99b]). Ces résultats sont comparables à ceux des meilleurs groupes travaillant sur le sujet alors que leurs méthodes sont spécifiques au PVC [JM97, MNDS+97].

5.4 Application aux verres de spins

Passons maintenant aux verres de spins et à l'implémentation de l'ARG qui a permis d'obtenir les résultats du chapitre précédent.

5.4.1 Implémentation

L'application de l'ARG aux verres de spins est très similaire à celle du PVC. La seule chose qui change vraiment c'est la façon dont on fait la renormalisation. L'idée est toujours la même, à savoir que l'on fixe les degrés de liberté identiques

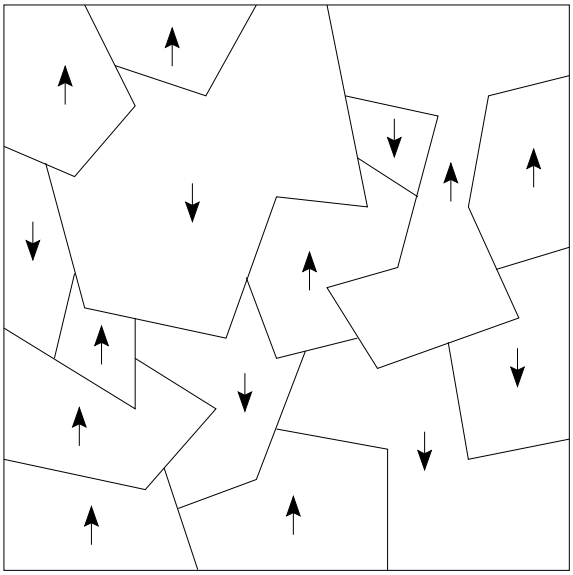

FIG. 5.5 – *La renormalisation des verres de spins*

dans tous les parents et qu'on laisse les autres libres. Le point important est le choix des degrés de liberté que l'on considère. Il serait en effet peu subtil de considérer l'orientation des spins car on passe à coté de la symétrie du problème. Les degrés de liberté intéressants sont en fait les orientations relatives des spins voisins. Voici donc comment se fait la renormalisation; on prend k parents et on fait une partition $\mathcal{P}$ des spins du système en domaines connexes tels que deux spins voisins sont dans le même domaine si et seulement si ils ont la même orientation relative dans tous les parents. Dans le système renormalisé deux spins d'un même domaine sont fixés l'un par rapport à l'autre, ainsi l'orientation de l'ensemble des spins d'un domaine A peut être représentée par un unique spin S_A. En notant S_i^0 l'orientation des spins dans un des parents on a

$$\text{pour tout } i \in A, S_i = S_i^0 S_A \tag{5.1}$$

et l'hamiltonien

$$H[S_i] = -\sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \sum_i h_i S_i \tag{5.2}$$

peut se réécrire en fonction des S_A

$$H[S_A] = -\sum_{A,B\in\mathcal{P}} J_{AB} S_A S_B - \sum_{A\in\mathcal{P}} h_A S_A \tag{5.3}$$

avec

$$J_{AB} = \sum_{i\in A}\sum_{j\in B} J_{ij} S_i^0 S_j^0 \tag{5.4}$$

et

$$h_A = \sum_{i \in A} h_i S_i^0 \tag{5.5}$$

On voit alors que le problème renormalisé est encore un verre de spins (éventuellement en champ désordonné) où chaque spin représente un ensemble de spins du système original (figure 5.5). On peut remarquer que comme pour le PVC cette construction n'est pas nouvelle [KS92] (même si je ne le savais pas quand je l'ai découverte). Cependant l'utilisation de l'ARG donne à cette construction toute sa puissance.

5.4.2 Résultats

Voici les détails de l'implémentation : pour la recherche locale on utilise une version de l'algorithme de Kernighan et Lin (KL) [KL70] et on fixe k dynamiquement (comme pour le PVC) de façon que la taille du problème renormalisé soit au moins 7.5% de celle du problème original. Les petits systèmes ($N \leq 20$) sont traités de manière analogue à celle du PVC en répétant 4 fois KL (quand $N \leq 8$ on a choisi une recherche exhaustive exacte). Le choix de M dépend encore de la précision recherchée, dans [HM99b] on discute deux cas, soit $M = 15$ qui est très rapide et qui donne une erreur maximale de l'ordre de 1% sur l'énergie (pour $N \leq 1000$) soit $M = N$ pour le premier niveau de la récursion et $M = 5 + 0.2N$ pour les niveaux intérieurs (avec N la taille du système à ce niveau) auquel cas on trouve l'état fondamental avec une probabilité de l'ordre de 95% (toujours pour $N \leq 1000$). Pour les détails voir [HM99b] et l'Annexe A.

Contrairement au PVC, il n'existe pas (à ma connaissance) de bibliothèque d'instances résolues. Pour tester mon algorithme il a donc fallu procéder de manière différente. J'ai fait deux sortes de tests, le premier est basé sur le fait qu'en dimension 2, il existe des algorithmes exacts relativement rapides. Grâce à John Mitchell qui a bien voulu nous fournir des instances résolues, j'ai pu constater que pour $N = 50 \times 50$ et en fixant $M = 5 + 0.2N$ pour tous les niveaux de la récursion l'ARG trouve le fondamental en moins de 8 générations sur les 10 instances aléatoires que j'ai testées. D'autre part j'ai effectué un test auto-cohérent consistant à faire tourner l'ARG un grand nombre de fois sur une même instance, si la meilleure solution ainsi trouvée est obtenue avec une grande probabilité (disons 90%) on dit que c'est le fondamental.

Dans le cadre du chapitre précédent [HM99a] on peut faire encore mieux en incorporant un tel test à la recherche de façon à augmenter la probabilité d'obtenir le fondamental. Comme on veut calculer le fondamental d'un verre de spin pour plusieurs valeurs du champ magnétique, on procède ainsi. On fixe $M = 5 + 0.2N$ pour tous les niveaux et on part de la valeur du champ magnétique la plus élevée pour laquelle la probabilité de trouver le fondamental est quasiment égale à

un car à peu de chose près tous les spins suivent le champ. Puis on diminue le champ et on recalcule le fondamental en incorporant la solution obtenue pour un champ plus élevé dans la première génération de l'ARG. Arrivé au champ nul on revient en arrière et on ré-augmente le champ en utilisant cette fois dans la première génération le résultat obtenu avec un champ inférieur. Pour cette valeur du champ on a donc deux résultats. Si ces deux résultats sont identiques on est (pour ainsi dire) sûr d'avoir le fondamental. S'ils sont différents on va réutiliser l'ARG en utilisant les deux résultats dans la première génération et en fixant $M = N$ au niveau supérieur. Pour évaluer l'erreur commise on compte le nombre de fois où deux résultats différents ont été trouvés. Par exemple pour $N = 512$ (en dimension 3) pour 40 valeurs du champ on trouve en moyenne 2.8 différences ce qui correspond à une probabilité de trouver directement le fondamental de 96.5%. Pour une valeur du champ où on a obtenu deux résultats différents, la probabilité que l'un des deux résultats soit déjà le fondamental est donc 96.5%. On réutilise alors l'ARG (avec $M = N$) et on a (d'après [HM99b]) 98% de chance de trouver le fondamental, mais c'est sans compter le fait que l'on utilise les deux résultats précédents dans la première génération ce qui augmente de beaucoup les chances de trouver le fondamental. Il est difficile de quantifier cette amélioration, mais elle est certainement très importante car par construction des deux états en question, l'un va ressembler au fondamental avec un champ plus grand et l'autre avec un champ plus petit, ainsi le fondamental que l'on cherche interpole entre les deux et c'est précisément ce genre de différence que l'ARG est capable de trouver. Je ne crois pas être optimiste (au contraire) en pensant que l'on peut gagner un facteur 100, ce qui correspondrait alors à un taux d'erreur bien inférieur à 10^{-5}.

5.4.3 Détermination de grandes excitations

Il est également possible d'avoir accès à certaines excitations avec l'ARG. Une première méthode consiste simplement à conserver en mémoire les différentes configurations intermédiaires du calcul et de les comparer au fondamental à la fin pour en déduire des excitations du système. Il est difficile d'obtenir de cette façon des excitations de petites tailles car elles sont éliminées par l'optimisation locale. En revanche, on peut obtenir de grandes excitations et c'est cette méthode que j'utilise et dont j'énonce les résultats aux chapitre précédent. Malheureusement il est très difficile de savoir de quelle nature sont les excitations trouvées et il est donc difficile de faire un raisonnement solide sur cette base.

Une autre méthode possible serait d'adapter l'ARG directement pour calculer des excitations. Je ne peux pas préciser davantage pour le moment, mais c'est une direction qui me semble prometteuse et dans laquelle je vais sûrement chercher.

5.5 Forces et faiblesses de l'ARG

5.5.1 Forces

La première force de l'ARG est sa généralité car il peut être appliqué à de nombreux systèmes. Pour cela il suffit uniquement de pouvoir définir une méthode de renormalisation raisonnable. Le point clé est qu'aucune autre compréhension algorithmique subtile du système n'est nécessaire, il suffit simplement d'avoir un algorithme d'optimisation locale. D'autre part on a vu que l'ARG est d'une redoutable efficacité. Qu'est ce qui fait que ça marche si bien ? L'idée est que le système est optimisé à toutes les échelles, chaque échelle correspondant à un niveau de récursion (et donc de renormalisation). En fait l'information circule librement entre les différentes échelles du système. Durant la création d'un enfant l'information est transmise des petites vers les grandes échelles, chaque étape de renormalisation prenant en compte l'information des petites échelles pour optimiser les grandes échelles. D'autre part l'algorithme génétique permet à l'optimisation aux grandes échelles d'influencer, à la génération suivante, les petites échelles. Cet incessant mouvement d'information permet à chaque niveau de la récursion de tirer le maximum de l'information contenue dans la première génération de l'algorithme génétique avec un minimum de perte d'information.

5.5.2 Faiblesses

Avec l'ARG il est très difficile (voire impossible) de perdre les bonnes choses qui se trouvaient dans les configurations de départ. En revanche, il peut arriver qu'une caractéristique du fondamental ne soit pas présente dans les configurations de la première génération, auquel cas il se peut qu'il soit alors impossible de trouver le fondamental, la solution consiste alors à prendre un M plus grand ou à avoir une meilleure recherche locale.

En fait ceci n'est pas toujours suffisant; pour certains problèmes comme SAT ou la partition de nombres pour lesquels j'ai essayé l'ARG, on obtient des résultats très décevants. Le problème vient du fait qu'il faut avoir identifié les degrés de liberté pertinents : par exemple si dans le verre de spins j'avais considéré la valeur des spins et non leur orientation relative les résultats auraient été bien moins bons. Si on n'identifie pas les bons degrés de liberté, ce qu'on garde des parents n'est pas pertinent et on ne progresse pas. Il est donc nécessaire d'avoir une bonne compréhension de la nature des degrés de liberté pertinents pour pouvoir implémenter l'étape de renormalisation.

L'autre problème de l'ARG est sa complexité (je ne parle pas de la difficulté de programmation qui peut également être un véritable obstacle). En effet si on utilise une heuristique pour résoudre un problème NP-difficile c'est qu'on ne veut

pas d'un algorithme exponentiel. Or il se trouve que l'ARG est exponentiel (au moins dans sa version actuelle), dans ce cas quel est son intérêt ? Tout d'abord l'ARG est très faiblement exponentiel ce qui fait qu'il reste utilisable jusqu'à des tailles assez grandes ($N \leq 2000$) et il est en tous cas bien plus rapide qu'une méthode exacte pour les verres de spins. D'autre part il permet d'obtenir de bien meilleures solutions que les autres heuristiques (pour peu que l'on ait un peu de temps).

5.5.3 Perspectives

J'espère avoir montré que l'ARG était à la fois puissant et général et donc que son emploi peut être étendu à de nombreuses situations, en particulier il serait intéressant de pouvoir l'appliquer à SAT ou aux hétéro-polymères.

D'autre part d'un point de vue pratique, il doit être possible d'améliorer sensiblement le temps de calcul en adaptant la dynamique des populations à la situation du moment. Par exemple on doit pouvoir gagner un temps précieux en diminuant la précision recherchée dans le calcul des enfants des premières générations, soit en diminuant la taille des enfants (en diminuant le nombre de parents utilisés pour renormaliser), soit en diminuant la taille des générations utilisées pour résoudre le problème renormalisé.

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

6.1 Bilan de la thèse

Pour terminer cette thèse je présente un petit état des lieux des éclairages qu'elle apporte.

6.1.1 Des techniques numériques prometteuses

J'ai développé et utilisé des techniques d'optimisation combinatoire pour étudier l'état fondamental et les excitations de faible énergie de deux systèmes désordonnés et frustrés : le couplage minimal et les verres de spins. Certes, l'optimisation combinatoire a déjà été utilisée pour étudier l'état fondamental de systèmes analogues [AS97, Rie98, Har99], en revanche c'est la première fois qu'elle permet d'accéder aux états excités. Cette approche donne un nouveau point de vue sur le paysage d'énergie et permet d'avoir accès à des informations que les simulations Monte Carlo ne permettent pas d'atteindre, essentiellement à cause du temps d'équilibration et des effets de taille finie.

Ainsi l'optimisation combinatoire a contribué à l'étude des systèmes physiques désordonnés. Inversement, en utilisant l'idée physique de renormalisation, j'ai développé une nouvelle technique d'optimisation combinatoire très performante et assez générale. Ce n'est pas la première fois que la physique contribue de manière pratique à l'optimisation combinatoire (on peut citer essentiellement le recuit simulé [KGV83]) mais c'est suffisamment rare pour être souligné.

6.1.2 Une situation théorique ambiguë

En utilisant ces simulations numériques à température nulle, j'ai essayé de trancher une question sujette à controverse depuis des années : la pertinence des approximations de champ moyen pour les systèmes désordonnés et frustrés en

dimension finie. J'ai donc tenté de comparer les mérites relatifs de deux approches très différentes : le champ moyen et la théorie des gouttelettes.

Je me suis d'abord intéressé au problème du couplage minimal qui présente le double mérite d'avoir une théorie de champ moyen très développée et d'être numériquement rapide à résoudre. Pour ce modèle, j'arrive à la conclusion inattendue qu'aucune des deux théories ne le décrit complètement. En fait chacune de ces théories est pertinente à une certaine échelle. Le champ moyen décrit très bien la structure de l'espace des phases à grande échelle : une structure complexe avec des vallées différant les unes des autres par un nombre infini de liens dans la limite thermodynamique. D'un autre côté la théorie des gouttelettes décrit bien ce qui se passe à l'échelle microscopique, l'échelle des excitations de taille finie.

Pour les verres de spins (le modèle EA), j'obtiens une conclusion similaire mais un peu plus complexe. D'une part mes simulations en champ magnétique indiquent que la phase verre de spins disparaît en présence d'un champ magnétique ce qui est en contradiction avec la théorie de champ moyen. D'autre part l'étude directe des excitations et des interfaces pose un problème à la théorie des gouttelettes. Ce problème consiste en des mesures incohérentes de l'exposant θ. Je ne serais pas surpris si ces incohérences provenaient du fait que cette théorie n'est valide qu'à l'échelle microscopique alors que les mesures concernent des excitations macroscopiques.

On peut donc imaginer la situation suivante : en absence de champ magnétique, la théorie du champ moyen permet de décrire correctement la structure à grande échelle de l'espace des phases (comme semble l'indiquer mes mesures directes des excitations de grandes tailles) tandis que la théorie des gouttelettes serait pertinente pour l'échelle microscopique; l'existence de ces deux échelles s'expliquant par la non-commutation des limites $N \to \infty$ et $\ell \to \infty$ (ℓ étant la taille des excitations). En revanche, en présence d'un champ, une seule des vallées est sélectionnée et la phase verre de spins disparaît. Ce phénomène s'expliquerait par une différence dans la nature des excitations entre le modèle champ moyen et le modèle EA. Cette différence tient au fait que les excitations de grande taille dans le modèle SK (comme dans le modèle à connectivité fixe) n'ont pas d'intérieur (tous les spins sont sur l'interface) alors que mes mesures de dimensions fractales de ces excitations montrent clairement que ce n'est pas le cas dans le modèle EA. Cette différence devient importante en présence de champ car on a alors des effets de volume. Je pense que cette différence est liée d'une certaine manière à la non commutation de deux limites : la limite de grande dimension et la limite thermodynamique. En effet, on affirme habituellement que le champ moyen est une limite de grande dimension, je pense pourtant que cela pose un problème car en toute dimension finie on doit avoir cet effet de volume, effet qui ne saurait être pris en compte par le champ moyen..

6.2 Perspectives d'avenir

6.2.1 Développement des techniques numériques

Dans le domaine des verres de spins et plus généralement pour tous les systèmes désordonnés, la recherche s'appuie beaucoup sur les simulations numériques. J'ai montré par mon travail que les techniques d'optimisation combinatoire pouvaient être très utiles dans ce cadre car elles portent un regard différent des simulations Monte Carlo. Il serait intéressant de développer et de faire connaître davantage ces techniques qui me semblent assez prometteuses. Néanmoins, il serait également utile d'améliorer les simulations Monte Carlo pour obtenir des renseignements à température finie. Peut-être est-il envisageable d'utiliser ma technique de renormalisation numérique pour les verres de spins pour obtenir un Monte Carlo capable de retourner des amas de spins ?

6.2.2 Une controverse à suivre

Les résultats obtenus pour le couplage minimal montrent qu'il n'est pas nécessairement vain de vouloir réconcilier la théorie de champ moyen et la théorie des gouttelettes. J'espère que mes résultats sur les verres de spins, bien que déjà controversés [MPZ99], pousseront la recherche dans cette voie et que bientôt une synthèse mettra tout le monde d'accord.

Annexe A

Implémentation de l'ARG

Dans cette annexe je décris les détails techniques concernant l'implémentation de l'ARG, ces détails sont fournis sous forme de pseudo-code décrivant de manière exhaustive les opérations à effectuer. Je compte bientôt donner libre accès au code source sur internet.

A.1 Partie indépendante du problème

A.1.1 Algorithme génétique

Tout d'abord, je présente la partie indépendante du problème d'optimisation combinatoire traité (voyageur de commerce, verre de spins, ...). Il s'agit essentiellement de la procédure implémentant l'algorithme génétique. Cette procédure (appelée Solve) prend en entrée l'instance du problème ainsi qu'un certain nombre de configurations servant à initialiser l'algorithme génétique et renvoie une configuration optimisée. Bien sûr, la procédure Solve a besoin de pouvoir agir sur le problème grâce à certaines procédures dont voici la liste. Je discute des quatre premières dans la suite. Les trois autres sont relativement simples et sont utilisées implicitement dans le pseudo-code qui suit.

- **procédure SolveFast** : En entrée l'instance du problème et une liste de configurations. En sortie une configuration optimisée (dont l'énergie n'est pas plus élevée que les configurations d'entrée). Cette procédure traite soit les petits systèmes, soit les cas où il faut aller vite.

- **procédure TailleGénération** : En entrée l'instance du problème. En sortie un nombre entier donnant le nombre de configurations à utiliser dans la première génération.

- **procédure LocalOpt** : En entrée l'instance du problème et une configuration. En sortie une configuration optimisée localement (dont l'énergie n'est pas plus élevée que la configuration d'entrée).
- **procédure Renormalisation** : En entrée l'instance du problème et une liste de configurations. En sortie une configuration optimisée et le nombre k de parents utilisés. Cette procédure crée une instance renormalisée et la résout en appelant Solve.
- **procédure Énergie** : En entrée l'instance du problème et une configuration. En sortie l'énergie de cette configuration.
- **procédure Identique** : En entrée l'instance du problème et deux configurations. En sortie vrai si les deux configurations sont identiques et faux sinon. Il faut noter que pour un verre de spins sans champ magnétique, deux configurations opposées sont considérées comme identiques.
- **procédure RandomConf** : En entrée l'instance du problème. En sortie une configuration aléatoire.

Le pseudo-code de la fonction Solve est présenté sur la page suivante, les mots clés sont en gras, les variables en italique.

procédure Solve(*instance*, *configs*)
    si l'instance est plus petite que T_{min}
    alors quitter Solve (renvoyer SolveFast(*instance*, *configs*))

    ***** Création de la première génération *****
    La liste *configs* est gérée de telle sorte que la configuration de plus faible énergie
        soit toujours en tête et que les configurations identiques soient éliminées
    Compléter la liste *configs* avec des configurations aléatoires
        jusqu'à ce que sa taille soit au moins TailleGénération(*instance*)
    pour chaque *conf* dans *configs*
        conf = LocalOpt(*instance*, *conf*)

    ***** Succession des générations *****
    tant que la liste *configs* a plus d'un élément
        new_confs = une liste vide de configurations (gérée comme *configs*)

        *** Création des enfants ***
        pour chaque *conf* dans *configs*

            *** Choix des configurations parents pour renormaliser ***
            list = une liste de k_{max} configurations toutes différentes
                dont la première est *conf*
                et dont les autres sont tirées aléatoirement dans *configs*

            *** Renormalisation ***
            (*enfant*, k) = Renormalisation(*instance*, *list*)
            enfant = LocalOpt(*instance*, *enfant*)

            *** Acceptation de la configuration ainsi créée ***
            si *new_confs* est vide ou si l'énergie de *enfant* est strictement inférieure
                à l'énergie maximale des k premières configurations de *list_confs*
            alors Ajouter *enfant* à *new_confs*
        fin de pour

        *** Les jeunes remplacent les vieux (c'est la vie !) ***
        configs = *new_confs*
    fin de tant que
fin de Solve (renvoyer l'unique configuration de *configs*)

Voici quelques remarques sur cette procédure :

- La génération des parents est la liste *configs*; la variable M décrite au chapitre 5 est simplement la longueur de cette liste. La génération des enfants est la liste *new_confs*. La variable k est celle décrite au chapitre 5 et est fixée par la procédure Renormalisation. T_{min} est la taille limite (en degrés de liberté) en dessous de laquelle le système est résolu directement (je l'ai fixée à 25 pour le PVC et à 20 pour les verres de spins).

- On impose que chaque enfant soit strictement meilleur que son plus mauvais parent afin d'assurer que l'algorithme termine (en particulier dans le cas d'un fondamental dégénéré). Cependant, il faut avoir au moins un individu dans la génération des enfants, on traite donc la tête de liste à part (cas de la liste *new_confs* vide). Finalement, comme on ne veut pas risquer de perdre la meilleure configuration déjà trouvée, on la met en tête de liste.

- Ceci étant dit, il est facile de vérifier que Solve renvoie toujours une configuration dont l'énergie est au moins aussi bonne que celle des configurations d'entrée.

- k_{max} pourrait être fixé à la longueur de la liste *configs* mais il suffit en pratique de le fixer à 10 (il faut juste être sûr de donner suffisamment de configurations à la procédure Renormalisation, voir plus loin).

A.1.2 Autres procédures

La procédure SolveFast :

procédure SolveFast(*instance*, *configs*)
    Compléter la liste *configs* avec des configurations aléatoires
        jusqu'à ce que sa taille soit au moins M_0
    pour chaque *conf* dans *configs*
        conf = LocalOpt(*instance*, *conf*)
    result = configuration de plus faible énergie dans *configs*
fin de SolveFast (renvoyer *result*)

En pratique je fixe $M_0 = 4$. On peut également, si le système est très petit faire une recherche systématique et trouver le fondamental exactement. C'est un peu compliqué pour le PVC alors je ne l'ai pas fais; en revanche je fais une recherche systématique pour les verres de spins de moins de 8 spins.

La procédure TailleGénération : c'est une procédure toute simple qui renvoie un nombre entier M en fonction du nombre N de degrés de liberté dans l'instance

(en pratique il n'est même pas nécessaire d'en faire une procédure séparée). Le choix de la fonction est en revanche délicat et va dépendre du problème et de la qualité que l'on cherche à obtenir. On aimerait pouvoir faire varier cette qualité en fonction du niveau de récursion car il n'est pas nécessaire de résoudre les problèmes renormalisés très précisément. On peut y parvenir en faisant ceci : on garde la trace du niveau de récursion en cours (on sait ainsi si l'on traite le problème initial ou si on est en train de résoudre un des problèmes renormalisé)s et on fournit ce niveau à la procédure TailleGénération qui peut ainsi en tenir compte. En pratique j'ai choisi les valeurs suivantes : Pour le PVC $M = 50$ au premier niveau de récursion et $M = 8$ pour les autres et pour les verres de spins $M = N$ pour le premier niveau et $M = 5 + 0.2N$ pour les autres.

A.2 La renormalisation

La procédure Renormalisation est le cœur de la méthode et dépend bien évidemment du problème à traiter. Elle effectue deux opérations différentes : premièrement elle choisit le nombre k de configurations utilisées pour faire la renormalisation et deuxièmement elle crée l'instance renormalisée et la résout.

procédure Renormalisation (*instance*, *configs*)
    Fixer N_{min} et N_{max} *** voir plus loin ***
    $k = 0$
    répéter
        $k = k + 1$
        inst_renorm = l'instance renormalisée créée avec les k premières
            configurations de *configs*
    jusqu'à ce que taille de *inst_renorm* $>N_{min}$
        ou que k = longueur de la liste *configs*
    list = liste des k configurations pour l'instance renormalisée
        correspondant aux k premières configurations de *configs*
    si taille de *inst_renorm* $<N_{max}$
        alors *conf_renorm* = Solve(*inst_renorm*, *list*)
        sinon *conf_renorm* = SolveFast(*inst_renorm*, *list*)
    conf = configuration correspondant à *conf_renorm* pour l'instance de départ
fin de Renormalisation (renvoyer *conf* et k)

Je ne décris pas davantage le processus de renormalisation car il est complétement défini au chapitre 5. Je vais en revanche discuter un peu la façon de fixer k : N_{min} est le nombre minimum de degrés de liberté que je veux avoir dans l'instance renormalisée. En pratique je pose $N_{min} = \max(N_0, t_{max}N)$ avec N la taille

de *instance*, N_0 est la taille minimum de cette instance (pour le PVC $N_0 = 12$ et pour le verre de spins $N_0 = 8$) et t_{max} est le taux de réduction maximum que je cherche à avoir (pour le PVC $t_{max} = 10\%$ et $t_{max} = 7.5\%$ pour le verre de spins). N_{max} est la taille maximum pour l'instance renormalisée, si cette taille est dépassée la résolution du problème renormalisé va prendre trop longtemps c'est pourquoi j'utilise alors une résolution rapide (mais beaucoup moins bonne). $N_{max} = t_{min}N$ avec $t_{min} = 30\%$ pour le PVC et $t_{min} = 15\%$ pour le verre de spins. La nécessité de cette borne maximum apparaît surtout pour le PVC où au début du calcul l'instance renormalisée créée avec seulement deux parents est trop grande.

A.3 La recherche locale

On peut à priori utiliser n'importe quel algorithme de recherche locale, du moment qu'il vérifie certaines contraintes : il faut que la configuration optimisée soit au moins aussi bonne que la configuration de départ (c'est la moindre des choses !), il faut qu'il soit très rapide surtout pour les systèmes de petite taille car l'essentiel du temps de calcul est là et finalement il faut qu'il soit suffisamment puissant pour trouver l'état fondamental avec une très grande probabilité pour les petits systèmes (une dizaine de degrés de liberté).

Le choix minimal serait l'algorithme 1- ou 2-opt (cf. chapitre 5). Bien sûr la qualité de l'optimisation locale influe sur le résultat final de l'ARG. L'idée c'est qu'il faut, en gros, que tout ce qui n'est pas pris en compte par l'optimisation locale le soit par la renormalisation. Ainsi si l'optimisation locale est capable de changer q degrés de liberté à la fois alors on peut, lors de la renormalisation, réduire le problème par un facteur q (en ajustant k). Il est clair que 1- ou 2-opt est alors un peu faible.

En pratique j'utilise les algorithmes de Lin et Kernighan pour le PVC [LK73] et pour les verres de spins [KL70] (ce dernier étant modifié de manière triviale pour prendre en compte le fait que le graphe n'est pas complet). Décrire ces algorithmes emmènerais trop loin, on peut juste remarquer que ces algorithmes sont tous les deux capables de changer une vingtaine de degrés de liberté à la fois.

A.4 Améliorations possibles

Pour améliorer cet algorithme, il faudrait pouvoir l'accélérer ce qui permettrait pour un même temps de calcul d'augmenter la qualité (il suffit pour cela d'augmenter la taille M des générations). Une possibilité serait pour la résolution des problèmes renormalisés de savoir exactement de quelle qualité on a besoin et de ne faire que les calculs strictement nécessaires pour atteindre cette qualité. Par

exemple les configurations des premières générations ne sont pas très optimisées, il n'est donc pas nécessaire quand on résout les problèmes renormalisés d'être très précis; ce qui compte c'est d'aller le plus vite possible pour faire baisser l'énergie.

Annexe B

Articles

Voici les quatre articles que j'ai écrit durant ma thèse :

1. **Comparing Mean Field and Euclidean Matching Problems**
   J. Houdayer, J. H. Boutet de Monvel et O. C. Martin
   Eur. Phys. Jour. B, **6** : 383–393, 1998 (cond-mat/9803195)

2. **Droplet Phenomenology and Mean Field in a Frustrated Disordered System**
   J. Houdayer et O. C. Martin
   Phys. Rev. Lett., **81** : 2554–2557, 1998 (cond-mat/9808316)

3. **Ising Spin-Glass in a Magnetic Field**
   J. Houdayer et O. C. Martin
   Phys. Rev. Lett., **82** : 4934–4937, 1999 (cond-mat/9811419)

4. **Renormalization for Discrete Optimization**
   J. Houdayer et O. C. Martin
   Phys. Rev. Lett., **83** : 1030–1033, 1999 (cond-mat/9901276)

Bibliographie

[AKT84] M. Ajtai, J. Komlos, and G. Tusnady. On optimal matchings. *Combinatorica*, 4:259–264, 1984.

[AS97] J.-C. Angles d'Auriac and N. Sourlas. The 3D random-field Ising model at zero temperature. *Europhys. Lett.*, 39:473–478, 1997.

[BCKM98] J.-P. Bouchaud, L. Cugliandolo, J. Kurchan, and M Mézard. Out of equilibrium dynamics in spin glasses and other glassy systems. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, Singapore, 1998.

[BD83] M. O. Ball and U. Derigs. An analysis of alternative strategies for implementing matching algorithms. *Networks*, 13:517–549, 1983.

[BHH59] J. Beardwood, J. H. Halton, and J. M. Hammersley. The shortest path through many points. *Proc. Camb. Phil. Soc.*, 55:299–327, 1959.

[BKMP91] R. Brunetti, W. Krauth, M. Mézard, and G. Parisi. Extensive numerical simulations of weighted matchings: Total length and distribution of links in the optimal solution. *Europhys. Lett.*, 14:295–301, 1991.

[BLMC98] L. Bernardi, N. Lemke, P. Mari, and I. Campbell. The spin glass transition: Exponents and dynamics. 1998. cond-mat/9804244.

[BM84] A. J. Bray and M. A. Moore. Lower critical dimension of Ising spin-glasses: A numerical study. *J. Phys. C Lett.*, 17:L463–L468, 1984.

[BM86] A. J. Bray and M. A. Moore. Scaling theory of the ordered phase of spin-glasses. In J. L. van Hemmen and I. Morgenstern, editors, *Heidelberg Colloquium on Glassy Dynamics*, volume 275 of *Lecture Notes in Physics*, pages 121–153, Berlin, 1986. Springer.

[BMRU80] 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*, 13:2553–2576, 1980.

[Bou96] J. H. Boutet de Monvel. *Physique Statistique et Modèles à Liens Aléatoires*. PhD thesis, Université Paris XI, Orsay, France, 1996.

[BPC96] L. Bernardi, S Parkash, and I. Campbell. Ordering temperatures and critical exponents in ising spin glasses. *Phys. Rev. lett.*, 77:2798–2801, 1996.

[Bro59] R. Brout. *Phys. Rev.*, 115:824, 1959.

[BY86a] R. Bhatt and A. P. Young. *J. Magn. Magn. Mater.*, 54–57:191, 1986.

[BY86b] K. Binder and A. P. Young. Spin-glasses: Experimental facts, theoretical concepts and open questions. *Rev. Mod. Phys.*, 58:801–976, 1986.

[CBB+97] N. J. Cerf, J. H. Boutet de Monvel, O. Bohigas, O. C. Martin, and A. G. Percus. The random link approximation for the Euclidean traveling salesman problem. *J. Physique I France*, 7:117–136, 1997.

[CMP97] A. Cacciuto, E. Marinari, and G. Parisi. A numerical study of ultrametricity in finite-dimensional spin glasses. *J. Phys. A*, 30:L263–L269, 1997.

[CPPS90] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Paternallo, and N. Sourlas. Low temperature behaviour of 3-D spin glasses in a magnetic field. *J. Phys. France*, 51:1877–1895, 1990.

[CPRR93] J.C. Ciria, G. Parisi, F. Ritort, and J.J. Ruiz-Lorenzo. The de Almeida-Thouless line in the four dimensional Ising spin glass. *J. Physique I France*, 3:2207–2227, 1993.

[dAT78] J. R. L. de Almeida and D. J. Thouless. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin-glass model. *J. Phys. A*, 11:983–990, 1978.

[Der81] B. Derrida. Random-energy model: An exactly solvable model of disordered systems. *Phys. Rev. B*, 24:2613–2626, 1981.

[DPW+95] V. Dotsenko, M. Picco, P. Windey, G. Harris, E. Martinec, and E. marinari. Self avoiding surfaces in the 3d Ising model. *Nucl. Phys. B*, 448:577–620, 1995.

[EA75] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin-glasses. *J. Phys. F*, 5:965–974, 1975.

[FH86] D. S. Fisher and D. A. Huse. Ordered phase of short-range Ising spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 56:1601–1604, 1986.

[FH88] D. S. Fisher and D. A. Huse. Equilibrium behavior of the spin-glass ordered phase. *Phys. Rev. B*, 38:386–411, 1988.

[FH91] K. H. Fischer and J. A. Hertz. *Spin-Glasses*, volume 1 of *Cambridge Studies in Magnetism*. Cambridge University Press, Cambridge, 1991.

[FRT99] S. Franz and F. Ricci-Tersenghi. Ultrametricity in 3D Edwards-Anderson spin glasses. 1999. cond-mat/9903130.

[FS85] D. S. Fisher and H. Sompolinski. Scaling in spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 54:1063–1066, 1985.

[GH91] E. R. Grannan and R. E. Hetzel. Susceptibility of two-, three-, and four-dimensional spin glasses in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 67:907–910, 1991.

[Gue96] F Guerra. *Int. J. Mod. Phys. B*, 10:1675, 1996.

[Har99] A. Hartmann. Scaling of stiffness energy for 3D +/-J Ising spin glasses. *Phys. Rev. E*, 59:84–87, 1999.

[HBM98] J. Houdayer, J. H. Boutet de Monvel, and O. C. Martin. Comparing mean field and Euclidean matching problems. *Eur. Phys. Jour. B*, 6:383–393, 1998.

[HM98] J. Houdayer and O. C. Martin. Droplet phenomenology and mean field in a frustrated disordered system. *Phys. Rev. Lett.*, 81:2554–2557, 1998.

[HM99a] J. Houdayer and O. C. Martin. Ising spin glasses in a magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 82:4934–4937, 1999.

[HM99b] J. Houdayer and O. C. Martin. Renormalization for discrete optimization. *Phys. Rev. Lett.*, 83:1030–1033, 1999.

[HN95] K. Hukushima and K. Nemoto. Exchange monte Carlo method and application to spin glass simulations. 1995. cond-mat/9512035.

[Hus91] D. A. Huse. Monte Carlo study of domain growth in an Ising spin glass. *Phys. Rev. B*, 43:8673–8675, 1991.

[JM97] D. S. Johnson and L. A. McGeoch. The traveling salesman problem: A case study in local optimization. In E. H. L. Aarts and J. K. Lenstra, editors, *Local Search in Combinatorial Optimization*. J. Wiley & and Sons, New York, 1997.

[JNV+99] K. Jonason, P. Nordblad, E. Vincent, J. Hammann, and J.-P. Bouchaud. Memory interference effects in spin glasses. 1999. cond-mat/9904410.

[JVH+98] K. Jonason, E. Vincent, J. Hammann, J.-P. Bouchaud, and P. Nordblad. Memory and chaos effects in spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3243–3246, 1998.

[KGV83] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr., and M. P. Vecchi. Optimization by simulated annealing. *Science*, 220:671–680, 1983.

[KI93] N. Kawashima and N. Ito. Critical behavior of the three-dimensional $\pm j$ model in a magnetic field. *J. of the Physical society of Japan*, 62:435–438, 1993.

[KL70] B. Kernighan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *Bell System Technical Journal*, 49:291 – 307, 1970.

[KS92] N. Kawashima and M. Suzuki. Replica optimization method for ground-state search of random spin systems. *J. Phys. A*, 25:1055–1070, 1992.

[KS94] S. Kirkpatrick and B. Selman. Critical behavior in the satisfiability of random boolean expression. *Science*, 264:1297–1301, 1994.

[LK73] S. Lin and B. Kernighan. An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem. *Operations Research*, 21:498–516, 1973.

[MBD98] M. A. Moore, H. Bokil, and B. Drossel. Evidence for the droplet picture of spin glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 81:4252–4255, 1998.

[McM85] W. L. McMillan. Domain-wall renormalization group study of the three dimensional random Ising model at finite temperature. *Phys. Rev. B*, 31:340–341, 1985.

[MJN+95] J. Mattsson, T. Jonsson, P. Nordblad, H. A. Katori, and A. Ito. No phase transition in a magnetic field in the ising spin glass $Fe_0.5Mn_0.5TiO_3$. *Phys. Rev. Lett.*, 74:4305–4308, 1995.

[MNDS+97] A. Möbius, A. Neklioudov, A. Díaz-Sánchez, K. H. Hoffmann, A. Fachat, and M. Schreiber. Optimization by thermal cycling. *Phys. Rev. Lett.*, 79:4297–4301, 1997.

[MNZ98a] E. Marinari, C. Naitza, and F. Zuliani. Critical behavior of the 4D spin glass in magnetic field. *J. Phys. A*, 31:6355–6366, 1998.

[MNZ+98b] E. Marinari, C. Naitza, F. Zuliani, G. Parisi, M. Picco, and F. Ritort. General method to determine replica symmetry breaking transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 81:1698–1701, 1998.

[MP85] M. Mézard and G. Parisi. Replicas and optimization. *J. Physique*, 46:L771–L778, 1985.

[MP86] M. Mézard and G. Parisi. Mean-field equations for the matching and the travelling salesman problem. *Europhys. Lett.*, 2:913–918, 1986.

[MP87] M. Mézard and G. Parisi. On the solution of the random link matching problems. *J. Physique*, 48:1451–1459, 1987.

[MP88] M. Mézard and G. Parisi. The Euclidean matching problem. *J. Physique France*, 49:2019–2025, 1988.

[MP92] E. Marinari and G. Parisi. Simulated tempering: a new Monte Carlo scheme. *Europhys. Lett.*, 6:451–458, 1992.

[MPR98] E. Marinari, G. Parisi, and J.J. Ruiz-Lorenzo. Numerical simulations of spin glass systems. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, Singapore, 1998.

[MPRT+99] E. Marinari, G. Parisi, F. Ricci-Tersenghi, J.J. Ruiz-Lorenzo, and F. Zuliani. Replica symmetry breaking in short range spin glasses: A review of the theoretical foundations and of the numerical evidence. 1999. cond-mat/9906076.

[MPV87] M. Mézard, G. Parisi, and M. A. Virasoro. *Spin-Glass Theory and Beyond*, volume 9 of *Lecture Notes in Physics*. World Scientific, Singapore, 1987.

[MPZ98] E. Marinari, G. Parisi, and F. Zuliani. Four-dimensional spin glasses in a magnetic field have a mean-field-like phase. *J. Phys. A*, 31:1181–1187, 1998.

[MPZ99] E. Marinari, G. Parisi, and F. Zuliani. Comment on "Ising spin glasses in a magnetic field". 1999. cond-mat/9812401.

[NS96] C. M. Newman and D. L. Stein. Non-mean-field behavior of realistic spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 76:515–518, 1996.

[NS97] C. M. Newman and D. L. Stein. Metastate approach to thermodynamic chaos. *Phys. Rev. E*, 55:5194–5211, 1997.

[NS98a] C. M. Newman and D. L. Stein. Simplicity of state and overlap structure in finite-volume realistic spin glasses. *Phys. Rev. E*, 57:1356–1366, 1998.

[NS98b] P. NordBlad and P. Svedlindh. Experiments on spin glasses. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, Singapore, 1998.

[Orl85] H. Orland. Mean-field theory for optimization problems. *J. Physique Lett.*, 46:L763–L770, 1985.

[Par79a] G. Parisi. Infinite number of order parameter for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 43:1754–1756, 1979.

[Par79b] G. Parisi. Toward a mean-field theory for spin-glasses. *Phys. Lett.*, 73A:203–205, 1979.

[Par80a] G. Parisi. Magnetic properties of spin-glasses in a new mean-field theory. *J. Phys. A*, 13:1887–1895, 1980.

[Par80b] G. Parisi. The order parameter for spin-glasses: A function on the interval 0–1. *J. Phys. A*, 13:1101–1112, 1980.

[Par80c] G. Parisi. A sequence of approximated solutions to the SK model for spin-glasses. *J. Phys. A Lett.*, 13:L115–L121, 1980.

[Par83] G. Parisi. Order parameter for spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 50:1946–1948, 1983.

[Par98] G. Parisi. A conjecture on random bipartite matching. cond-mat/9801176, 1998.

[PC99] M. Palassini and S. Caracciolo. Universal finite size scaling functions in the 3D Ising spin glass. 1999. cond-mat/9904246.

[PM96] A. G. Percus and O. C. Martin. Finite size and dimensional dependence in the Euclidean traveling salesman problem. *Phys. Rev. Lett.*, 76:1188–1191, 1996.

[PR94] M. Picco and F. Ritort. Numerical study of the ising spin glass in a magnetic field. *J. Phys. I France*, 4:1619–1625, 1994.

[PR98] M. Picco and F. Ritort. Tempering simulations in the four dimensional +-J Ising spin glass in a magnetic field. *Physica A*, 250:46–57, 1998.

[PS82] C. H. Papadimitriou and K. Steiglitz. *Combinatorial Optimization: Algorithms and Complexity.* Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1982.

[PY99] M. Palassini and A. P. Young. Triviality of the ground state structure in Ising spin glasses. 1999. cond-mat/9906323.

[Rei91] G. Reinelt. TSPLIB — a traveling salesman problem library. *ORSA Journal on Computing*, 3:376–384, 1991. www.iwr.uni-heidelberg.de/-iwr/comopt/soft/TSPLIB95/TSPLIB.html.

[Rie98] H. Rieger. Frustrated systems: Ground state properties via combinatorial optimization. In J. Kertesz and I. Kondor, editors, *Advances in Computer Simulation*, volume 501 of *Lecture Notes in Physics.* Springer-Verlag, Heidelberg, 1998.

[SFM+96] J. Schneider, C. Froschhammer, I. Morgenstern, T. Husslein, and J. Singer. Searching for backbones – an efficient parallel algorithm for the traveling salesman problem. *Computer Physics Communications*, 96:173–188, 1996.

[SK75] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. Solvable model of a spin-glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35:1792–1796, 1975.

[Sou84] N. Sourlas. Three-dimensional Ising spin-glasses and mean-field theory. *J. Physique Lett.*, 45:L969–L975, 1984.

[Ste81] J. M. Steele. Subadditive Euclidean functionals and nonlinear growth in geometric probability. *Ann. Probab.*, 9:365–376, 1981.

[Ste97] J. M. Steele. *Probability Theory and Combinatorial Optimization.* SIAM, Philadelphia, 1997.

[SW86] R. H. Swendsen and J.-S. Wang. Replica Monte Carlo simulation of spin-glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 57:2607–2609, 1986.

[VB85] L. Viana and A. J. Bray. Phase diagrams for dilute spin-glasses. *J. Phys. C*, 18:3037–3051, 1985.

[VM84] J. Vannimenus and M. Mézard. On the statistical mechanics of optimization problems of the travelling salesman type. *J. Physique Lett.*, 45:L1145–L1153, 1984.

[Wei98] M. B. Weissman. Mesoscopic fluctuation experiments on metallic spin glasses. In A. P. Young, editor, *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, Singapore, 1998.

[You98] A. P. Young, editor. *Spin Glasses and Random Fields*. World Scientific, Singapore, 1998.

Index

algorithme, 19
  calcul des excitations, 52–56
  heuristique, 77
  hongrois, 48, 52
  renormalisation génétique, 79–89
approximation
  de champ moyen, 7, 33, 36
  des plus proches voisins, 49
auto-moyennant, **9**, 24, 29, 33, 35

boucles, 39–46, 52–56

champ moyen, **7**, 15, 32, 41, 57, 64
complexité, 1, 19–21, 49, 88
conditions aux bords, 7, 30, 58, 71
conjecture
  de Parisi, 37
  du k-ème voisin, 37

désordre, 1, 8–10

effets de taille finie, 25, 51, 58, 61, 66, 70
excitations, 39–46, 52–56, 72, 87
exposants
  couplage minimal, 41, 44
  gouttelettes, 18, 58, 71
  verre de spins, 66, 70

frustration, 1, 12

gouttelettes, **18**, 40, 43, 57, 62, 71, 72

interfaces, 71

ligne AT, 16, 58, 60–71

modèle, 2
  à connectivité fixe, 64
  à liens aléatoires, 32
  champ moyen, 8, 32, 64
  EA, 3, **12**, 31, 57–76
  RKKY, 11
  SK, 15
  Viana–Bray, 15

optim. combinatoire, 21–24, 77–89
  stochastique, 23, 29

paramètre d'ordre, 5, 14, 16
paysage d'énergie, 25, 39, 46, 62, 71
problème décisionnel, 20, 22

réduction de variance, 50
répliques, **10**, 16–18, 33, 59, 60
recouvrement, 17, 18, 57
renormalisation, 6, 79, 80, 84

satisfaisabilité, 20
susceptibilité, 5, 11, 14, 17

théorème limite centrale, 9, 35
topologie, 74–76

ultramétricité, 18, 60
universalité, 6

voyageur de commerce, 21, 80–84

Abstract

Frustrated and disordered systems are one of the most active subjects of research in statistical physics. Progress has been slow in part because analytical and numerical treatments are particularly difficult. The mean field approximation is a fruitful approach but its relevance for finite dimensional systems is still highly debated. In this thesis, I study the validity of this approximation and the nature of the energy landscape for two different systems: the minimum matching and spin glasses.

The techniques used are essentially numerical, but in contrast to what is usually done, I do not use Monte carlo simulations. The method I choose allows the study of systems at zero temperature; it consists in computing the ground state and low energy excitations by methods from combinatorial optimization. Combinatorial optimization is the field of computer science that deals with optimization over a finite configurations set. Finding the ground state of a disordered and frustrated system is a problem of this kind, and so there are interesting links between the two domains.

The contributions of this thesis fall into three topics. First, an in-depth study of the minimum matching (a dimerization problem). The main conclusion of this study is the existence of two scales, the macroscopic scale well described by mean field theory and the microscopic scale described by a "droplet" theory. Second, a study of finite dimensional spin glasses that seems to indicate the absence of the AT transition line predicted by mean field. Finally, I have developed a new combinatorial optimization algorithm based on renormalization that is both general and very powerful.

Résumé

Les systèmes désordonnés et frustrés sont un des sujets actifs de la physique statistique actuelle dont l'étude analytique est particulièrement difficile. L'approximation de champ moyen est une approche fructueuse, mais sa pertinence pour les systèmes en dimension finie est encore débattue. Dans cette thèse, j'étudie la validité de cette approximation et la nature du paysage d'énergie pour deux systèmes différents : le couplage minimal et les verres de spins.

Les techniques utilisées sont essentiellement numériques, mais contrairement à ce qu'on voit habituellement il ne s'agit pas ici de simulations de type Monte Carlo. La méthode que j'ai retenue permet d´étudier un système à température nulle et consiste à calculer l'état fondamental et les excitations de faible énergie par des méthodes d'optimisation combinatoire. L'optimisation combinatoire est la branche de l'informatique qui s'intéresse aux problèmes d'optimisation d'une fonction sur un ensemble fini de configurations. Trouver le fondamental d'un système désordonné et frustré est un problème de ce type ce qui crée des liens intéressants entre les deux domaines.

Les apports de cette thèse peuvent être décomposés en trois parties : premièrement une étude approfondie du couplage minimal (un problème de dimérisation), dont la conclusion principale est l'existence de deux échelles, l'échelle macroscopique bien décrite par le champ moyen et l'échelle microscopique décrite par une théorie de type "gouttelettes". Deuxièmement, une étude des verres de spins en dimension finie qui semble indiquer l'absence de la ligne de transition AT en champ magnétique prédite par le champ moyen. Et finalement le développement d'un nouveau type d'algorithme d'optimisation combinatoire basé sur l'idée de renormalisation qui s'avère être à la fois général et très puissant.