



Systèmes désordonnés et frustrés: modèles champ moyen et problèmes d'optimisation combinatoire

Georg R. Schreiber

► To cite this version:

Georg R. Schreiber. Systèmes désordonnés et frustrés: modèles champ moyen et problèmes d'optimisation combinatoire. Physique mathématique [math-ph]. Université Paris Sud - Paris XI, 1997. Français. NNT: . tel-00000825

HAL Id: tel-00000825

<https://theses.hal.science/tel-00000825>

Submitted on 16 Oct 2001

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

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

ORSAY

N° D'ORDRE :

UNIVERSITÉ DE PARIS-SUD
U.F.R. SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THÈSE

présentée pour obtenir le titre de

DOCTEUR EN SCIENCES

SPÉCIALITÉ : PHYSIQUE THÉORIQUE

de

L'UNIVERSITÉ PARIS XI ORSAY

par

Georg R. SCHREIBER

Sujet :

Systèmes désordonnés et frustrés :
Modèles Champ Moyen et
Problèmes d'Optimisation Combinatoire

Soutenue le 13 novembre 1997

devant la commission d'examen, composée de

MM. V.-D. Cung

T. H. Diep Rapporteur

O. C. Martin Directeur de thèse

H. Orland

K. A. Penson Rapporteur

..., quien,le hizo saber que un mismo libro no podía ser dedicado dos veces. Es decir, que en ningún caso sería noble proponerle al poeta – por comunista que fuera – que tarjara sus palabras para reemplazarlas por otras(*)

Antonio Skarmeta^(†)

À ma future épouse Sophia.

La ciudad luz^(‡), Paris, octobre 1997

(*).., qui, ... lui fait savoir que le même livre ne pouvait pas être dédié deux fois. C'est-à-dire qu'en aucun cas ne serait-il noble de proposer au poète – tout communiste qu'il soit – qu'il efface ses propres mots afin de les remplacer avec d'autres

(†)Antonio Skarmeta, *El cartero de Neruda*

(‡)idem

ROI DES AULNES

Qui chevauche si tard dans la nuit et le vent ?
C'est le père avec son enfant.
Il serre le jeune garçon dans ses bras,
Il le tient au chaud, il le protège.
Mon fils pourquoi caches-tu peureusement ton visage ?
Père, ne vois-tu pas le Roi des Aulnes ?
Le Roi des Aulnes avec sa couronne et sa traîne ?
Mon fils, c'est une traînée de brume.
Cher enfant, viens, partons ensemble !
Je jouerai tant de jolis jeux avec toi !
Tant de fleurs émaillent le rivage !
Ma mère a de beaux vêtements d'or.
Mon père, mon père, mais n'entends-tu pas,
Ce que le Roi des Aulnes me promet tout bas ?
Du calme, rassure-toi, mon enfant,
C'est le bruit du vent dans les feuilles sèches.
Veux, fin jeune garçon,-tu venir avec moi ?
Mes filles s'occuperont de toi gentiment.
Ce sont elles qui mènent la ronde nocturne,
Elles te berceront par leurs danses et leurs chants.
Mon père, mon père, ne vois-tu pas là-bas,
Danser dans l'ombre les filles du Roi des Aulnes ?
Mon fils, mon fils, je vois bien en effet,
Ces ombres grises ce sont de vieux saules.
Je t'aime, ton beau corps me tente,
Si tu n'es pas consentant, je te fais violence !
Père, père, voilà qu'il me prend !
Le Roi des Aulnes m'a fait mal !
Le père frissonne, il presse son cheval,
Il serre sur sa poitrine l'enfant qui gémit.
A grand-peine, il arrive à la ferme
Dans ses bras l'enfant était mort.

J.W. Goethe

Table des matières

I	Introduction générale	1
I.1	Physique statistique	2
I.2	Verres de spins	8
I.3	Optimisation combinatoire	20
I.4	Physique statistique et optimisation combinatoire	26
I.5	Survol de cette thèse	29
II	Le modèle de Blume, Emery et Griffiths	33
II.1	Introduction	34
a)	Préliminaires	34
b)	Le modèle BEG	38
II.2	Présentation du modèle BEG	40
a)	Le modèle de Griffiths	40
b)	Le modèle de Blume et Capel	44
c)	Le modèle de Blume, Emery et Griffiths	48
II.3	Le modèle BEG frustré	52
a)	Le modèle BEG frustré	52
b)	Étude par la méthode des répliques	53
c)	Les différentes phases	55
d)	Au-delà de la symétrie des répliques	57
II.4	Le modèle BEG avec potentiel chimique désordonné	60
II.5	Discussion, perspectives et conclusions	65
II.6	Journal de Physique preprint	69
	Appendix A	91
	Annexe B	97
III	Propriétés statistiques associées aux algorithmes heuristiques	103
III.1	Motivations	104
III.2	Le problème de la bipartition de graphe	106
III.3	Des heuristiques pour la bipartition de graphe	108
III.4	Propriétés statistiques des coûts engendrés par des heuristiques	112
III.5	Qualités des solutions engendrées par des heuristiques	115
III.6	Discussion	120
III.7	Article soumis au SIAM Journal of Optimization	123
III.8	Proceedings de la 2eme Conférence Internationale des Metaheuristiques	141
	Annexe A	157

IV Verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires	161
IV.1 Introduction	162
IV.2 Application de l'optimisation combinatoire à l'étude des verres de spins	165
IV.3 Nouvel algorithme pour trouver les états fondamentaux	168
IV.4 L'énergie du fondamental	170
IV.5 Propriétés des états fondamentaux	174
IV.6 Preprint	181
Annexe A	187
Annexe B	189
 Principales notations	 193
 Bibliographie générale	 195
 Remerciements	 206
 Summary	 207
 Résumé	 209

Table des figures

I-1	L'aimantation spontanée en fonction de la température.	5
I-2	Le diagramme de phase d'un aimant ferromagnétique.	5
I-3	Le diagramme d'états d'une substance simple.	6
I-4	Le triangle frustré.	7
I-5	Le diagramme de phase du modèle de Sherrington et Kirkpatrick (PM : phase paramagnétique, FM : phase ferromagnétique, SG : phase verre de spins).	16
I-6	Le diagramme de phase du modèle de Sherrington et Kirkpatrick dans le plan champ-magnétique-température. Pour une température $T > T(h)$ une phase paramagnétique existe (la solution RS est stable) ; pour une température $T < T(h)$ une phase verre de spins existe (la solution RS est instable).	17
I-7	Les distributions $P(e)$ des densités d'énergie des états fondamentaux pour des différentes tailles du système $N = 40, 80$ et 200	18
I-8	Les classes $\mathcal{P}$, $\mathcal{NP}$ et $\mathcal{NP}$ -complet.	22
I-9	Les éléments constituant un graphe.	24
I-10	Un graphe et une partition de ce graphe.	25
I-11	Un graphe géométrique.	26
II-1	La forme de l'énergie libre pour une transition de second ordre (2A, 2B).	34
II-2	La forme de l'énergie libre pour une transition du premier ordre (1A,1B,1C).	35
II-3	Un diagramme de phase avec un point tricritique.	36
II-4	Un diagramme de phase schématique d'un mélange binaire.	37
II-5	Diagramme de phase d'un mélange de He^3 et He^4 dans le plan T - x	38
II-6	Diagramme de phase du modèle de Griffiths dans le plan T/x pour $K = 4.0$. La ligne de transition de phase comme fonction de la concentration (en haut) et la courbe limite de la région de stabilité de l'énergie de Gibbs comme fonction de la concentration (en bas).	41
II-7	Diagramme de phase dans le plan $T - \Delta$ du modèle de Griffiths pour une valeur du couplage quadrupolaire $K = 4.0$	43
II-8	Le diagramme de phase dans le plan de concentration x de l'isotope He^3 et de température T	46
II-9	Diagramme de phase dans le plan de potentiel chimique Δ et de température T	47
II-10	Le diagramme de phase du modèle BEG dans le plan x - T pour $K = 0.16$. Les symboles représentent la ligne de séparation de phase. La ligne de transition de second ordre est la ligne continue.	51
II-11	Le diagramme de phase du modèle BEG dans le plan Δ - T pour $K = 0.16$. Les symboles représentent la ligne de séparation de phase. La ligne de transition de second ordre est la ligne continue.	51

II-12	Le diagramme de phase du modèle de Blume, Emery et Griffiths avec un couplage quadrupolaire $K = 0$ et du faible désordre ($\sigma = 0.5$) dans le cas recuit : la concentration x du He^3 isotope en fonction de la température.	60
II-13	Le diagramme de phase dans le cas recuit : la température en fonction du potentiel chimique en cas de faible désordre ($\sigma = 0.5$).	61
II-14	La fonction $\chi(x, \sigma)$ pour quelques valeurs de $\sigma = 0.0, 0.05, 0.1, \dots, 0.3$	63
II-15	Les concentrations $x_{c,i}(\sigma)$, $i = 1, 2$ des points terminaux en fonction de σ	64
II-16	La fonction $\chi(x)$ pour faible désordre $\sigma = 0.05$	64
II-17	La solution $x_{c,1}(\sigma)$ pour $\chi = 0$ pour faible désordre σ	65
III-1	Distributions des coûts engendrées par un algorithme heuristique pour le problème de la bipartition de graphe (tailles du graphe $N = 20, 100, 500$, et 2000).	105
III-2	Distributions des coûts pour différentes heuristiques appliquées au problème de la bipartition de graphe (graphes de taille $N = 1000$).	106
III-3	Le schéma de l'algorithme CLO.	111
III-4	Valeurs moyennes des différents algorithmes et la limite de grande taille N	113
III-5	Variances relatives des coûts $\frac{\sigma^2(N)}{N}$ pour des différents algorithmes en fonction de $1/N$	113
III-6	Distribution $P(e)$ des coûts réduits $e = \mathcal{C}/N$ engendrée par KL pour un graphe donné de taille $N = 1000$	114
III-7	La distribution $P(\mathcal{C})$ de l'algorithme de KL pour quatre graphes avec $N = 20, 50, 100$, et 170	116
III-8	$\ln[< P_{KL}(\mathcal{C}_0) >]$ en fonction de $1/N$	117
III-9	Le temps de calcul pour des différents algorithmes en fonction de taille des graphes.	118
III-10	Premier du classement des algorithmes par rapport à la qualité et au temps de calcul pour des différents temps disponibles et différentes tailles des graphes.	118
III-11	Valeurs moyennes de SA, CLO et CLO avec un schéma de refroidissement pour différentes tailles de graphes.	119
III-12	La probabilité de trouver un amas retourné en fonction de la taille.	120
III-13	Le schéma de fonction de l'algorithme de Metropolis.	157
III-14	Le schéma de fonction du recuit simulé.	158
IV-1	Le nouvel algorithme.	169
IV-2	Effets de taille finie de l'énergie par spin de l'état fondamental pour les coordinations $\alpha = 3, 4, 5$ et 7 (de bas en haut).	172
IV-3	Comparaison de la conjecture (courbe) aux valeurs obtenues par des simulations.	173
IV-4	Variance divisée par l'énergie au carré en fonction de $1/N$ pour une coordination de $\alpha = 5$	175
IV-5	La distribution du paramètre d'ordre $P(q_{\alpha\beta})$ à $N = 120$ et $\alpha = 4$	176
IV-6	La distribution du paramètre d'ordre $P_J(q_{\alpha\beta})$ obtenue par des simulations du modèle SK (à $N = 200$) et par la solution analytique due à Parisi ($N = \infty$).	177
IV-7	La moyenne q de la distribution du paramètre d'ordre $P(q_{\alpha\beta})$ pour les différentes coordinations $\alpha = 3, 4, 5$ et 7 en fonction de la taille $1/N$	178
IV-8	Variance $\sigma^2(q_{\alpha\beta})$ q en fonction de $1/N$	179
IV-9	Moyenne de la distribution $\overline{p_J(u)}$ en fonction de $1/N$ ($\alpha = 4$).	179
IV-10	La distribution $P(q_{\alpha\beta})$ pour une boucle frustrée.	180

Liste des tableaux

III.1 Les valeurs moyennes $\bar{\mathcal{C}}/N$ pour CLO sans et avec refroidissement, et du recuit simulé, ainsi que l'excès en pourcentage pour différentes tailles et pour la limite $N \rightarrow \infty$	117
IV.1 Comparaison des différents algorithmes.	170
IV.2 Comparaison des énergies par spin corrigées de l'erreur systématique pour les différentes coordinations dans la limite de grand N avec la formule de Banavar <i>et al.</i> . Nous donnons les χ_r^2 et l'excès en pourcentage entre conjecture et simulations.	172

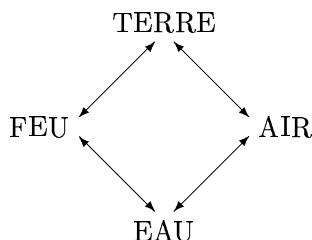
Chapitre I

Introduction générale

Plan du chapitre

I.1	Physique statistique	2
I.2	Verres de spins	8
I.3	Optimisation combinatoire	20
I.4	Physique statistique et optimisation combinatoire	26
I.5	Survol de cette thèse	29

En regardant autour de soi on s'aperçoit que la nature apparaît sous multiples formes dont la variété est impressionnante. L'homme cherchant à comprendre son environnement depuis toujours a essayé d'abstraire et de capturer les principales structures. Très tôt, il a distingué la matière vive de la matière inerte. La classification des formes inertes en états gaz, liquide et solide a été achevée beaucoup plus tard. En effet, dans l'ancienne Grèce, *Aristoteles* (700-670 a.D.) parlait de quatre éléments :



À la fin du dernier siècle les savants avaient à leur disposition les possibilités techniques pour produire des substances pures, et observaient que de nombreux corps solides étaient cristallins. Mais il existe des matériaux solides qui se distinguent par l'absence d'une structure bien définie : les matériaux amorphes et les verres. Une sous-classe des verres — **les verres de spins** — sont devenus très importants : dans les trois dernières décennies on s'est intéressé aux verres de spins comme systèmes permettant de comprendre l'état vitreux. L'objet de cette thèse est l'étude de plusieurs modèles de verres de spins.

Dans ce chapitre, je vais mettre les chapitres qui suivent dans un contexte général. Ceci permettra de comprendre les différentes motivations qui m'ont mené à étudier des problèmes aussi variés. D'abord je vais esquisser quelques idées de physique statistique. Après, je vais *en media res* et traiter les propriétés des verres de spins et du problème de partition d'un graphe. Une synthèse des deux problèmes suit et je conclus cette introduction avec un aperçu du reste de la thèse.

– I.1 – Physique statistique

La physique statistique est un cadre théorique pour décrire les systèmes avec de nombreux degrés de liberté là où la mécanique classique (*Newton* 1643 - 1727) devient trop difficile à utiliser. En effet, au-delà de quelques degrés de liberté, calculer explicitement les trajectoires est infaisable et en outre n'avance pas notre connaissance du système. De telles informations sont trop détaillées. La physique statistique se restreint à une échelle plus grande, dite *macroscopique* au lieu de *microscopique*.

Les différents points de vue et les différentes techniques sont reflétés dans les noms qui ont été introduits pour désigner ce domaine de la physique. Au début, ce fut la *thermodynamique*. Cette approche macroscopique a été suivie par la *mécanique statistique* qui essaie de décrire l'ensemble des particules par des lois probabilistes. Tous les différents aspects ont finalement été regroupés sous le nom *physique statistique*. Au début de son histoire la physique statistique (en fait la mécanique statistique) s'est consacrée aux systèmes avec un très grand nombre de degrés de liberté, mais les systèmes étaient homogènes. Les quantités physiques macroscopiques prennent alors les mêmes valeurs pour différents échantillons. Au cours du temps, les techniques de la physique statistique ont été développées de plus en plus. Récemment elles se prêtent à l'étude de la physique des milieux désordonnés, c'est-à-dire des systèmes dont des échantillons sont différents malgré une préparation semblable. Si on divise un cristal parfait, on obtient deux cristaux parfaits. Mais si on prend un cristal avec des défauts et que l'on coupe cet échantillon en deux, nous obtenons deux échantillons différents car le désordre fait que les distributions spatiales des défauts dans des échantillons sont différentes. Néanmoins, expérimentalement on trouve que certaines quantités physiques ne diffèrent pas. Ceci est dû au fait que les échantillons restent macroscopiques et donc en pratique on mesure une moyenne sur le désordre. Les échantillons macroscopiques représentent des systèmes suffisamment grands pour que cette moyenne puisse s'effectuer presque parfaitement (voir l'argument de Brout I.2). Étonnamment, il y a parfois des quantités qui ne coïncident pas entre deux échantillons macroscopiques : (i) ceci est le cas pour la distribution du paramètre d'ordre de verre de spins ; (ii) c'est aussi vrai pour des coefficients de transport ou de diffusion. Ces quantités sont très sensibles aux différentes réalisations du désordre. D'autre part on s'aperçoit que pour des tailles plus petites c'est-à-dire dans la région du nanomètre on peut facilement mesurer des déviations par rapport au comportement de grande taille. L'étude de ces systèmes avec une telle taille dite *mésoscopique* ne sera pas abordé dans cette thèse. Nous nous intéresserons au comportement typique d'un système physique de très grande taille. Si les distributions des quantités intéressantes sont piquées, la valeur typique et la moyenne coïncide, ce que nous permet d'utiliser les quantités moyennées. Pour ces grandeurs, dites *auto-moyennantes*, dans la limite de taille infinie il n'y a pas de différence essentielle entre la valeur réelle et sa moyenne, mais comme nous allons aussi regarder des systèmes de taille finie les *effets de taille finie* seront importants. Nous nous intéressons alors aux moyennes sur le désordre de ces quantités, c'est-à-dire sur plusieurs échantillons. Afin d'étudier les effets de taille finie nous allons analyser les fluctuations d'échantillon à échantillon. Ceci sera fait dans cette thèse pour certains modèles.

Modélisation Pour comprendre les propriétés des matériaux les théoriciens ont conçu des modèles qui sont plus ou moins capables de capturer les caractéristiques principales de systèmes réels. Certes les modèles introduisent des abstractions et des simplifications. Différentes représentations du même problème résultent en une diversité importante de modèles. Chacun de ces modèles se prête à une technique ou une méthode spéciale. Pour être plus concret considérons à titre d'exemple un verre de spins. Pour les systèmes ordonnés, l'approche champ moyen sert habituellement de première approximation. Mais cette approche doit être complètement reformulée pour les verres de spins. Cette extension de l'approximation de champ moyen est la théorie des répliques. Même si jusqu'à présent il n'existe pas une justification rigoureuse de la théorie des répliques, il existe une forte indication qu'elle est correcte : les prédictions de la théorie sont pour une grande partie en accord avec les expériences, et sont confirmées par d'autres méthodes, notamment les simulations.

Tous les modèles que je vais présenter dans cette thèse sont traités classiquement (les effets quantiques sont négligeables). Cette approximation est très bonne dans la plupart des régimes, mais il est vrai qu'il est nécessaire d'inclure des effets quantiques pour certaines des questions les plus subtiles. Par exemple, dans le modèle de Blume, Emery et Griffiths qui explique la séparation de phase et l'apparition d'une transition de phase de ordre second, l'approche classique ne reproduit pas une miscibilité finie pour de très faibles températures et des concentrations jusqu'à 6%. C'est un effet purement quantique de l'hélium [Tre97, Wil67].

Les modèles ont différents paramètres. En changeant les valeurs de ces paramètres, les modèles peuvent montrer des effets collectifs, par exemple, l'apparition d'un ordre spatial. Afin de décrire ces effets, la notion de paramètre d'ordre a été introduite. Une difficulté majeure consiste à identifier un paramètre d'ordre approprié pour un système donné. Dans le paragraphe suivant je vais discuter le cas du modèle d'Ising et de son paramètre d'ordre. Pour des valeurs appropriées des paramètres ou des champs externes, le paramètre d'ordre est non nul et indique un état ordonné. La transition d'une valeur nulle à une valeur non nulle s'effectue à une valeur critique du paramètre et correspond à une transition de phase. Il y peut avoir des transitions avec une chaleur latente, dite de premier ordre, comme le processus de fusion de la glace, ou des transitions d'ordres plus élevés, sans chaleur latente.

Il est pratique de classer tous les modèles et les systèmes physiques associés. Une telle classification émerge si on ordonne les systèmes selon les types de transition de phase qu'ils subissent. Dans cette classification la théorie des phénomènes critiques apporte un élément important avec la notion d'universalité. Ces classes regroupent des systèmes qui montrent le même comportement singulier lorsque les valeurs des paramètres extérieurs approchent leurs valeurs critiques. Les transitions de phase sont indiquées en général par l'apparition d'un point singulier dans une des fonctions thermodynamiques. Une transition de k ème ordre signifie que la k ème dérivée d'une fonction thermodynamique par rapport à un paramètre approprié est discontinue. Comme exemple assez simple, on peut prendre le modèle d'Ising. Ce modèle décrit un système ferromagnétique et subit une transition de phase de deuxième ordre. La transition apparaît quand la température approche la température critique, appelée température de Curie. Je vais préciser ceci dans ce qui suit.

La limite thermodynamique Nous avons mentionné la taille du système que nous étudions et nous avons exprimé notre intérêt à étudier la limite de grande taille. Pourquoi s'intéresser à cette limite ? Dans les expériences, on a des échantillons macroscopiques sauf si on est spécialement intéressé par des échelles microscopiques telles que le nanomètre. Du fait que les échantillons sont de taille macroscopiques, on a un très grand nombre N de particules, $N \approx N_A = 6 \cdot 10^{23}$ et on est très proche de la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$. Cette limite thermodynamique a certains avantages. D'abord les calculs analytiques sont plus faciles, les corrections de taille finie présentant très souvent

une difficulté sérieuse. Ensuite, les fonctions thermodynamiques ne développent de vraies singularités que dans cette limite. Pour des tailles finies ces fonctions ne possèdent que de grands maxima et ainsi les transitions de phase sont arrondies.

Un exemple : le modèle d'Ising Soyons plus précis et reprenons le ferromagnétisme comme exemple. Les faits expérimentaux se laisse résumer comme suit : en fonction de la température T le système physique se trouve dans deux phases distinctes. À haute température le matériau ne montre aucune aimantation spontanée. Quand on baisse la température en-dessous de la température de Curie T_c il apparaît une aimantation spontanée. La théorie des phénomènes critiques classe alors le système physique selon son comportement en approchant cette valeur critique T_c . Au moyen d'expériences on a pu constater la loi suivante :

$$m(T) = \left(\frac{T_c - T}{T_c} \right)^\beta \quad \text{quand } T \nearrow T_c \quad (\text{I.1-1})$$

Il s'agit d'un comportement en puissance et l'exposant $\beta^{(*)}$ vaut environ $\beta = 0.31$. Cette valeur a été retrouvée pratiquement pour tous les matériaux ferromagnétiques et est donc universelle. Chaque substance appartient à une unique classe d'universalité et les comportements critiques de toutes les substances d'une classe sont décrites par le même modèle. Le modèle d'Ising a été proposé en 1925 par le professeur W. Lenz [Len20] à son thésard E. Ising [Isi25]. (Celui-ci a trouvé à sa grande déception que le modèle ne subit pas de transition de phase à température non-nulle en dimension $d = 1$.) Le modèle est donné par le Hamiltonien suivant :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_i s_i. \quad (\text{I.1-2})$$

L'interaction spin-spin s'exprime par un couplage J_{ij} entre les spins sur les sites i et j . Dans le modèle d'Ising la constante de couplage ne dépend pas des sites ($J_{ij} = J$) et est positive. Elle sera négative pour un anti-ferromagnétique, et de signe variable pour un verre de spins. Les variables s_i représentent des moments magnétiques, dites *spins*, et ne peuvent prendre que les valeurs $s_i = \pm 1$. La somme porte sur les spins voisins d'un réseau sous-adjacent. Le paramètre d'ordre pour ce modèle est l'aimantation spontanée : la moyenne thermique d'un spin $m = \langle s_i \rangle$. Le modèle possède une température critique T_c au-dessus de laquelle on se trouve dans la phase *paramagnétique*. En-dessous de T_c l'aimantation spontanée apparaît et tend vers 1 quand $T \rightarrow 0$. Le système se trouve dans la phase *ferromagnétique*. Cette phase a un ordre spatial homogène, et les moyennes des moments magnétiques sont toutes de même signe. L'apparition de cet ordre à la température critique est la raison du comportement singulier de certaines fonctions thermodynamiques et de la divergence de la longueur de corrélation à T_c .

Diagramme de phase Un système dépendant de plusieurs paramètres externes se trouvera dans des états différents suivant les valeurs de ces paramètres. En général, les différentes phases d'un système sont caractérisées par des paramètres d'ordres.

(*) À ne pas confondre avec l'inverse de la température $\beta = 1/T$.

I.1 Physique statistique

Pour représenter le comportement du système, on peut donner le paramètre d'ordre en fonction des paramètres externes. On peut aussi donner le *diagramme de phase*. Illustrons ces notions avec le modèle d'Ising. Donnée ci-contre est la représentation du comportement du paramètre d'ordre d'un aimant ferromagnétique. Le paramètre d'ordre est l'aimantation spontanée m qui est une fonction de la température T . La représentation graphique est donnée dans la figure I-1. Si le paramètre d'ordre dépend de plusieurs champs extérieurs, il sera implicite que ces champs sont fixés. Par exemple, pour le graphique ci-contre le champ magnétique a été choisi nul.

L'autre type de représentation est le diagramme de phase. Dans ce diagramme on représente les différentes valeurs des paramètres externes et on associe à chaque point dans cet espace la phase à laquelle il appartient.

Un exemple de diagramme de phase déduit du modèle d'Ising est donné dans la figure I-2 ci-contre. Une phase est marquée par la valeur du paramètre d'ordre (l'aimantation spontanée m) en fonction des champs externes (la température T et le champ magnétique h). Il existe deux phases : une phase ferromagnétique (FM), et une phase paramagnétique (PM). La phase ferromagnétique est réduite à une ligne $h = 0, T \in [0, T_c]$ et la phase paramagnétique représente le reste du plan $T-h$. Le diagramme montre un point terminal critique à $T = T_c$ et $h = 0$. Notons qu'il est possible d'aller de la phase paramagnétique avec $m < 0$, en partant du point x^- , à la phase paramagnétique $m > 0$, jusqu'au point x^+ , sans traverser la ligne critique (la phase ferromagnétique) en entourant le point critique ($h = 0, T_c$), comme indiqué dans la figure I-2.

Un modèle plus complexe pourrait donner lieu à plusieurs paramètres d'ordre et à des phases séparées par des lignes de transition de phase. Un exemple d'un tel système est le verre de spins que nous allons traiter dans la suite. La méthode de description appropriée d'un tel modèle avec une multitude de phases est le diagramme de phase ; celui-ci peut avoir plusieurs dimensions. Pour la représentation graphique il sera alors nécessaire de faire des sections dans un plan du diagramme complet. Prenons par exemple la figure I-3 qui est le diagramme de phase d'une substance simple ; on y trouve les trois états : solide, fluide, et vapeur.

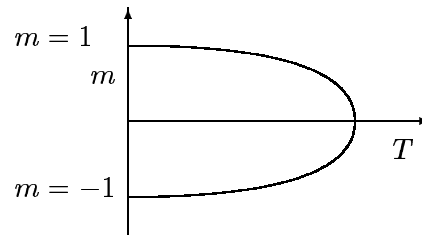


FIG 1 : L'aimantation spontanée m d'un aimant ferromagnétique à champ nul $h = 0$ en fonction de la température T .

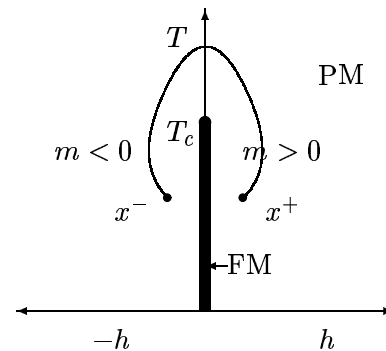


FIG 2 : Le diagramme de phase d'un aimant ferromagnétique.

Les phases sont séparées par des lignes de transitions de premier ordre. Le point où les trois lignes de transitions se rencontrent est le point triple $\mathcal{P}_t$. La nomenclature vient du fait que les trois phases peuvent y coexister. La ligne de transition entre les états solide et fluide continue jusqu'à $p \rightarrow \infty$; par contre la ligne de transition entre fluide et vapeur se termine en un point terminal critique $\mathcal{P}_c$. Au-delà de ce point toute distinction entre les deux phases perd sa signification; il n'existe qu'une phase. On peut alors aller d'un état gazeux à basse pression $\mathcal{P}_g$ à l'état fluide à basse pression $\mathcal{P}_f$ en faisant le tour autour du point critique $\mathcal{P}_c$ et ainsi éviter de traverser la ligne de transition ($\mathcal{P}_t, \mathcal{P}_c$). De ce point de vue il s'agit en fait d'une même phase. Il n'y a donc que deux véritables phases pour un élément simple. Notons aussi que la ligne de transitions de premier ordre entre liquide et vapeur se termine en un point critique comme c'était le cas pour le modèle d'Ising dans le paragraphe précédent (cf. I-2).

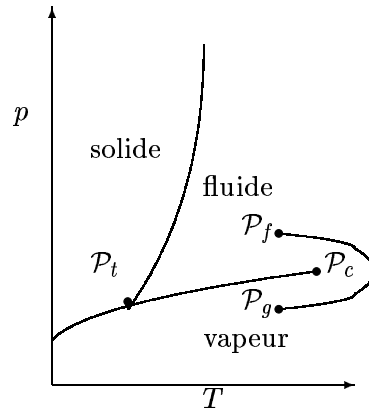


FIG 3 : Le diagramme d'états d'une substance quelconque.

Sujets d'étude Dans cette thèse nous nous intéressons à des systèmes désordonnés et frustrés. Mais que sont le désordre et la frustration? Quels sont les matériaux où on peut trouver de telles propriétés? Dans ce qui suit nous allons introduire et préciser ce que nous entendons par désordre et frustration. Nous venons de discuter des trois états d'un corps simple : solide liquide et vapeur. Comment peut-on caractériser formellement la phase solide? Un solide résiste au cisaillement, un liquide cède à une telle force. En conséquence dans un solide les ondes longitudinales et transversales se propagent; dans un liquide il n'y a que les ondes longitudinales. Les solides peuvent être divisés en deux classes : un solide est soit cristallin, soit amorphe. Le cristal est un état solide qui possède une structure périodique dans l'espace, et donc présente des corrélations de longue portée. Par contre ceci n'est pas le cas d'un solide amorphe. Ce dernier n'a pas de corrélations à longue portée. Quand on considère des corps composés, on trouve pour certains matériaux un état assez subtil qu'on appelle un verre (voir aussi le paragraphe I.2). Les verres sont probablement des liquides très spéciaux car ayant une viscosité tellement haute que l'écoulement n'est presque pas mesurable. On les appelle aussi parfois des liquides super-refroidis. On peut les considérer aux échelles de temps usuelles comme des solides amorphes. Il se trouve que les verres de spins ont des propriétés magnétiques qui les font ressembler à des verres. Ces ressemblances expliquent l'intérêt pour les verres de spins ces dernières décennies. Les ressemblances existent à la fois au niveau statique (propriétés des phases décrivant les états d'équilibre) qu'au niveau dynamique. Dans cette thèse, nous ne considérons que les aspects statiques des verres de spins.

Désordre Le désordre est une composante essentielle des modèles que nous allons étudier. En pratique, le désordre est omni-présent, et c'est une tâche difficile que d'obtenir expérimentalement un système sans désordre. Les cristaux montrent une régularité dans l'espace physique; ce sont des systèmes très ordonnés, ce qui permet une description théorique extrêmement détaillée. Mais dans les cas habituels, cet ordre est perturbé par des défauts ou des impuretés. On peut chercher à minimiser

I.1 Physique statistique

ce désordre, comme c'est le cas dans l'industrie électronique où il faut des cristaux de silicium d'une très grande pureté afin de produire des puces sans erreurs de fonctionnement. On peut aussi chercher à introduire des impuretés pour changer les propriétés des matériaux comme c'est le cas pour des alliages et des semi-conducteurs. L'influence des défauts dépend de leur concentration. Même à faible concentration, les défauts peuvent produire des effets remarquables, tels que la localisation d'Anderson ou l'effet Kondo. Dans ce qui suit nous nous intéresserons au régime de haute concentration.

Frustration L'autre ingrédient important est la *frustration*. Ce phénomène vient du fait qu'il y a des forces qui s'opposent et sont en compétition. Le cas standard est celui où on a des spins couplés par des constantes de couplages J_{ij} avec des signes différents. Ceci peut engendrer la frustration. Supposons pour la suite que nous avons à faire à une réalisation du désordre c'est-à-dire que les couplages sont donnés. Une connection entre deux sites i et j pour laquelle la constante de couplage J_{ij} ne s'annule pas est un lien. La frustration décrit le fait qu'il peut y avoir des liens qui ne peuvent pas être satisfaits simultanément. Un lien est dit satisfait si $J_{ij}s_i s_j > 0$, sinon il n'est pas satisfait. Afin de comprendre mieux cet effet Toulouse [Tou77] a introduit la notion de plaquette frustrée. Les plaquettes sont les boucles les plus petites d'un graphe. Si on multiplie les couplages le long de cette boucle, la frustration est indiquée par une valeur négative :

$$\prod'_{ij} J_{ij} < 0.$$

Le prime indique que le produit porte seulement sur une plaquettes. La frustration vient d'un nombre impair de couplages négatifs dans la plaquette.

L'exemple le plus simple est celui d'un système triangulaire comme désigné ci-contre dans la figure I-4 où chaque site est muni d'un spin, avec un nombre impair d'interactions négatives. La plaquette sera dite frustrée, lorsqu'il est impossible de trouver une configuration des spins qui satisfasse tous les liens. Ceci se voit facilement si on regarde le Hamiltonien pour un verre de spins qui est écrit comme

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ij} J_{ij} s_i s_j \quad (\text{I.1-3})$$

Pour notre exemple d'un système triangulaire avec les liens donnés comme indiqué dans la figure ($J_{12} = J_{13} = 1$ et $J_{23} = -1$) le Hamiltonien (I.1-3) devient beaucoup plus simple :

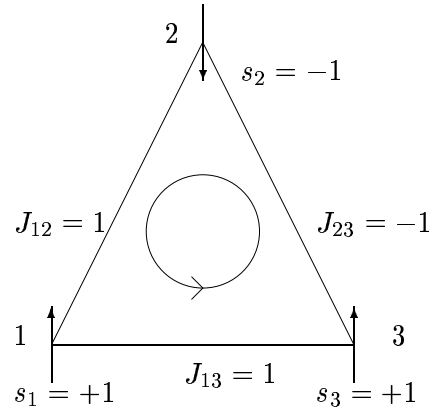


FIG 4 : Le système de spins sur un triangle comme exemple le plus simple d'une plaquette frustrée.

$$H = -s_1 s_2 - s_1 s_3 + s_2 s_3 \quad (\text{I.1-4})$$

La dégénérescence L'état le plus basse énergie pourrait être obtenu directement s'il n'y avait pas de frustration mais ici aucun choix ne peut satisfaire tous les liens. On s'aperçoit également qu'il apparaît une dégénérescence de l'état fondamental : le système de la figure I-4 possède $2^3 = 8$ états

dont deux d'énergie $H = 3$ et six avec $H = -1$. Par conséquent l'état fondamental est six fois dégénéré. De façon générale, on peut s'attendre à ce que la frustration donne lieu à des quasi dégénérescences de l'énergie la plus basse.

Il est important de noter que la frustration n'est pas liée à la présence de désordre, mais peut apparaître dans des systèmes ordonnés dès que les interactions sont non positives. Un cas extrême est l'anti-ferromagnétique sur un réseau triangulaire. Le système est complètement frustré. D'autres exemples de matériaux où la frustration apparaît sont ceux dont l'interaction spin-spin est décrite par l'interaction RKKY [RK67, Kas56, Yos57]

$$J_{ij} = \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad \text{avec} \quad r = d(i, j).$$

Il s'agit d'une interaction dont le signe dépend de la distance. Dans le cas des verres de spins les interactions et leurs signes sont aléatoires et causent alors la frustration. La frustration est présente dans des systèmes comme les verres de spins (Spin Glasses, SG), le modèle d'Ising dans un champ magnétique aléatoire (Random Field Ising Model, RFIM) [AdS97, MSC⁺91], et l'anti-ferromagnétique dilué dans un champ constant (Diluted AntiFerromagnet in a constant Field DAFF). Pour un aperçu des résultats obtenus jusqu'aujourd'hui, je renvoie le lecteur à la contribution de Rieger [Rie95]. Dans la prochaine section nous allons présenter les verres de spins et discuter de leur modélisation et de leur propriétés.

— I.2 — Verres de spins

Les verres de spins sont des substances ayant des propriétés surprenantes et surtout inattendues. Jusqu'à la découverte des verres de spins, les systèmes magnétiques connus se composaient de systèmes ferromagnétiques ou de systèmes anti-ferromagnétiques. L'existence d'un autre type d'ordre était une question ouverte. Expérimentalement les verres de spins peuvent être réalisés comme des mélanges binaires magnétiques, par exemple AuFe ou CuMn [NC59, ZH60] [CM72, CM74, WK75, WK76]. Le comportement inhabituel de ces matériaux a motivé la conception de modèles qui pourrait être capables de décrire ces phénomènes. Bien que ces particularités aient été la motivation initiale de ces études, il y a l'espoir que les modèles développés pour les verres de spins peuvent contribuer à mieux comprendre les vrais verres. Cet espoir s'est confirmé de plus en plus dans les dernières années et aujourd'hui il existe un consensus que la dynamique des verres de spins est très semblable à celle des verres structuraux [MP96].

Je vais tout d'abord donner un bref aperçu expérimental et puis je soulignerais quelques ingrédients nécessaires pour construire des modèles décrivant les verres de spins. Ensuite je vais esquisser quelques étapes dans la modélisation et dans le développement théorique. Je vais présenter le modèle d'Edwards et Anderson et son successeur dans le sens qu'il s'agit de l'approximation de champ moyen de ce modèle, le modèle de Sherrington et Kirkpatrick. Je vais exposer ce dernier modèle en détail en incluant une discussion concise d'une solution. Finalement je présenterais très brièvement quelques commentaires concernant des simulations, surtout du type *Monte Carlo*.

Un aperçu expérimental Les résultats et leurs discussions ci-dessous suivent les monographies [BY86b] et [FH91] auxquelles je renvoie le lecteur pour de plus amples informations. Un verre de spins est généralement constitué d'atomes magnétiques placés aléatoirement dans une matrice d'un matériau-hôte non-magnétique. Les matériaux composés de cette façon ne montrent aucun ordre magnétique spatial homogène. De plus cet ordre magnétique est différent d'un échantillon à l'autre.

I.2 Verres de spins

Il est intéressant de remarquer que les verres de spins en dimension $d = 2$ ne produisent pas une transition vers une phase verre de spins à température finie. Leur phase verre de spins est confinée à la température nulle et est instable vis à vis des fluctuations thermiques. Pour des verres de spins en $d = 3$, l'apparition d'une phase verre de spins à température finie est confirmée expérimentalement. Les matériaux classifiés comme des verres de spins sont souvent des alliages magnétiques, surtout des combinaisons métal — métal de transition. Considérons une impureté magnétique introduite dans une matrice non-magnétique : le moment magnétique reste-t-il, ou est-il écranté ? Ceci était la question dominante pendant les années 60. Différentes explications ont été données, parmi lesquelles se trouvent le modèle de l'état lié virtuel, la localisation d'Anderson et l'effet Kondo. Plus tard - dans les années 70 - les systèmes avec plusieurs impuretés ont été étudiés et les comportements inhabituels, comme par exemple un terme linéaire supplémentaire dans la chaleur spécifique, ont été expliqués par un modèle d'Ising avec l'interaction RKKY [RK67, Kas56, Yos57, Mar60, KB63]

$$J(r) = \frac{\cos(2k_F r)}{r^3} \quad \text{où} \quad r = d(s_i, s_j). \quad (\text{I.2-1})$$

A cette époque on mesurait la susceptibilité χ dans un champ fort h afin d'en extraire la susceptibilité $\frac{m}{h} = \chi$ en supposant l'existence d'une relation linéaire. On trouvait un large maximum à une température où la rémanence disparaissait. Les données expérimentales ont donné naissance à l'image suivante : il existe dans le matériau des domaines ferromagnétiques et anti-ferromagnétiques qui interagissent entre eux et font surgir à basse température un ordre aléatoire. Jusqu'à cette époque, la susceptibilité a été déterminée de façon statique comme exposé ci-dessus. Une méthode plus fine consiste à mesurer en champ alternant le changement de l'aimantation avec le champ appliqué $\chi(\omega) = \frac{\partial m}{\partial h(\omega)}$. Ainsi on détermine la susceptibilité différentielle et il est possible d'utiliser des champs très faibles. Dans les mesures précédentes on a pu seulement constater un maximum très large. Pour un champ alternant la susceptibilité est constituée de deux parties : la partie transmise $\chi'(\omega)$ et la partie absorbée $\chi''(\omega)$, qui sont liées par la relation *Kramers-Kronig*. Dans le cas des verres de spins la composante imaginaire $\chi''(\omega)$ n'est présente que pour les basses températures et s'annule au-delà de la température critique. L'apparition de l'absorption suggère l'existence d'un processus de relaxation similaire à l'hystérésis dans un ferromagnétique. Les fameuses expériences de Cannella, Mydosh et Budnick [CMB71, CM72] utilisent cette nouvelle technique de champ alternant en contraste avec les expériences antérieures. À l'aide de cette nouvelle méthode ils ont pu découvrir les points anguleux dans la susceptibilité χ qu'on appelle *cusp*. On peut se demander pourquoi les substances avec des propriétés si étranges n'ont été découvertes qu'après les années 70. D'abord il faut tenir compte du fait que les effets mesurés sont très petits par rapport à d'autres effets mesurés lors des expériences. Par exemple un champ magnétique trop fort, normalement appliqué pour mesurer la susceptibilité, va supprimer dans le cas d'un verre de spins l'effet particulier c'est-à-dire arrondir le *cusp* dans la susceptibilité. Ce point anguleux pourrait indiquer une transition de phase vers une phase jusqu'alors inconnue. Cet ordre ne sera pas périodique dans l'espace. Il va de soi que le bon paramètre d'ordre ne peut pas être l'aimantation spontanée. Il faut ajouter que sur une échelle très fine le *cusp* est quand même arrondi ; de plus le sommet de ce *cusp* est dépendant de la fréquence ω . Ce dernier fait est surprenant parce que jusqu'à présent une telle dépendance n'a été observée que pour les très hautes fréquences. En outre le fait que le *cusp* soit arrondi indique que la transition n'est pas une transition de phase de deuxième ordre commune, mais qu'il y a des effets qui évitent que la transition soit nette. Ceci est expliqué par l'apparition d'une phase verre de spins.

Un autre phénomène est celui de la rémanence (*cf.* [Myd87]). Si on mesure la susceptibilité de façon statique c'est-à-dire en mesurant l'aimantation spontanée et en supposant l'existence d'une relation

linéaire $\chi = \frac{m}{h}$, les résultats obtenus dépendent de la préparation. Comme dans le cas d'un ferromagnétique où l'aimantation dépend du champ et de son histoire, on s'aperçoit aussi dans le cas d'un verre de spins de l'existence d'une rémanence. Il existe deux préparations. D'abord la préparation *field cooling* qui consiste à appliquer un champ lorsque l'échantillon se trouve à une température bien supérieure à la température de transition de phase T_c et ensuite à le refroidir pendant qu'on mesure l'aimantation. La deuxième préparation consiste à refroidir l'échantillon afin qu'il se trouve bien en dessous de la température critique et ensuite on applique le champ magnétique en mesurant l'aimantation. Cette préparation s'appelle *Zero Field Cooling*. Les deux préparations produisent deux courbes d'aimantation différentes bien qu'elles coïncident pour des températures supérieures à la température critique. Le *field cooling* produit une valeur de la susceptibilité constante et une courbe réversible, c'est-à-dire la courbe peut être parcourue dans n'importe quel sens, soit en refroidissant ou en réchauffant. Par contre le *Zero Field Cooling* donne lieu à une susceptibilité qui est inférieure à celle obtenue par *field cooling*. En réchauffant, la valeur s'approche de la valeur obtenue par *field cooling* à la température critique. Un effet dynamique apparaît si on attend avant la mesure : la courbe du *Zero Field Cooling* tend vers celle du *field cooling* et on s'attend, dans la limite de temps infini, à ce que les deux courbes coïncident. Cette bifurcation en deux courbes, une réversible, l'autre irréversible, indique l'apparition de la phase de verre de spins. Le verre de spins en préparation de *Zero Field Cooling* se trouve dans un état métastable à $T_c > T$ conduisant à une irréversibilité. Ces effets apparaissent en-dessous de la température critique T_c et peuvent être utilisées expérimentalement pour déterminer la température critique. Les effets décrits ci-dessus sont d'une nature purement dynamique. Une théorie dynamique a été conçue par Sompolsky et Zippelius [SZ87, SZ82, SZ83] et d'autres [Hor92a, Hor92b, Som83a, Som83b, CS87]. Ces théories ne seront pas présentées dans cette thèse. Nous nous limiterons dans la présente thèse aux théories statiques.

Ingrédients principaux Un modèle de verres de spins doit être capable de tenir compte de la frustration et du désordre gelé. Le désordre gelé est défini par l'existence de deux échelles de temps très différentes, $t_r \ll t_l$. Les degrés de liberté se séparent en deux ensembles : l'ensemble des degrés de liberté avec des échelles de temps très courts t_r par rapport au deuxième ensemble dont les degrés de liberté ont une dynamique très lente caractérisée par l'échelle t_l . Ici, la diffusion d'une impureté dans le matériau est très lente comparé aux mouvements des moments magnétiques associés aux impuretés. Comme les impuretés sont mises au hasard dans la matrice hôte, les distances entre elles sont aussi aléatoires. Cette séparation d'échelles permet de traiter les deux ensembles différemment. En supposant que $t_l \rightarrow \infty$ on peut se restreindre aux mouvements des moments magnétiques. Ceci fait un parallèle avec l'approximation de *Born-Oppenheimer* dans la physique atomique, mais dans cette approximation la supposition contraire a été faite. Les électrons sont supposés se déplacer instantanément : $t_r \rightarrow 0$. Par contre les noyaux peuvent être considérés comme lents, ayant un large temps de relaxation t_l . Ce temps devient la seule échelle de temps importante et ainsi on peut s'abstraire de la présence des électrons. Ici on s'intéresse dans un certain sens au cas contraire, c'est-à-dire aux degrés de liberté rapides. En conséquence nous regardons la limite $t_l \rightarrow \infty$ et t_r finie. Les variables rapides dans les verres de spins sont les moments magnétique, désormais appelées *spins*. Les variables lentes sont normalement modélisées comme des couplages entre les moments magnétiques et sont gelées.

Ayant clarifié le principe du désordre gelé il reste à concevoir comment le désordre va être introduit. Le désordre peut être réalisé de deux façons. Les modèles peuvent être désordonnés au niveau des sites : dans une matrice régulière quelques spins sont absents de sorte qu'il s'agit d'une matrice diluée ou lacunaire. Il est aussi possible de regarder un mélange de particules, disons A et B . Un exemple sera donné dans le chapitre II où deux particules différentes sont représentées par les valeurs des spins s_i .

La particule A est présente si $s_i = \pm 1$, sinon ($s_i = 0$) la particule B se trouve au site i . Une autre manière consiste à introduire une variable supplémentaire qui indique la présence d'une particule. Ces modèles sont des modèles de *gaz sur réseau* et ne seront pas traités dans cette thèse. Les modèles désordonnés au niveau des sites ne produisent en général aucun effet de frustration si les signes des interactions ne sont pas convenablement choisis. Ces modèles ne sont alors pas aptes à décrire les verres de spins.

Pour produire de la frustration dans un système désordonné il est nécessaire d'introduire le désordre au niveau des interactions. Les spins sont situés dans une matrice régulière ou non, mais les couplages prennent des valeurs de signes aléatoires. Si les couplages ne sont pas négatifs il n'apparaît pas de frustration. Un modèle sans frustration mais désordonné au niveau des liens est un ferromagnétique dilué : les couplages sont tirés avec la distribution $P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(1 - J_{ij}) + \frac{1}{2}\delta(J_{ij})$. Cette distribution fait qu'il y a soit des couplages ferromagnétiques, soit pas d'interactions. Il est clair que pour avoir un modèle frustré, les liens doivent être tirés d'une distribution qui permette des valeurs négatives.

Les différents types de désordre mentionnés ci-dessus sont possibles mais je me contenterais dans ce qui suit de discuter du désordre au niveau des couplages où il y a une probabilité non négligeable d'avoir des couplages négatifs. Reste la question du choix de la distribution dont on tire les valeurs des couplages pour réaliser un échantillon. Expérimentalement on peut constater que les impuretés sont dispersées et situées aléatoirement dans la matrice du solide. Une interaction convenable peut être, par exemple, l'interaction RKKY, mais cette interaction est difficile à traiter analytiquement. Dû à la faible corrélation spatiale, il est justifié de prendre les couplages J_{ij} comme des valeurs aléatoires tirées *indépendamment* d'une distribution appropriée $P(J_{ij})$. Ceci représente une simplification assez drastique, mais les résultats montrent qu'elle capture tous aspects principaux.

Le modèle d'Edwards et Anderson Un premier essai de modélisation des verres de spins est dû à Edwards et Anderson [EA75]. Le modèle d'Edwards et Anderson (EA) est un modèle de spins vectoriel de dimension 3 ($\vec{s}_i = \{s_{ix}, s_{iy}, s_{iz}\}$) sur réseau avec des interactions J_{ij} entre les plus proches voisins :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - \sum_i \vec{h}_i \cdot \vec{s}_i. \quad (\text{I.2-2})$$

Les interactions J_{ij} sont ferromagnétiques ou anti-ferromagnétiques. Dans le modèle d'Edwards et Anderson les liens J_{ij} sont distribués de façon aléatoire selon une loi bimodale : $P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(J_{ij} -$

$\sigma_{ij}) + \frac{1}{2}\delta(J_{ij} + \sigma_{ij})$ ou une loi continue : $P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_{ij}^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{J_{ij}^2}{\sigma_{ij}^2}}$. La valeur moyenne de ces distributions

est nulle $\langle J_{ij} \rangle = 0$ mais la largeur ne s'annule pas $\langle J_{ij}^2 \rangle = \sigma_{ij}^2$. De cette façon le modèle tient compte de la distance entre les sites mais d'une manière probabiliste. Le modèle avec des couplages positifs et identiques $J_{ij} = J$ et des spins vectoriels $\vec{s}_i$ se réduit au modèle *Heisenberg*. Il s'agit d'une généralisation aux spins vectoriels du modèle d'Ising. Le modèle de Heisenberg est une bonne approximation des matériaux réels. Herring [Her65] discute les limites de cette approximation. D'habitude, on parle du modèle EA si les spins sont scalaires et binaires $s_i = \pm 1$. En fait, les deux différents modèles ont leurs correspondances dans des matériaux qui sont décrits soit par des spins d'Heisenberg, soit par des spins d'Ising. Ceci vient du fait que le cristal peut avoir une influence sur l'orientation des spins par une interaction avec les moments magnétiques [AM76][Kit88][Par88]. Si on introduit un champ cristallin (*crystal field*) il se présente deux cas extrêmes. D'abord le cas d'un fort champ ; il suffit alors de considérer des spins du type Ising car il y a seulement deux orientations permises. Le cas restant

est celui d'un champ faible. La corrélation entre les moments magnétiques et le champ cristallin est faible de sorte que la substance est mieux modélisée avec un modèle du type Heisenberg.

La frustration est bien présente dans le modèle de Edwards et Anderson car pour une plaquette le produit $J_{ij}J_{jk}J_{kl}J_{li}$ peut être négatif. Il en résulte un grand nombre d'états presque ou complètement dégénérés avec l'état fondamental. Même si l'aimantation spontanée est le paramètre d'ordre pour le modèle d'Ising, elle ne l'est pas pour les verres de spins. Les expériences discutées ci-dessus ont montré que dans la phase verre de spins il n'existe pas d'ordre homogène à longue portée et que l'aimantation spontanée s'annule dans cette phase. Le paramètre d'ordre proposé par Edwards et Anderson suppose des corrélations temporelles et est donné par

$$q_{\text{EA}} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [\langle s_i(t_0) s_i(t_0 + \tau) \rangle]_{t_0}. \quad (\text{I.2-3})$$

$[(\dots)]_{t_0}$ représente une moyenne sur tous les temps initiaux t_0 . Le paramètre ordre q_{EA} s'annule si le système est ergodique, mais est différent de zéro dès que le système se trouve piégé dans une région finie de l'espace des phases, c'est-à-dire si l'ergodicité est brisée. Il est important de prendre les limites dans l'ordre indiqué car il n'y a pas des vraies transitions de phase pour un système fini.

Pour relier q_{EA} à une quantité statique il faut assigner à chaque région α de l'espace des phases un poids p_α . Ce poids représente la probabilité avec laquelle cette région est visitée. Cette probabilité est donnée par le poids de Boltzmann en remplaçant le Hamiltonien par l'énergie libre. On obtient finalement pour le paramètre d'ordre d'Edwards et Anderson[FH91] :

$$q_{\text{EA}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} p_{\alpha} m_{i,\alpha}^2 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\alpha} p_{\alpha} \sum_{i=1}^N m_{i,\alpha}^2. \quad (\text{I.2-4})$$

Afin de revenir sur les propriétés reproduites par le modèle EA on constate que ce modèle montre une transition de phase à une température T_c finie et que le paramètre d'ordre possède les deux valeurs limites suivants : $q_{\text{EA}} \rightarrow 0$ pour $T \rightarrow T_c^-$ et $q_{\text{EA}} = 1$ pour $T = 0$. La susceptibilité dans ce modèle est donnée par

$$\chi(T) = \chi_p [1 - q_{\text{EA}}(T)], \quad (\text{I.2-5})$$

$\chi_p = \frac{a}{T}$ étant la susceptibilité de la phase paramagnétique. Dans la phase paramagnétique le modèle EA obéit à une loi de Curie habituelle et reproduit de façon satisfaisante le *cusp* dans la susceptibilité. Ce *cusp* a été l'un des phénomènes surprenants lors de la découverte expérimentale des verres de spins. Ceci vient du fait que $q_{\text{EA}}(T)$ s'annule au-dessus de la température critique T_c , et en-dessous le paramètre d'ordre de EA possède une dépendance en température non-triviale. Le résultat est que la susceptibilité obéit à une loi inversement linéaire pour $T > T_c$ et à une loi inversement quadratique pour $T < T_c$. Cela reproduit bien le *cusp* observé lors des expériences. Le modèle donne aussi une explication du fait que l'application d'un champ trop fort supprime le *cusp*. Le modèle EA est alors capable de prédire correctement quelques propriétés expérimentales mais souffre aussi de quelques prédictions non-physiques. Néanmoins le modèle est important pour le développement de la théorie.

Notons finalement que Edwards et Anderson ont aussi introduit l'astuce des répliques pour l'étude des verres de spins. Cette astuce avait été d'abord proposée par Kac, Edwards et Lin [Kac70, Edw70, Lin70]. Aujourd'hui l'astuce des répliques est devenu l'une des principales techniques pour traiter les systèmes désordonnés.

Le modèle de Sherrington et Kirkpatrick Pour faciliter les calculs et mieux comprendre le modèle de EA, Sherrington et Kirkpatrick ont introduit une version champ moyen du modèle de Edwards et Anderson. Guidé par le fait que pour le modèle d'Ising du ferromagnétisme la limite des interactions de portée infinie rend l'approximation de champ moyen exacte, Sherrington et Kirkpatrick ont proposé le Hamiltonien suivant :

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j. \quad (\text{I.2-6})$$

Comme la somme porte ici sur tous les spins, le modèle est de portée infinie et en fait correspond à un modèle à dimension infinie, $d = \infty$. Les couplages sont tirés d'une distribution gaussienne avec une moyenne $\langle J_{ij} \rangle = J_0$ et une variance $\langle J_{ij}^2 \rangle = \sigma^2$ qui désormais ne dépend plus de la distance des voisins et est ainsi identique pour tous les couplages :

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(J_{ij} - J_0)^2}{\sigma^2}}. \quad (\text{I.2-7})$$

De cette relation vient le fait que tous les spins interagissent de la même façon et que les interactions J_{ij} sont indépendantes de la “distance” entre les spins i et j . Ceci est peu réaliste mais en première approximation c'est suffisant. De plus, comme nous l'avons vu pour le modèle EA, les détails de l'interaction ne sont guère importants. L'essentiel est que les couplages introduisent du désordre et de la frustration.

Ceci conclut la présentation des modèles. Dans un paragraphe à venir je vais exposer une solution approchée du modèle SK et quelques propriétés de cette solution. Ensuite, je vais discuter la solution finale du modèle SK. Un autre aspect de verres de spins est celui de la dynamique. Sompolinsky et Zippelius [SZ87, SZ82, SZ83] ont présenté une théorie dynamique des verres de spins. Celle-ci reproduit les résultats principaux de la théorie des répliques avec brisure^(†). De plus cette théorie est capable de traiter le comportement bizarre des verres de spins quand on regarde la relaxation lente des fonctions de corrélations et la dépendance des expériences avec le temps de préparation : on y observe le *vieillissement*. D'autres théories ont été proposées pour résoudre le modèle SK, comme les équations TAP dues à Thouless, Anderson et Palmer [TAP77] et la méthode de la cavité qui est une adaptation de la méthode de *Lorentz* pour calculer la polarisation en électrostatique [Kit88]. Ces théories ne seront pas traitées dans cette thèse. Pour une revue, je renvoie au livre [MPV87].

Les simulations numériques par Monte Carlo Après les années 60, les développements technologiques ont permis l'utilisation d'ordinateurs pour simuler des modèles. La physique a profité dans plusieurs domaines de cette nouvelle possibilité : dynamique moléculaire, écoulement des fluides, etc. La simulation numérique et plus particulièrement le Monte Carlo est un outil très important pour vérifier les prédictions des différentes théories. Les simulations ont contribué à une connaissance approfondie des verres de spins. Utilisant le modèle EA sur réseau comme point de départ, les simulations permettent de reproduire les différentes propriétés expérimentales : Binder [Bin86, Bin87] et Schröder [BS76a, BS76b] retrouvent le point anguleux de la susceptibilité et le comportement presque divergent de la chaleur spécifique. Les simulations suggèrent aussi d'autres détails jusqu'à aujourd'hui inaccessibles au calcul analytique. L'existence de la ligne AT^(‡) pourrait être de nature dynamique et donc disparaître lorsqu'on attend suffisamment longtemps [Kin83] (*cf.* [CPPS90]). Ceci pourrait signifier

^(†)La brisure de la symétrie des répliques sera aussi discutée dans un paragraphe ultérieur.

^(‡)La ligne AT sera discutée dans un paragraphe ultérieur.

que la phase verre de spins est restreinte au champ magnétique nul et le moindre champ introduit un ordre ferromagnétique ou paramagnétique suivant que la distribution des couplages a une moyenne nulle ou pas. Des progrès ont pu aussi être obtenu grâce à des simulations Monte Carlo (MC) pour des systèmes sur réseau à basses dimensions [RBY90, Ogi85]. Mais les simulations ont révélé aussi que la méthode Monte Carlo souffre elle-même des propriétés particulières des verres de spins. La méthode Monte Carlo tente d'effectuer des calculs à l'équilibre thermique, mais les verres de spins montrent à basse température une relaxation vers l'équilibre tellement lente que la méthode doit être améliorée. De plus, du fait que dans les systèmes vitreux l'ergodicité n'est vraisemblablement pas réalisée, les simulations doivent être mises en œuvre très prudemment. Depuis plusieurs modifications et améliorations ont été proposées, comme les simulations Monte Carlo sans rejet, *Multiple Markov Chain* [MP92, HN95, KR94] et d'autres. Ces simulations améliorées ont permis de calculer des quantités physiques intéressantes avec une meilleure précision.

Un autre aspect des simulations sont les algorithmes qui permettent de calculer les états fondamentaux, correspondant à des simulations à température nulle. (Les simulations du type Monte Carlo sont conçues pour des températures non nulles.) Comme je vais l'exposer dans cette thèse, il y a un lien très fort entre la physique statistique et l'optimisation combinatoire. Cette dernière peut être vue comme un cas spécial de la physique statistique. Dans l'optimisation combinatoire on s'intéresse à des solutions exactes. Les problèmes qui y correspondent en physique statistique sont des systèmes à température nulle. Un échange fructueux a produit un fort progrès dans les deux domaines et aujourd'hui il y a des algorithmes pour étudier précisément les états fondamentaux. En outre de nombreuses simulations ont fait des prédictions pour le comportement des verres de spins à température très basse, ou même à $T = 0$, la température pour laquelle les systèmes deviennent équivalents aux problèmes d'optimisation combinatoire. Ceci ouvre la porte pour un échange important des méthodes et des algorithmes. Dans la section I.3 et I.4 je vais décrire quelques aspects de cet échange fructueux. Ceci sera approfondi dans les chapitres III et IV.

La «solution» de Sherrington et Kirkpatrick Edwards et Anderson utilisent l'astuce des répliques qui a été introduite par Kac [Kac70], Edwards [Edw70] et Lin [Lin70] pour l'étude des systèmes désordonnés, afin de résoudre le modèle EA. Cette astuce est une méthode très puissante et aussi bien applicable aux verres de spins qu'à d'autres systèmes complexes. Les moyennes thermiques peuvent être déduites de la fonction de partition :

$$Z[J_{ij}] = \sum_{\{s_i\}_{i=1\dots N}} e^{-\beta H[\{s_i\}_{i=1\dots N}; J_{ij}]} \quad (\text{I.2-8})$$

Comme il y a du désordre, il faut une moyenne supplémentaire : celle sur l'ensemble des échantillons. Comme il s'agit d'un désordre gelé ou figé, les quantités thermodynamiques intéressantes peuvent fluctuer d'échantillon à échantillon. En fait, on s'intéresse en physique statistique aux valeurs typiques de ces quantités thermodynamiques. Comme la valeur moyenne donne un accès immédiat à la valeur typique (si la distribution est suffisamment piquée) on possède une technique pour accéder directement aux quantités typiques. La quantité à moyenner est l'énergie libre :

$$\beta \overline{f[J_{ij}]} = -\frac{1}{N} \overline{\ln Z[J_{ij}]} \quad (\text{I.2-9})$$

La moyenne sur le désordre est indiquée par $\overline{(\dots)}$. L'ensemble des couplages est fixé pour un échantillon ; on peut considérer que l'échelle de temps correspondante aux variations des valeurs des couplages J_{ij} est infiniment plus grande que celle qui correspond aux variations des valeurs des spins

I.2 Verres de spins

s_i . Si par contre on moyenne la fonction de partition on obtient l'approximation *recuite* (*annealed*). Il s'agit d'une approximation parce que le fait d'effectuer les moyennes différentes au même niveau va en effet traiter les degrés de liberté des spins s_i et des couplages J_{ij} de la même manière. La séparation des différentes échelles de temps est assurée en moyennant l'énergie libre, c'est-à-dire le logarithme de la fonction de partition. L'astuce des répliques est basée sur l'identité mathématique

$$\overline{\ln Z[J_{ij}]} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\overline{Z[J_{ij}]^n} - 1). \quad (\text{I.2-10})$$

L'interprétation de $Z[J_{ij}]^n$ comme la fonction de partition de n systèmes indépendants et identiques c'est-à-dire ayant tous les mêmes couplages a donné le nom à cette astuce. Parfois, cette astuce permet de calculer analytiquement la moyenne sur le désordre $\overline{Z^n}$, ce qui n'était pas réalisable pour $\overline{\ln Z}$. Sherrington et Kirkpatrick [SK75] ont repris le modèle EA et ils l'ont traité en approximation de champ moyen. La somme dans le Hamiltonien du modèle de EA porte sur tous les voisins. Sherrington et Kirkpatrick ont étudié le modèle avec une distribution gaussienne des liens : $P(J_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2} \frac{(J_{ij}-J_0)^2}{\sigma^2}}$. Ces auteurs discutent alors la limite de portée infinie des interactions. Effectuant la moyenne sur le désordre, on s'aperçoit qu'il apparaît des interactions entre les différentes répliques : des termes comme $s_i^\alpha s_j^\alpha s_i^\beta s_j^\beta$ apparaissent dans l'Hamiltonien effectif. On s'intéresse à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$ de l'énergie libre $\frac{F}{N} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} f$. En fait, il faudrait d'abord effectuer le prolongement analytique $n \rightarrow 0$ comme prévu par l'astuce des répliques. Sherrington et Kirkpatrick échangent les deux limites, puis appliquent la méthode du col et introduisent le paramètre d'ordre

$$q_{\text{SK}} = q_{\alpha\beta} = \overline{\langle s_i^\alpha s_i^\beta \rangle}. \quad (\text{I.2-11})$$

Afin de mener le calcul à bout, ils ont supposé une symétrie totale entre les répliques $q_{\alpha\beta} = q_{\text{RS}}$. Ceci est l'hypothèse de la symétrie des répliques (RS). Cette solution du modèle prédit une transition de phase à une température critique T_c avec le paramètre d'ordre $q_{\alpha\beta} = q_{\text{RS}}$ qui s'annule au-dessus de cette température ($T \geq T_c$) et prend des valeurs non-nulles $q_{\text{RS}} \neq 0$ en dessous de T_c . Dans la figure I-5, je reproduit le diagramme de phase obtenu par Sherrington et Kirkpatrick. Il apparaît trois phases dépendantes de la température et du couplage ferromagnétique. À haute température, pour un faible couplage ferromagnétique, on obtient une phase paramagnétique (PM). Pour un couplage ferromagnétique assez fort ou à basse température, il apparaît une phase ferromagnétique. Finalement pour un faible couplage ferromagnétique et à basse température une phase verre de spins apparaît. Le modèle est capable de décrire en partie les résultats des expériences, par exemple le *cusp* de la susceptibilité en champ alterné à la température critique. Mais cette solution du modèle SK souffre de quelques défauts graves. Elle prédit une catastrophe d'entropie : à basse température l'entropie devient négative $\bar{S} \rightarrow -Nk_B/2\pi$, ce qui est impossible, le modèle ayant des spins discrets. Sherrington et Kirkpatrick se sont aperçus des défauts de leur calcul et ont supposé que peut-être ces défauts étaient dus à l'hypothèse de symétrie des répliques, mais ils n'ont pas donné d'autre solution. Comme je viens de l'exposer, pour arriver à des résultats explicites Sherrington et Kirkpatrick ont échangé les deux limites : la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$ et le prolongement analytique $n \rightarrow 0$. On peut se méfier et soupçonner que les contradictions sont causées par cet échange de limites. Mais van Hemmen et Palmer [vHP79] ont pu démontrer que ce n'était pas le cas et qu'il devait y avoir d'autres raisons pour lesquelles la solution de SK produit des prédictions inacceptables. En fait, la solution de SK ne souffre pas seulement des défauts cités ci-dessus mais comme l'ont montré de Almeida et Thouless [dAT78], la solution est instable en-dessous de la température critique c'est-à-dire dans la

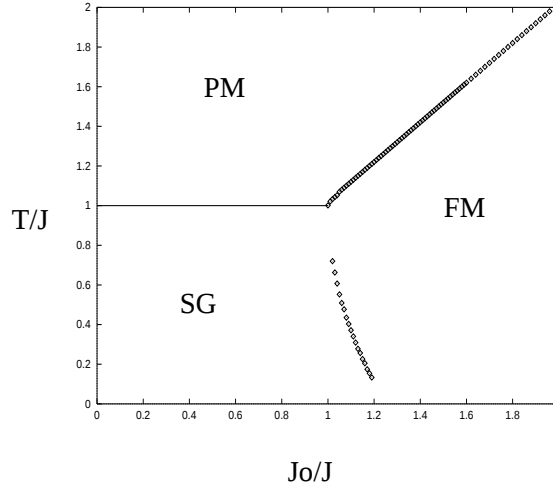


FIG. I-5: Le diagramme de phase du modèle de Sherrington et Kirkpatrick (PM : phase paramagnétique, FM : phase ferromagnétique, SG : phase verre de spins).

phase verre de spins. Ces auteurs ont également démontré qu'il persiste une phase instable (verre de spins) en présence d'un champ magnétique. Le diagramme de phase est schématiquement reproduit dans la figure I-6. Une ligne, nommée ligne AT, sépare une phase stable (paramagnétique) d'une phase instable (verre de spins). Il a été argumenté que l'existence de cette phase instable est un artefact de la théorie statique. Dans la théorie dynamique cette phase disparaît au cours du temps ; il s'agit d'un problème d'approche à l'équilibre [FH91]. Le point de vue actuel est que l'instabilité de la solution SK indique l'existence de la phase verre de spins. Notons finalement que de Almeida et Thouless ont proposé qu'il fallait briser la symétrie des répliques comme Sherrington et Kirkpatrick l'avaient pressenti.

La solution du modèle SK par Parisi Plusieurs tentatives ont été entreprises et le schéma final généralement accepté a été proposé par Parisi [Par80b]. Il introduit une brisure à pas discrets (kRSB) et démontre qu'à chaque pas supplémentaire $k \rightarrow k + 1$ les prédictions deviennent plus réalistes. L'entropie croît et tend vers zéro. En prenant la limite continue c'est-à-dire la brisure à une infinité de pas (SRSB) un nouveau paramètre d'ordre, ou fonction d'ordre définie sur l'intervalle $x \in [0, 1]$, apparaît. Ce nouveau paramètre d'ordre $q_{\alpha\beta} \xrightarrow{k \rightarrow \infty} q(x)$ satisfait

$$\int_0^1 q(x) dx \equiv - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta}. \quad (\text{I.2-12})$$

Toutes les grandeurs physiques s'expriment comme des intégrales sur le nouveau paramètre d'ordre, comme par exemple la susceptibilité χ et l'énergie interne U

$$\chi(T) = \frac{1}{k_B T} \int_0^1 [1 - q(x)] dx, \quad (\text{I.2-13})$$

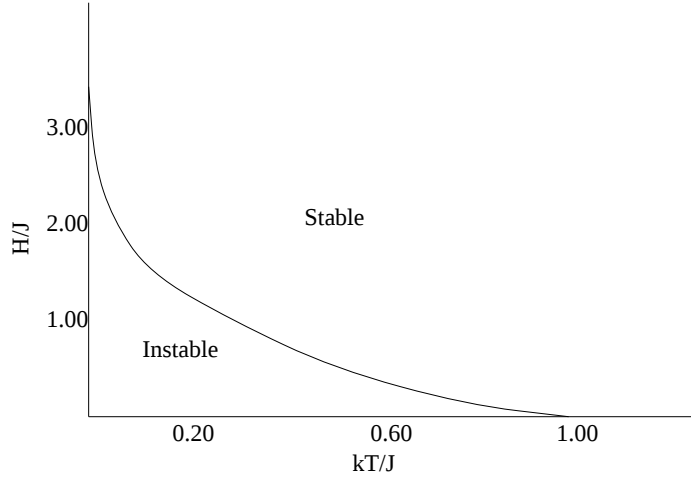


FIG. I-6: Le diagramme de phase du modèle de Sherrington et Kirkpatrick dans le plan champ-magnétique-température. Pour une température $T > T(h)$ une phase paramagnétique existe (la solution RS est stable); pour une température $T < T(h)$ une phase verre de spins existe (la solution RS est instable).

$$U(T) = \frac{1}{2k_B T} \int_0^1 [1 - q^2(x)] dx. \quad (\text{I.2-14})$$

Le comportement de $q(x)$ en fonction de x à différentes températures a été étudié numériquement. La valeur de l'énergie interne par exemple doit être calculée numériquement. Pour la température nulle, l'énergie interne vaut $U_0 = U(T = 0) = 0.7633 \pm 0.0001$ où l'erreur est l'incertitude numérique. En examinant la stabilité on s'assure que la solution de Parisi est au moins marginalement stable. De plus l'entropie est physiquement acceptable, c'est-à-dire non négative.

Propriétés statistiques de l'énergie libre L'énergie libre $f[J_{ij}; N]$ possède en approchant la limite thermodynamique une propriété remarquable. Elle tend en probabilité vers la même valeur $f[J_{ij}; N] \xrightarrow{N \rightarrow \infty} f$ pour l'ensemble des couplages de l'échantillon. Il a été montré que les verres de spins avec des interactions de courte portée sont fortement auto-moyennants [MPV87, Bro59].

$$\overline{f^2[J]} - \overline{f[J]}^2 = \mathcal{O}\left(\frac{1}{N}\right) \quad (\text{I.2-15})$$

Ce résultat est aussi vrai pour le modèle SK et sa solution due à Parisi [HKP91][MPV87], [MPS⁺84], [YBM84]. Les fluctuations autour de la valeur moyenne décroissent et à la limite $N \rightarrow \infty$ la distribution des énergies libres pour différentes réalisations devient une distribution δ . Comme exemple, nous présentons dans la figure I-7 des résultats obtenus dans le cadre de cette thèse. La figure montre les distributions de la densité d'énergie du fondamental pour différentes tailles. Il est évident que les distributions deviennent de plus en plus étroites et tendent, dans la limite thermodynamique, vers une distribution δ . L'argumentation, voir Brout [Bro59], est la suivante. En divisant un système en un grand nombre de sous-systèmes, toujours de taille constante, les énergies libres des sous-systèmes sont des valeurs aléatoires. L'énergie libre totale fluctue ainsi proportionnellement à la racine carré du nombre de sous-systèmes. Dû au fait que les sous-systèmes restent macroscopiques, leurs nombre

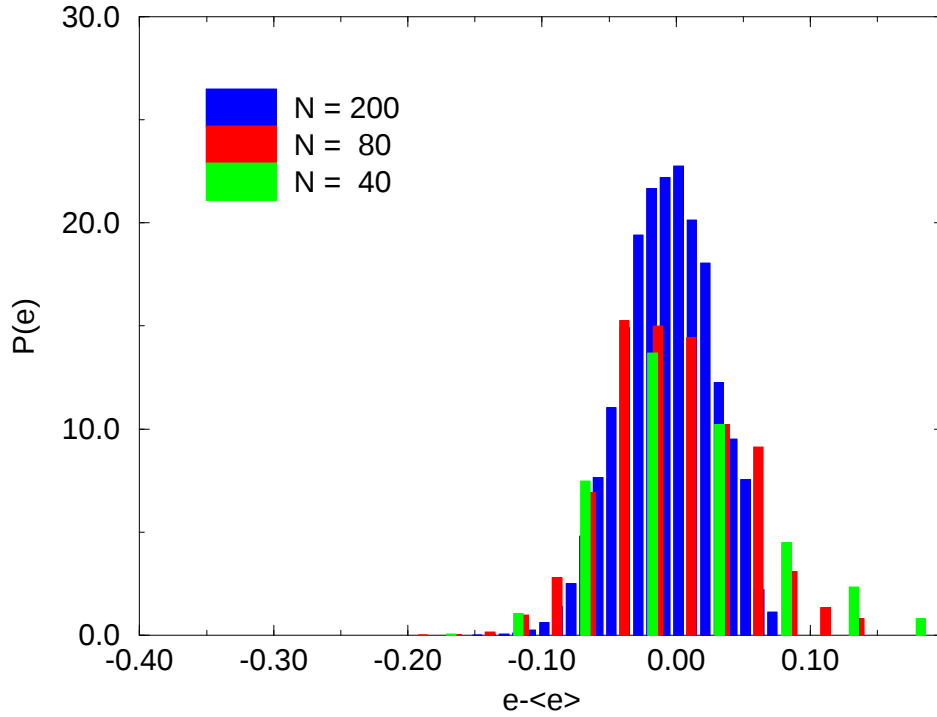


FIG. I-7: Les distributions $P(e)$ des densités d'énergie des états fondamentaux pour des différentes tailles du système $N = 40, 80$ et 200 .

est proportionnel à la taille N du système. Les fluctuations sont alors proportionnelles à $\sqrt{N}$. En conséquence les fluctuations relatives diminuent comme $1/\sqrt{N}$. L'argumentation n'est valable que pour des systèmes à courte portée mais les simulations des verres de spins montrent la validité de cette propriété aussi dans le cas de portée infinie.

Phase verre de spins et ultramétrie Pour un verre de spins il existe un grand nombre de configurations avec des énergies presque dégénérées. Ces minima de l'énergie sont séparées par des barrières d'énergie de hauteur grandissante avec N . Dans la limite thermodynamique ces barrières deviennent de hauteur infinie [MY82]. Ceci suggère l'image suivante. Le paysage de l'énergie libre possède un grand nombre de différentes vallées. Les vallées ne sont pas accessibles l'une de l'autre dans la limite thermodynamique. Ceci indique que le système a perdu l'ergodicité, c'est-à-dire que le système ne peut plus accéder à tous les états. Ces vallées sont des états purs, en distinction des états métastables. En outre ces vallées sont fortement structurées hiérarchiquement : les états obéissent à une structure ultramétrique, à discuter plus tard. Un point peu commun est le fait que les vallées de ce modèle ne sont liés par aucune symétrie. La brisure spontanée d'ergodicité n'est pas nouvelle car le modèle d'Ising l'exhibe déjà. Ce qui est nouveau ici est le grand nombre d'états de faible énergie. La caractérisation du système ne se fait plus par un paramètre d'ordre mais par une fonction d'ordre.

Tout comme le modèle d'Ising est capable de décrire la transition de phase para-ferromagnétique, il est intéressant de savoir si les modèles discutés ci-dessus sont capables de décrire une transition de

phase éventuelle. De plus il faudrait savoir quel est le type d'une telle transition de phase. Par exemple discutons de la transition de Kosterlitz-Thouless [KT73]. La phase basse température est ordonnée d'une façon inhabituelle : elle est caractérisée par la formation de tourbillons. Le paramètre d'ordre n'est pas l'aimantation spontanée mais le nombre de tourbillons. Par contre, dans une transition de second ordre habituelle — comme dans l'aimant ferromagnétique — la phase de basse température est ordonnée d'une façon homogène : tous les spins sont alignés. La solution du modèle SK a révélé que pour les verres de spins il apparaît un ordre à longue portée mais qu'il ne s'agit pas d'un ordre homogène. La phase verre de spins n'est pas caractérisée par un seul paramètre d'ordre mais par une matrice de paramètres $\{q_{\alpha\beta}\}_{(\alpha=1,\dots,n;\beta=1,\dots,n)}$. Le paramètre d'ordre $q_{\alpha\beta}$ est le recouvrement entre deux états d'équilibre ou, à température nulle, entre deux états fondamentaux $\mathcal{S}_\alpha$ et $\mathcal{S}_\beta$. Dans la théorie des répliques le paramètre d'ordre $q_{\alpha\beta}$ est fixé par l'équation de col $\frac{\partial f[q_{\alpha\beta}]}{\partial q_{\alpha\beta}} = 0$ (cf. I.2–12). Dans les simulations le recouvrement est directement accessible et est donné par

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^\alpha s_i^\beta \text{ avec } s_i^\alpha \in \mathcal{S}_\alpha \text{ et } s_i^\beta \in \mathcal{S}_\beta. \quad (\text{I.2-16})$$

Les $q_{\alpha\beta}$ sont distribués selon une distribution $P(q_{\alpha\beta})$. Il est possible de la calculer dans le cadre de la théorie des répliques [Par80b, MPV87]. Une des propriétés de la solution du modèle de Sherrington et Kirkpatrick due à Parisi est que la distribution $P(q_{\alpha\beta})$ est non-triviale [Par80a], indiquant ainsi la brisure de la symétrie des répliques. Par conséquent, le paramètre d'ordre n'est pas auto-moyennant, contrairement à l'énergie libre (cf. ci-dessus).

En outre, l'espace des configurations est fortement ordonné par rapport à cet ensemble de paramètres d'ordre : il existe un ordre hiérarchique qui s'appelle *ultramétrie*. L'inégalité triangulaire est valable pour les distances $d_{\alpha\beta}^2 = \frac{1}{2}(1 - q_{\alpha\beta})$, mais l'ultramétrie oblige les paramètres d'ordre en plus à satisfaire une autre inégalité : deux parmi trois paramètres d'ordre doivent être égaux et plus petits ou égaux au troisième. Supposons que $q_{\alpha\beta} \equiv q_1 \leq q_{\beta\gamma} \equiv q_2 \leq q_{\gamma\alpha} \equiv q_3$. L'ultramétrie s'exprime donc par

$$q_1 = q_2 \leq q_3. \quad (\text{I.2-17})$$

Cette ultramétrie a pour conséquence que l'espace de phase est fortement ordonné.

Problèmes ouverts et le modèle des gouttelettes Différents problèmes physiques restent ouverts. Quel est l'effet d'un champ magnétique sur l'existence de la phase verre de spins ? La ligne AT (cf. section I.2) persiste-t-elle ? En fait cette question peut être reformulée comme suit. Si on applique un champ magnétique, la solution SRSB reste-t-elle stable ou au moins marginalement stable ?

La solution avec SRSB du modèle SK a pu expliquer quelques unes des différentes propriétés des vrais verres de spins. Mais il y a un autre modèle qui est également capable d'expliquer quelques propriétés d'un verre de spins réel : c'est le modèle des gouttelettes (*droplet model*) [FH88]. Malgré le fait que chaque modèle décrit bien quelques propriétés, les modèles ne sont pas compatibles car il y a des prédictions différentes pour certaines propriétés. Bien que l'ultramétrie soit établie dans le cadre du SRSB pour le modèle SK, la persistance de cette propriété à basse dimension est controversée. Une telle structure hiérarchique de l'espace des configurations n'est pas prédite par le modèle des gouttelettes ; par contre celui-ci prédit une structure binaire, comparable à des systèmes à deux niveaux. Les différentes solutions souffrent elles-mêmes de quelques questions ouvertes. La théorie de SRSB attend toujours une fondation mathématique. En outre la théorie des perturbations utilisée pour

l'étude de la stabilité de la solution n'est pas contrôlée : il existe de sévères singularités infrarouges à cause des modes de *Goldstone* et la théorie reste non renormalisable [DKT91, DKT94]. Ceci est un des problèmes sans réponse, jusqu'à maintenant.

Approximation plus réaliste Les propriétés trouvées dans le modèle à portée infinie dans le cadre de la théorie des répliques sont bien particulières et on voudrait savoir si ces propriétés sont présentes aussi dans des modèles à basse dimension. Pour une dimension assez élevée, il est bien établi que les verres de spins montrent une transition de phase. En-dessous de la dimension critique inférieure d_l , la phase verre de spins apparaît seulement à température nulle et cette dimension d_l se trouve entre 2 et 3. Il est expérimentalement confirmé qu'il existe des systèmes plans pour lesquels la phase verre de spins n'apparaît qu'à température nulle. Également il est confirmé que pour des systèmes en dimension habituelle, c'est-à-dire $d = 3$ la phase verre de spins apparaît à une température non nulle (*cf.* Sandlund, Andersson). La solution de Parisi du modèle SK prédit l'existence de la phase verre de spins au moins en dimension infinie. Mais la question de savoir si les propriétés prédites par la solution de Parisi persistent à des dimensions finies reste ouverte. Il existe des simulations Marinari et al. [MPRLR96, CMP96] qui suggèrent qu'à basse dimension les propriétés déduites de la solution du champ moyen persistent. Mais jusqu'à aujourd'hui, la réponse n'est pas concluante. Il est important de considérer des modèles à dimension finie ou à coordination finie. Les modèles sur réseau sont des exemples de modèles assez réalistes, mais ils sont jusqu'à aujourd'hui analytiquement inextricables. Les verres de spins sur des graphes aléatoires et lacunaires sont des modèles utiles pour comprendre quelles propriétés de la solution SRSB persistent et quelles sont perdues à basse dimension. Dans cette thèse je présente les résultats de simulations concernant un modèle de verre de spins à basse coordination. Ce modèle correspond à une approximation intermédiaire entre les modèles sur réseau et le modèle SK (*cf.* chapitre IV).

– I.3 – Optimisation combinatoire

Motivation Très souvent, nous ne nous rendons pas compte que la plupart des problèmes d'organisation et de gestion peuvent être formulés comme des problèmes d'optimisation combinatoire. Il s'agit de minimiser (ou maximiser) une fonction, souvent appelée fonction de coût, de plusieurs variables soumise à des contraintes. Prenons un exemple de la vie quotidienne : il faut aller faire des courses, voir le médecin, prendre des rendez-vous professionnels, etc. ; il est donc préférable d'organiser sa journée de façon optimale en satisfaisant toutes les contraintes. Historiquement les sciences économiques ont été les premières à être confrontées à de tels problèmes, comme par exemple la gestion optimale des ressources financières. Mais rapidement des problèmes d'autres provenances, comme le meilleur procédé de production ou les horaires des ouvriers pour une utilisation efficace des machines ont montré qu'ils peuvent être interprétés comme des problèmes d'optimisation. Aujourd'hui tous les domaines techniques présentent des problèmes de ce type. Si on regarde alors les quelques problèmes qui suivent on sera convaincu que de nombreux problèmes quotidiens peuvent être décrits comme des problèmes d'optimisation combinatoire : l'allocation optimale de ressources, l'emplacement des usines ou des centres administratifs, la composition de portefeuilles et la minimisation des risques financiers, le "capital budgeting", la conception des implantations industrielles, le positionnement des satellites, les réseaux de communication pour un débit maximal, les calculs parallèles, la conception des puces électroniques (VLSI), l'utilisation d'un ensemble de camions ou d'avions, les horaires d'équipages, l'attribution de tâches à des agents, etc. La liste pourrait être continuée, mais je me contenterai de mentionner quelques domaines dans lesquels l'optimisation combinatoire n'a commencé à jouer

une rôle important que très récemment, comme pour l'archéologie, la psychologie et la sociologie. La nécessité de la recherche opérationnelle a fait de l'optimisation combinatoire une branche de recherche indépendante et l'optimisation est ainsi devenue un sujet carrefour dont la physique statistique, la recherche opérationnelle et l'informatique théorique profitent.

Définition d'un problème d'optimisation combinatoire L'optimisation vu comme la minimisation ou la maximisation d'une fonction de variables réelles est l'optimisation classique, traitée par le calcul différentiel. Le sujet de l'optimisation combinatoire est l'optimisation dans un domaine discret. Il faut trouver parmi toutes les possibilités, souvent en nombre fini, la possibilité optimale. Ceci paraît facile mais devient infaisable dès que la taille du problème est suffisamment grande. La taille pour laquelle la recherche d'un optimum devient infaisable est petite, très souvent plus petite que la taille des problèmes pratiques. En général, la difficulté d'un problème grandit très vite avec le nombre des variables. Il n'est pas alors faisable d'examiner toutes les possibilités.

Les classes $\mathcal{P}$, $\mathcal{NP}$ et $\mathcal{NP}$ -complet Pour distinguer des problèmes d'optimisation combinatoire faciles de ceux qui sont difficiles, la théorie de la complexité a été développée [PS82, GJ79]. Ces notions utilisées dans ce qui suit ont été développées pour des problèmes de décision, c'est-à-dire des problèmes qui exigent une réponse soit positive ou négative. Mais il est possible de reformuler un problème d'optimisation comme un ensemble des problèmes de décision : existe-t-il une solution avec un coût inférieur à une valeur $\mathcal{C}$? L'idée principale est de classer les problèmes selon le temps qu'il faut pour les résoudre ou pour vérifier qu'une solution proposée satisfait le problème de décision. Les problèmes dont la solution peut être trouvée ou vérifiée en temps polynomial constituent la classe $\mathcal{NP}$. Cette classe est la classe des problèmes polynomiaux non-déterministes. Ceci veut dire qu'un algorithme non-déterministe pourrait résoudre le problème en temps polynomial, ou plus précisément, connaissant la solution optimale il est possible de vérifier en temps polynomial qu'elle satisfait le problème de décision. Cette classe contient clairement les problèmes dont la solution optimale peut être trouvée en temps polynomial. Ces problèmes appartiennent à la classe des problèmes $\mathcal{P} \subseteq \mathcal{NP}$. Un représentant de ce dernier est le problème de l'appariement minimal. Dans la classe $\mathcal{NP}$ on peut introduire la relation d'équivalence suivante générant la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -complet. Un problème appartient à cette classe si on peut démontrer que celui-ci est au moins aussi exigeant en temps de calcul, à part des corrections polynomiales, que n'importe quel autre problème connu comme étant $\mathcal{NP}$ -complet. Les problèmes qui satisfont cette relation constituent la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -complets. Un problème est jugé difficile quand il appartient à la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -complets. Tout ceci est valable pour les problèmes de décision. Pour des problèmes d'optimisation, on dit qu'un problème est $\mathcal{NP}$ -difficile si son problème de décision conjugué appartient à la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -complets [Coo71]. Jusqu'aujourd'hui, il n'a pas été démontré que $\mathcal{P} \neq \mathcal{NP}$, mais le consensus est qu'ils sont effectivement différents. Sous cette hypothèse, il est possible de démontrer que $\mathcal{NP} \setminus \mathcal{P} \neq \mathcal{NP}$ -complet c'est-à-dire qu'il existe des problèmes qui ne sont ni $\mathcal{P}$ ni $\mathcal{NP}$ -complets [HKP91].

Il y a aussi des problèmes plus difficiles. Si on demande de donner toutes les solutions d'un problème $\mathcal{NP}$ -complet, on doit résoudre un problème plus que $\mathcal{NP}$ -complet s'il y a un nombre des solution plus grand que polynomial. De la définition de la relation d'équivalence, on pourrait conclure que si l'on sait résoudre en temps polynomial un problème qui appartient à la classe $\mathcal{NP}$ -complet, mais pas à $\mathcal{P}$, on aurait : $\mathcal{P} \equiv \mathcal{NP}$. Peut-être pour tous les problèmes existe-t-il un algorithme qui va les résoudre en temps polynomial mais jusqu'à aujourd'hui personne ne l'a trouvé.

Plus que $\mathcal{NP}$ -complet [MPV85]

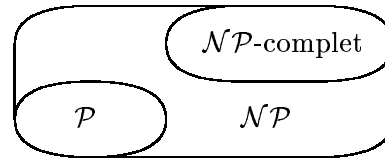


FIG 8 : Les classes $\mathcal{P}$, $\mathcal{NP}$ et $\mathcal{NP}$ -complet.

Aspects pratiques Vu que beaucoup de problèmes appartiennent à la classe $\mathcal{NP}$ -complet, il est fortement souhaitable de disposer d'un algorithme puissant, c'est-à-dire d'un algorithme qui trouve rapidement une solution optimale. La difficulté d'un problème se reflète dans le temps nécessaire pour trouver une solution. Comme exposé ci-dessus les problèmes faciles peuvent se résoudre en un temps polynomial mais les problèmes $\mathcal{NP}$ -complets montrent une dépendance exponentielle du temps de calcul avec la taille du problème. Afin de trouver une solution optimale en utilisant un algorithme exact, qui garantit que la solution proposée est optimale, il faut un temps exponentiel. Pour ordonner alors disons 100 particules dans un ordre optimal le calcul de la solution optimale prendra $100! \approx e^{100 \ln 100} \approx 10^{43}$ opérations. Sachant que un ordinateur à 200 MHz accomplit 10^8 opérations par seconde, il lui faut 10^{35} secondes ou 10^{28} ans, ce qui est beaucoup plus que l'âge de l'univers ...

Dès que la taille de l'instance n'est plus très modeste, la difficulté de trouver une solution optimale est si grande qu'on est obligé de se contenter d'une solution quasi-optimale. Afin d'obtenir une telle solution de nombreux algorithmes ont été proposés. Ceux-ci s'appellent des algorithmes *heuristiques*. Pour une revue de ces algorithmes je renvoie à [Ree93]. Il s'agit d'algorithmes qui proposent une solution en un temps typiquement polynomial. De bons algorithmes génèrent des solutions à quelques pourcents du coût de l'optimum. En outre connaître seulement un quasi-optimum d'une fonction de coût qui elle-même n'est pas donnée exactement n'aggrave pas forcément l'information qu'on souhaite en tirer. Une partie de la présente thèse va traiter des propriétés statistiques de tels algorithmes. Un des principaux problèmes de trouver la solution optimale est le fait qu'il y a des tas de solutions quasi-optimales qui sont très proches de la solution optimale : d'abord proche en coût, mais également proche en mesurant la distance des solutions dans une métrique appropriée, par exemple la distance de *Hamming*. Mais il existe aussi parfois des solutions très éloignées par rapport à cette métrique qui peuvent donner essentiellement le même coût. Cela dépend du paysage d'énergie du problème d'optimisation combinatoire considéré.

Définition d'un problème d'optimisation combinatoire et des exemples Il est approprié de donner une définition plus formelle du problème d'optimisation combinatoire (PdOC). Comme exemple je fais référence au problème de la bipartition de graphe (PPG) que je vais exposer un peu plus tard. Pour un problème bien défini, il faut indiquer

- (i). quelle est l'instance ou l'ensemble des instances, par exemple le graphe ou l'ensemble des graphes dans le cas du PPG.
- (ii). les contraintes imposées aux solutions, par exemple la taille des partitions dans le cas du PPG.

I.3 Optimisation combinatoire

(iii). la fonction de coût, c'est-à-dire le coût d'une partition dans le cas du PPG.

Connaissant ces ingrédients le problème est bien défini. Le problème est considéré comme résolu si un algorithme proposé est capable de trouver une solution pour n'importe quelle instance de l'ensemble. Pour distinguer la complexité des différents algorithmes nous introduisons la notion de leur ordre. Un algorithme est d'ordre k , noté comme $\mathcal{O}(N^k)$, si le temps de calcul de l'algorithme croît avec la k ème puissance de la taille N du système. Si l'algorithme était exact, il pourrait avoir un comportement exponentiel, $\mathcal{O}(e^N)$.

Je cite ici à titre d'exemple quelques problèmes d'optimisation combinatoire [PS82], séparés selon qu'ils sont $\mathcal{NP}$ -complets ou non.

Les problèmes $\mathcal{P}$	Les problèmes $\mathcal{NP}$ -complets.
(i). l'appariement minimal	(i). la bipartition de graphe
(ii). problèmes de coupure minimale/flux maximal	(ii). le problème de colorer un graphe
(iii). état fondamental d'un verre de spins en dimension 2 avec des conditions ouvertes au bord et sans champ magnétique	(iii). le voyageur de commerce [LLRS84]
(iv). ...	(iv). job-shop, job scheduling
	(v). contrainte satisfaction problem (CSP)
	(vi). le problème d'affectation quadratique (Quadratic Assignment Problem QAP)
	(vii). le problème de satisfiabilité SAT, k-SAT [KS94]
	(viii). les verres de spins en dimension $d \geq 3$ ou dans le plan avec un champ magnétique
	(ix). ...

De nombreux problèmes pratiques trouvent une formulation abstraite parmi ces problèmes. Considérons par exemple un maillage d'un domaine dans l'espace qui sera utilisé dans la résolution numérique d'équations aux dérivées partielles. Si la résolution se fait sur un ordinateur parallèle, il faut équilibrer les charges sur les différents processeurs, ce qui revient à partitionner le graphe associé au maillage. Notons aussi que lors des différentes étapes de la conception d'un processeur électronique apparaissent des problèmes de partition : les transistors doivent être posés d'une façon optimale sur un substrat, de même les éléments du CPU, les puces sur la carte mère, etc.

Algorithmes Afin de résoudre une telle abondance de problèmes, un nombre très important d'algorithmes et de méthodes ont été développés. Ici, je me contente de dénombrer quelques algorithmes proposés pour résoudre des problèmes $\mathcal{NP}$ -complets. Ces algorithmes peuvent être divisés en deux classes, la première est celle des algorithmes exacts et la deuxième celle des algorithmes heuristiques. À part quelques cas spécifiques, les problèmes $\mathcal{NP}$ -difficiles exigent habituellement pour les résoudre à optimalité un temps de calcul exponentiel en fonction de la taille du problème. D'un point de vue pratique il est par conséquent très souvent prohibitif d'utiliser un algorithme exact. Afin d'obtenir rapidement une solution faisable, mais pas forcément optimale, les algorithmes heuristiques ont été conçus.

Les algorithmes exacts

- (i). programmation dynamique / programmation par contraintes
- (ii). séparation et évaluation / séparation et coupure
- (iii). coupure minimale / flux maximal [Ogi86]
- (iv). ...

Les algorithmes heuristiques :

- (i). le recuit simulé
- (ii). la recherche locale, tabou, à profondeur variable
- (iii). les algorithmes génétiques
- (iv). ...

Un grand nombre d'algorithmes sont des combinaisons de ces méthodes. Pour un aperçu des progrès dans la théorie des graphes, de la programmation linéaire et des flux de réseau, je renvoie le lecteur aux ouvrages suivants [LLRS84, Chv83, Der91, AMO93]. Afin de mieux comprendre le fonctionnement des algorithmes discutés, nous allons donner quelques notations. Certains algorithmes appliquent des changements au niveau de la configuration et il est alors nécessaire de savoir le type de changement permis. On appelle *voisinage* les configurations qui sont à atteindre en appliquant les changements permis dans l'espace des configurations. Dans un système de spins on pourrait définir le voisinage d'une configuration comme l'ensemble des configurations qu'on peut obtenir en retournant un seul spin.

Partition de graphe Dû à la surabondance des problèmes d'optimisation combinatoire (PdOC) il est nécessaire pour une présentation plus explicite de faire un choix. J'ai choisi le PdOC qui a une forte ressemblance avec un système physique : le problème de partition de graphe. Le problème de partition de graphe (PPG) peut être défini comme suit. D'abord j'introduit la notion d'un graphe.

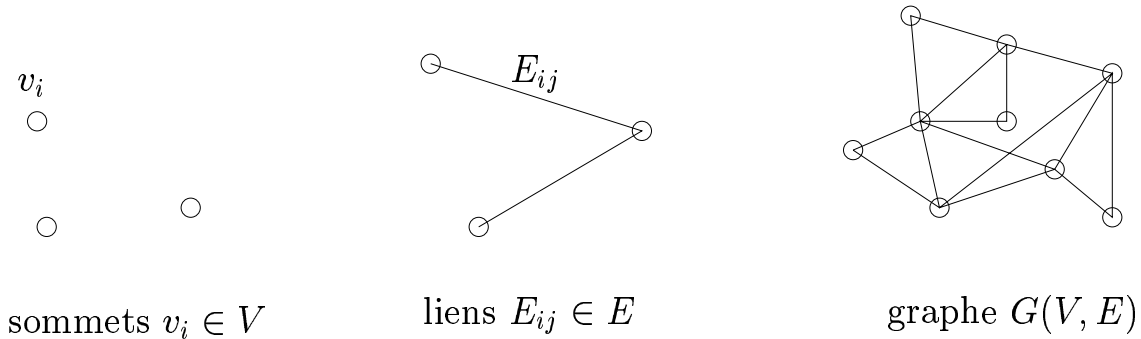


FIG 9 : Les éléments constituant un graphe.

Un graphe est donné par $G = G(V, E)$ qui se compose de N sommets $V = \{v_1, \dots, v_N\}$ et un ensemble d'arêtes E_{ij} non-orientées qui relient des différents sommets v_i . Il est commode d'introduire la matrice $E = \{E_{ij}\}_{i,j=1\dots N}$, appelée la matrice d'adjacence qui est définie comme

$$E_{ij} = \begin{cases} 1 & : \text{ si } v_i \text{ est relié à } v_j \\ 0 & : \text{ sinon} \end{cases}$$

La propriété de non-orientation s'exprime par $E_{ij} = E_{ji}$. Les E_{ij} sont les poids de la connection.

I.3 Optimisation combinatoire

Une partition du graphe G , dont un exemple est présenté dans la figure I-10 ci-contre, est donné par division des sommets de G en deux sous-ensemble disjoints V_1 et V_2 , tel que $V = V_1 \cup V_2$. Le nombre des arêtes reliant V_1 à V_2 , alors coupé par la partition, est appelé le coût de la partition et sera noté $\mathcal{C}$. La fonction de coût est donc donnée par

$$\mathcal{C}[V_1, V_2] = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} E_{ij}. \quad (\text{I.3-1})$$

Le problème de partition de graphe (*graph partitioning problem*, *graph bisection*, ou *Min-Cut problem*) consiste à trouver

la partition (V_1, V_2) pour laquelle le coût (I.3-1) est minimal, la partition étant soumise à une contrainte de taille : le nombre de sommets dans V_1 et V_2 est spécifié d'avance. Le PPG est *NP-complet* [GJ79]. Dans la formulation habituelle V_1 et V_2 ont la même taille. Dans la suite de cette thèse je me contente d'étudier ce problème dans sa formulation habituelle et avec des poids uniformes $E_{ij} = 1$. Pour définir complètement le PPG il faut préciser quels graphes vont servir comme instances. Dans cette thèse, j'ai étudié des graphes aléatoires, soit avec une coordination aléatoire dont la moyenne est fixée, soit avec une coordination fixe. Le premier ensemble a été très étudié en théorie des graphes et pour le PPG. Le deuxième ensemble a été choisi parce qu'il existe des travaux portant sur cet ensemble dans le cadre des verres de spins. Les deux ensembles mènent à l'étude des verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires. Les verres de spins sur de tels graphes représentent des modèles à coordination finie et constituent une approximation moins grossière que celle du modèle SK. Le problème de partition de graphe dans le cadre de l'optimisation combinatoire va être traité dans le chapitre III. L'étude des verres de spins sur des graphes aléatoires et lacunaires va être exposé dans cette thèse au chapitre IV.

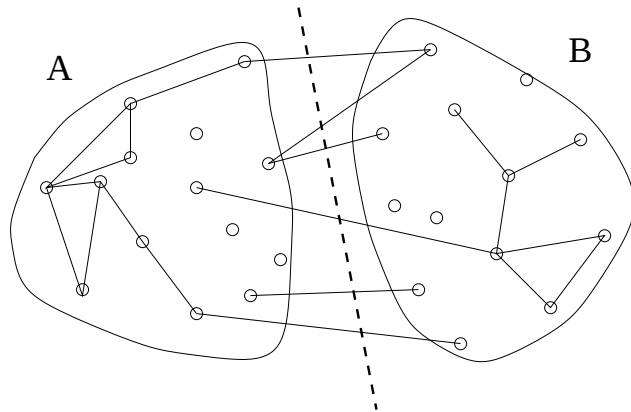


FIG 10 : Un graphe et une partition de ce graphe.

Des graphes aléatoires Pour les graphes aléatoires avec une coordination finie, on peut imaginer deux cas : la coordination est aléatoire avec une moyenne bien définie ou elle est fixée. Les graphes aléatoires avec coordination aléatoire sont des graphes à N sommets dont les arêtes sont placés avec une probabilité p . Le nombre d'arêtes partageant un sommet est fixée en moyenne à être α ; il s'ensuit que la probabilité

p doit être inversement proportionnelle au nombre des sommets $p = \frac{\alpha}{N-1}$. Les graphes aléatoires avec coordination fixée sont des graphes à N sommets tous reliés à α autres sommets, de sorte que la coordination est indépendante du nombre des sommets N . (Ces graphes sont une version diluée des graphes denses où la coordination est intensive $\alpha \sim N$.) Le graphe ci-contre dans la figure I-11 n'est pas un graphe aléatoire mais un graphe "géométrique" où deux sommets sont reliés s'ils sont suffisamment proches. Cette figure est donnée pour illustrer la notion de graphe lacunaire où chaque sommet n'est connecté qu'à un faible nombre d'autres sommets.

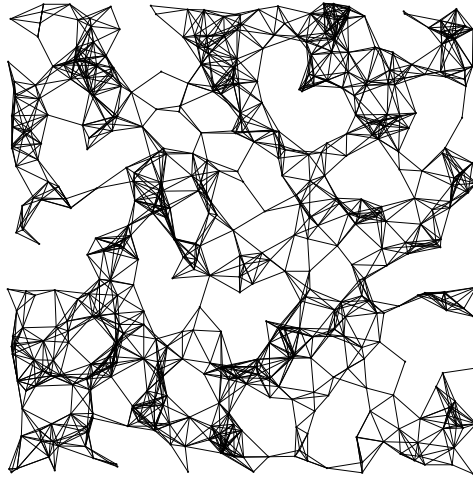


FIG 11 : Un graphe géométrique.

— I.4 — Physique statistique et optimisation combinatoire

On peut reformuler des problèmes d'optimisation combinatoire comme des problèmes de physique statistique à température nulle $T = 0$. Inversement un problème de physique statistique à $T = 0$ peut être interprété comme un problème d'optimisation combinatoire. Les problèmes d'optimisation combinatoire sont formulés à l'aide d'une fonction de coût H qu'il faut minimiser en satisfaisant certaines contraintes. Par contre, en physique statistique on s'intéresse à des fonctions thermodynamiques comme l'énergie libre. Celle-ci est donnée par $F = U - TS$, où l'énergie interne est $U = \langle H \rangle$, la valeur thermique moyenne du Hamiltonien, et S est l'entropie. Afin qu'une correspondance tienne il faut prendre la température nulle ($T = 0$), de sorte que $F = \langle H \rangle = H_{\min}$. La quantité à laquelle nous nous intéressons est le minimum de l'énergie.

Comme nous l'avons exposé dans la section I.3, les problèmes couramment analysés sont $\mathcal{NP}$ -difficile. Ceci implique que la recherche d'une solution optimale est difficile; alors on se contente parfois de solutions fournies par des algorithmes heuristiques. Du point de vue de la recherche opérationnelle, il s'agit d'obtenir des solutions quasi-optimales; en physique statistique, il s'agit de comprendre les propriétés typiques de ces solutions, pour mieux comprendre les propriétés des états fondamentaux et des états de faible énergie. Dans cette thèse j'expose quelques problèmes appartenant à la physique statistique aussi bien qu'à l'optimisation combinatoire. La relation entre les problèmes de la physique des systèmes désordonnés et les problèmes de l'optimisation combinatoire a motivé de nouveaux algorithmes [KGV83, Kir84, NSS86]. Ces auteurs utilisent l'image de fondre et figer pour justifier l'utilisation du recuit simulé pour attaquer des problèmes d'optimisation combinatoire. Une fois les problèmes de l'optimisation combinatoire reformulés dans le langage de la physique statistique, il est évident que les techniques conçues pour les problèmes de la physique statistique sont également applicables aux problèmes de l'optimisation combinatoire. La théorie développée pour des verres de spins décrit également — avec des notions convenablement adaptées — les problèmes de l'optimisation combinatoire, par exemple le problème de la bipartition de graphe.

La vue traditionnelle des problèmes d'optimisation combinatoire n'exige pas un ensemble aléatoire d'instances alors que les verres de spins sont naturellement interprétés comme des problèmes d'opti-

sation combinatoire stochastiques où le problème est spécifié par la fonction coût *et* par l'ensemble des instances. En physique statistique, l'ensemble des instances correspond à l'ensemble des échantillons.

Des échanges de méthodes et d'algorithmes ont permis aux deux domaines, la physique statistique ainsi que l'optimisation combinatoire, de profiter l'un de l'autre. Dans la section précédente j'ai discuté d'un modèle de physique statistique : les verres de spins. Dans la suite, je vais présenter une formulation des verres de spins comme un problème de l'optimisation combinatoire : le problème du *Max-Cut*.

Max-Cut Le problème du *Max-Cut* consiste à trouver la partition d'un graphe pour laquelle la coupure est maximale ; il n'y a pas de contrainte de taille sur la partition. Il n'existe pas non plus de restrictions sur les poids des arêtes. En physique statistique, ce dernier problème correspond exactement à trouver le fondamental d'un hamiltonien de verres de spins d'Ising. Et c'est pourquoi il peut y avoir symbiose entre les méthodes de l'optimisation combinatoire et de la physique statistique. Dans ce qui suit je vais exposer la correspondance qui permet d'interpréter le problème de trouver le fondamental d'un verre de spins comme étant un problème d'optimiser (maximiser) la coupure dans un graphe. Les verres de spins sont des matériaux avec des défauts magnétiques qui possèdent des interactions au hasard ferro ou anti-ferromagnétiques. Le modèle conçu en physique statistique pour décrire des tels systèmes est le Hamiltonien de Edwards et Anderson. Comme déjà dit, celui-ci décrit les matériaux avec des interactions de courte portée et est donné par

$$H_{EA} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j, \quad (\text{I.4-1})$$

avec les spins s_i satisfaisant $s_i = \pm 1$ et des interactions J_{ij} quelconques. Le problème de trouver l'état d'énergie la plus basse peut s'écrire comme une minimisation. Supposons que $\mathcal{S} = \{s_i\}_{i=1,\dots,N}$ est une configuration des spins. Une telle configuration est naturellement divisée en deux sous-ensembles, un sous-ensemble V_1 contenant les spins $s_i = +1$ et un sous-ensemble V_2 contenant tous les spins $s_i = -1$. Nécessairement $V_2 = \mathcal{S} \setminus V_1$. Maintenant l'énergie est réécrite en tenant compte des sous-ensembles V_1 et V_2 :

$$H_{EA} = - \sum_{\{i,j\} \in (V_1, V_1)} J_{ij} - \sum_{\{i,j\} \in (V_2, V_2)} J_{ij} + \sum_{\{i,j\} \in (V_1, V_2)} J_{ij}. \quad (\text{I.4-2})$$

En introduisant un terme qui se compense et en tenant compte que $\sum_{\{i,j\}} J_{ij} = C$ est une constante indépendante de la configuration on obtient

$$H_{EA} = -C + 2 \sum_{(i,j) \in (V_1, V_2)} J_{ij}. \quad (\text{I.4-3})$$

Définissons $H'_S = \frac{1}{2}(H_{EA} + C)$. La formulation de minimisation est la suivante

$$\min_{\mathcal{S}} \{H'_S\} = \min_{V_1, V_2} \sum_{(i,j) \in (V_1, V_2)} J_{ij}. \quad (\text{I.4-4})$$

Notons que les couplages peuvent prendre n'importe quelles valeurs positives ou négatives, et qu'il n'y a aucune restriction sur la taille des sous-ensembles. Ceci est une différence importante avec le problème du *Min-Cut* qui va être traité dans le chapitre III. Afin d'éviter la moindre confusion, le problème présent est appelé *Max-Cut* parce que la minimisation de H est équivalente à la maximisation de $-H$. Ces différences font que le problème n'est pas un problème de *coupure minimale* dans le sens propre (où

les J_{ij} seraient positifs), de sorte que le théorème de Ford et Fulkerson [FF62] établissant l'équivalence du problème de *coupure minimale* et du problème de *flux maximal* ne peut pas être appliqué. Ce dernier problème est traité efficacement par des algorithmes comme *directed path*, *preflow push* and *retreat without overhangs* [Mid95] en un temps polynomial. Pour des détails concernant le flux dans un réseau, je renvoie au livre de Ahuja *et al.* [AMO93]. Ici nous sommes confrontés à un problème beaucoup plus complexe et il est démontré que le *Max-Cut* appartient en général à la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -difficiles. Pour les graphes planaires, le *Max-Cut* n'est pas $\mathcal{NP}$ -difficile mais appartient à $\mathcal{P}$. Par contre, si un champ magnétique est appliqué, le problème redevient $\mathcal{NP}$ -difficile [Bar82, BMRP82]. Pour des graphes quelconques, bien qu'il n'existe probablement aucun algorithme polynomial, des algorithmes assez puissants ont été développés [GJR87] [dSDJ⁺95, KK94]. Le problème du *Max-Cut* peut être écrit comme un programme entier linéaire mais nous remettons cette exposition à plus tard dans le chapitre IV. Dans ce chapitre nous allons reprendre le problème des verres de spins et nous discuterons d'algorithmes pour l'étude de ce problème.

Le cas de la dimension 2 Prenons un réseau carré en $d = 2$ avec conditions de bord ouvertes et sans champ magnétique. Le problème de *Max-Cut* est alors dans $\mathcal{P}$ par le mapping qui suit. La somme sur les liens entre les deux sous-ensemble V_1 et V_2 peut être réécrit $-\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} s_i s_j = \sum_{\text{non-satisfaits}} |J_{ij}| - \sum_{\text{satisfaits}} |J_{ij}|$. Le Hamiltonien vaut alors :

$$H_{\text{EA}} = - \sum_{\langle ij \rangle} |J_{ij}| + 2 \sum_{\text{non-satisfaits}} |J_{ij}|, \quad (\text{I.4-5})$$

La minimisation doit alors se faire sur les liens non-satisfaits. Connectant les liens non satisfaits, en passant par les centres des plaquettes, on obtient des chemins qui forment, soit des boucles fermées, soit des chemins ouverts qui relient des plaquettes frustrées. Les chemins fermés augmentent toujours l'énergie; on peut s'en convaincre en retournant les spins à l'intérieur de la région délimitée par le chemin fermé. Le fondamental n'a donc pas de tels chemins. Pour une plaquette frustrée, il faut un chemin la reliant à une autre plaquette; il s'agit d'avoir un chemin le plus court possible. Raccourcir tous ces chemins revient au même que de chercher un *appariement* entre les plaquettes frustrées avec les chemins les plus courts. On retombe donc sur un problème d'appariement minimal qui est soluble en temps polynomial. Une telle correspondance n'existe pas en présence d'un champ magnétique, ni en dimension plus élevée.

Recuit simulé et paysages d'énergie Afin de trouver une solution d'un problème d'optimisation combinatoire, il est nécessaire de disposer d'un algorithme suffisamment puissant. Un algorithme heuristique qui appartient aux algorithmes les plus performants est le *recuit simulé*. Kirkpatrick, Vecchi et Gelatti ont conçu cet algorithme et son application à l'optimisation combinatoire. Guidés par les analogies avec les processus de fonte et de solidification des matériaux, ils introduisent dans une recherche locale une faible probabilité d'accepter un pas défavorable. Cette probabilité dépend d'un paramètre supplémentaire : la température. Cette température va être diminuée successivement jusqu'à ce que le système soit figé, c'est-à-dire dans l'état fondamental qui correspond à la solution optimale. Je vais exposer cet algorithme dans le chapitre III. Pour mieux comprendre les propriétés qui rendent un PdOC difficile, ils ont étudié plus profondément les similitudes entre un système physique qui subit un refroidissement et le recuit simulé appliqué à un PdOC. La motivation vient du fait que le recuit simulé est un algorithme très efficace et se pose la question de savoir si cet algorithme utilise une structure dans l'espace de configuration pour rapidement trouver une bonne solution. On a conjecturé qu'une telle structure pourrait être l'ultramétrie. Comme je viens de l'exposer dans un

des paragraphes précédent, le modèle SK représente le modèle par excellence pour étudier des systèmes frustrés. Ce modèle possède beaucoup d'états métastables avec une énergie quasi-minimale ou dans le langage de l'optimisation combinatoire beaucoup de solutions localement optimales. La question principale est de comprendre si la surface d'énergie libre $f[J_{ij}]$ possède une structure permettant au recuit simulé d'être performant. Tanaka et Edwards [TF80] ont montré que le nombre des minima locaux du modèle SK croît exponentiellement avec N . Un autre résultat dérivé par Baldi et Baum [BB86] dit que dans un verre de spins avec N spins, il y a au maximum $N + 1$ configurations qui peuvent former une structure ultramétrique.

Il est remarquable que le recuit simulé ainsi que d'autres algorithmes trouvent facilement de bonnes solutions bien qu'il y ait un nombre exponentiel de solutions quasi-optimales. Comme les verres de spins, beaucoup de PdOC possèdent un nombre exponentiel de minima locaux.

Échange fructueux L'optimisation combinatoire et la physique statistique profitent d'échanges de concepts et de procédés. Par exemple l'algorithme du recuit simulé est appliqué en optimisation et d'autres algorithmes de l'optimisation combinatoire sont appliqués en physique statistique. Citons par exemple l'algorithme polynomial d'Edmonds [Edm67a, Edm67b, Edm72, BMRU80], qui représente le problème des verres de spins en 2 dimensions comme un problème d'appariement de longueur minimal des plaquettes frustrées. Également, les états fondamentaux d'un modèle d'Ising avec un champ magnétique aléatoire en n'importe quelle dimension peuvent être trouvés par un algorithme polynomial [AdM84]. Utilisant la qualification de la complexité d'un problème combinatoire, on déduit qu'il s'agit ici des problèmes appartenant à la classe $\mathcal{P}$. Les verres de spins, soit avec des conditions au bord périodiques [Bar82], soit à dimension plus élevée, appartiennent à la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -difficiles.

Finalement les deux domaines, celui de la physique statistique et celui de l'optimisation combinatoire, partagent un grand nombre de points communs. Les éléments génériques qui apparemment rendent les problèmes de ces deux domaines difficiles sont la frustration et le désordre. Ces deux ingrédients engendrent un paysage d'énergie fortement structuré avec des vallées et des sous-vallées, et donnent lieu à des nombreux états métastables qui cachent les états fondamentaux. Différentes analogies ont été proposées pour mieux comprendre ces paysages. Un algorithme utilisant l'analogie avec la fonte et la solidification est l'algorithme du recuit simulé. Il exploite les états métastables afin de descendre occasionnellement dans l'état fondamental. Des analogies comme ci-dessus ont fortement inspiré et animé la recherche dans ces domaines au cours des dernières années.

– I.5 – Survol de cette thèse

Le premier chapitre de cette thèse a donné une introduction générale aux différents sujets qui seront traités dans les trois chapitres suivants. Le deuxième chapitre traite le modèle BEG. Le modèle BEG est une généralisation du modèle d'Ising et nous allons l'étudier en approximation de champ moyen. Ceci permet d'appliquer la théorie des répliques afin de décider s'il y a aussi dans ce modèle une phase de verre de spins. En outre, le modèle BEG possède une séparation de phase et on se demande si l'introduction du désordre modifie cette transition et, si c'est le cas, comment il le modifie.

Nous esquissons les résultats connus et discutons aussi de quelques modèles qui ont servi comme précurseurs du modèle BEG afin de mieux comprendre la signification de chaque terme dans l'Hamiltonien. Dans les sections qui suivent, j'expose le modèle BEG désordonné. D'abord, je considère le désordre au niveau des liens, ce qui donne le modèle BEG frustré. Ensuite j'introduit un potentiel chimique désordonné. Dans le premier cas, il existe des résultats pour des modèles similaires,

c'est-à-dire désordonnés, mais pas frustrés, et il existe aussi des études d'un modèle frustré, mais soit sans interaction ferromagnétique, soit sans interaction quadrupolaire. Nos calculs ont été effectués au niveau du champ moyen dans le cadre de la théorie des répliques en supposant la symétrie entre les répliques. Les équations du col sont résolues numériquement et la stabilité de la solution a été étudiée. Nous trouvons que le diagramme de phase est seulement faiblement modifié par le désordre et que la transition de premier ordre persiste. Dans les cas limites, nos résultats sont en accord avec d'autres travaux. La persistance de la transition de premier ordre ouvre une discussion sur les critères pour qu'une telle transition soit supprimée. Dans le cas d'un potentiel chimique désordonné, nous trouvons que la transition de premier ordre apparaît à une température plus basse ce qui est en accord avec des études plus anciennes. Dans la section finale nous discutons ces résultats et nous les comparons aux résultats d'autres auteurs. Dans deux annexes nous discutons des détails techniques du calcul RS et l'analyse de stabilité et enfin des modèles à p spins. Dans une troisième annexe, un prétrirage issue de ce travail est reproduit. Il est soumis au *Journal de Physique I*.

Dans le troisième chapitre l'attention est tournée vers l'optimisation combinatoire. Dans un premier temps nous introduisons le problème de bipartition de graphe. L'identification entre les modèles de la physique statistique et les problèmes de l'optimisation combinatoire soulève la question de savoir si des propriétés statistiques trouvées en physique s'appliquent également aux solutions quasi-optimales des problèmes d'optimisation combinatoire. Dans le cadre des verres de spins, il a été montré qu'il existe des lois d'échelle et d'auto-moyennage. Ces résultats ont été déduits par l'approximation de champ moyen, ce qui est équivalent à un graphe avec une coordination infinie. Mais ici nous nous intéressons à des graphes avec une coordination finie, mais aléatoires. Nous avons étudié numériquement ces propriétés pour le problème de la bipartition de graphe. Nous avons trouvé que de telles propriétés s'appliquent aussi bien à des solutions aléatoires (haute température) qu'à des solutions quasi-optimales (basse température). L'étude de ces propriétés se fait numériquement. Dans la suite nous présentons des algorithmes heuristiques que nous avons utilisé pour attaquer ce problème. Le problème est très difficile à résoudre et afin de pouvoir étudier des propriétés statistiques, il faut des algorithmes heuristiques puissants. Parmi ceux-là, il se trouve des algorithmes déjà dans le domaine public, écrit par des co-auteurs, ou écrit ou modifié par moi-même. La section suivante présente des résultats de cette étude qui a portée sur des propriétés statistiques de ces algorithmes heuristiques. Dans une annexe je discute du recuit simulé plus en détail. Des prétrirages issus de ces études sont donnés par la suite. Le premier est soumis à *SIAM Journal of Optimization* et le deuxième est soumis au *Proceedings of MIC'97*.

Le dernier chapitre est consacré à l'étude des verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires. La première partie de ce chapitre introduit les verres de spins sur de tels graphes et motive la présente étude. Les verres de spins sur des graphes denses sont très bien compris par la théorie des répliques. Cette théorie a été appliqué au modèle BEG dans le deuxième chapitre. La théorie des répliques révèle un grand nombre de propriétés intéressantes. Mais cette théorie est une approximation de type champ moyen et il reste la question de savoir si de telles propriétés persistent à un niveau différent de l'approximation. Une approximation champ moyen consiste à regarder un modèle où tous les sommets du graphe sont liés à tous les autres. Ceci fait que le modèle se trouve effectivement à dimension infinie. Mais ici, nous nous intéressons à des modèles avec une coordination finie et fixe. Les graphes qui ont une telle propriété sont des graphes aléatoires lacunaires. Nous avons choisi une approche numérique afin d'étudier les propriétés statistiques des états fondamentaux des verres de spins sur certains graphes aléatoires lacunaires. Pour de tels graphes, il existe des calculs et des simulations à température finie mais qui ne sont pas concluants. L'étude des états fondamentaux jette un pont vers l'optimisation combinatoire et permet d'utiliser des algorithmes performants. Nous présentons un nouvel algorithme heuristique pour l'étude des propriétés des états fondamentaux. Dans la dernière

section nous présentons nos résultats. Nous étudions une conjecture qui concerne le comportement de l'énergie du fondamental dans la limite thermodynamique en fonction de la coordination. En outre, des lois d'échelle et de l'auto-moyennage ont été trouvés pour l'énergie du fondamental. La distribution du paramètre d'ordre est non triviale et non auto-moyennante. Ceci confirme que les propriétés prédites par la théorie des répliques s'appliquent également à ce modèle. Il se révèle que l'ultramétrie s'applique aussi dans ce cas. Mais une déviation a pu être constatée à très basse coordination. Ceci suggère qu'il faut s'attendre à des corrections si l'on va vers des modèles plus réalistes. Le modèle présent est une approximation intermédiaire entre l'approximation de champ moyen (graphes denses) et la physique réelle (réseau en basse dimension). Une première annexe discute des méthodes pour estimer les différentes erreurs. Dans une seconde annexe se trouve le prétravail issu de ce travail.

Chapitre II

Le modèle de Blume, Emery et Griffiths

Plan du chapitre

II.1 Introduction	34
a) Préliminaires	34
b) Le modèle BEG	38
II.2 Présentation du modèle BEG	40
a) Le modèle de Griffiths	40
b) Le modèle de Blume et Capel	44
c) Le modèle de Blume, Emery et Griffiths	48
II.3 Le modèle BEG frustré	52
a) Le modèle BEG frustré	52
b) Étude par la méthode des répliques	53
c) Les différentes phases	55
d) Au-delà de la symétrie des répliques	57
II.4 Le modèle BEG avec potentiel chimique désordonné	60
II.5 Discussion, perspectives et conclusions	65
II.6 Journal de Physique preprint	69
Appendix A	91
Annexe B	97

Dans l'introduction générale (I) j'ai exposé la théorie du modèle d'Ising et son extension au cas de liens désordonnés, c'est-à-dire aux verres de spins et en particulier au modèle de Edwards et Anderson [EA75] et au modèle de Sherrington et Kirkpatrick [SK75]. Ce chapitre reprend le modèle d'Ising et le généralise d'une autre manière : les spins peuvent maintenant aussi acquérir la valeur nulle : $s_i = 0, \pm 1$. Cette généralisation permet de décrire un matériau formé de deux composantes dont l'une est magnétique. En outre nous allons introduire deux interactions supplémentaires : un couplage quadrupolaire et un potentiel chimique. Ces modifications amènent au modèle de Blume, Emery et Griffiths que nous appellerons désormais le modèle BEG. Le modèle BEG permet de modéliser des mélanges binaires dont une des composantes a un degré de liberté du type magnétique ou superfluide. Du point de vue historique le modèle BEG a été conçu afin d'étudier le mélange binaire $\text{He}^4\text{-He}^3$. Le modèle possède une transition de phase du premier ordre et une de second ordre et permet ainsi d'étudier en détail un point tricritique.

Ce chapitre est consacré à l'étude de la version "verre de spins" du modèle BEG. Le désordre et la frustration sont introduits au niveau des liens et conduisent à des problèmes très intéressants. Dans mon étude, je vais traiter le modèle BEG frustré en approximation de champ moyen.

– II.1 – Introduction

Le modèle de Blume, Emery et Griffiths (BEG) permet de décrire le mélange de He^3 et He^4 . Le modèle a été d'un grand succès car il était capable de décrire, au moins qualitativement, le comportement de ce mélange. En particulier le modèle prédit correctement les transitions de second et de premier ordre, cette dernière étant due à une séparation de phase. Ces transitions du premier et du second ordre sont responsables de l'apparition d'un point tricritique. Le modèle BEG a un grand nombre de propriétés intéressantes et la question se pose de savoir si ces propriétés persistent lorsque du désordre gelé est introduit. Nous nous intéressons surtout à la question de la persistance du point tricritique. Ce chapitre considère ce qui se passe quand on introduit un tel désordre.

Dans cette section de l'introduction, je vais discuter des transitions de phase, de la séparation de phase et du point tricritique. Je donne également un bref aperçu expérimental du mélange de He^3 et He^4 . Cette section se termine en esquissant le modèle BEG. Dans la section suivante, je présente quelques modèles apparentés à celui de Blume, Emery et Griffiths pour faire apparaître plus clairement quelles interactions sont responsables des différents effets.

a) Préliminaires

Transitions de phase Les transitions de phase sont classées selon le comportement analytique des fonctions thermodynamiques. L'ordre d'une transition de phase est donné par l'ordre de la dérivée à partir de laquelle une fonction thermodynamique n'est plus continue. Une transition de phase du premier ordre est donc caractérisée par la discontinuité de la première dérivée d'une fonction thermodynamique, par exemple l'énergie interne. Pour une transition de deuxième ordre, c'est la deuxième dérivée qui est discontinue. Landau [LL69] a conçu une théorie permettant de décrire ces transitions de phase qualitativement en fonction d'un paramètre d'ordre m . Discutons cette description dans le cadre de systèmes magnétiques où m est l'aimantation spontanée. Près de la température critique T_c , l'énergie libre peut être développée en puissances du paramètre d'ordre :

$$f = f_0 + \frac{1}{2}f_2m^2 + \frac{1}{4!}f_4m^4 + \frac{1}{6!}f_6m^6 + \dots; \quad (\text{II.1-1})$$

Les termes impairs n'apparaissent pas à cause de la symétrie du Hamiltonien par rapport au retournement de tous les spins $s_i \rightarrow -s_i$. Pour simplifier, nous avons négligé les fluctuations spatiales de l'aimantation spontanée : $(\nabla m)^2 = 0$, en nous restreignant à des solutions constantes. La phase stable est celle qui possède l'énergie libre f minimale ; la deuxième dérivée par rapport au paramètre d'ordre doit donc être positive. Supposons que f_2 soit de la forme $\sim (T - T_c)$, f_4 de la forme $\sim (\Delta_A - \Delta)$ et que f_6 soit positif, contrainte assurant la stabilité à grand m .

Discutons d'abord la transition de phase de second ordre, représentée dans la figure II-1. Pour le

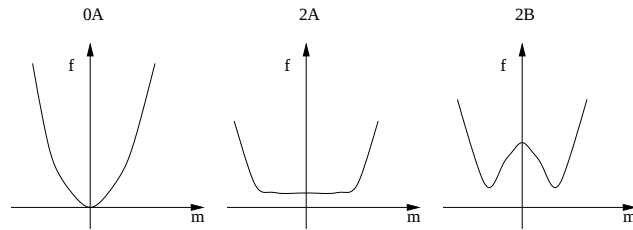


FIG. II-1: La forme de l'énergie libre pour une transition de second ordre (2A, 2B).

II.1 Introduction

moment, nous supposons que f_4 est également positive, c'est-à-dire $\Delta < \Delta_A$. Pour une température $T \geq T_c$, qui correspond à une énergie libre ayant la forme (0A), il n'y a qu'un minimum, $m = 0$. C'est la phase paramagnétique. Dès que $T < T_c$, il existe deux minima avec $m = \pm m_0$ (2B) ; c'est la phase ferro-magnétique. L'apparition de deux solutions au lieu d'une seule montre que la symétrie de retournement global des spins est spontanément brisée. Notons que le paramètre d'ordre est continu en fonction de la température (2A) $\rightarrow$ (2B).

Considérons maintenant une transition de phase du premier ordre. Les différentes formes de l'énergie libre en fonction de la température sont esquissées dans la figure II-2. Prenons $f_4 < 0$, ce qui

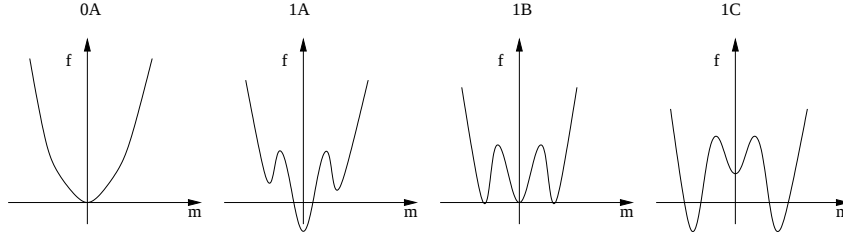


FIG. II-2: La forme de l'énergie libre pour une transition du premier ordre (1A,1B,1C).

revient à dire que $\Delta > \Delta_A$. À haute température l'énergie libre n'a qu'un minimum (0A). À plus basse température, toujours dans la phase paramagnétique, l'énergie libre f a trois minima locaux situés à $m = 0$ et $m = \pm m_0$, mais la solution $m = 0$ est le minimum absolu (1A). En baissant la température, on arrive à une température critique T'_c où les trois solutions $m = 0$ et $m = \pm m_0$ possèdent la même énergie libre (1B). À cette température les phases peuvent coexister. À une température inférieure à T'_c , les solutions $m \neq 0$ possèdent l'énergie libre la plus basse (1C). En traversant T'_c l'aimantation saute de $m = 0$ à $m = m_0$: la transition est discontinue. Pour des températures proches de T_c le système admet des phases *métastables*. Le fait qu'il existe une barrière d'énergie entre les deux phases fait que le système peut rester quelque temps dans cet état, avant que l'instabilité se développe. Il est important de remarquer que le système, décrit par II.1-1, peut montrer deux transitions de phase, une de premier et l'autre de second ordre, en variant les deux paramètres T et Δ . Bien que notre présentation ait été motivée par un système magnétique, la discussion est valable pour n'importe quel système possédant un paramètre d'ordre, et en particulier est pertinente dans le cas d'une séparation de phase.

Points tricritiques Un point tricritique [LS84] apparaît si deux lignes de transition de phase, une de second ordre et l'autre de premier ordre, se rencontrent. Comme Griffiths [Gri66] l'a souligné, la nomenclature *tricritique* vient du fait que dans un espace des phases approprié trois lignes de transition se rencontrent au point tricritique. Considérons un modèle caractérisé par trois paramètres : la température T , le champ magnétique h et le potentiel chimique Δ . Le diagramme de phase de ce système est représenté dans la figure II-3. La ligne de transition de second ordre est nommée L_λ . La ligne de transition de premier ordre est désignée par L_τ . L'espace $\Delta - T$ est agrandi par l'introduction du champ magnétique h . Dans cette représentation il apparaît deux surfaces $L^\pm$ qui se joignent suivant la ligne L_τ . Ces surfaces sont engendrées par la ligne L_τ en variant le champ magnétique ; elles représentent la transition de phase de premier ordre à un champ magnétique non nul. Les bords des ces surfaces $B^\pm$ sont des points de transition de second ordre et le point de rencontre de ces bords $B^\pm$ avec la ligne L_λ constitue le point tricritique.

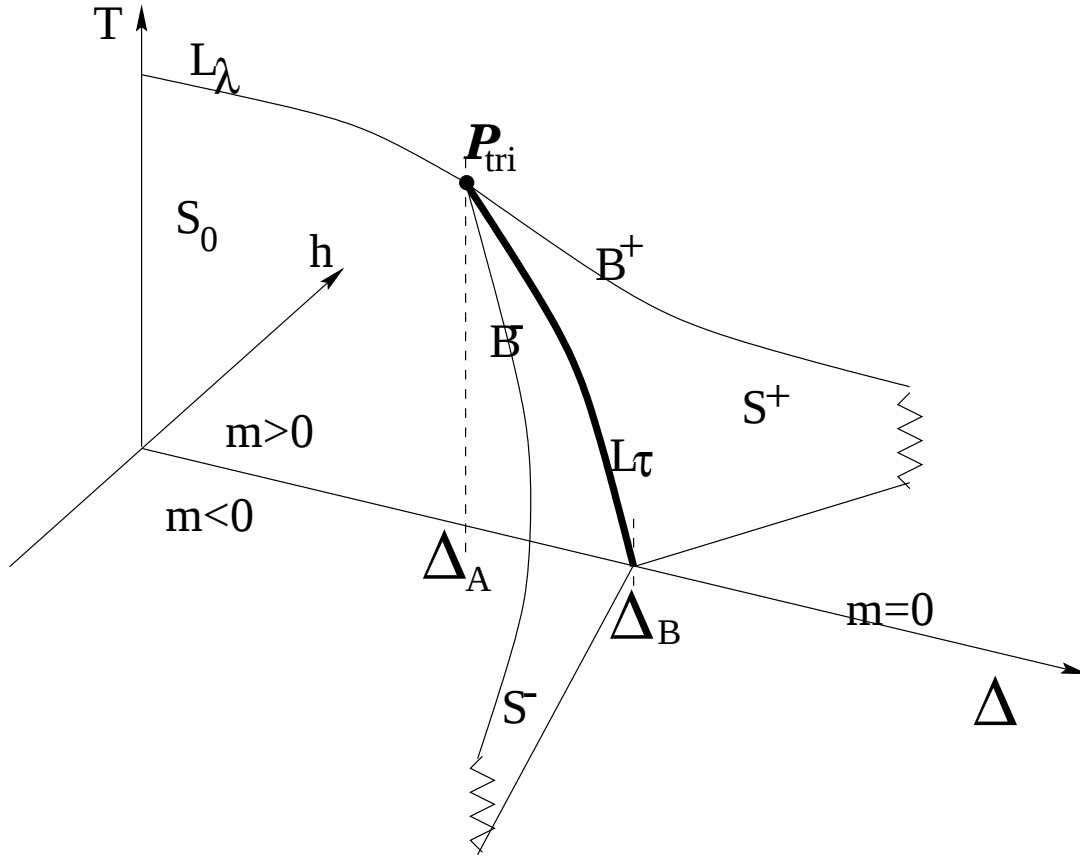


FIG. II-3: Un diagramme de phase avec un point tricritique.

Phénomène de séparation de phase Nous discutons maintenant du phénomène de séparation de phase dans le cadre d'un mélange binaire, par exemple le fondu d'un alliage de FeMn. Il est possible de mélanger les deux composantes A et B dans des proportions x quelconques à haute température. Par contre, si le mélange binaire est refroidi, il est souvent observé que les deux espèces se séparent : c'est la séparation de phase et le fondu ne forme plus un mélange homogène. La figure II-4 donne schématiquement un diagramme de phase d'un mélange binaire ; la séparation de phase est hachurée et délimitée par une courbe $T(x)$. Prenons un mélange possédant les concentrations x en A et $(1 - x)$ en B. Si on refroidit un tel mélange, par exemple en suivant la flèche dans la figure gauche, ce mélange passe en-dessous de la température $T(x)$ et se sépare en deux phases avec les concentrations $x_A(T)$ et $x_B(T)$. Ces deux phases *coexistent*. La séparation en deux phases est due au fait que la concentration totale des espèces A et B est conservée. Quand la séparation apparaît, la quantité de A et de B aux concentrations $x_A(T)$ et $x_B(T)$ est telle que le nombre total de A et B est conservé. La région hachurée dans le diagramme de phase n'est pas accessible dans le sens où un mélange à une telle concentration x et à une température T se décompose en deux phases, avec des concentrations $x_A(T)$ et $x_B(T)$. L'apparition de la séparation de phase n'est pas dû à un refroidissement trop rapide, mais vient du fait que le gain d'énergie libre en mélangeant les deux espèces n'est plus positif.

Dans la classification des transitions discutée dans le paragraphe précédent, la séparation de phase est une transition de premier ordre, bien qu'en baissant la température les changements de concen-

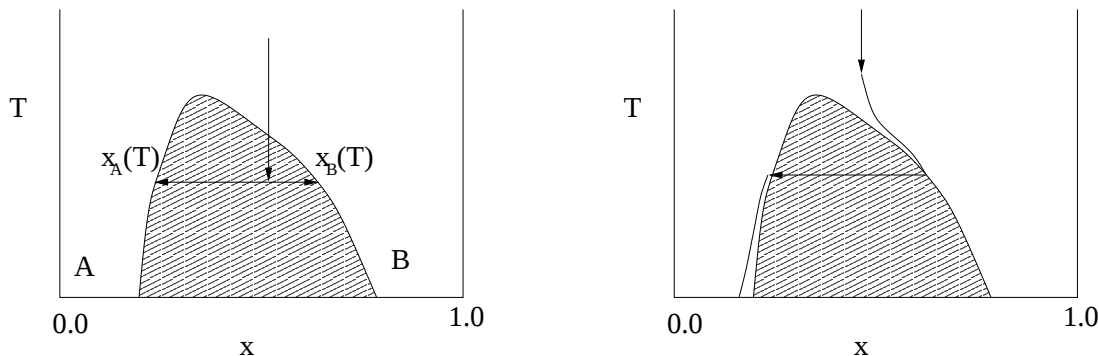


FIG. II-4: Un diagramme de phase schématique d'un mélange binaire.

trations soient continus. Ceci devient plus clair si on regarde des lignes d'un potentiel chimique $\Delta =$ constant. Dans une expérience, le potentiel chimique ne peut pas être mesuré directement ; seuls les concentrations peuvent varier. Supposons que le potentiel chimique soit variable et fixons une valeur appropriée. En baissant la température on suit une ligne de $\Delta =$ constant, comme par exemple dans la figure II-4 à droite. Pour une température $T(\Delta)$ la région de séparation de phase est atteinte. En baissant encore la température la concentration saute de la région riche en B à la région riche en A : la concentration en fonction de la température, à potentiel chimique fixe, est *discontinue*.

Vue d'ensemble Revenons aux transitions de phase. Supposons pour la suite que le système considéré montre une séparation de phase et une ligne de transition de second ordre, permettant ainsi un point tricritique. Nous discutons les différents cas en nous référant au diagramme de phase dans la figure II-3 et aux figures II-2 et II-1. Supposons que la valeur du potentiel chimique Δ soit fixée avec $\Delta < \Delta_A$. En baissant la température tout en gardant $h = 0$, on suit une ligne de potentiel chimique $\Delta =$ constant. Au-dessus de la température critique $T_c(\Delta)$ il n'y a qu'une solution $m = 0$ (0A) ; en approchant T_c l'énergie libre en fonction du paramètre d'ordre, m , devient de plus en plus plate (2A). Dès que la température est plus basse que T_c une aimantation spontanée apparaît (2B) ; la transition est de second ordre. Si on choisit une ligne de potentiel chimique constant à $\Delta_A < \Delta < \Delta_B$ dans la figure II-3, le comportement de l'énergie libre est différent : il apparaît une transition de phase du premier ordre quand on traverse la ligne L_τ . Suivons maintenant la discussion de la transition de premier ordre et faisant référence à la figure II-2. À très haute température, l'énergie libre a la forme de (0A) et à une température proche de T_c elle a la forme (1A). En baissant la température on touche la ligne L_τ et la séparation de phase apparaît (1B). L'énergie libre possède trois minima locaux, mais pour $T > T_c$ la solution $m = 0$ est celle de plus basse énergie (1A). À $T = T_c$ les trois minima sont dégénérées (1B). En baissant encore la température l'aimantation non nulle devient l'état avec la plus basse énergie libre (1C). Le dernier cas à traiter est celui d'une ligne de potentiel chimique à $\Delta > \Delta_B$. Comme il est évident sur la figure II-3, aucune transition de phase n'apparaît au-delà de Δ_B et l'aimantation spontanée s'annule pour toutes les températures. L'énergie libre a toujours la forme (0A).

Mélanges de He^3 - He^4 Dans ce paragraphe je donne un court aperçu des résultats des expériences concernant les mélanges de He^3 et He^4 . Ce système est plus compliqué que les systèmes magnétiques discutés jusqu'ici. Le mélange He^3 - He^4 présente un diagramme de phase très riche. Le diagramme de phase d'un mélange de He^3 et He^4 est représenté dans la figure II-5. Ce diagramme montre une ligne

L_λ , un point tricritique et une ligne de séparation de phase. Désignons par x la concentration de He^3

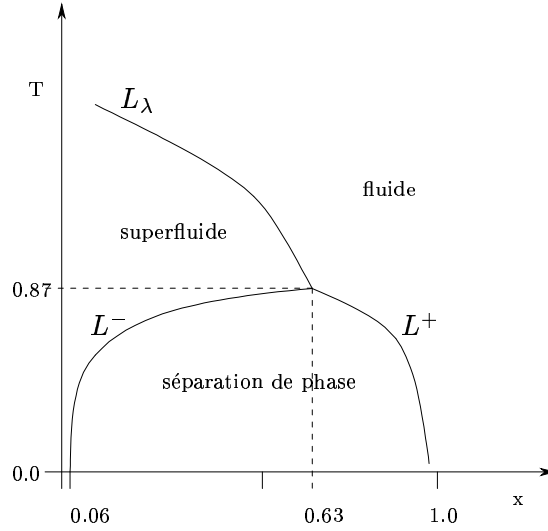


FIG. II-5: Diagramme de phase d'un mélange de He^3 et He^4 dans le plan T - x .

dans le mélange He^3 - He^4 . Les expériences révèlent les propriétés suivantes : pour une concentration inférieure à la concentration tricritique $x < 63\% = x_{\text{tri}}$ de He^3 et au-dessus de la température tricritique $T_{\text{tri}} = 0.87$, le mélange binaire de He^3 et He^4 montre une ligne L_λ c'est-à-dire une transition de phase de second ordre, entre une phase superfluide et une phase fluide normal. Pour des détails sur la superfluidité, voir par exemple [AM76], et pour des détails expérimentaux, voir [Wil67]. Si la température est baissée en-dessous de la température tricritique, une séparation de phase apparaît pour la concentration de He^3 $x_A(T) < x < x_B(T)$. Cette séparation de phase (une transition du premier ordre) crée des régions superfluides à faible concentration de He^3 , ainsi que des régions de fluide normal à grande concentration de He^3 .

b) Le modèle BEG

Je présente maintenant le modèle de Blume, Emery et Griffiths et vais discuter la provenance des différents termes d'interaction. Le modèle a été conçu afin de décrire un mélange de He^3 et He^4 . Ce modèle doit montrer une ligne de transition de second ordre normal-fluide et superfluide ainsi qu'une séparation de phase. Blume, Emery et Griffiths ont choisi de modéliser le mélange de He^3 et He^4 par un système de spins sur réseau. Leur modèle permet l'apparition d'un ordre ferro-magnétique qu'ils interprètent comme la superfluidité, cette identification étant purement phénoménologique. Néanmoins, le modèle BEG décrit assez bien le mélange de He^3 et He^4 .

Superfluidité Blume, Emery et Griffiths prennent un Hamiltonien de type d'Ising et identifient aimantation spontanée et superfluidité. Les spins avec $s = \pm 1$ représentent He^4 et leur interaction est décrit par le Hamiltonien H_M :

$$H_M = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + h \sum_i s_i. \quad (\text{II.1-2})$$

II.1 Introduction

La constante d'interaction bilinéaire positive $J > 0$ est responsable de l'ordre ferro-magnétique à basse température. Pour décrire formellement la superfluidité on introduit le paramètre d'ordre

$$m = \langle \frac{1}{N} \sum_i s_i \rangle. \quad (\text{II.1-3})$$

L'apparition de la superfluidité est indiquée par une valeur non-nulle du paramètre d'ordre $m = \langle s_i \rangle$. Dans une description plus précise le paramètre d'ordre devrait être la phase de la fonction d'onde associée au superfluide. Bien que la superfluidité soit un phénomène purement quantique, il est raisonnable d'utiliser une approche classique. On pourrait aussi se limiter à modéliser seulement la phase de la fonction d'onde ; il suffirait d'introduire des spins vectoriels, comme dans le modèle XY. Le modèle BEG a donc des déficiences au niveau de la modélisation ; la superfluidité et le magnétisme sont des phénomènes distincts. Le choix du modèle est *a posteriori* justifié par son succès. Notons aussi que dans le Hamiltonien (II.1-2) apparaît un champ magnétique ; il va de soi qu'un champ qui se couple à la phase de la fonction d'onde ne peut pas être réalisé expérimentalement.

Interaction isotopique Pour distinguer les deux espèces He^3 et He^4 , Blume, Emery et Griffiths permettent aux spins de prendre la valeur zéro. Un spin prenant la valeur $s_i = 0$ représente un atome de He^3 . Dans un mélange de He^3 et He^4 , l'apparition de la superfluidité n'est pas seulement une fonction de la température mais dépend aussi de la concentration de He^3 . Dans une phase riche en He^3 il n'y a pas de superfluidité, $m = 0$. Pour décrire la concentration des deux espèces, on introduit le paramètre d'ordre :

$$z = 1 - x = \langle \frac{1}{N} \sum_i s_i^2 \rangle. \quad (\text{II.1-4})$$

Ce deuxième paramètre d'ordre z , est la concentration de He^4 dans le mélange binaire. Il est communément appelé le moment quadrupolaire. On peut également regarder la concentration de He^3 ; le paramètre d'ordre associé est $x = 1 - z$. Nous avons vu que la concentration de He^3 affecte la superfluidité : La superfluidité lors de la séparation de phase apparaît dans la phase riche en He^4 . Pour modéliser la séparation de phase, introduisons explicitement l'effet de l'interaction isotopique. L'interaction "magnétique" est seulement présente entre les atomes d' He^4 . L'interaction isotopique entre les espèces peut être modélisée comme suit :

$$H_Q = -K_{33} \sum_{\langle ij \rangle} (1 - S_i^2)(1 - S_j^2) - K_{44} \sum_{\langle ij \rangle} S_i^2 S_j^2 - K_{34} \sum_{\langle ij \rangle} [(1 - S_i^2)S_j^2 + (1 - S_j^2)S_i^2]. \quad (\text{II.1-5})$$

Les constantes de couplages décrivent les interactions entre les différents espèces ; par exemple K_{33} décrit l'interaction des atomes d' He^3 entre eux. Pour les systèmes réels de mélange de He^3 - He^4 , l'effet des interactions entre des isotopes est faible : $H_Q = \text{constant}$.

Le modèle complet Nous présentons dans ce paragraphe le modèle complet de Blume, Emery et Griffiths. On suppose que le nombre des particules est conservé. Afin de traiter la conservation il est nécessaire d'introduire un potentiel chimique μ . Tenant compte de ces nouveaux termes, le Hamiltonien complet est donné par :

$$H = H_Q + H_I - \mu_3 N_3 - \mu_4 N_4. \quad (\text{II.1-6})$$

Blume, Emery et Griffiths ont résolu ce modèle en approximation de champ moyen. Les produits dans H_Q peuvent ainsi être développés. Le terme quadrupolaire $\sim \sum_{ij} s_i^2 s_j^2$ possède le coefficient suivant : $K \equiv K_{33} + K_{44} - 2K_{34}$. Dans un mélange de He^3 - He^4 , les couplages K_{xx} ne diffèrent guère et en conséquence $K \approx 0$. Mais l'interaction étant petite, Blume, Emery et Griffiths ont toutefois traité le cas $K \neq 0$. La présence de l'interaction isotopique donne lieu à différents phénomènes. Si $K \approx 4J$, il apparaît un point critique. Pour des valeurs de K intermédiaires, un point triple apparaît.

Les potentiels chimiques μ sont des coefficients de termes $\sim \sum_i s_i$. Des contributions identiques viennent aussi du développement de H_Q de sorte qu'il est pratique de définir $\Delta = \mu_3 - \mu_4 + 2N(K_{33} - K_{44})$. Blume, Emery et Griffiths obtiennent ainsi le Hamiltonien suivant :

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j - K \sum_{i,j} s_i^2 s_j^2 + \Delta \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i - N(NK_{33} + \mu_3) \quad (\text{II.1-7})$$

Dans la suite nous omettons le dernier terme, qui est une constante. De plus, nous supposons que l'interaction quadrupolaire est positive, $K > 0$. Ceci revient à dire qu'il y a une interaction effective attractive entre les mêmes espèces. Le cas contraire ne sera pas discuté ici, mais a été traité dans [SNA97].

Comparaison aux expériences Le modèle BEG reproduit qualitativement le diagramme de phase expérimental. La concentration tricritique prédite est

$$x_c(\text{exp}) = 0.63, \text{ à comparer avec } x_c(\text{BEG}) = 0.66. \quad (\text{II.1-8})$$

Évidemment le modèle n'est pas capable de reproduire la miscibilité finie de $z = 1 - x = 6\%$ à $T = 0$, qui est due aux effets quantiques. Un autre défaut est la prédiction que pour le diagramme de phase dans le plan $x - T$, la λ -ligne L_λ et la ligne triple L_τ^+ ont la même pente au point tricritique. Ceci peut être un artefact de l'approximation de champ moyen, mais aussi peut être lié au fait que la dimension critique inférieure pour des phénomènes tricritiques est $d_c = 3$. À $d = 3$ les corrections [VL66, WR73] pourraient être importantes.

– II.2 – Présentation du modèle BEG

Je vais d'abord exposer dans cette partie les modèles à partir desquels le modèle BEG fut constitué. Pour commencer je vais esquisser le modèle de Griffiths, puis celui de Blume et Capel. Ces modèles visent des propriétés différentes : le modèle de Griffiths fait comprendre l'apparition d'une séparation de phase et le modèle de Blume et Capel permet d'étudier un système avec une transition du premier et de second ordre, permettant ainsi l'existence d'un point tricritique. À la fin de cette section le modèle BEG sera discuté. Tous les modèles sont traités au niveau de champ moyen.

a) Le modèle de Griffiths

Griffiths [Gri67] propose un modèle pour décrire des systèmes qui possèdent une transition du premier ordre. Dans le cadre de son modèle il démontre :

- (i). qu'il faut un potentiel chimique à une valeur finie $\Delta > 0$, pour que la transition ordre-désordre apparaisse et soit du premier ordre.
- (ii). qu'il est possible de trouver une correspondance de ce modèle au modèle spin- $\frac{1}{2}$ -Ising.

II.2 Présentation du modèle BEG

Le modèle est décrit par l'Hamiltonien

$$H = -\frac{K}{2N} \sum_{i,j} s_i^2 s_j^2 + \Delta \sum_i s_i^2, \quad (\text{II.2-1})$$

le couplage quadrupolaire $K > 0$ est positif et Δ est le potentiel chimique. Les spins peuvent prendre des valeurs $s_i = 0, \pm 1$. Par conséquent le paramètre d'ordre est la concentration des espèces $s_i = \pm 1$ $x = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^2$.

Diagramme de phase L'approximation de champ moyen donne un diagramme de phase comme celui présenté dans la figure II-6. La concentration x et la température T sont les paramètres externes de ce diagramme. La ligne de transition de phase est donnée en fonction de la concentration. Le

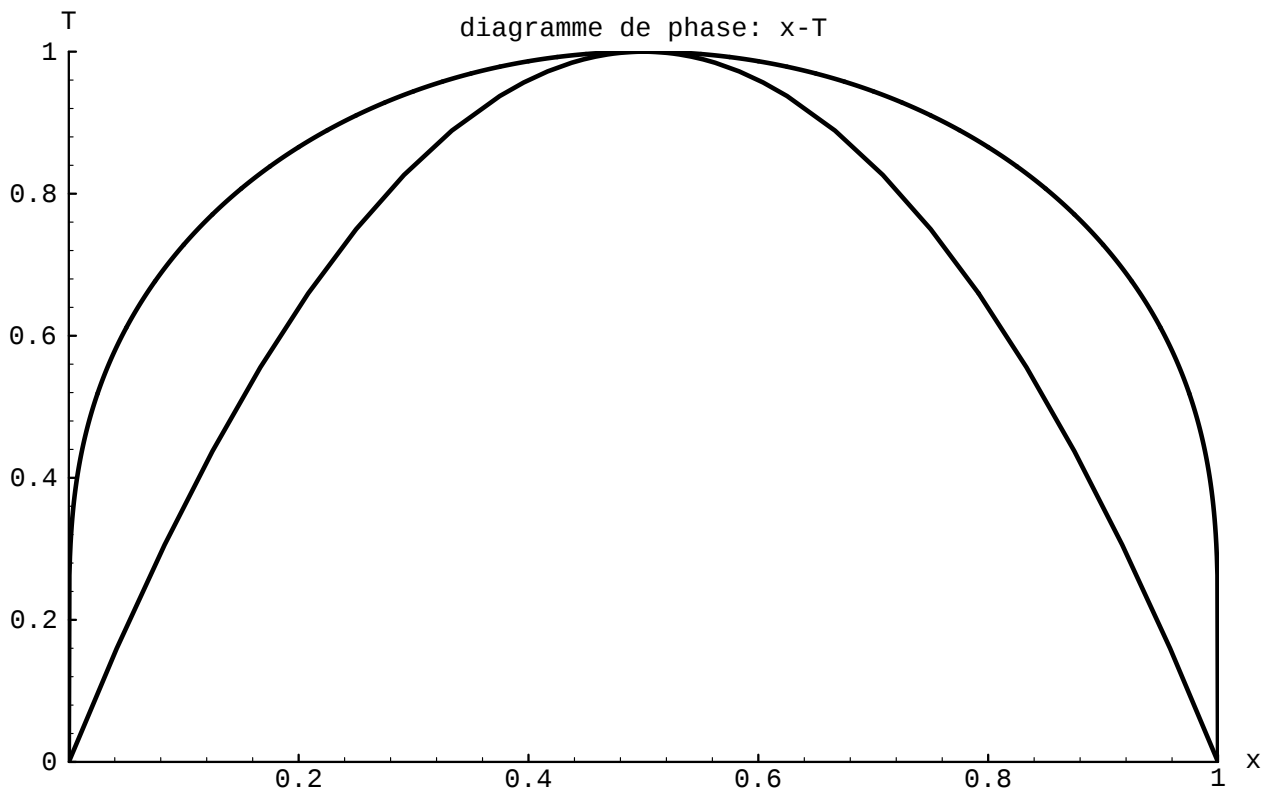


FIG. II-6: Diagramme de phase du modèle de Griffiths dans le plan T/x pour $K = 4.0$. La ligne de transition de phase comme fonction de la concentration (en haut) et la courbe limite de la région de stabilité de l'énergie de Gibbs come fonction de la concentration (en bas).

diagramme de phase montre que, pour une température suffisamment basse, le système se sépare en deux phases, une riche $x \rightarrow 1$ et l'autre dilué $x \rightarrow 0$.

D'habitude dans les expériences la concentration est choisie et le potentiel chimique n'est pas accessible. Pour la solution numérique un autre point de vue est plus pratique. Les équations de col déterminent la concentration en fonction du potentiel chimique. Pour obtenir des informations pour une concentration et une température donnée, il faut ajuster la valeur du potentiel chimique jusqu'à

ce que la solution de l'équation de col donne la concentration souhaitée. Nous avons donc choisi une valeur du potentiel et résolu les équations du col pour toutes températures. Les lignes de $\Delta = \text{constant}$ sont identiques aux isothermes du modèle de *van der Waals*.

L'approximation de champ moyen Dans l'approximation de champ moyen, on obtient pour l'énergie libre

$$f = \frac{1}{2}K(1-x)^2 - T \ln[1 + 2e^{\beta(K(1-x)-\Delta)}]. \quad (\text{II.2-2})$$

L'énergie libre dans l'approximation de champ moyen est donnée par l'équation (II.2-2) c'est-à-dire que l'énergie libre est une fonction de la concentration et du potentiel chimique : $f = f(x, \Delta)$. La minimisation donne la condition (II.2-3) qui fixe la concentration $z = 1 - x$ en fonction du potentiel chimique $x = x(\Delta)$ ou *vice versa*. Cette condition, bien qu'elle soit implicite, réduit l'énergie libre à une fonction seulement du potentiel chimique $f = f(\Delta)$. Certes les énergies dépendent toujours de la température. La transformation de Legendre par rapport au potentiel chimique donne l'énergie de Gibbs $g(z) = f(\Delta) + z\Delta$ avec $\frac{\partial g}{\partial z} = \Delta$ et $\frac{\partial f}{\partial \Delta} = -z$.

L'équation du col La minimisation de l'énergie libre par rapport à la concentration donne l'équation du col suivant

$$(1-x) = \frac{2}{2 + e^{\beta(\Delta - K(1-x))}}. \quad (\text{II.2-3})$$

Si on regarde les cas limites $T \rightarrow \infty$ ou $T \rightarrow 0$ on s'aperçoit que dans la limite de haute température il n'y a qu'une solution : $z = \frac{2}{2+1+\beta\Delta-\beta Kz} \rightarrow \frac{2}{3}$. Par contre dans la limite de basse température il y a au moins deux solutions : $z \rightarrow 0$ and $z \rightarrow 1$. Afin d'obtenir cette bifurcation à une température intermédiaire il faut un potentiel chimique avec une valeur positive finie et un couplage quadrupolaire approprié.

La ligne de transition de phase Le modèle de Griffiths est remarquable parce que la ligne de transition peut être déduite analytiquement. Afin de déduire les lignes de transition dans le diagramme de phase nous considérons le potentiel chimique. Nous utilisons les techniques standards de la thermodynamique classique. Le potentiel est, à l'aide de l'équation du col, donné par

$$\Delta = K(1-x) + T \ln\left[\frac{2x}{(1-x)}\right]. \quad (\text{II.2-4})$$

Le point critique est donné comme point d'inflexion : $\frac{\partial \Delta}{\partial x} = 0$ et $\frac{\partial^2 \Delta}{\partial x^2} = 0$ En évaluant ces équations on obtient le point critique, situé à :

$$x_c = \frac{1}{2} \quad T_c = \frac{K}{4} \quad (\text{II.2-5})$$

À la ligne de séparation de phase, les deux phases sont à équilibre. Ceci exige que $\frac{\partial \Delta}{\partial x}|_{x=x_l} = \frac{\partial \Delta}{\partial x}|_{x=x_u}$, avec x_l la basse et x_u la haute concentration. Cette condition permet de trouver une des concentrations en fonction de l'autre $x_l = x_l(x_u)$. La construction tangente des phases exige $\Delta(x_u) = \Delta(x_l) = \Delta(x_l(x_u))$. Cette égalité est valable pour deux points sur la ligne de séparation de phase à

II.2 Présentation du modèle BEG

une température donnée. Cette relation permet d'obtenir la température le long de la transition de phase en fonction de la concentration

$$T(x) = \frac{K(2x - 1)}{2 \ln \left[\frac{x}{(1-x)} \right]}. \quad (\text{II.2-6})$$

Cette ligne de transition définit la ligne de coexistence de deux phase et est reproduite dans la figure II-6. Si le système se trouve sur la ligne de coexistence, on trouve dans ce système des domaines avec la concentration x_l et également des domaines avec la concentration x_u . Le potentiel chimique sur la ligne de séparation de phase est donné par

$$\Delta(x) = K(1 - x) + \frac{K(2x - 1)}{2 \ln \left[\frac{x}{(1-x)} \right]} \ln \left[\frac{2x}{(1-x)} \right], \quad (\text{II.2-7})$$

et ceci permet de tracer le diagramme de phase $\Delta - T$. Dans la figure II-7 le diagramme de phase $\Delta - T$

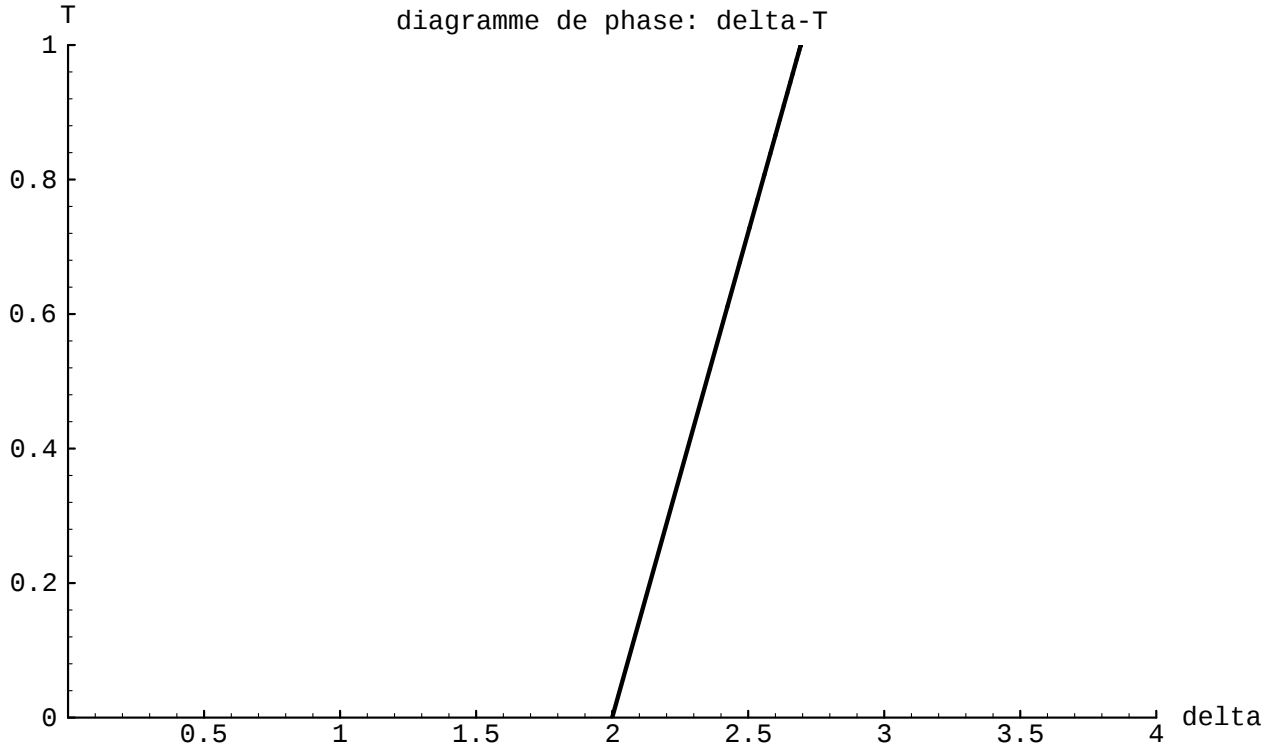


FIG. II-7: Diagramme de phase dans le plan $T - \Delta$ du modèle de Griffiths pour une valeur du couplage quadrupolaire $K = 4.0$.

est donné. Le comportement du potentiel chimique en fonction de la température semble linéaire. La formule II.2-7 donne la valeur critique du potentiel chimique :

$$\Delta_c = \frac{K}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \ln[2] \right) \approx 0.673K. \quad (\text{II.2-8})$$

De plus à la température nulle $T = 0$, le potentiel chimique vaut $\Delta_0 = \frac{K}{2}$.

Nous avons également étudié la stabilité de la phase. La phase est stable si $\frac{\partial^2 g}{\partial z^2}$ est positive. La condition que cette expression soit nulle donne $K - \frac{T}{(1-z)z} = 0$. Cette ligne est aussi reproduite dans le diagramme de phase dans le plan $x - T$ II-6 et on constate que la séparation de phase évite la phase instable.

b) Le modèle de Blume et Capel

Nous nous intéressons à un modèle avec un point tricritique afin d'étudier quels effets a l'introduction de désordre sur ce point particulier. Le modèle de Griffiths est d'importance car il permet une étude fine de la transition de phase du premier ordre, mais ne présente pas de point tricritique. Blume [Blu66] et Capel [Cap66] ont proposé un modèle pour étudier les phénomènes tricritique. Leurs modèle montre des transitions de phase du premier et du second ordre. En fait le modèle de Blume et Capel est le modèle BEG sans interaction quadrupolaire. Nous discutons ce modèle d'abord, mais nous allons introduire le désordre seulement dans le modèle BEG. En posant $K = 0$, on récupère les résultats pour le modèle de Blume et Capel. Le Hamiltonien du modèle de Blume et Capel est

$$H = -J \sum_{i,j} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i. \quad (\text{II.2-9})$$

Les spins peuvent prendre des valeurs $s_i = 0, \pm 1$. Ce modèle est une généralisation du modèle d'Ising. Si on introduit un terme supplémentaire, c'est-à-dire un terme avec un couplage quadrupolaire : $K \sum_{i=1}^N s_i^2 s_j^2$, on retrouve le modèle BEG (c).

L'approximation de champ moyen Nous allons traiter tous les modèles dans ce chapitre dans l'approximation du champ moyen. L'énergie libre du modèle de Blume et Capel dans cette approximation vaut

$$f = \frac{1}{2} J m^2 - T \ln[1 + 2 \cosh[\beta(Jm + h)] e^{-\beta\Delta}]. \quad (\text{II.2-10})$$

Dans ce modèle il existe deux paramètres d'ordre, l'aimantation spontanée M et la concentration $x = 1 - z$. Leurs valeurs sont déterminées en minimisant l'énergie libre par rapport à ces deux paramètres. On trouve :

$$M = \frac{\sinh[\beta(JM + h)]}{\frac{1}{2}e^{\beta\Delta} + \cosh[\beta(JM + h)]} \quad (\text{II.2-11})$$

$$z = 1 - x = \frac{\cosh[\beta(JM + h)]}{\frac{1}{2}e^{\beta\Delta} + \cosh[\beta(JM + h)]} \quad (\text{II.2-12})$$

Supposant que le système se trouve à une température inférieure à la tricritique T_{tri} il apparaît une transition de phase du premier ordre. C'est une séparation de phase. Nous déduisons maintenant le diagramme de phase. Pour la phase $M \neq 0$, les deux équations de col peuvent être divisées et on obtient

$$x_l = 1 - M \coth[\beta JM] \quad (\text{II.2-13})$$

II.2 Présentation du modèle BEG

L'équation de col pour l'aimantation M peut être résolue pour Δ en écrivant

$$\Delta = T \ln \left[\frac{2}{M} (\sinh[\beta JM] - M \cosh[\beta JM]) \right] \quad (\text{II.2-14})$$

Ainsi on peut calculer la concentration $x(M)$ et le potentiel chimique $\Delta(M)$ en fonction de l'aimantation spontanée M . Dans la phase paramagnétique $M = 0$, la concentration x est donné en fonction du potentiel chimique par

$$x_u = 1 - \frac{2}{2 + e^{\beta \Delta}}. \quad (\text{II.2-15})$$

Le diagramme de phase La ligne de transition de phase du premier ordre doit être calculée en égalisant les deux énergies de Gibbs $g = f - hM$ pour $M = 0$ et $M = M_o$, où M_o est une valeur finie de l'aimantation spontanée. Pour simplifier, nous regardons le cas d'un champ magnétique extérieur qui s'annule et on obtient comme condition $f(M = M_o) - f(M = 0) = 0$, ce qui devient

$$M^2 = \frac{2}{\beta J} \ln \left[\frac{\sinh[\beta JM]}{\sinh[\beta JM] - M \cosh[\beta JM] + M} \right]. \quad (\text{II.2-16})$$

On résout cette équation. La solution donne l'aimantation spontanée en fonction de la température $M(T)$ sur la courbe de séparation de phase de basse concentration $x_A < x_c$. Utilisant les équations (II.2-13) et (II.2-14) ci-dessus, la basse concentration x_A et le potentiel chimique Δ peuvent être calculés. Sachant que le potentiel chimique doit être identique sur les deux lignes de transitions du premier ordre on peut enfin à l'aide de l'équation (II.2-15) calculer la concentration $x_B > x_c$. La solution numérique est représentée dans la figure II-8. La transition de phase de second ordre est la courbe partant de $(x, T) = (0, 1)$ et se termine au point tricritique. Les lignes de la séparation de phase sont les deux courbes partant de $(x, T) = (0, 0)$ et $(x, T) = (1, 0)$ et qui rencontrent la ligne de transition de phase de second ordre au point tricritique.

Au-dessus de la température tricritique T_{tri} , la transition est de second ordre. La transition de second ordre peut être déduite en appliquant la théorie de *Landau*[LL69] Pour cela on développe l'énergie libre en puissances de l'aimantation spontanée :

$$G = G_o + AM^2 + BM^4 + CM^6 + \mathcal{O}(M^8), \quad (\text{II.2-17})$$

ou, ce qui revient au même, on regarde quand la dérivée seconde par rapport à l'aimantation s'annule. La condition pour la transition de phase de second ordre donne

$$\frac{T_\lambda(x)}{J} = 1 - x. \quad (\text{II.2-18})$$

Le point tricritique est obtenu en regardant le coefficient B dans le développement ci-dessus. Quand ce coefficient devient nul, la transition de second ordre se termine et le point tricritique apparaît. Pour des températures plus basses la transition est du premier ordre.

$$\frac{\partial^4 f}{\partial m^4} \Big|_{m=0} = 0 \Rightarrow x_{\text{tri}} = \frac{2}{3} \quad \text{et} \quad T_{\text{tri}} = \frac{1}{3}. \quad (\text{II.2-19})$$

En résolvant toutes les équations numériquement, on obtient le diagramme de phase des figures II-8 et II-9. Dans le diagramme de phase II-9 est représenté le potentiel chimique à la ligne de séparation de phase en fonction de la température. La partie de la courbe, pour une température plus haute que la température tricritique, représente la transition de phase de second ordre. La partie restante donne le potentiel chimique pour la séparation de phase.

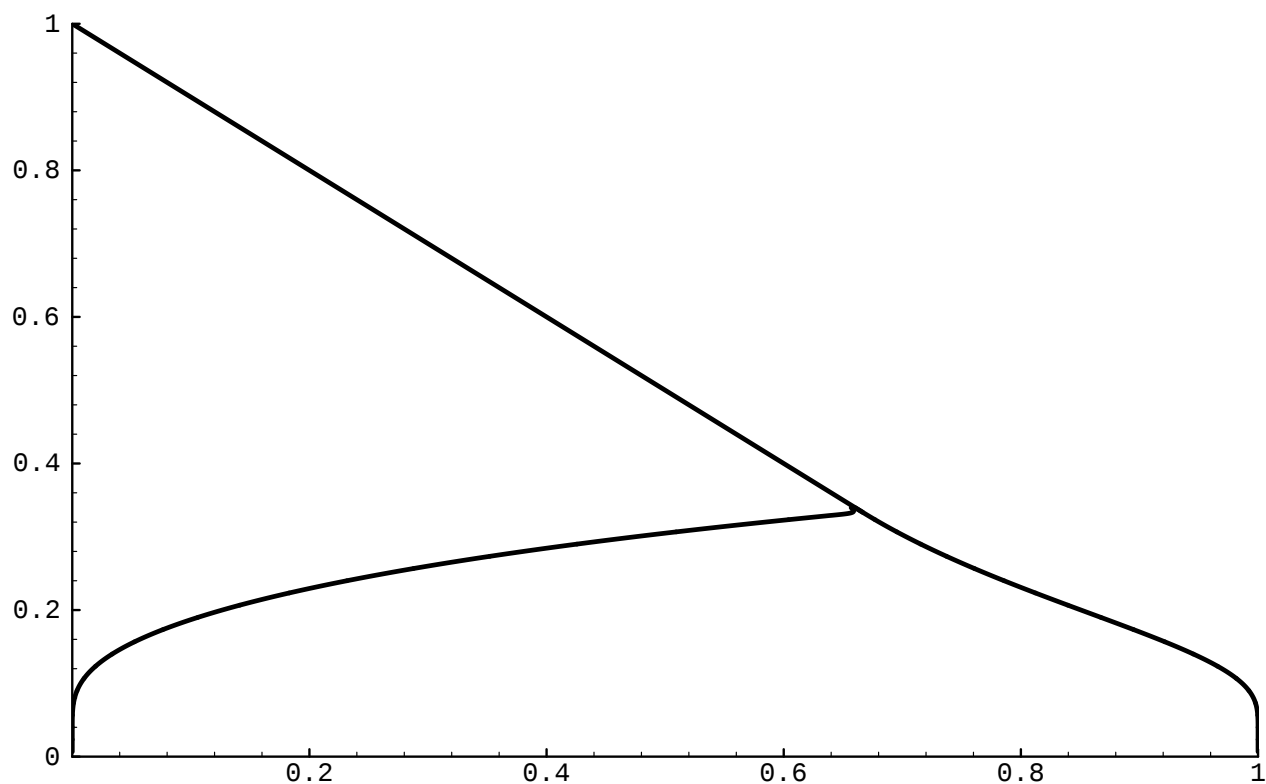


FIG. II-8: Le diagramme de phase dans le plan de concentration x de l'isotope He^3 et de température T .

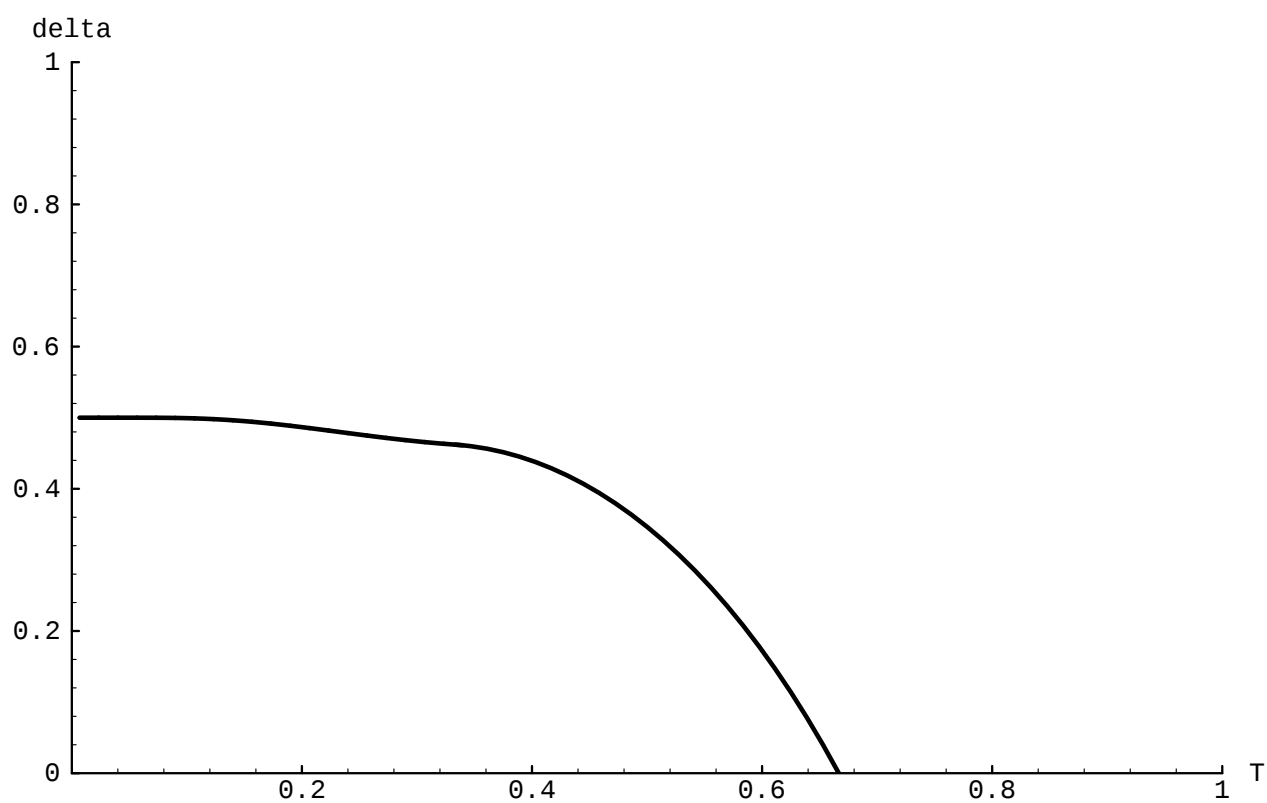


FIG. II-9: Diagramme de phase dans le plan de potentiel chimique Δ et de température T .

c) Le modèle de Blume, Emery et Griffiths

Maintenant on s'adresse au modèle BEG. Comme déjà indiqué le modèle est une généralisation du modèle de Blume et Capel en incluant une interaction quadrupolaire. L'Hamiltonien est alors obtenu à partir de celui du modèle de Blume et Capel en ajoutant un terme supplémentaire. Ce nouveau terme décrit l'interaction isotopique comme étant une interaction quadrupolaire.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - K \sum_{\langle i,j \rangle} s_i^2 s_j^2 + \Delta \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i \quad (\text{II.2-20})$$

Comme auparavant on se permet de prendre les spins les valeurs $-1, 0, 1$. Afin de déduire des quantités thermodynamiques, il est commode d'introduire la fonction de partition

$$Z = \text{tr}_{s_i=0,\pm 1} e^{-\beta H(\{s_i\})} \quad (\text{II.2-21})$$

Dans l'introduction de ce chapitre II.1 nous avons vu que le modèle BEG décrit très bien des mélanges binaires. En outre ce modèle montre, comme le modèle de Blume et Capel, un point tricritique. Pour de petites valeurs du couplage quadrupolaire K nous nous attendons à ce que le diagramme de phase soit très similaire à celui du modèle de Blume et Capel. Une différence entre les résultats pour les deux modèles va apparaître seulement pour des valeurs de K plus importantes. En effet, c'est ce que nous allons voir dans la suite. Des valeurs K négatives ne sont pas étudiées dans cette thèse, mais *cf.* [SM94, SNA97].

L'approximation de champ moyen On applique l'approximation du champ moyen, ce qui correspond à prendre le modèle avec des interactions à portée infinie. Pratiquement, ceci signifie que les sommes portent sur tous les spins sans restriction.

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j - \frac{K}{2N} \sum_{i,j} s_i^2 s_j^2 + \Delta \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i \quad (\text{II.2-22})$$

La fonction de partition s'écrit à l'aide de la transformation de *Hubbard* et *Stratonowich* sous la forme suivante

$$Z_N = \text{tr} \int \mathcal{D}m \int \mathcal{D}z e^{m \sqrt{\frac{\beta J}{N}} \sum_i s_i + z \sqrt{\frac{\beta K}{N}} \sum_i s_i^2 + \Delta \sum_i s_i^2 + h \sum_i s_i} \quad (\text{II.2-23})$$

Comme nous nous intéressons à la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, nous faisons un changement des variables permettant l'utilisation de la méthode du col. La transformation de *Hubbard* et *Stratonowich* permet de factoriser l'exponentielle :

$$Z_N = \int \frac{dm}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta J}}} \int \frac{dz}{\sqrt{\frac{2\pi}{N\beta K}}} e^{-\frac{1}{2}N\beta J m^2 - \frac{1}{2}N\beta K z^2} \prod_i^N \text{tr} e^{\beta[Jm+h)s_i + (Kz-\Delta)s_i^2]}. \quad (\text{II.2-24})$$

Maintenant il est possible de calculer la trace, ce qui donne :

$$\prod_i^N \text{tr} e^{\beta[Jm+h)s_i + (Kz-\Delta)s_i^2]} = \exp\{N \ln[1 + 2 \cosh[\beta(Jm+h)]] e^{\beta(Kz-\Delta)}\}. \quad (\text{II.2-25})$$

II.2 Présentation du modèle BEG

La fonction de partition est maintenant sous une forme qui permet d'appliquer la méthode du col ; dans la limite thermodynamique, on peut ainsi effectuer les intégrales en les remplaçant par la valeur dominante $e^{-N\Phi^*}$.

$$Z_N = {}^N\!\!\overset{\sim}{\rightarrow} e^{-N\Phi^*} \quad (\text{II.2-26})$$

L'énergie libre est définie par $\beta f = -\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log[Z_N] = \Phi^*$. La minimisation de Φ donne les équations de col suivantes :

$$\frac{\partial \Phi}{\partial m} = 0 \Rightarrow m = \frac{\sinh[\beta(Jm + h)]}{\frac{1}{2}e^{\beta(\Delta - K(1-x))} + \cosh[\beta(Jm + h)]} \quad \text{et} \quad (\text{II.2-27})$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial z} = 0 \Rightarrow z = 1 - x = \frac{\cosh[\beta(Jm + h)]}{\frac{1}{2}e^{\beta(\Delta - K(1-x))} + \cosh[\beta(Jm + h)]}. \quad (\text{II.2-28})$$

L'énergie libre est donnée par

$$f = \frac{1}{2}Jm^2 + \frac{1}{2}K(1-x)^2 - T \ln[1 + 2 \cosh[\beta(Jm + h)]e^{\beta(K(1-x) - \Delta)}] \quad (\text{II.2-29})$$

Diagramme de phase Pour déduire le diagramme de phase, on introduit z_A et z_B les concentrations de He^4 à la transition de phase. La séparation de phase divise l'espace de phase en deux sous-espaces. Dans le sous-espace à haute concentration apparaît la superfluidité. Cet sous-espace est borné par la ligne de transition à une concentration z_A . La concentration z_B est la concentration de He^4 à la ligne de transition dans l'autre sous-espace, où il y a seulement une faible concentration de He^4 . À la transition de phase, l'énergie libre pour les deux concentrations z_A et z_B doit être identique. De même pour l'énergie de Gibbs (=le potentiel chimique) pour ces deux concentrations. Dans la phase de faible concentration, l'aimantation spontanée s'annule. L'égalité de l'énergie libre donne :

$$\frac{1}{2}Jm^2 + \frac{1}{2}Kz_A^2 - T \ln[1 + 2 \cosh[\beta Jm]e^{\beta(Kz_A - \Delta)}] = \frac{1}{2}Kz_B^2 - T \ln[1 + 2e^{\beta(Kz_B - \Delta)}]. \quad (\text{II.2-30})$$

Dans la phase de faible concentration $z < z_B$ l'aimantation spontanée s'annule identiquement et on obtient de ce fait, à l'aide des équations du col, une équation déterminant le potentiel chimique

$$z_B = \frac{2}{2 + e^{\beta(Kz_B - \Delta)}} \iff \Delta(z_B) = Kz_B + T \ln\left[\frac{2}{z_B}(1 - z_B)\right]. \quad (\text{II.2-31})$$

Pour l'autre côté de la région de séparation $z > z_A$ l'aimantation spontanée ne s'annule pas et l'équation (II.2-27) reste valable. La deuxième équation de col (II.2-28) peut être réécrite pour donner une équation définissant le potentiel chimique en fonction de la concentration et de l'aimantation spontanée :

$$\Delta(z_A) = Kz_A + T \ln\left[\frac{2}{m}(\sinh[\beta(Jm + h)] - m \cosh[\beta(Jm + h)])\right]. \quad (\text{II.2-32})$$

En divisant l'équation (II.2-28) par l'équation (II.2-27) on obtient une équation donnant la concentration z_A en fonction de l'aimantation spontanée

$$z_A = m \coth[\beta Jm]. \quad (\text{II.2-33})$$

Ainsi nous avons obtenu que pour une forte concentration $z > z_A$, toutes les quantités peuvent être exprimées en fonction de l'aimantation spontanée. L'égalité des énergies libres s'écrit maintenant

$$\frac{1}{2}Jm^2 + \frac{1}{2}Km^2 \coth^2[\beta Jm] - T \ln \left[\frac{\sinh[\beta(Jm + h)]}{\sinh[\beta(Jm + h)] - m \cosh[\beta(Jm + h)]} \right] = \frac{1}{2}Kz_B^2 + T \ln[1 - z_B]. \quad (\text{II.2-34})$$

L'égalité des potentiels chimiques s'écrit :

$$KM \coth[\beta Jm] + T \ln \left[\frac{2}{m} (\sinh[\beta(Jm + h)] - m \cosh[\beta(Jm + h)]) \right] \quad (\text{II.2-35})$$

$$= Kz_B + T \ln \left[\frac{2}{z_B} (1 - z_B) \right]. \quad (\text{II.2-36})$$

Naturellement pour le cas $K = 0$ le modèle se réduit à celui de Blume-Capel. Pour des valeurs du couplage quadrupolaire non-nulle $K \neq 0$ il ne suffit pas de résoudre l'équation (II.2-16). Par contre il faut résoudre les équations (II.2-34) et (II.2-36) pour chaque température T .

Solution numérique En pratique, il est plus simple de se donner le potentiel chimique et la température et de rechercher le minimum de l'énergie libre (II.2-29) suivant une ligne à Δ constant en variant la température. En général, on trouve plusieurs minima parmi lesquels il faut sélectionner ceux qui sont minima globaux et satisfont aux équations du col (II.2-27) et (II.2-28) plus haut. Ceci nécessite seulement un algorithme de descente et non pas la solution de deux équations simultanées. En traversant la ligne de transition de phase du premier ordre il apparaît deux solutions z_A et z_B . Il s'agit alors d'une séparation de phase avec l'énergie libre ayant la même valeur pour deux concentrations et deux aimantations différentes. Nécessairement le potentiel chimique et l'énergie libre sont identiques en ces deux points.

II.2 Présentation du modèle BEG

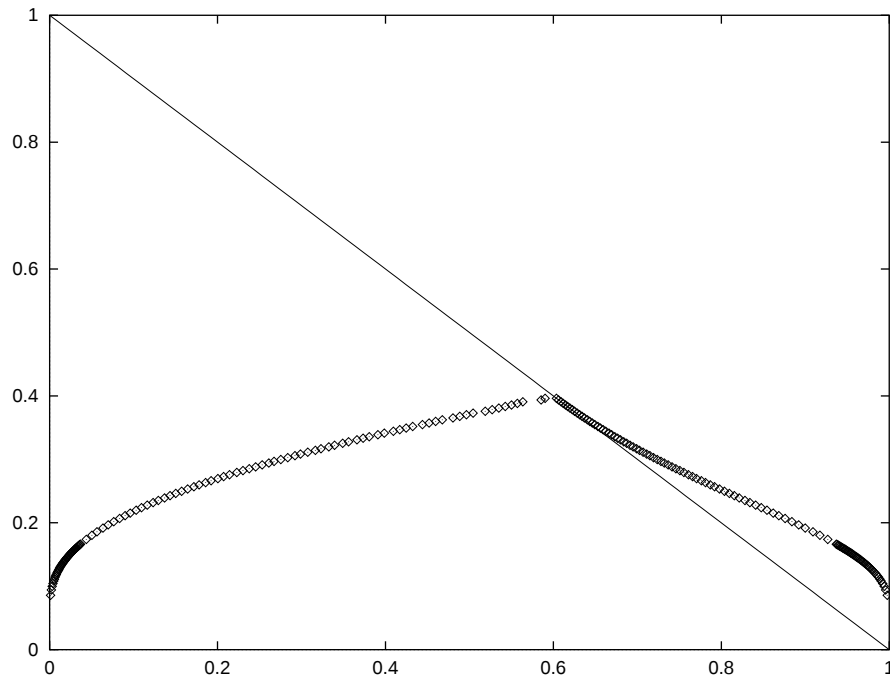


FIG. II-10: Le diagramme de phase du modèle BEG dans le plan x - T pour $K = 0.16$. Les symbols représentent la ligne de séparation de phase. La ligne de transition de second ordre est la ligne continue.

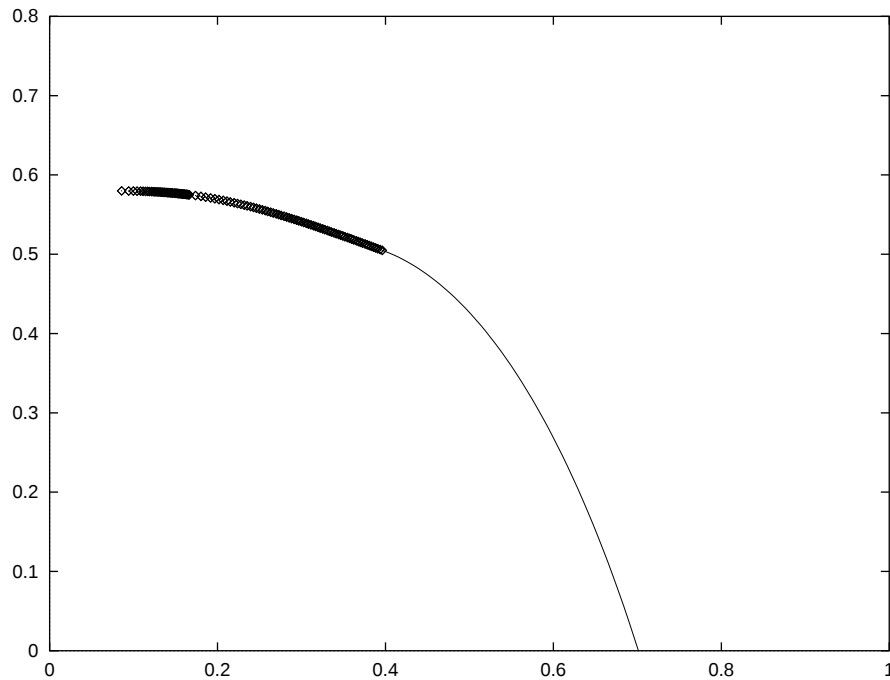


FIG. II-11: Le diagramme de phase du modèle BEG dans le plan Δ - T pour $K = 0.16$. Les symbols représentent la ligne de séparation de phase. La ligne de transition de second ordre est la ligne continue.

– II.3 – Le modèle BEG frustré

a) Le modèle BEG frustré

Dans ce paragraphe nous allons discuter le modèle de Blume, Emery et Griffiths désordonné et frustré. Notre intérêt principal pour ce modèle vient du fait qu'il décrit très bien les phénomènes tricritiques. Nous pouvons à l'aide de ce modèle étudier l'effet du désordre gelé sur des lignes de transition du premier ordre. En outre la solution, symétrique dans les répliques ou avec une brisure des répliques, peut être discutée près d'un point tricritique.

Nous allons effectuer le calcul d'abord au niveau du champ moyen en supposant de la symétrie des répliques. Déjà à ce niveau on s'aperçoit que la moyenne sur le désordre introduit une interaction quadropolaire qui dépend de la température. Le désordre est, pour ce qui suit, fixé, du type gelé. Comme nous avons discuté dans l'introduction générale, les verres de spins sont obtenu à partir d'un modèle d'Ising en introduisant des couplages qui sont dépendants du site et aléatoires. Le terme qui décrit l'interaction bilinéaire devient avec cette modification

$$J \sum_{i,j} s_i s_j \rightarrow \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j. \quad (\text{II.3-1})$$

Le Hamiltonien du modèle BEG frustré s'écrit alors :

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2 - \frac{1}{2N} K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - h \sum_i s_i. \quad (\text{II.3-2})$$

Autres extensions du modèle de Blume, Emery et Griffiths Dans l'introduction générale nous avons vu que la solution du modèle de Sherrington et Kirkpatrick exige la brisure spontanée des répliques à une infinité de pas et ceci se révèle encore plus fastidieux dans le cas présent. Afin d'avoir accès à un modèle plus facile à résoudre, nous avons étudié le modèle BEG avec une interaction à plusieurs spins. Il est connu que le modèle de Sherrington et Kirkpatrick ainsi modifié peut être résolu en effectuant seulement un pas de brisure de la symétrie des répliques [GM84]. J'expose cette approche dans l'annexe II.6. D'abord je présente le cas original de Gross et Mézard [GM84] afin qu'il soit plus facile de suivre la version à p spins du modèle BEG.

La discussion des ces résultats se fera à la fin de ce chapitre. Il sera également intéressant d'étudier des modèles où les interactions sont diluées $J = J_0$. Ceci peut être atteint avec une distribution comme suit $P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(J_{ij}) + \frac{1}{2}\delta(J - J_{ij})$. Par contre dans ce modèle n'apparaît pas l'effet de frustration. Un modèle similaire a été étudié par Berker et Falicov [FB95b] par des méthodes de groupe de renormalisation. Nous continuons à exposer le modèle BEG frustré.

Approximation de champ moyen Nous suivons l'approche de Sherrington et Kirkpatrick [SK75] qui consiste à remplacer les couplages à courte portée ($\sum_{\langle ij \rangle}$) par des couplages de portée infinie ($\sum_{ij}$). Ceci est l'approximation habituelle de champ moyen – utilisée pour les systèmes désordonnés. Comme dans le cas du modèle SK, il est nécessaire de changer l'échelle des couplages ($J \rightarrow J/\sqrt{N}$ et $J_0 \rightarrow J_0/N$), afin d'obtenir une énergie libre extensive. Afin de simplifier le calcul les couplages sont tirés d'une distribution gaussienne :

$$p(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} e^{-\frac{N}{2J^2}(J_{ij} - J_0/N)^2}. \quad (\text{II.3-3})$$

II.3 Le modèle BEG frustré

avec une moyenne $\overline{J_{ij}} = J_o/N$ et une variance $\overline{J_{ij}^2} = J^2/N$. Nous sommes confronté au problème de moyenner sur un désordre gelé. D'après ce qui a été dit dans l'introduction, *cf.* chapitre I, il faut moyenner l'énergie libre $f = \overline{F(J_{ij})/N}_{J_{ij}}$. Edwards et Anderson [EA75] ont introduit la méthode des répliques, qui consiste à utiliser l'identité $\ln[Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (Z^n - 1)$. Le nomenclature *répliques* vient du fait que Z^n est la fonction de partition de n systèmes répliqués. Les n systèmes possèdent la même réalisation du désordre. Nous désignons les systèmes répliqués par α : $s_i \rightarrow s_i^\alpha$ $\alpha = 1, \dots, n$. L'énergie se calcule comme suit

$$\beta f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\overline{Z^n} - 1). \quad (\text{II.3-4})$$

Un aperçu historique Sherrington et Kirkpatrick [SK75] ont appliqué cette technique à l'approximation de champ moyen du modèle de Edwards et Anderson. Leur calcul prédit quelques aspects de la situation réelle mais souffre d'une entropie négative à basse température. Ces auteurs échangent les deux limites $N \rightarrow \infty$ et $n \rightarrow 0$, mais van Hemmen et Palmer [vHP79] ont montré que ce n'est pas la source de l'erreur. En fait le travail de de Almeida et Thouless [dAT78] a montré que le problème est dû à l'hypothèse de la symétrie des répliques (RS). Il a fallu attendre 1979 pour obtenir un schéma de brisure de la symétrie des répliques (SRSB), qui est stable [Par80b].

La généralisation du modèle SK à des spins généraux et l'étude de l'influence d'un champ cristallin ont été d'abord effectuée par Ghatak and Sherrington [GS77]. La stabilité de la solution RS pour ce modèle modifié a été analysée par Lage et de Almeida [LdA82] et en plus grand détail par Mottishaw and Sherrington [MS85]. La solution RS a été après étudié numériquement par da Costa *et al.* [dCYS94]. Les travaux que nous venons de citer ont limité leur analyse à un modèle d'Ising des spins $\frac{1}{2}$, évidemment sans potentiel chimique, ou ils ont négliger une constante de couplage ferro-magnétique $J_0 = 0$. Le travail représente la première étude du modèle BEG désordonné et frustré. Nous allons voir que ces ingrédients sont indispensables pour modéliser un système qui montre une séparation de phase. En outre le modèle BEG nous permet d'étudier l'influence du désordre sur une telle transition. Il est possible qu'une telle transition sera supprimée ou au moins modifiée. Nous allons maintenant exposer le calcul en approximation du champ moyen et en supposant la symétrie des répliques en détail.

b) Étude par la méthode des répliques

Nous suivons de près la procédure standard pour moyenner le logarithme sur le désordre. La n -ième puissance de la fonction de partition moyenné sur le désordre, est donnée par :

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} = \text{tr} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{ij} s_i^\alpha s_i^\beta s_j^\alpha s_j^\beta + \left(\frac{\beta^2 J^2}{4N} + \frac{\beta K}{2N} \right) \sum_{\alpha} \sum_{ij} (s_i^\alpha)^2 (s_j^\alpha)^2 \right. \\ \left. + \frac{\beta J_o}{2N} \sum_{\alpha} \sum_{ij} s_i^\alpha s_j^\alpha - \beta \Delta \sum_{\alpha} \sum_i (s_i^\alpha)^2 + \beta h \sum_{\alpha} \sum_i s_i^\alpha \right\}. \end{aligned}$$

Quelques termes peuvent être linéarisé à l'aide de la transformation de *Hubbard-Stratonowich* :

$$e^{\frac{1}{2}\lambda(\sum_{\alpha} s^{\alpha})^2} = \int \mathcal{D}t e^{t\sqrt{\lambda} \sum_{\alpha} s^{\alpha}}. \quad (\text{II.3-5})$$

Définissons $\mathcal{D}t = \frac{e^{-\frac{1}{2}t^2}}{\sqrt{2\pi}}$; nous pouvons écrire pour l'énergie libre pour n répliques :

$$\begin{aligned} n\beta f_n = & \frac{1}{2}\beta J_o \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 + \frac{1}{2}\beta K \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 \\ & - \ln \left[\text{tr}_{s_{\alpha}=0,\pm 1} \int \mathcal{D}x \exp \left\{ \sum_{\alpha} [-\beta\Delta + \beta K z_{\alpha} + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z_{\alpha}] s_{\alpha}^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{\alpha} [\beta J_o m_{\alpha} + \beta h] s_{\alpha} + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} s_{\alpha} s_{\beta} \right\} \right]. \end{aligned}$$

Il faut maintenant prendre la limite $n \rightarrow 0$. En supposant que les quantités à un indice soient symétriques dans les répliques, nous trouvons :

$$\beta f_n = \frac{1}{2}\beta J_o m^2 + \frac{1}{2}\beta(K + \beta J^2)z^2 + \frac{1}{2n} \sum_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta}^2 - \frac{1}{n} \ln [\text{tr}_{s_{\alpha}=0,\pm 1} \quad \quad \quad (\text{II.3-6})$$

$$\int \mathcal{D}x \exp \left\{ \beta((K + \beta J^2)z - \Delta) \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 + \beta(J_o m + h) \sum_{\alpha} s_{\alpha} + J\beta \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} s_{\alpha} s_{\beta} \right\} \quad (\text{II.3-7})$$

En fait, cette formule se généralise facilement dans le cas où il existe un potentiel chimique. Si le potentiel chimique a une distribution gaussienne d'écart-type σ , il faut ajouter au argument de l'exponentiel le terme $+\beta\sigma x \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2$.

Le calcul sans brisure de la symétrie des répliques Afin de pousser les calculs plus loin il faut faire une hypothèse sur la forme des paramètres d'ordre. L'Ansatz le plus simple pour la matrice du paramètre d'ordre est celui d'une matrice symétrique dans les indices : $q_{\alpha\beta} = q \quad \forall \alpha \neq \beta$. Avec un tel Ansatz, l'énergie libre se simplifie considérablement :

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{2}\beta J_o m^2 + \frac{1}{2}\beta K z^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 z^2 - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^2 \\ & - \int \mathcal{D}x \int \mathcal{D}y \ln \left[1 + 2 \cosh [\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} y] e^{\beta K z - \beta \Delta + \beta \sigma x + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q} \right] \end{aligned}$$

Cette équation se réduit à celle étudié par Ghatak and Sherrington [GS77], Lage et de Almeida [LdA82] et par Mottishaw et Sherrington [MS85] si l'on met $J_o = 0$ et $K = 0$. Nous allons suivre le cas le plus général, en permettant $J_o \neq 0$ et $K \neq 0$. Il est commode d'introduire une interaction quadrupolaire effective, dépendante de la température $\kappa = K + \frac{1}{2}\beta J^2$. Pour ce qui suit nous supposons que le potentiel chimique n'est pas désordonné. Les équations de col sont les suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial m} &= J_o m - J_o \int \mathcal{D}x \frac{2 \sinh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial z} &= \kappa z - \kappa \int \mathcal{D}x \frac{2 \cosh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]} = 0 \quad (\text{II.3-8}) \\ \frac{\partial f}{\partial q} &= -\frac{1}{2}\beta J^2 q + \frac{1}{2}\beta J^2 \int \mathcal{D}x \left[\frac{2 \sinh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta J_o m + \beta h + \beta J \sqrt{q} x]} \right]^2 = 0 \end{aligned}$$

II.3 Le modèle BEG frustré

Nous allons résoudre numériquement ces équations et accepter seulement la solution qui fournit l'énergie libre la plus basse. La discussion vient après un traitement analytique plus poussé. Pour alléger la dérivation nous supposons qu'il n'y a pas de champ magnétique, $h = 0$.

Afin d'obtenir le diagramme de phase il faut calculer toutes les lignes de transitions entre les différentes phases. La difficulté majeure pour résoudre numériquement ce système d'équations (II.3–8) est qu'il faut calculer des intégrales. Les lignes de transition séparent des phases distinctes. Le paramètre d'ordre prend une valeur finie dans une phase et s'annule dans l'autre. Le long des lignes de transition de phase et dans leur voisinage, le paramètre d'ordre approprié est donc petit et permet ainsi un développement.

Il apparaît une phase verre de spins si les équations ci-dessus permettent une solution non-nulle pour le paramètre d'ordre de la phase verre de spins q et que le paramètre d'ordre de la phase ferromagnétique m s'annule identiquement. Le cas échéant le modèle BEG frustré permet aussi une phase verre de spins.

c) Les différentes phases

La phase ferro-magnétique Si on suppose un couplage ferro-magnétique J_o , qui ne s'annule pas, il existe une phase ferro-magnétique qui est décrite par l'ensemble des équations de col. Cette phase est caractérisée par $q \neq 0$ et $m \neq 0$.

La phase verre de spins La phase verre de spins est définie par $m = 0$ et simultanément $q \neq 0$. L'énergie libre s'écrit dans cette phase

$$\begin{aligned} \beta f &= \frac{1}{2}\beta\kappa z^2 - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^2 \\ &\quad - \int \mathcal{D}x \int \mathcal{D}y \ln \left[1 + 2 \cosh[\beta J \sqrt{q} y] e^{\beta K z - \beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q} \right] \end{aligned}$$

La première équation de col c'est-à-dire celle pour l'aimantation spontanée m , est identiquement satisfaite et les équations restantes deviennent

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial z} &= \kappa z - \kappa \int \mathcal{D}y g_z(y) = 0, \text{ où } g_z(y) = \frac{\cosh[\beta J \sqrt{q} y]}{\frac{1}{2}e^{\beta(\Delta - \kappa z) + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q} + \cosh[\beta J \sqrt{q} y]} \\ \frac{\partial f}{\partial q} &= -\frac{1}{2}\beta J^2 q + \frac{1}{2}\beta J^2 \int \mathcal{D}y [g_q(y)]^2 = 0, \text{ où } g_q(y) = \frac{\sinh[\beta J \sqrt{q} y]}{\frac{1}{2}e^{\beta(\Delta - \kappa z) + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q} + \cosh[\beta J \sqrt{q} y]}. \end{aligned}$$

La phase paramagnétique Dans la phase paramagnétique tous les paramètres d'ordre magnétiques, $m = 0$ et $q = 0$, s'annulent. Une conséquence intéressante est que l'énergie libre et l'équation du col restante sont identiques au cas pur.

$$f = \frac{1}{2}\kappa z^2 - T \int \mathcal{D}y \ln \left[1 + 2e^{\beta(kappa z - \Delta)} \right], \quad (\text{II.3--9})$$

où $\kappa = K + \frac{1}{2}\beta J^2$. L'équation suivante est bien celle qui décrit la concentration en fonction de la température et le potentiel chimique.

$$\frac{\partial f}{\partial z} = \kappa z - \kappa \frac{2}{e^{\beta(\Delta - \kappa z)} + 2} = 0 \quad (\text{II.3--10})$$

Transitions entre les phases Nous avons vu que les phases sont caractérisées par la validité des certaines simplifications, mais cette caractérisation n'est pas suffisamment explicite afin qu'on puisse en déduire le diagramme de phase. Pour déduire un tel diagramme, il est plus facile d'obtenir les équations ou conditions qui décrivent les lignes de transitions. Comme dans les travaux précédents [dAT78, LdA82], nous allons maintenant analyser la stabilité de la solution dans chacune des phases et ainsi obtenir les lignes de transition.

Analyse de la stabilité Le modèle BEG frustré mérite des études formelles plus détaillées car c'est un modèle avec trois paramètres d'ordres $q_{\alpha\beta}, m_{\alpha}, z_{\alpha}$. En conséquence, il faut diagonaliser la hessienne dans un espace plus grand.

Les lignes de transition sont définies comme des lignes de limite de la stabilité de la solution décrivant la phase. Il faut alors déterminer la hessienne et les valeurs propres. La stabilité de la solution dans n'importe quelle phase demande que les valeurs propres de la hessienne soient positives. La concentration z n'est pas un paramètre d'ordre magnétique mais elle cause la séparation de phase et doit alors être incluses dans l'analyse de stabilité. La hessienne a la forme

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} U & V & W & X & Y & Z \\ & U & & W & & Y \\ & & A & B & C & D \\ & & & A & & C \\ & & & & P & Q & R \\ & & & & & P & Q \\ & & & & & & P \end{pmatrix}, \quad (\text{II.3-11})$$

les entrées $A, \dots, Z$ étant donné dans l'annexe II.6. Pour les détails de la construction des vecteurs propres et des valeurs propres associées, je renvoie le lecteur à l'annexe II.6. Les valeurs propres se divisent en trois famille [BM78], comme c'est le cas pour les vecteurs propres : *longitudinal*, *longitudinal anomalous* et *replicon*. Les expressions pour les deux premières valeurs propres, *longitudinal* et *longitudinal anomalous*, sont trop encombrantes et elles sont données dans l'annexe II.6. Mais la troisième valeur propre est plus simple et est donné par

$$\lambda_R = P - 2Q + R = \beta^2 J^2 [1 - \beta^2 J^2 (s - 2v + w)] \quad (\text{II.3-12})$$

La dérivation de cette valeur propre se trouve également dans l'annexe II.6. De cette manière nous avons atteint notre but de diagonaliser la hessienne et de trouver les valeurs propres. En principe il faut maintenant chercher les lignes où un ou plusieurs valeurs propres s'annulent et ces lignes donneront la ligne de transition.

La transition entre la phase paramagnétique et la phase verre de spins Proche à la ligne de transition entre la phase paramagnétique et la phase verre de spins le paramètre d'ordre est petit $q \ll 1$, c'est-à-dire que les intégrales peuvent être évalué en développant g_q et g_z par rapport à q . L'équation de col pour q donne

$$0 = \beta^7 J^8 \delta^2 \left(-\delta + 1/12 + \frac{15 \delta^2}{4} \right) q^3 - \beta^5 J^6 q^2 \delta^3 + \frac{\beta J^2 (\beta^2 J^2 \delta^2 - 1) q}{2} + \mathcal{O}(q^4) \quad (\text{II.3-13})$$

Le coefficient de l'ordre le plus bas s'annule à la ligne défini par

$$T = J\delta, \text{ où } \delta = \frac{2}{e^{\beta(\Delta - \kappa z)} + 2}. \quad (\text{II.3-14})$$

II.3 Le modèle BEG frustré

Cette équation est presque identique à l'équation du modèle pure, mais avec la différence qu'ici le couplage quadrupolaire est remplacé par le couplage effectif et dépend ainsi de la température. L'équation pour z se lit comme suit

$$0 = \kappa z - \kappa \delta + \frac{1}{2} \beta^4 J^4 q^2 \delta^2 (1 - \delta). \quad (\text{II.3-15})$$

Pour une valeur nulle du paramètre d'ordre de la phase verre de spins q , l'équation devient l'équation du col du modèle pur, avec une petite modification au niveau d'interaction quadrupolaire.

Les cas limites Nécessairement le modèle présent se réduit au modèle pur si la largeur de la distribution du couplage bilinéaire J tend vers zéro. Par contre si la moyenne de la distribution c'est-à-dire le couplage ferro-magnétique J_o , s'annule, on est ramené au modèle de Ghatak and Sherrington [GS77], avec une petite modification concernant l'introduction d'une interaction quadrupolaire.

d) Au-delà de la symétrie des répliques

Afin de surmonter des problèmes posés par une solution instable on pourrait suivre le schéma de Parisi pour briser la symétrie des répliques. Ce problème est adressé dans le paragraphe présent. Nous utilisons le schéma de brisure proposé par Parisi [Par80b]. Les termes concernés peuvent s'écrire comme :

$$\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 = nq_2^2 + n(r-1)q_1^2 + n(n-r)q_0^2 = n(r-1)q_1^2 - nrq_0^2 + \mathcal{O}(n^2), \quad (\text{II.3-16})$$

où la dernière égalité vient du fait qu'ici $q_2 = 0$. Le deuxième terme à modifier dans le schéma de brisure de la symétrie des répliques à un pas est

$$\sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} s_\alpha s_\beta = (q_2 - q_1) \sum_{\alpha} s_\alpha^2 + (q_1 - q_0) \left[\left(\sum_{\alpha_1} s_{\alpha_1} \right)^2 + \cdots + \left(\sum_{\alpha_p} s_{\alpha_p} \right)^2 \right] + q_0 \left(\sum_{\alpha} s_{\alpha} \right)^2. \quad (\text{II.3-17})$$

Le paramètre m définit la sous-division de la matrice $q_{\alpha\beta}$ et ne possède aucune signification physique. Nous avons défini $p = \frac{n}{m}$. L'énergie libre peut maintenant s'écrire comme :

$$\begin{aligned} n\beta f_n = & \frac{1}{2} \beta J_o n m^2 + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 n z^2 + \frac{1}{2} \beta K n z^2 + \frac{1}{4} \beta^2 J^2 n (m-1) q_1^2 - \frac{1}{4} \beta^2 J^2 n m q_0^2 \\ & - \ln \left[\text{tr}_{s_\alpha=0,\pm 1} \exp \left\{ \sum_{\alpha} [-\beta \Delta + \beta K z_\alpha + \frac{1}{2} \beta^2 J^2 z_\alpha] s_\alpha^2 + \sum_{\alpha} [\beta J_o m_\alpha + \beta h] s_\alpha - \frac{1}{2} \beta^2 J^2 q_1 \sum_{\alpha} s_\alpha^2 \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{2} \beta^2 J^2 (q_1 - q_0) \left[\left(\sum_{\alpha_1} s_{\alpha_1} \right)^2 + \cdots + \left(\sum_{\alpha_p} s_{\alpha_p} \right)^2 \right] + \frac{1}{2} \beta^2 J^2 q_0 \left(\sum_{\alpha} s_{\alpha} \right)^2 \right\} \right]. \end{aligned}$$

De nouveau, la linéarisation du carré, après complétation permet de factoriser l'intégrale en p facteurs :

$$\begin{aligned} \beta f_n = & \frac{1}{2}\beta J_o n m^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 n z^2 + \frac{1}{2}\beta K n z^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 n (m-1) q_1^2 - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 n m q_0^2 \\ & - \ln \left[\int \mathcal{D}u \left[\text{tr}_{s_\alpha=0,\pm 1} \exp \left\{ \sum_{\alpha_i} [-\beta\Delta + \beta K z_\alpha + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z_\alpha] s_\alpha^2 + \sum_{\alpha_i} [\beta J_o m_\alpha + \beta h] s_{\alpha_i} \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q_1 \sum_{\alpha} s_\alpha^2 + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 (q_1 - q_0) \left(\sum_{\alpha_i} s_{\alpha_i} \right)^2 + \beta J u \sqrt{q_0} \sum_{\alpha_i} s_{\alpha_i} \right\} \right]^p \right]. \end{aligned}$$

On répète la linéarisation pour les sommes partielles et on obtient dans la limite $n \rightarrow 0$ l'énergie libre sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{2}\beta J_o m^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 z^2 + \frac{1}{2}\beta K z^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 (r-1) q_1^2 - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 r q_0^2 \\ & - \frac{1}{r} \int \mathcal{D}u \ln \left[\int \mathcal{D}v \left[1 + 2 \cosh[\beta(J_o m + h + Jv\sqrt{(q_1 - q_0)} + Ju\sqrt{q_0})] \right. \right. \\ & \left. \left. \exp \left\{ -\beta\Delta + \beta K z + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q_1 \right\} \right]^r \right]. \end{aligned}$$

Le schéma de brisure à un pas introduit deux nouveaux paramètres et ainsi deux équations du col supplémentaires. D'abord le paramètre de sous-division m est supposé être un paramètre réel décrivant la forme de la matrice, mais cette signification est perdue dans la limite $n \rightarrow 0$. Dès maintenant nous le regardons comme un paramètre libre à ajuster pour minimiser l'énergie libre.

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial m} &= J_o m - J_o \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v 2 \sinh[\Omega] \exp\{\Gamma\} \Phi^{r-1}}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right] \\ \frac{\partial f}{\partial z} &= \kappa z - \kappa \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v 2 \cosh[\Omega] \exp\{\Gamma\} \Phi^{r-1}}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right] \\ \frac{\partial f}{\partial r} &= \frac{1}{4}\beta J^2 (q_1^2 - q_0^2) + \frac{1}{r^2} \int \mathcal{D}u \ln \left[\int \mathcal{D}v \Phi^r \right] - \frac{1}{r} \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v 2 \sinh[\Omega] \exp\{\Gamma\} \Phi^r \ln \Phi}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right] \\ \frac{\partial f}{\partial q_0} &= -\frac{1}{2}\beta J^2 r q_0 - \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v 2 \sinh[\Omega] \exp\{\Gamma\} \left[\frac{Ju}{2\sqrt{q_0}} - \frac{Jv}{2\sqrt{q_1 - q_0}} \right] \Phi^{r-1}}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right] \\ \frac{\partial f}{\partial q_1} &= \frac{1}{2}\beta J^2 (r-1) q_1 - \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v \exp\{\Gamma\} \left[2 \sinh[\Omega] \frac{Jv}{2\sqrt{q_1 - q_0}} - 2 \cosh[\Omega] \frac{1}{2}\beta J^2 \right] \Phi^{r-1}}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right] \end{aligned}$$

La dernière équation peut être simplifiée par l'intégration partielle et donne :

$$\frac{\partial f}{\partial q_1} = \frac{1}{2}\beta J^2 (r-1) q_1 - \int \mathcal{D}u \left[\frac{\int \mathcal{D}v (2 \sinh[\Omega] \exp\{\Gamma\})^2 (r-1) \Phi^{r-2}}{\int \mathcal{D}v \Phi^r} \right]. \quad (\text{II.3-18})$$

Dans les équations ci-dessus nous avons utilisé les abréviations suivantes :

$$\begin{aligned} \Omega &= \beta(J_o m + h + Jv\sqrt{(q_1 - q_0)} + Ju\sqrt{q_0}) \\ \Gamma &= \beta\Delta - \beta K z - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q_1 \\ \Phi &= [1 + 2 \cosh[\Omega] \exp\{\Gamma\}] \end{aligned}$$

II.3 Le modèle BEG frustré

Le modèle BEG en formalisme de Parisi Afin d'aller au-delà de la brisure de la symétrie des répliques à un pas, il est plus facile d'utiliser le formalisme et l'algèbre des matrices de Parisi [Par80b]. Ce développement n'est valable qu'autour de la température de transition et la théorie développée dans le cadre des répliques s'applique à des transitions de second ordre ; il est alors possible que l'analyse des transitions du premier ordre ne puisse pas être effectué. Néanmoins nous donnons ici l'énergie libre après avoir effectué la brisure à un nombre de pas infini.

$$f = \frac{1}{2}r^2 + \frac{1}{2}t^2 + \frac{1}{2}J^2\beta^2\frac{1}{n}\sum_{\alpha\beta}q_{\alpha\beta}^2 - \frac{1}{n}\ln[3^n + n23^{n-1}\kappa + n\gamma^23^{n-1} + J^2\beta^23^{n-2}2^2\sum_{\alpha\beta}q_{\alpha\beta}^2 + \frac{1}{6}J^3\beta^33^{n-3}2^6\text{tr } q^3 \dots]$$

Cette formule a été obtenue en utilisant par exemple :

$$-\frac{1}{2}\frac{1}{n}\sum_{\alpha\beta}q_{\alpha\beta}^2 \rightarrow \frac{1}{2}\int q(x)^2 \mathbf{d} x. \quad (\text{II.3-19})$$

L'équation d'état, qui substitue une équation du col, est donné par :

$$\frac{\delta f[q(x)]}{\delta q(x)} = 0. \quad (\text{II.3-20})$$

En suivant Parisi, la dérivation de $q(x)$ par rapport au paramètre x donne une équation qui détermine la fonction $q(x)$. Il est sous-entendu que $q(x; T)$ possède une dépendance implicite à la température. Avec l'équation pour $q(x)$, la valeur de $q(x)$ à une température donnée peut être calculée. Ainsi les intégrales peuvent être effectuées et on obtient une énergie libre purement algébrique. Les équations de col donnent les valeurs pour l'aimantation spontanée et la concentration dépendante de la température. Nous n'avons pas d'avantage poursuivi cette approche.

– II.4 – Le modèle BEG avec potentiel chimique désordonné

L'introduction du désordre au niveau du potentiel chimique peut être motivé comme suit. Le modèle BEG décrit des mélanges binaires, par exemple un mélange de He^3 et He^4 . Si l'on étudie ce mélange, étant dans un matériau poreux, il apparaît une interaction avec la surface. La distance entre la surface et l'atome i est aléatoire de sorte que l'atome subisse une interaction également aléatoire. L'introduction d'un potentiel chimique désordonné dans le modèle BEG décrit un mélange de He^3 et He^4 dans un matériau poreux. Un tel matériau sont par exemple des aérogels [MG95]. Des tels systèmes ont été déjà étudiés [SMCB94] [MSC⁺91] [SCCB93] [MCBB94] [Ber91, Ber93], mais le désordre a souvent été tiré d'une distribution bimodale. Ici nous allons traiter le cas d'une distribution gaussienne. D'abord nous considérons l'approximation *recuit* et par la suite nous présentons le calcul à l'aide de la méthode des répliques.

Le modèle BEG avec désordre du type *recuit* Dans l'approximation *recuit* il est possible d'intégrer l'énergie libre explicitement sur le désordre

$$f = \frac{J}{2}m^2 + \frac{K}{2}(1-x)^2 - \frac{1}{\beta} \ln \left[1 + e^{\beta[K(1-x) - \Delta_o + \frac{1}{2}\beta\sigma^2]} 2\cosh[\beta(Jm + h)] \right] \quad (\text{II.4-1})$$

Les équations obtenues sont de la même forme que les équations obtenues dans le cas pur, mais il faut remplacer Δ par $\Delta \rightarrow \Delta_o + \frac{1}{2}\beta\sigma^2$. L'équation qui résulte de l'égalité de l'énergie libre devient finalement

$$\Delta_0 = \frac{\sigma^2}{2T} + T \log \left[\frac{2}{M} (\sinh[\beta JM] - M \cosh[\beta JM]) \right] \quad (\text{II.4-2})$$

Le potentiel chimique dans le cas non désordonné est remplacé ici par un potentiel effectif. La largeur de la distribution a été choisie fixe telle que le potentiel Δ_0 soit variable. Par conséquence le diagramme de phase dans le plan $x - T$, comme le montre la figure II-12, n'est pas modifié. Mais le diagramme

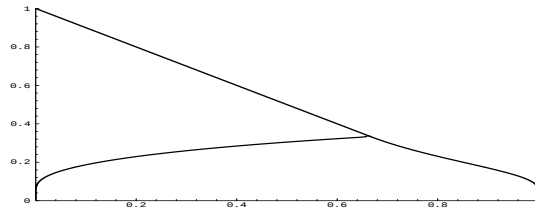


FIG. II-12: Le diagramme de phase du modèle de Blume, Emery et Griffiths avec un couplage quadrupolaire $K = 0$ et du faible désordre ($\sigma = 0.5$) dans le cas *recuit* : la concentration x du He^3 isotope en fonction de la température.

représentant le potentiel chimique Δ en fonction de la température T sera différent. Ceci est montré dans la figure II-13. Le potentiel chimique Δ_0 doit compenser la contribution du terme $1/2\beta\sigma^2$.

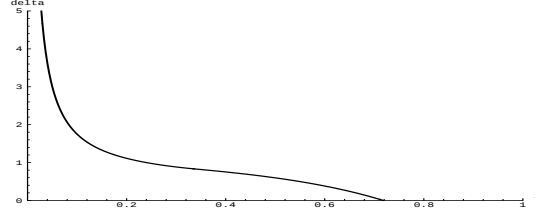


FIG. II-13: Le diagramme de phase dans le cas recuit : la température en fonction du potentiel chimique en cas de faible désordre ($\sigma = 0.5$).

Le modèle BEG avec potentiel chimique désordonné Dans ce paragraphe je vais étudier l'influence du désordre sur la ligne de la transition de phase de deuxième ordre. Considérons le modèle BEG avec désordre gelé au niveau du potentiel chimique $\Delta \rightarrow \Delta_i$, $i = 1, \dots, N$, c'est-à-dire l'Hamiltonien s'écrit :

$$H = -\frac{J}{2N} \sum_{i,j} s_i s_j - \frac{K}{2N} \sum_{i,j} s_i^2 s_j^2 + \sum_i \Delta_i s_i^2 - h \sum_i s_i \quad (\text{II.4-3})$$

Il y a plusieurs façon d'introduire le désordre. Nous avons choisi ici un potentiel chimique gaussien. Supposons que les Δ_i sont distribués selon une probabilité gaussienne.

$$p(\Delta_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{(\Delta_i - \Delta_o)^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (\text{II.4-4})$$

En suivant Schneider et Pytte [SP76] nous utilisons le formalisme des répliques $\ln[Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{Z^n - 1}{n}$. La moyenne s'effectue sur le désordre et l'énergie libre est donnée par :

$$f = \frac{J}{2} m^2 + \frac{K}{2} (1-x)^2 - \frac{1}{\beta} \int \mathcal{D} y \ln \left[1 + e^{\beta[K(1-x) - \Delta_o + \sigma y]} 2 \cosh[\beta(Jm + h)] \right] \quad (\text{II.4-5})$$

L'énergie libre peut être obtenue en utilisant le théorème limite centrale au lieu de la technique des répliques. L'énergie libre s'écrit :

$$f = \frac{1}{2} J m^2 + \frac{1}{2} K (1-x)^2 - T \int \mathbf{d} \Delta p(\Delta) \ln \left[1 + e^{\beta[K(1-x) - \Delta]} 2 \cosh[\beta(Jm + h)] \right]. \quad (\text{II.4-6})$$

Afin qu'il y ait une transition du premier ordre dans le cas non désordonné il faut un potentiel chimique Δ non nul [Gri67]. Dans le cas désordonné, on s'attend également à ce qu'une moyenne Δ_o non nulle soit nécessaire. Les équations du col fixent les valeurs des paramètres d'ordre, l'aimantation spontanée

$$m = \int \mathcal{D} y \frac{2 \sinh[\beta(Jm + h)]}{\left[e^{-\beta[K(1-x) - \Delta_o + \sigma y]} + 2 \cosh[\beta(Jm + h)] \right]} \quad (\text{II.4-7})$$

et la concentration de He^4

$$1 - x = \int \mathcal{D} y \frac{2 \cosh[\beta(Jm + h)]}{[e^{\beta[K(1-x) - \Delta_o + \sigma y]} + 2 \cosh[\beta(Jm + h)]]}. \quad (\text{II.4-8})$$

Pour analyser la transition de second ordre il faut trouver les concentrations et les aimantations spontanées qui donnent la même énergie libre. Sachant que l'aimantation spontanée s'annule dans la phase riche en He^3 on peut établir une équation supplémentaire. L'égalité des énergies libres pour une aimantation $m = 0$ et $m = m_0$ donne, si on suppose pour simplifier $K = 0$, l'équation suivante

$$m_0^2 = \frac{2T}{J} \int \mathcal{D} y \ln \left[\frac{1 + e^{\beta[-\Delta_o + \sigma y]} 2 \cosh[\beta(Jm_0 + h)]}{1 + e^{\beta[-\Delta_o + \sigma y]} 2} \right]. \quad (\text{II.4-9})$$

Dans la suite nous supposons en outre que le champ magnétique s'annule $h = 0$. Ces trois équations déterminent les inconnues m, Δ_o, x en fonction de la température T . Ainsi nous pouvons calculer la concentration dans la phase superfluide ou dans la phase normal-fluide en-dessous du point tricritique. Pour le calcul on considère σ , ainsi que le couplage J , constant.

La ligne de transition de deuxième ordre Nous nous intéressons maintenant à ligne de second ordre. Nous supposons que la constante de couplage quadrupolaire s'annule. La ligne de transition de deuxième ordre se termine dans le cas non-désordonné sur la ligne de séparation de phase. La ligne elle-même est définie par l'annulation de la deuxième dérivée de l'énergie libre par rapport à l'aimantation spontanée. La transition change son caractère quand le quatrième dérivée change de signe. Les dérivées impaires s'annulent due à la symétrie du Hamiltonien. Un développement par rapport à l'aimantation spontanée du potentiel de Gibbs donne :

$$G = G_o + Am^2 + Bm^4 + Cm^6 + \dots \quad (\text{II.4-10})$$

En imposant que la deuxième dérivée $\sim A$ s'annule, on obtient la ligne de transition de phase de second ordre.

$$\frac{\partial^2 f}{\partial m^2} \Big|_{m=0} = J - 2T\beta^2 J^2 \int \mathcal{D} y \frac{1}{e^{\beta(\Delta_o - K(1-x) - \sigma y)} + 2} = 0. \quad (\text{II.4-11})$$

Ceci peut être récrit, en utilisant la deuxième équation du col long de la ligne de transition $\frac{\partial f}{\partial(1-x)} \Big|_{m=0} = 0$ en donnant une équation pour cette ligne :

$$\frac{T(x)}{J} = 1 - x \quad (\text{II.4-12})$$

Cette ligne est identique à celle trouvée dans le modèle BEG. Pour déterminer le point tricritique il faut trouver le zéro de la quatrième dérivée $\sim B$. Elle est donnée par

$$\frac{\partial^4 f}{\partial m^4} \Big|_{m=0} = 0 \Rightarrow \int \mathcal{D} y \frac{e^{\beta(\Delta_o - K(1-x) - \sigma y)} - 4}{[e^{\beta(\Delta_o - K(1-x) - \sigma y)} + 2]^2} \quad (\text{II.4-13})$$

Comme le point tricritique se trouve sur la ligne de transition de phase de second ordre, il est possible de simplifier l'expression précédente. Dans la suite nous supposons que la valeur de couplage est $J = 1$. La condition pour un point tricritique peut s'écrire en utilisant $\beta = \frac{1}{1-x}$ comme

$$\chi \equiv \int \mathcal{D} y \frac{e^{-\frac{\sigma y}{1-x}} - 2\frac{1-x}{x}}{[e^{-\frac{\sigma y}{1-x}} + \frac{1}{x} - 1]^2} = 0. \quad (\text{II.4-14})$$

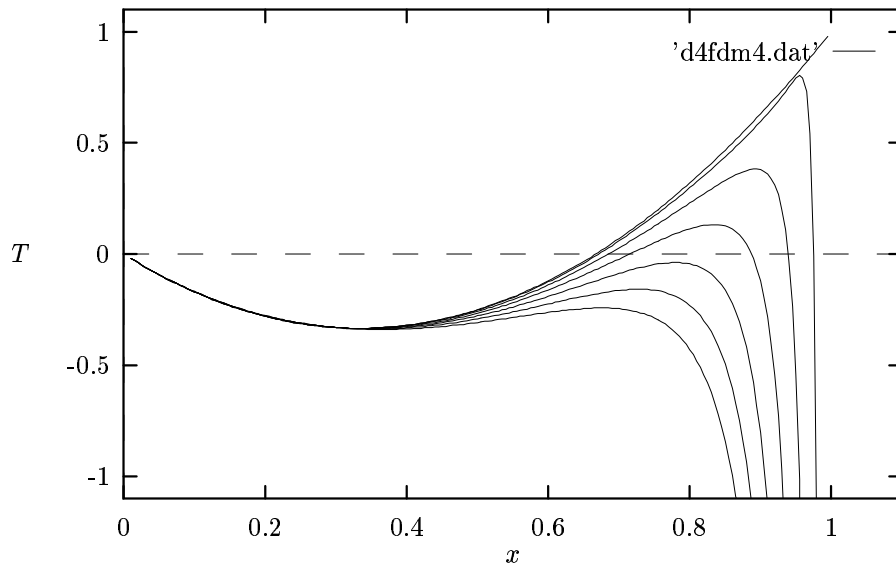


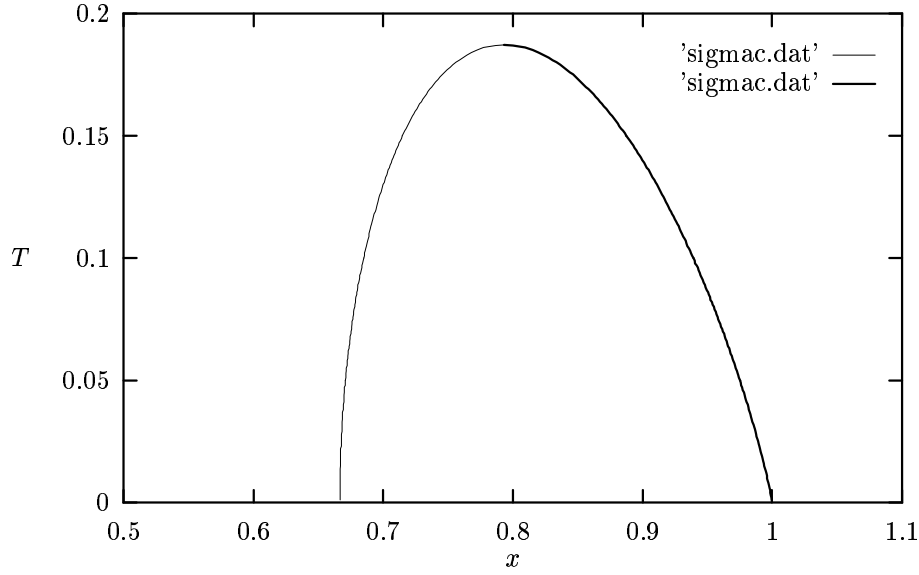
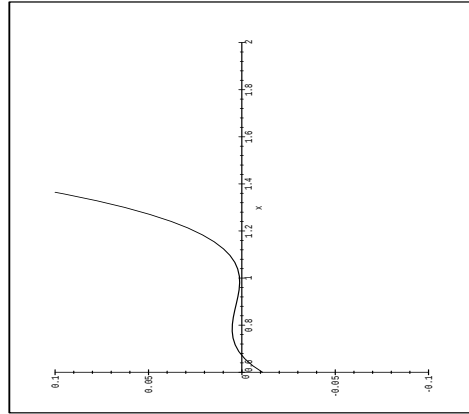
FIG. II-14: La fonction $\chi(x, \sigma)$ pour quelques valeurs de $\sigma = 0.0, 0.05, 0.1, \dots, 0.3$.

Les zéros de la fonction χ doivent être cherché numériquement. La fonction χ est représentée dans la figure II-14. Les solution pour $\chi = 0$ dépendent du désordre σ . S'il n'y a pas de désordre, il existe deux solutions pour $\chi = 0$, une solution est triviale $x_s = 1$ et l'autre est la concentration tricritique x_{tri} . Si l'on introduit du désordre, les deux solutions s'approchent ; la concentration tricritique augmente, la concentration x_s baisse. La ligne de transition de phase du premier ordre touche maintenant la ligne de transition de phase de second ordre. Ceci continue jusqu'à une valeur critique du désordre σ_c où il ne reste qu'une solution. La ligne de séparation de phase se trouve complètement en-dessous de la ligne de transition de second ordre qui croise tout le diagramme de phase. La valeur critique du désordre σ_c a été déterminée numériquement et vaut $\sigma_c = 0.187$ et la concentration où les deux lignes se rencontrent vaut $x_c = 0.793$.

La concentration des points terminaux de la ligne de transition de phase de second ordre en fonction du désordre est montrée dans la figure II-15. Pour vérifier ces résultats la fonction χ a été développée pour un désordre faible jusqu'à l'ordre $\mathcal{O}(\sigma^3)$, donnant une équation algébrique pour la concentration dépendant du désordre. La deuxième solution n'est pas trouvée, car l'ordre est trop bas : l'équation cubique n'a qu'une racine réelle, ce qui est à voir dans la figure II-16. Mais la première branche de la solution pour des valeurs du désordre suffisamment petit est en bon accord avec la solution numérique et est montré dans la figure II-17. Les solutions de l'équation $\chi = 0$ se réduisent pour le cas non-désordonné ($\sigma = 0$) aux valeurs tricritiques de la concentration : $x_{c,1} = \frac{2}{3}$, $x_{c,2} = 1$. La dernière solution mentionnée $x_{c,2} = 1$ n'est pas obtenue numériquement car l'expression pour χ est divergente pour $x \rightarrow 1$.

D'autres distributions Nous avons ici étudié le cas d'une distribution gaussienne, mais celle-là n'est pas la seule possible. On pourrait proposer une distribution à deux valeurs pour le potentiel chimique, par exemple comme suit :

$$p(\Delta_i) = l\delta(\Delta_i - \Delta_o) + (p - l)\delta(\Delta_i - \Delta_1). \quad (\text{II.4-15})$$


 FIG. II-15: Les concentrations $x_{c,i}(\sigma)$, $i = 1, 2$ des points terminaux en fonction de σ .

 FIG. II-16: La fonction $\chi(x)$ pour faible désordre $\sigma = 0.05$.

Cette distribution a été étudiée par [MCS⁺92] dans le cas non corrélé et dans le cas corrélé par [FB95a]. La corrélation est introduit par une dépendance du potentiel chimique de site, s'il est ou non proche de la paroi. Une autre possibilité étudiée est le cas d'une distribution diluée, comme suit :

$$p(\Delta_i) = l\delta(\Delta_i) + (p - l)\delta(\Delta_i - \Delta_o) \quad (\text{II.4-16})$$

L'effet de la dilution a été étudié pour le modèle d'Ising ferro-magnétique par Yeomans et Stinchcombe [YS79]. Une distribution encore plus générale est une combinaison des distributions mentionnées ci-dessus. Une possibilité d'engendrer une telle distribution est de considérer une distribution quasi-gaussienne à deux valeurs.

$$p(\Delta_i) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}(\Delta_i - \Delta_o)(\Delta_i - \Delta_1)} \quad (\text{II.4-17})$$

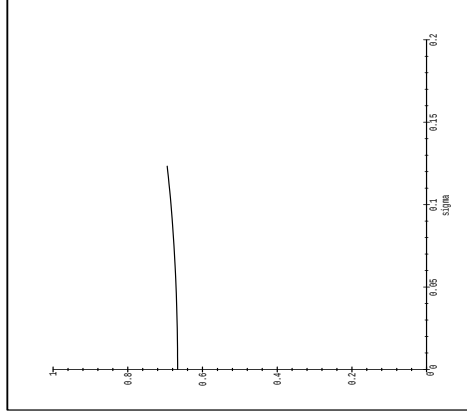


FIG. II-17: La solution $x_{c,1}(\sigma)$ pour $\chi = 0$ pour faible désordre σ .

Cette distribution inclue les deux cas précédents en prenant certaines limites :

- (i). $\sigma \rightarrow 0$ le cas d'une distribution binaire
- (ii). $\Delta_o = \Delta_1$ le cas gaussien.

Discussion Le modèle BEG avec un potentiel chimique désordonné est un modèle approprié pour décrire un mélange binaire, comme par exemple He^3 et He^4 dans un matériau poreux. L'analyse effectuée montre que la transition de phase du premier ordre est supprimée en température et qu'elle est précédée d'une transition d'ordre second pour toute valeur de la concentration dès que le désordre est suffisamment fort. Les résultats présentés sont en accord avec la littérature. Une discussion plus profonde suit dans la prochaine section.

– II.5 – Discussion, perspectives et conclusions

Approximation de champ moyen Le modèle BEG a donné naissance à plusieurs directions de recherche. Dans cette thèse, j'ai étudié un modèle frustré au niveau des liens et désordonné au niveau du potentiel chimique. Dans le cas de liens désordonnés la séparation de phase persiste. Par contre dans le cas d'un potentiel chimique désordonné le point tricritique apparaît à une température plus basse et disparaît lorsque le désordre est suffisamment fort. Les calculs ont été effectués en approximation de champ moyen. Cette approche semble assez fiable pour étudier un point tricritique. Selon les travaux de Wegner et Riedel [WR73], on s'attend à des corrections pour des propriétés critiques près de T_c par rapport aux prédictions du champ moyen du type suivant :

- (i). $d > 3$: pas de corrections
- (ii). $d = 3$: seulement des corrections logarithmiques, donc faibles
- (iii). $d = 2$: des corrections assez importantes.

Ceci assure que les résultats concernant les phénomènes tricritiques, obtenus en approximation de champ moyen, s'appliquent presque sans modifications à des systèmes de dimension $d = 3$ finie.

Comparaison avec d'autres résultats Les résultats obtenus peuvent être interprétés comme suit. Le modèle BEG contient trois termes d'interaction. L'étude du modèle de Griffiths montre que le terme du potentiel chimique est indispensable et que le potentiel ne doit pas être plus petit qu'une certaine valeur de seuil afin qu'une transition de phase du premier ordre apparaisse. Le modèle de Blume et Capel montre qu'un terme quadrupolaire n'a pas beaucoup d'effet sur la transition de phase du premier ordre. Ces résultats confirment que le terme essentiel pour l'apparition d'une telle transition est le potentiel chimique. Si on considère maintenant les variantes désordonnées de ces modèles, on s'aperçoit que le désordre au niveau des couplages bilinéaires n'influence que faiblement le comportement tricritique, mais le désordre au niveau du potentiel chimique le change de façon importante. Le point tricritique est déplacé le long de la ligne de transition de deuxième ordre, et donc la température tricritique T_{tri} décroît en fonction et à mesure que le désordre croît. Dans des études précédentes [KMM⁺93, NB91], il y a de fortes indications que pour le modèle avec potentiel chimique désordonné le point tricritique apparaît à plus basse température. En conséquence la ligne de transition de premier ordre s'est détaché de la ligne de transition de phase de second ordre. Les résultats obtenus sont en accord avec des travaux précédents mais un désaccord apparaît au niveau du modèle frustré.

La persistance du point tricritique Des travaux au niveau de groupe de renormalisation dans l'espace réel indiquent que dans le modèle désordonné, mais pas frustré, la transition de phase du premier ordre disparaît. Le modèle étudié ici est un cas spécial. Le modèle BEG frustré est résolu en approximation de champ moyen, le désordre ayant une distribution gaussienne. D'abord il faut remarquer que la dimension est effectivement infinie et que l'intégration sur le désordre produit une interaction quadrupolaire supplémentaire. Cette interaction supplémentaire est dépendante de la température, et elle est d'autant plus forte que la température est plus basse. L'étude du modèle BEG a montrée qu'une constante de couplage assez grande dans le terme quadrupolaire peut faire que le modèle exhibe une séparation de phase tellement forte qu'un point critique peut apparaître. La dimension infinie du modèle BEG frustré dans l'approximation de champ moyen peut expliquer la désaccord avec les résultats obtenus à basses dimensions; il s'agit alors d'un artefact de l'approximation. L'analyse du modèle désordonné, mais pas frustré, à l'aide du groupe de renormalisation, a montré que la suppression de la transition du premier ordre est dépendante de la dimension. En dimension $d = 2$ les auteurs prédisent que la ligne sera complètement supprimé; en dimension $d = 3$, il faut un seuil de désordre fini pour supprimer la transition. Ces données confirment des résultats de Berker [Ber93] et d'autres auteurs [BH89], [HB89], [IM75], [AW89]. Mais il faut retenir que le cas du désordre qui implique la frustration n'a pas été étudié par ces auteurs. Une étude pour des dimensions plus élevées n'a pas été effectué non-plus. Il est naturel de penser que la seuil de désordre nécessaire pour détruire la transition est dépendant de la dimension et sera infinie dans la limite d'une dimension infinie. Nous avons seulement étudié le cas d'un désordre finie et ceci peut être, dans notre approximation, la raison pour le désaccord. Pour une vérification des résultats dans l'approximation de champ moyen on peut avoir recours aux techniques Monte Carlo [HHS95]. À part cet argument de dimension, il reste une autre différence entre les modèles étudiés. Berker *et al.* utilisent le groupe de renormalisation en supposant qu'un désordre au niveau des liens a le même effet qu'un désordre au niveau du potentiel chimique : l'application du groupe de renormalisation fait que les couplages sont mélangés et alors tous les couplages deviennent désordonnés. Par contre nous avons ici traité les termes comme indépendants.

Pertinence expérimentale Le modèle Blume, Emery, Griffiths décrit un mélange binaire avec une composante magnétique et a été utilisé de modéliser les mélanges de He^3 et He^4 ou d'autres. Mais le

II.5 Discussion, perspectives et conclusions

modèle BEG frustré n'a pas de réalisation expérimentale. Par contre le modèle BEG avec un potentiel chimique désordonné possède une application intéressante : pour décrire un mélange dans un matériau poreux, l'interaction avec la paroi peut être modéliser par un potentiel chimique aléatoire. En fait il y a une discussion actuelle toujours en cours qui porte sur la localisation de la phase superfluide, est-ce que la phase superfluide apparaît dans le volume ou proche des parois ? Selon le modèle utilisé l'une ou l'autre hypothèse est confirmé. Notre contribution n'a pas été conçu pour éclaircir ce problème.

Perspectives Nous avons vu dans les dernières sections que beaucoup des questions restent ouvertes, et il serait donc souhaitable de poursuivre l'étude des différentes variantes du modèle BEG. De plus l'étude de ce modèle peut contribuer à une meilleure connaissance des domaines de validité des différentes méthodes. Voici quelques questions qui me semblent particulièrement intéressantes.

- (i). Le phénomène de séparation de phase décrit la coexistence de phases riches ou diluées en He^4 . Il serait donc important que le modèle ait une structure euclidienne pour comparer avec des calculs de groupe de renormalisation et discuter de théorème de Imry et Ma [IM75]. Il s'agirait donc de prendre le modèle BEG, et le mettre sur un réseau de dimension $d = 2, 3, 4$, et de l'étudier, par exemple à l'aide des simulations Monte Carlo.
- (ii). Il serait aussi intéressant de regarder le cas d'une dilution au niveau des interactions : $J = J, 0$. Ceci représente un cas spécial de la possibilité d'étudier le modèle BEG avec différentes distributions de désordre au niveau des liens. Ceci est aussi intéressant du point de vue de la comparaison avec des résultats du calcul du groupe de renormalisation de Berker *et al.*. Ces auteurs ont utilisé une distribution avec une moyenne ferro-magnétique et un désordre très faible, plus précisément $J = J \pm \sigma$ ou $\sigma \ll J$ est petit. Le cas proposé ici correspond à un désordre fort.
- (iii). Les effets du désordre au niveau du potentiel chimique sur le diagramme de phase ont déjà été étudié pour le modèle de Blume et Capel ($K = 0$). Ces analyses sont surtout numériques et ont été limitées à des distributions très spéciales. Il faudrait généraliser ces études à la dimension finie (*cf.* la généralisation de (i)) à un potentiel chimique désordonné sera facile.

L'étude du modèle BEG en dimension finie est aussi intéressante parce que tous les arguments du type Imry et Ma [IM75], dépendent d'une notion d'espace. Ces arguments consistent à comparer les différentes contributions à l'énergie libre et trouver leur dépendance en la dimension.

Pour un traitement du modèle BEG frustré qui va au-delà de l'approximation de champ moyen il est possible d'étendre des techniques, déjà appliqué avec succès au modèle non désordonné, au modèle BEG frustré. Parmi ces techniques on compte la théorie du champ moyen locale [HK79], la groupe de renormalisation, les techniques de matrice de transfert, etc.

Conclusions Nous avons vu la grande variété de systèmes qui peuvent être décrit à partir du modèle de Blume, Emery et Griffiths. De même, le modèle frustré donne un cadre dans lequel de différents problèmes peuvent être discutés. Dans le modèle BEG frustré la séparation de phase persiste, et le diagramme de phase est semblable à celui sans désordre. Néanmoins, il existe une différence importante : dans le modèle frustré, la phase ordonnée peut être, soit une phase magnétique, soit bien une phase verre de spins, selon la valeur du couplage ferro-magnétique. Dans tous les cas limites, les résultats obtenus sont en accord avec les résultats d'autres auteurs. Nous avons vu que dans le modèle frustré il est nécessaire de briser la symétrie des répliques afin d'obtenir une solution stable. L'analyse de la stabilité a été effectué en diagonalisant la hessienne dans un espace à trois paramètres

d'ordre. L'introduction d'un potentiel chimique aléatoire fait que le point tricritique apparaît à une température plus basse, ce qui est en accord avec la littérature.

– II.6 – Journal de Physique preprint

Le modèle de Blume, Emery et Griffiths représente une généralisation du modèle de Sherrington et Kirkpatrick. Ce modèle permet des spins lancunaires représentés par des valeurs nulles pour des spins $s_i = 0$ et en outre contient un terme quadrupolaire. Ce terme est responsable pour l'apparition d'une séparation de phase, c'est-à-dire une transition de phase de premier ordre. L'analyse du modèle procède au niveau du champ moyen. L'astuce des répliques est appliquée afin d'obtenir l'énergie libre moyennée sur le désordre. Le désordre est tiré d'une distribution gaussienne avec un moyen non-nul. Les équations de col sont résolues numériquement. Comme dans le modèle de SK le modèle BEG présente des instabilités de la solution symétrique dans les répliques. Les lignes des instabilités sont déduites et donnent la ligne de transition vers la phase de verres de spin. Cette analyse de stabilité exige la diagonalisation de la Hesseienne cette fois-ci avec trois paramètres d'ordre. Également il est possible de la diagonaliser en introduisant la partition de l'espace dans des sous-espaces : *longitudinal*, *longitudinal anomalous* et *replicon*. Les valeurs propres sont calculées et elles indiquent l'instabilité en devenant négatives. La solution numérique de ces lignes de transition confirme les prédictions théoriques. Finalement les diagrammes des phases sont obtenus par solution numérique des équations de col. Ils montrent une persistance de la transition du premier ordre malgré la présence du désordre. Ceci est un résultat inattendu, car le modèle se peut interpréter comme un modèle de champ aléatoire, avec l'exception qu'il s'agit ici d'un modèle avec un terme supplémentaire qui brise cette identification et est probablement responsable pour la persistance de la transition du premier ordre. Ce résultat est un contre-exemple à la validité générale du théorème de Imry et Ma. Berker *et al.* ont effectué une étude d'un système désordonné mais sans frustration et en outre par l'application de la groupe de renormalisation dans l'espace réel. Ils obtiennent comme résultat que la transition sera supprimée en contraste de notre résultat. Les possibilités pour résoudre cette contradiction sont discutées dans l'article qui issue de cette étude.

Frustrated Blume-Emery-Griffiths model

Georg R. Schreiber*
Service de Physique Théorique
C.E.A.-Saclay
F - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex
France

submitted to
Journal de Physique I

A generalised integer S Ising spin glass model is analysed using the replica formalism. The bilinear couplings are assumed to have a Gaussian distribution with ferromagnetic mean $\langle J_{ij} \rangle = J_0$. Incorporation of a quadrupolar interaction term and a chemical potential leads to a richer phase diagram with transitions of first and second order. The first order transition may be interpreted as a phase separation, and contrary to what has been argued previously, it persists in the presence of disorder. Finally, the stability of the replica symmetric solution with respect to fluctuations in replica space is analysed, and the transition lines are obtained both analytically and numerically.

*E-mail: georg@spht.saclay cea.fr, Present address: Division de Physique Théorique, Unité de Recherche des Universités Paris XI et Paris VI, associée au C.N.R.S., Institut de Physique Nucléaire, Université Paris-Sud F-91406 Orsay Cedex, France

I. INTRODUCTION

The much studied SK model of spin glasses may be generalised in different ways. The standard spin glass model, given by

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j \quad \text{with} \quad s_i = \pm 1, \quad (1)$$

may be extended for instance by allowing values $s = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm S$ for the spin variables. It is then possible to consider higher order interactions such as $K \sum_{ij} s_i^2 s_j^2$, or a chemical potential such as $\Delta \sum_i s_i^2$. Such generalisations can be regarded as extensions of the Blume-Emery-Griffiths model (BEG) [4]. Indeed the standard BEG model allows $s = 0, \pm 1$ and takes into account the aforementioned higher order interaction and chemical potential. However, the bilinear couplings are neither frustrated nor disordered: they are ferromagnetic. The $s = 0$ degree of freedom may model a diluted lattice gas and leads to a first order transition separating magnetic and non-magnetic phases. Thus our generalisation of the BEG Hamiltonian is a good case study of the influence of disorder and frustration on first order transitions.

The BEG model has been studied in various contexts and a mean field approximation has been given by Blume, Emery and Griffiths [4]. They introduced the model in order to study multicritical phenomena associated with physical systems such as binary mixtures. For an overview, see the review article of Lawrie and Sarbach [18]. To improve the mean field results and to cope with the finite dimensionality of real physical systems, several different techniques have been applied to the BEG model, e.g., Tucker [24] applied the exponential operator technique of Honmura and Kaneyoshi [16] to the isotropic BEG, and Fittipaldi *et al.* [12] applied it to the anisotropic BEG model. In addition the model has been treated in the cluster approximation by Tucker [25] and in the local mean field approximation by Maritan *et al.* [5].

Several disordered BEG models have been studied. Berker *et al.* [11] looked at a bond disordered BEG model and Ez-Zahraoui [10] looked at a bond diluted BEG model. To our knowledge no studies of the case of quenched disorder *with* frustration have been carried out for the BEG model, though Arenzon *et al.* [1] have considered a frustrated lattice gas model similar to the BEG model. The closest model to a generalised BEG studied in the literature was first analysed by Ghatak and Sherrington [13]. In their model, they considered $s = 0, \pm 1$, and the influence of a chemical potential, but they had no quadrupolar interaction and the ferromagnetic mean J_0 of their bilinear coupling J_{ij} was assumed to vanish. The interesting point we wish to stress here is that the first order transition of the BEG model, which can be interpreted as a phase separation transition, persists in the GS generalisation. This is in contrast to the findings of Berker *et al.* which will be discussed below.

In the present paper we generalise the standard SK spin glass Hamiltonian to incorporate higher integer values for the spin variables, the chemical potential, the quadrupolar interaction, and randomly distributed bilinear couplings with a non-zero ferromagnetic mean. We restrict our discussion to the $s = 0, \pm 1$ case, which should cover in a generic way the general integer S -spin models [17]. Furthermore we do not study the effect of disorder in the quadrupolar couplings; such effects have been considered in other models by Snowman *et al.* [20]. The paper is organised as follows. In section 2 we introduce the model. In section 3 the free energy is derived in the replica symmetric approximation and in section 4 we give the model's phase diagram. In section 5 we discuss our results in the light of recent arguments of Berker *et al.* concerning the influence of quenched disorder on phase transitions of first order. In section 6 we analyse the stability of the replica symmetric solution and derive the lines of instability. Conclusions are drawn in the final section.

II. THE MODEL

We consider the model described by the BEG-SK Hamiltonian, where the spin variables are allowed to assume the values $s_i = 0, \pm 1$

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} s_i s_j + \Delta \sum_i s_i^2 - \frac{1}{2} K \sum_{\langle ij \rangle} s_i^2 s_j^2 - h \sum_i s_i. \quad (2)$$

This model will be treated in the mean field approximation, *i.e.*, in the infinite range limit. For the sake of simplicity we assume, as in the SK model, bilinear couplings with a Gaussian distribution about a non-zero mean $\langle J_{ij} \rangle = J_0 > 0$ allowing for ferromagnetic ordering. To avoid additional complexity of the model we consider only the case of positive quadrupolar coupling, $K > 0$, and a ferromagnetic mean J_0 of the bilinear couplings. The chemical potential Δ is allowed to assume positive as well as negative values.

The couplings must be rescaled for the present case of infinite ranged couplings in order to give a sensible free energy in the thermodynamic limit: $J \rightarrow J/\sqrt{N}$, $J_0 \rightarrow J_0/N$ and $K \rightarrow K/N$, respectively.

$$p(J_{ij}) = \sqrt{\frac{N}{2\pi J^2}} e^{-\frac{N}{2J^2}(J_{ij}-J_0/N)^2}.$$

We consider now some special cases, which have already been treated in the literature. When $J = 0$ and $J_0 > 0$, we recover the non-frustrated and non-disordered standard BEG model, which may describe a binary mixture (e.g., He^3 and He^4). When $J_0 = 0$ and $K = 0$, we recover the Gathak and Sherrington model. In order to cope with the problem of averaging quenched disorder, it is necessary to average the free energy over the bond distribution J_{ij} : $f = \overline{F\{J_{ij}\}}/\overline{N}_{J_{ij}}$. We accomplish this by using the replica technique of Edwards and Anderson [9] and applied to the infinite ranged spin- $\frac{1}{2}$ Ising model by Sherrington and Kirkpatrick [23]. This technique relies on the identity $\ln[Z] = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n}(Z^n - 1)$; Z^n may be interpreted as the partition function of a n -fold replicated system $s_i \rightarrow s_i^\alpha$, $\alpha = 1, \dots, n$. The average free energy may be computed using the prescription:

$$\beta f = - \lim_{n \rightarrow 0} \frac{1}{n} (\overline{Z^n} - 1).$$

We follow this standard procedure to average the logarithm of the partition function. The average of the n -fold replicated partition function over the disorder gives

$$\begin{aligned} \overline{Z^n} = \text{tr}_{\{s_i^\alpha\}=0,\pm 1,\dots,\pm S} \exp \left\{ \frac{\beta^2 J^2}{4N} \sum_{\alpha \neq \beta} \sum_{ij} s_i^\alpha s_i^\beta s_j^\alpha s_j^\beta + \left(\frac{\beta^2 J^2}{4N} + \frac{\beta K}{2N} \right) \sum_{\alpha} \sum_{ij} (s_i^\alpha)^2 (s_j^\alpha)^2 \right. \\ \left. + \frac{\beta J_0}{2N} \sum_{\alpha} \sum_{ij} s_i^\alpha s_j^\alpha - \beta \Delta \sum_{\alpha} \sum_i (s_i^\alpha)^2 + \beta h \sum_{\alpha} \sum_i s_i^\alpha \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

Using the Hubbard-Stratonowich transformation $e^{\frac{1}{2}\lambda(\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2)} = \int \mathcal{D}t e^{t\sqrt{\lambda}\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2}$ with the convention $\mathcal{D}t = \frac{e^{-\frac{1}{2}t^2}}{\sqrt{2\pi}} dt$ gives for the free energy, within the framework of the replica method at the saddle point,

$$\beta f_n = \frac{1}{2}\beta J_0 \sum_{\alpha} m_{\alpha}^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 + \frac{1}{2}\beta K \sum_{\alpha} z_{\alpha}^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta}^2 - \ln[Z_{\text{eff}}], \quad (4)$$

where the effective Hamiltonian and its partition function is given by

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = \sum_{\alpha} [-\beta \Delta + \beta K z_{\alpha} + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z_{\alpha}^2] s_{\alpha}^2 + \sum_{\alpha} [\beta J_0 m_{\alpha} + \beta h] s_{\alpha} + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} q_{\alpha\beta} s_{\alpha} s_{\beta} \\ Z_{\text{eff}} = \text{tr}_{s_{\alpha}=0,\pm 1,\dots,\pm S} \exp \{H_{\text{eff}}[s_{\alpha}]\} \end{aligned}$$

The quantities introduced by the foregoing transformations now acquire the meaning of order parameters:

$$\begin{aligned} m_{\alpha} &= \langle s_{\alpha} \rangle \\ 1 - x_{\alpha} &= z_{\alpha} = \langle s_{\alpha}^2 \rangle \\ q_{\alpha\beta} &= \langle s_{\alpha} s_{\beta} \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

where the average is with respect to the effective partition function. These results are valid for general integer spin values, but in the following we restrict ourselves to the generic case of $S = 1$. In order to solve this model it is necessary to make assumptions on the order parameter matrix $q_{\alpha\beta}$ and to propose an Ansatz.

III. FREE ENERGY OF THE MODEL IN RS

As mentioned in the introduction, we limit ourselves in this paper to extending spin variables values from $s = \pm \frac{1}{2}$ to $s = 0, \pm 1$ and to the simplest Ansatz for the order parameter matrix, i.e., we assume symmetry with respect to permutations of any pair of the replicas: $q_{\alpha\beta} = q$, $\forall \alpha \neq \beta$. The single indexed quantities are assumed to be

independent of the replica index as this is done even in replica breaking schemes: $m_\alpha = m$ and $z_\alpha = z$, $\forall \alpha$. This leads to:

$$\beta f = \frac{1}{2}\beta J_0 m^2 + \frac{1}{2}\beta K z^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 z^2 - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^2 - \int \mathcal{D}y \ln \left[1 + 2 \cosh [\beta J_0 m + \beta h + \beta J \sqrt{q} y] e^{\beta K z - \beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 z - \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q} \right]. \quad (6)$$

This equation reduces to the one analysed by Ghatak and Sherrington [13], Lage and de Almeida [17] and by Mottishaw and Sherrington [19] if $J_0 = 0$ and if there is no quadrupolar coupling. In order to simplify the notation hereafter, we define

$$\phi_k(y) = \frac{1}{Z_{\text{eff}}(y)} \text{tr}_{s=0,\pm 1,\dots,\pm S,y} [s^k e^{-\beta H_{\text{eff}}(y)}]. \quad (7)$$

The effective Hamiltonian and its partition function are the replica symmetric equivalents of those defined earlier and obtained by one further Hubbard-Stratonowich transformation. The set of functions $\phi_k(y)$ reduces for the $S = 1$ model to only two different functions:

$$\begin{aligned} \phi_0(y) &= \frac{2 \cosh[\beta(J_0 m + y J \sqrt{q} + h)]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta(J_0 m + y J \sqrt{q} + h)]} & \text{for } k \text{ even,} \\ \phi_1(y) &= \frac{2 \sinh[\beta(J_0 m + y J \sqrt{q} + h)]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2}\beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta(J_0 m + y J \sqrt{q} + h)]} & \text{for } k \text{ odd.} \end{aligned}$$

Introducing an effective temperature-dependent quadrupolar coupling $\kappa = K + \frac{1}{2}\beta J^2$, the mean field saddle point equations in the replica symmetric approximation read:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial m} &= J_0 m - J_0 \int \mathcal{D}y \phi_1(y) = 0, \\ \frac{\partial f}{\partial z} &= \kappa z - \kappa \int \mathcal{D}y \phi_0(y) = 0, \\ \frac{\partial f}{\partial q} &= -\frac{1}{2}\beta J^2 q + \frac{1}{2}\beta J^2 \int \mathcal{D}y [\phi_1(y)]^2 = 0. \end{aligned} \quad (8)$$

IV. DISCUSSION

Mean field phase diagrams are obtained by extremising the free energy with respect to the order parameters. Those have been determined for the BEG-SK model by extremising numerically the free energy (6) with respect to the order parameters z , m and q for any pair of temperature T and chemical potential Δ . Following a line of constant chemical potential while varying the temperature — as is shown in Figure 5 for two different but fixed values of the chemical potential — will occasionally reveal the onset of ordering. The examples include the appearance of non-vanishing values of the order parameters m or q (see Figure 5 the left of the dotted lines) and discontinuous changes of the order parameter z (see Figure 5 the right of the dotted lines), which indicates a phase separation. We infer the transition lines of different order by monitoring the magnetisation m , the spin glass order parameter q and the concentration z for fixed chemical potential Δ and varying the temperature T . This has been performed for a range of different chemical potentials, sufficiently large to exhibit the different phenomenae.

In order to present the numerical results we will make use of two commonly used phase diagram sections, the section of chemical potential versus temperature (Δ - T) and the section of concentration versus temperature (x - T).

For the sake of completeness we first give the results for the non-disordered BEG model. Since in the BEG model there are two order parameters, the complete phase diagram is 3-dimensional, but we restrict ourselves to the 2-dimensional sections just mentioned. In figure 1 we show the concentration/temperature (x - T) section and in figure 2 the chemical potential/temperature (Δ - T) section of the phase diagram. Both diagrams are obtained for a small value of the quadrupolar coupling constant $K = 0.16$.

In order to make contact to the work of Sherrington and Kirkpatrick we next consider a special limit of the BEG-SK model. We allow the concentration to vary freely and we take the limit $\Delta \rightarrow -\infty$. From this, we recover the Sherrington and Kirkpatrick Hamiltonian [23]: all spins tend to be $|s| = 1$, i.e., $x \rightarrow 0$. The phase diagram obtained

by Sherrington and Kirkpatrick represents a section of the general phase diagram, i.e., the x - J_0 - T section for a concentration value $x = 0$. This diagram exhibits a *paramagnetic* phase at high temperatures and small ferromagnetic coupling, whereas it exhibits a *ferromagnetic* phase for larger ferromagnetic coupling and moderate temperatures. Finally at very low temperatures the spin glass phase appears. This behaviour is shown in figure 3. The figure does not take into account the correction to the transition line between ferromagnetic and spin glass phase due to stability requirements [7].

The section of the general phase diagram obtained by Ghatak and Sherrington [13] is the Δ - T -section for $J_0 = 0$, cf. [22]. The transition lines are obtained analytically following the procedure of Lage and de Almeida [17] by examining the stability of the replica symmetric solution; they are given by

$$\Delta = \begin{cases} \frac{J^2}{4T} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8T^2}{J^2}} \right) + T \ln \left[2 \left(\frac{J}{T} - 1 \right) \right] & : T > \frac{1}{3} \\ \frac{J^2}{4T} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8T^2}{J^2}} \right) + T \ln \left[2 \left(\frac{1}{\frac{1}{3}(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8T^2}{J^2}})} - 1 \right) \right] & : T \leq \frac{1}{3} \end{cases} \quad (9)$$

These transition lines are shown in figure 4. The lower two lines belong respectively to the two choices of sign in the second equation.

Finally we give the results of this work, i.e., the complete phase diagram for BEG-SK model.

Figure 5 shows the x - T section and figure 6 the Δ - T section of the phase diagram for one choice of the coupling parameters: $J_0 = 2.0$, $J = 1.0$ and $K = 0.16$. In order to relate this to previous work and to present the complete phase diagram, the x - T and the Δ - T sections have been calculated for different values of the ferromagnetic coupling (scaled by the variance of the distribution of the couplings) and the results are shown in figures 7 and 8, respectively. Figure 7 shows in the x - J_0/J - T section the numerical results of the present model by diamonds and the results of the SK model by crosses at a value $x = 0$ of the concentration. The line of tricritical temperatures which will be given in formula (23) is shown with a broken line and the surface gives the second order phase transition. In figure 8 the Δ - J_0/J - T section is given and the square symbols indicate the numerical results, which cover the first as well as the second order phase transition. The results from Ghatak and Sherrington [13] are reproduced for the value of the ferromagnetic coupling $J_0 = 0$, i.e. the face of the cube. For details on the stability we refer the reader to section VI and to figure 11. The first order transitions terminate at the line of tricritical potential given by formula (24), which is the thick line from the left bottom to the right top. The crosses represent the first order transition lines. The second order transition above T_{tri} , given by formula (21) and obtained by the stability analysis presented in Section 6 are represented by squares. The stability lines below T_{tri} are not given.

We discuss now the numerical results in the light of recent work on disordered BEG-type models which are not frustrated. After we will address the problem of stability of the replica symmetric solution.

V. FIRST ORDER TRANSITION

We discuss in this section the influence of disorder on the first order transition, which can — following Blume, Emery and Griffiths — be interpreted as a phase separation. This first order transition represents an example of a transition which breaks a global symmetry. The Hamiltonian is invariant under inversion of all spins; in the ordered phase this symmetry is spontaneously broken, whereas in the paramagnetic phase the symmetry is preserved.

We first consider the non-disordered BEG model in the x - T representation, where the appearance of the phase separation is most visible. In figure 1 the phase diagram is shown for a weak quadrupolar interaction. In figure 9 the same is seen for a rather strong quadrupolar coupling $K = 2.88$. It is remarkable that the quadrupolar coupling enhances the phase separation. In the limit of $K \gg 1$, the model tends to behave as the Griffiths model [14]. We thus wish to emphasise the importance of the presence of a quadrupolar interaction. In the original model of Blume, Emery, and Griffiths, even the $K = 0$ case exhibits a phase separation. It is due to the bulk interaction of the $s = 0$ species (He^3) and the $s = \pm 1$ species (He^4), the latter allowing for a additional degree of freedom (ferromagnetic phase). At low temperature the ferromagnetic phase is the favoured phase for the $s = \pm 1$ species and phase separation occurs in order to permit ordering in a He^4 rich phase. Letting $K \neq 0$ allows for an inter-isotopic interaction; in fact K represents the sum of inter-isotopic interactions $K = K_{33} + K_{44} - 2K_{34}$, which are assumed to be positive. This interaction is combined with the bulk interaction. It is remarkable that for a range of values of K the phase diagram exhibits a triple point together with the critical and tricritical point. This appears in the original BEG model, confer figure 10 for the appearance of a triple point, marked as A, as well as in the present model, as can be seen from figure 10. The tricritical point is given in the diagrams by A, the triple point by B and the critical one by C; this special points are also marked in figure 9.

Introducing disorder in the BEG model may affect the phase separation. Figure 5 shows the phase diagram obtained by a numerical extremisation of the free energy. *The phase separation persists independently of the presence of disorder.*

The average over the Gaussian disorder has introduced an effective quadrupolar coupling κ , which — as we have seen before in the non-disordered case — enhances the phase separation. Furthermore this effective interaction is also temperature dependent:

$$\kappa = K + \frac{1}{2}\beta J^2. \quad (10)$$

This promotes the phase separation at low temperatures as can be seen by comparing with figure 9 (for the low temperature regime) and figure 1 (for the high temperature regime) in the non-disordered case. Even if there is an effect due to the presence of disorder, which might suppress or change the first order transition, this effect is apparently compensated by the additional term contributing to the effective quadrupolar coupling.

This result complements the results of Berker *et al.* [2], [3] and [11]. They conjecture, in dimension $d \geq 3$, that the disorder lowers the tricritical temperature: the part of the transition line enclosed between the former and the actual tricritical temperature is expected to become second order. Also, they claim that all of the first order line is replaced by a second order one if the disorder is sufficiently strong.

A few comments are in order:

- (i) The analysis of Berker *et al.* relies on the real space renormalisation group approach for an initially positive distribution of the couplings. This distribution remains positive and consequently cannot take into account the effect of frustration. Nevertheless, we do not think that the frustration is responsible for the persistence of the phase separation for the following reason: even when J is small, so that there is disorder but essentially no frustration, the phase separation persists (see the phase diagrams). Monte Carlo studies by Diep *et al.* [8] indicate this persistence and hence made sure that the phase separation is not an artifact of the mean field approach.
- (ii) The mean field approximation is equivalent to a model in infinite dimensions, perhaps rendering the comparison of our results with the predictions of Berker *et al.* invalid. But at least it should give an indication of whether the first order transition persists or not. Furthermore one could argue that in infinite dimensions, an infinitely strong disorder is required to suppress the first order transition. However figure 4 indicates that this model reduces to that discussed by Ghatak and Sherrington [13] with a vanishing ferromagnetic coupling, showing again the persistence of the first order transition.
- (iii) The assumption of replica symmetry is not justified. However, based on the stability analysis, we have found the first order transition to persist and it would be rather improbable to find it suppressed by doing the full replica symmetry breaking scheme. In order to clarify this point and others concerning the validity of the replica Ansatz, work is in progress to perform the complete replica symmetry breaking scheme.

To summarise, Berker *et al.* claim that their results are generic, but our mean field treatment shows that the phase separation is not affected by the introduction of disorder. In particular, the tricritical temperature is not modified: $\frac{T}{J} = \frac{1}{3}$, if $J > J_0$, using the same scaling as Berker *et al.* Note that their analysis does not reveal the effective quadrupolar interaction, which plays a subtle role. On the one hand, following Berker *et al.* and their general arguments [2] and [3], the disorder should change the first order transition to a second order one; on the other hand, the effective quadrupolar interaction enhances the phase separation, so stabilises the first order transition. As we have seen above, the effective quadrupolar interaction overcompensates the first effect so that the first order transition persists. Furthermore, since for a small amount of disorder the frustration effect can be neglected, the models considered are comparable and our results provide a counterexample to their claim.

VI. TRANSITION LINES AND STABILITY ANALYSIS

The application of the replica method to the problem of random, but quenched interactions [9] was a first step in understanding spin glass magnetic ordering. The replica symmetric solution of the infinite-range SK-Ising model due to Sherrington and Kirkpatrick [23] suffers from several drawbacks, such as for example negative entropy in the low temperature region. Later de Almeida and Thouless [7] showed that the solution obtained by assuming a symmetric Ansatz may be unstable, implying the need to break the replica permutation symmetry. The currently accepted replica symmetry breaking scheme, developed by Parisi [21], has been shown to remove the instabilities in all cases studied to date. Using the assumption of replica symmetry allows for a simple answer for the BEG-SK model. As was discussed for the SK model by de Almeida and Thouless [7], the assumption of replica symmetry leads to an unstable solution and the breaking of the permutation symmetry of the replicas is required. The same is true for the BEG-SK model and the Parisi breaking scheme may equally well be applied here to remove the instabilities. Since

under replica symmetry breaking the findings of the analysis assuming replica symmetry are in general confirmed, *i.e.*, a spin glass phase persists, we won't study finite step and infinite step replica symmetry breaking. In this section we restrict ourselves to the replica symmetric solution and we use the lines of instability to locate the phase transitions lines — even though these lines may differ in their location in a more advanced treatment. The stability of the replica symmetric solution of the SK model in its second generalisation was examined by Lage and de Almeida [17] and in greater detail by Mottishaw and Sherrington [19]. These works limit their analysis to the disordered integer S spin glass model without a non-zero ferromagnetic mean and without quadrupolar coupling.

The present stability analysis follows closely that of de Almeida and Thouless [7] and subsequent works. To examine the stability of the solution it has to be made sure that the solution extremises the free energy. The quadratic form Γ describing the deviation of the solution from its stationary value should be positive definite.

$$\begin{aligned} \beta f &= \beta f(m, z, q) - \frac{1}{2}\Gamma + \mathcal{O}(\delta^3) \quad \text{and} \\ \Gamma &= \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^{\epsilon\epsilon} \epsilon_\alpha \epsilon_\beta + \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^{\rho\rho} \rho_\alpha \rho_\beta + \sum_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)} G_{(\alpha\beta)(\gamma\delta)}^{\eta\eta} \eta_{\alpha\beta} \eta_{\gamma\delta} \\ &\quad + 2 \sum_{\alpha\beta} G_{\alpha\beta}^{\epsilon\rho} \epsilon_\alpha \rho_\beta + 2 \sum_{(\alpha\beta)\gamma} G_{(\alpha\beta)\gamma}^{\eta\epsilon} \eta_{\alpha\beta} \epsilon_\gamma + 2 \sum_{(\alpha\beta)\gamma} G_{(\alpha\beta)\gamma}^{\eta\rho} \eta_{\alpha\beta} \rho_\gamma. \end{aligned} \quad (11)$$

The matrix G associated with this form is the Hessian $\mathcal{H}$. The eigenvalues of the Hessian should be non-negative to make sure that the solution is stable. Due to the same symmetry arguments used by de Almeida and Thouless [7], we discover three families of eigenvalues which by convention are called: *longitudinal*, *longitudinal anomalous* and *replicon*. But in the present case the stability analysis requires the diagonalisation of a Hessian $\mathcal{H}$, which is now built out of three blocks. As a consequence there are now three distinct eigenvalues in each family. The longitudinal eigenvectors are the fully symmetric ones with respect to permutations of the replica indices and are of the form:

$$e_\mu^L = a \text{ for } \mu = 1 \dots n, e_\nu^L = b \text{ for } \nu = 1 \dots n, e_{\alpha\beta}^L = c \text{ for } \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n-1). \quad (12)$$

They give rise to eigenvalues which are the solution to the cubic characteristic equation. The full formula for the eigenvalues is too cumbersome to be displayed here, they will be discussed in the paramagnetic phase below but the full expressions are given in appendix A. The longitudinal anomalous eigenvectors are generated by one distinct replica index θ and look like:

$$\begin{aligned} e_\mu^{LA} &= a \text{ for } \mu = 1 \dots n \text{ and } \mu \neq \theta, e_\mu^{LA} = g \text{ for } \mu = \theta, \\ e_\nu^{LA} &= b \text{ for } \nu = 1 \dots n \text{ and } \nu \neq \theta, e_\nu^{LA} = c \text{ for } \nu = \theta, \\ e_{\alpha\beta}^{LA} &= d \text{ for } \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n-1) \text{ and } \alpha, \beta \neq \theta, e_{\alpha\beta}^{LA} = e \text{ for } \alpha, \beta = \theta. \end{aligned} \quad (13)$$

Again the eigenvalues are given in appendix A. The replicon eigenvectors are generated by two distinct replica indices ω and θ and they are of the following form:

$$\begin{aligned} e_\mu^R &= a \text{ for } \mu = 1 \dots n \text{ and } \mu \neq \theta, \omega, e_\mu^R = g \text{ for } \mu = \theta, \omega, \\ e_\nu^R &= b \text{ for } \nu = 1 \dots n \text{ and } \nu \neq \theta, \omega, e_\nu^R = c \text{ for } \nu = \theta, \omega, \\ e_{\alpha\beta}^R &= d \text{ for } \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n-1) \text{ and } \alpha, \beta \neq \theta \text{ and } \alpha, \beta \neq \omega, \\ e_{\alpha\beta}^R &= e \text{ for } \alpha, \beta = \theta \text{ or } \alpha, \beta = \omega, e_{\alpha\beta}^R = f \text{ for } (\alpha\beta) = (\theta\omega). \end{aligned} \quad (14)$$

The eigenvalue is given by the solution of the characteristic equation, but as this equation is explicit, the eigenvalue is obtained immediately:

$$\lambda_R = P - 2Q + R, \quad (15)$$

where P, Q and R are appropriate correlation functions given in the appendix. Adding the number of eigenvalues obtained in the three symmetry families gives the expected number $3 + (3n-3) + \frac{n}{2}(n-3) = \frac{n}{2}(n+3)$, *i.e.*, the dimension of $\mathcal{H}$. The so called longitudinal eigenvalues λ_L and λ_{LA} coincide in the $n \rightarrow 0$ -limit as in the work of de Almeida and Thouless [7] and Lage and de Almeida [17]. The replica symmetric fluctuations of the one-indexed quantities (z_α and m_α) and the two-indexed quantity $q_{\alpha\beta}$ are described respectively by the longitudinal eigenvalues, λ_{LA} and λ_L . The third eigenvalue λ_R is for any value of n distinct from the other two eigenvalues and related to the

fluctuations which break the replica symmetry of the two indexed quantity $q_{\alpha\beta}$. In order to investigate the stability of the replica symmetric solution, for example in the ferromagnetic phase, the eigenvalues λ_L , λ_{LA} and λ_R have to be calculated in this phase. In the appendix the general expressions for the different eigenvalues and the correlation functions appearing therein are given. They must be evaluated under the appropriate approximation, i.e., in the present case the replica symmetric approximation. In order for a phase to be stable the eigenvalues in this phase have to be non-negative. We now investigate the stability of the paramagnetic phase.

The paramagnetic phase

The paramagnetic phase is defined by the vanishing of all magnetic order parameters: $q = 0, m = 0$. This simplifies the expressions for the eigenvalues considerably. All off-diagonal elements of the Hessian or combinations appearing in the characteristic equations vanish. In order to simplify the notation further we consider directly these combinations appearing in the definitions of the different eigenvalues. The *longitudinal* eigenvalues are given by the solution of:

$$\lambda_L^3 + a\lambda_L^2 + b\lambda_L + c = (\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2)(\lambda - \lambda_3) = 0. \quad (16)$$

The coefficients for a cubic equation are given implicitly by the solutions to that equation:

$$\begin{aligned} -a &= [U - V] + [A - B] + [P - 4Q + 3R] = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 \\ b &= [U - V][P - 4Q + 3R] + [A - B][P - 4Q + 3R] + [U - V][A - B] = \lambda_1\lambda_2 + \lambda_2\lambda_3 + \lambda_1\lambda_3 \\ c &= -[U - V][A - B][P - 4Q + 3R] = -\lambda_1\lambda_2\lambda_3, \end{aligned} \quad (17)$$

which may be solved immediately to give

$$\begin{aligned} \lambda_1^L &= [A - B] \\ \lambda_2^L &= [U - V] \\ \lambda_3^L &= [P - 4Q + 3R] = P. \end{aligned} \quad (18)$$

The *longitudinal anomalous* eigenvalues are given by the same expressions. The *replicon* eigenvalue is given by:

$$\lambda_R = P - 2Q + R = P, \quad (19)$$

and coincides in the paramagnetic phase with the third longitudinal eigenvalue. In order for the paramagnetic phase to be stable, the eigenvalues in this phase must be non-negative. The border line of stability is given by $\lambda_{L,LA,R} = 0$, which defines seven lines; but due to the collapsing eigenvalues of different families there are only three different stability lines. In the replica symmetric approximation, these read:

$$\begin{aligned} A - B &= \beta J_0 [1 - \beta J_0 z] = 0 \\ U - V &= \beta \kappa [1 - \beta \kappa (z - z^2)] = 0 \\ P - 4Q + 3R &= P - 2Q + R = \beta^2 J^2 [1 - \beta^2 J^2 z^2] = 0. \end{aligned} \quad (20)$$

The stability limits are given by the following explicit formulae, first in the plane of concentration x versus temperature T .

$$\begin{aligned} \frac{T(x)}{J_0} &= 1 - x \\ \frac{T(x)}{J} &= 1 - x \\ \frac{1}{\beta K + \frac{1}{2}\beta^2 J^2} &= x(1 - x). \end{aligned} \quad (21)$$

The paramagnetic phase becomes unstable whenever the temperature is lowered below the greater of the two bilinear couplings J and J_0 . This behaviour is identical to that observed by Sherrington and Kirkpatrick. The conditions of stability can be rewritten in terms of the chemical potential Δ and temperature T . The stability lines are obtained by using the fixed point equation (8) determinating the concentration, and represent a line in the Δ - T -section of the phase diagram.

$$\Delta_{\text{RS}}(T) = \begin{cases} (K + \frac{1}{2}\beta J^2) \frac{T}{J} + T \ln [2 (\frac{J}{T} - 1)] & : T > T_{\text{tri}} \\ (K + \frac{1}{2}\beta J^2) \frac{1}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8}{2\beta K + \beta^2 J^2}} \right) + T \ln \left[2 \left(\frac{1}{\frac{1}{2}(1 \pm \sqrt{1 - \frac{8}{2\beta K + \beta^2 J^2}})} - 1 \right) \right] & : T \leq T_{\text{tri}} \end{cases} \quad (22)$$

For one choice of the parameter the complete set of stability lines has been depicted in figure 11. Furthermore the numerical results covering the first order transition points as well as those of second order are represented by diamond symbols. The following discussion refers to this figure. The two choices of sign in the second equation separate different regions of the free energy's behaviour. The branch (μ) belonging to the positive sign separates the region of free energy with a unique minimum (PM-U) from the region where there is more than one local minima (PM-M). It is in this latter region where first order transitions occur and the phase separation appears. The branch (ϱ) belonging to the negative sign represents regions where the free energy has three local minima, separating the region where the minimal solution is the one with vanishing order parameter from the region where the minimal solution is the one with a nonvanishing order parameter; this line (ϱ) is indicating the onset of phase separation. The concentration x jumps when crossing this line; in fact this line represents in the Δ - T section of the phase diagram the whole phase separation or coexistence region. As can be seen by comparison with the numerical data the location of the first order phase transition is predicted correctly only near the tricritical point. As known the stability analysis is not an adequate mean to determinate first order phase transitions. As in previous works the λ -line (λ) meets the first order transition line at a tricritical point: a second order line changes to a first order line or according to Griffiths [15], three critical lines meet (see also [18]). For completeness the continuation of the λ -line below T_{tri} has been drawn too.

Tricriticality

The occurrence of a tricritical point in a system with one order parameter is signaled by the vanishing of the fourth derivative of the free energy with respect to the order parameter. In the present problem there are three order parameters and these are indexed by the replica index. The criterion must be modified: the eigenvalues of the matrix of the fourth derivatives have to vanish. But due to the diagonal structure of the Hessian $\mathcal{H}$ in the paramagnetic phase this amounts in computing the fourth derivative with respect to the magnetisation and to search for its zero. This is in fact the classical argument of the Landau theory. The tricritical temperature in the non-disordered case is given for a vanishing quadrupolar coupling by

$$T_{\text{tri}} = \frac{1}{3} \max \{J_0, J\}.$$

For a non-vanishing quadrupolar coupling the tricritical temperature is given through:

$$T_{\text{tri}} = \frac{2K + 1}{2K + 3} \max \{J_0, J\}.$$

The tricritical point present in the non-disordered model (BEG) persists and in terms of the temperature and concentration is given in the crudest approximation by:

$$x_{\text{tri}} = \frac{2}{3} \quad \text{and} \quad T_{\text{tri}} = \frac{2K + 1}{2K + 3} \max \{J_0, J\} \quad (23)$$

The numerical data confirms very good this approximation and it is worth mentioning that the tricritical concentration has kept its value from the non-disordered BEG model. In contrast the tricritical chemical potential has been modified. Resolving the tricritical condition provides a formula in Δ - J_0 / J - T space for the tricritical line. In the Δ - T plane, it is given by:

$$\Delta_{\text{tri}}(J_0, J) = \begin{cases} \frac{K}{3} + \frac{1}{2} \frac{J^2}{J_0} + \frac{2}{3} J_0 \ln[2] & \text{and} \quad T_{\text{tri}} = \frac{J_0}{3} \text{ for } J_0 > J \\ \frac{K}{3} + \frac{1}{2} J + \frac{2}{3} J \ln[2] & \text{and} \quad T_{\text{tri}} = \frac{J}{3} \text{ for } J > J_0 \end{cases} \quad (24)$$

This line as a function of J_0 is constant up to $J_0 = J$ and then tends for stronger ferromagnetic coupling to bigger chemical potential. The line of stability for the second order transition and the aforementioned line of tricritical δ are displayed together with the numerical data in figure 8. The value for the quadrupolar coupling for this figure is $K = 0.16$.

VII. DISCUSSION AND CONCLUSIONS

We have performed a replica study of the disordered BEG model and have extended previous work to present a picture of the complete phase diagram. The BEG-SK model shows a second order transition, the so-called λ -line, separating an ordered phase from a paramagnetic one. The ordered phase may be a ferromagnetic or a spin glass phase, depending on the strength of the ferromagnetic coupling J_0 . Furthermore, a transition of first order, present in the non-disordered BEG model, persists, and may be interpreted as a phase separation. This extends recent work of Berker *et al.* on the influence of disorder on first order transitions. Our mean field study is completed by a stability analysis of the replica symmetric approximation. The complete set of eigenvectors and eigenvalues has been found and analysed in the paramagnetic phase. The replica symmetric solution suffers from instabilities, but the assumption of replica symmetry and the associated results do *not* exhibit more severe inconsistencies than in the SK model. For the SK model, the instabilities of the replica symmetric solution have been remedied by the infinite step replica symmetry breaking procedure. We expect the same approach to work in this case, but following Mottishaw and Sherrington [19] near the tricritical point, the Parisi Ansatz has to be extended to higher order in $q_{\alpha\beta}$.

VIII. ACKNOWLEDGEMENT

I would like to thank Thomas Garel for suggesting this problem and for his encouragement, T. H. Diep, C. de Dominicis, O. Martin, H. Orland and A. Sedeki for helpful discussions. An Individual Fellowship of the Commission of European Communities under contract number ERBCHBICT941665 is gratefully acknowledged. Furthermore, I would like to express my gratitude to Professors A. Poves and J. Luis Egido for their generous hospitality at the Department of Theoretical Physics of the *Universidad Autonoma de Madrid*, where part of this work was accomplished.

APPENDIX A: EIGENVECTORS AND EIGENVALUES

We follow Lage and de Almeida [17] in their stability analysis of the replica symmetric solution. The Hessian of the free energy is given schematically by:

$$\mathcal{H} = \frac{\partial^2 f}{\partial[z_\alpha m_\alpha q_{\alpha\beta}] \partial[z_\alpha m_\alpha q_{\alpha\beta}]} = \begin{pmatrix} U(z, z) & V & W & X & Y & Z \\ & U & & W & & Y \\ & & A(m, m) & B & C & D \\ & & & A & C & \\ & & & & P(q, q) & Q & R \\ & & & & & P & Q & P \end{pmatrix}.$$

The second equality defines the quantities $U, V, \dots$ with respect to their position in the Hessian. These quantities are the respective $G_{cc}^{\alpha\beta}$, etc. as given in the main part. As will be seen later they are expressed by the different multispin correlation functions up to degree 4. The dimension of the Hessian is $n + n + \frac{n}{2}(n-1) = \frac{n}{2}(n+3)$ and equals the number of eigenvalues and eigenvectors to be found. In order to diagonalise the Hessian we construct the eigenvectors using the symmetry arguments exposed by de Almeida and Thouless [7]. We do not construct a orthonormal set of eigenvectors, because the additional constraints destroy the symmetry with respect to replica permutations. Rather we content ourselves with three families of eigenvectors, each orthogonal to another, but not orthogonal within the families.

We start with the eigenvector totally symmetric under permutations of the replicas:

$$\mathbf{e}_L = \begin{cases} a & : \mu = 1 \dots n \\ b & : \nu = 1 \dots n \\ c & : \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n-1) \end{cases}$$

According to conventional notation this vector is referred to as belonging to the longitudinal subspace; hence the subscript L . This is a subspace of dimension $d = 3$, which is easily verified by constructing a orthogonal set of eigenvectors conserving the form prescribed above. The eigenvector equation $\mathcal{H}\mathbf{e}_L = \lambda_L \mathbf{e}_L$ reads

$$\begin{aligned}
a[U + (n-1)V - \lambda_L] + b[W + (n-1)X] + c[Y(n-1) + Z[\frac{n}{2}(n-1) - (n-1)]] &= 0 \\
a[W + (n-1)X] + b[A + (n-1)B - \lambda_L] + c[C(n-1) + D[\frac{n}{2}(n-1) - (n-1)]] &= 0 \\
a[2Y + (n-2)Z] + b[2C + (n-2)D] + c[P + 2(n-2)Q + R[\frac{n}{2}(n-1) - 2(n-1) - 1] - \lambda_L] &= 0
\end{aligned}$$

The longitudinal eigenvector equation gives rise to a cubic characteristic equation for the eigenvalue λ_L :

$$(\lambda^L)^3 + a(\lambda^L)^2 + b\lambda^L + c = 0.$$

We quote its coefficients in the $n = 0$ limit

$$\begin{aligned}
a &= -[U - V] - [A - B] - [P - 4Q + 3R] = -\lambda_1^L - \lambda_2^L - \lambda_3^L \\
b &= -[W - X]^2 + [U - V][P - 4Q + 3R] + 2[Y - Z]^2 \\
&\quad + [A - B][P - 4Q + 3R] + [U - V][A - B] + 2[C - D]^2 = \lambda_1^L \lambda_2^L + \lambda_2^L \lambda_3^L + \lambda_1^L \lambda_3^L \\
c &= -[U - V][A - B][P - 4Q + 3R] - 2[U - V][C - D]^2 \\
&\quad + [W - X]^2[P - 4Q + 3R] + 4[W - X][Y - Z][C - D] - 2[Y - Z]^2[A - B] = -\lambda_1^L \lambda_2^L \lambda_3^L.
\end{aligned}$$

Define:

$$\begin{aligned}
\gamma &= -\frac{a^2}{3} + b \\
\varrho &= 2\left(\frac{a}{3}\right)^3 - \frac{1}{3}ab + c \\
\Gamma &= \left(\frac{\gamma}{3}\right)^3 + \left(\frac{\varrho}{2}\right)^2 \\
\sigma^+ &= \left(-\frac{\varrho}{2} + \sqrt{\Gamma}\right)^{\frac{1}{3}} \\
\sigma^- &= \left(-\frac{\varrho}{2} - \sqrt{\Gamma}\right)^{\frac{1}{3}},
\end{aligned}$$

taking only the real cubic roots. This allows us to write the three solutions as:

$$\begin{aligned}
\lambda_{L1} &= \sigma^+ + \sigma^- \\
\lambda_{L2} &= -\frac{1}{2}(\sigma^+ + \sigma^-) + \frac{i}{2}\sqrt{3}(\sigma^+ - \sigma^-) \\
\lambda_{L3} &= -\frac{1}{2}(\sigma^+ + \sigma^-) - \frac{i}{2}\sqrt{3}(\sigma^+ - \sigma^-).
\end{aligned} \tag{A1}$$

The value of Γ tells us whether the solutions are degenerated or not.

$$\Gamma \begin{cases} < 0 & : \text{distinct real solutions} \\ = 0 & : \text{degenerate real solutions} \\ > 0 & : \text{complex solutions} \end{cases}$$

As has been recognised by Lage and de Almeida [17], occasionally Γ becomes positive and so the eigenvalues complex. This has been verified numerically by da Costa *et al.* [6].

The next eigenvectors, which will be called longitudinal anomalous, are constructed by breaking the symmetry of the longitudinal vector with respect to one replica, given by the distinct index θ .

$$\mathbf{e}_{LA} = \begin{cases} a & : \mu = 1 \dots n, \mu \neq \theta \\ g & : \mu = \theta \\ b & : \nu = 1 \dots n, \nu \neq \theta \\ c & : \nu = \theta \\ d & : \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n-1), \alpha, \beta \neq \theta \\ e & : \alpha, \beta = \theta \end{cases}$$

Consider the orthogonality condition for the first eigenvector, if $a = g$ or $b = c$. This condition results in trivial eigenvectors. In order to obtain non-trivial eigenvectors the symmetry in both n -blocks has to be broken, giving

kn eigenvectors of the second family, where k is the number of different choices of the parameters conserving the prescribed form. Orthogonality of the second family to the first family of eigenvectors requires:

$$g = (1 - n)a \quad c = (1 - n)b \quad e = (1 - \frac{n}{2})d \quad (\text{A2})$$

Therefore $k = 3$ and this choice gives rise to $3n$ eigenvectors including the previous one. Writing down the characteristic equation for the longitudinal anomalous eigenvalues λ_{LA} gives in general:

$$\begin{aligned} a[U - V - \lambda_{LA}] + b[W - X] + d(\frac{n}{2} - 1)[Y - Z] &= 0 \\ a[W - X] + b[A - B - \lambda_{LA}] + d(\frac{n}{2} - 1)[C - D] &= 0 \\ 2a[Y - Z] + 2b[C - D] + d(\frac{n}{2} - 1)[P + (n - 4)Q + R(3 - n) - \lambda_{LA}] &= 0 \end{aligned}$$

The longitudinal anomalous eigenvector equation also gives rise to a cubic characteristic equation for the eigenvalue λ_L :

$$(\lambda^{LA})^3 + a(\lambda^{LA})^2 + b\lambda^{LA} + c = 0.$$

We quote its coefficients in the $n = 0$ limit

$$\begin{aligned} a &= -U + V - A + B - P + 4Q - 3R \\ b &= (W - X)^2 - (U - V)(P - 4Q + 3R) + (2Y - 2Z)(-Y + Z) \\ &\quad - (A - B)(P - 4Q + 3R) - (U - V)(A - B) + (-C + D)(2C - 2D) \\ c &= (U - V)(A - B)(P - 4Q + 3R) - (U - V)(-C + D)(2C - 2D) \\ &\quad - (W - X)^2(P - 4Q + 3R) + (W - X)(-Y + Z)(2C - 2D) \\ &\quad + (2Y - 2Z)(W - X)(-C + D) - (2Y - 2Z)(-Y + Z)(A - B) \end{aligned}$$

Again the solutions may be written as in A1, but now with modified coefficients $\gamma, \rho, \dots$

The eigenvalues will in general be different in each family, but since the characteristic equations for the *longitudinal* and the *anomalous longitudinal* become identical in $n = 0$ -limit and so do the eigenvalues, the *longitudinal* and *longitudinal anomalous* families will collapse. There are $3n$ eigenvectors and the three eigenvalues are each n -fold degenerate; including the three eigenvalues of the first eigenvector.

It remains to construct the third family, called *replicon*. Breaking the symmetry with respect to permutations of pairs by distinguishing two indices θ and ω , we obtain the following form for the eigenvectors.

$$\mathbf{e}_R = \begin{cases} a : \mu = 1 \dots n, \mu \neq \theta, \omega \\ g : \mu = \theta, \omega \\ b : \nu = 1 \dots n, \nu \neq \theta, \omega \\ c : \nu = \theta, \omega \\ d : \alpha, \beta = 1 \dots \frac{n}{2}(n - 1), \alpha, \beta \neq \theta \text{ and } \alpha, \beta \neq \omega \\ e : \alpha, \beta = \theta \text{ or } \alpha, \beta = \omega \\ f : (\alpha\beta) = (\theta\omega) \end{cases}$$

Orthogonality of the third family to the previous two families of eigenvectors requires:

$$g = a \quad c = b \quad 0 = f + (n - 4)e + (3 - n)d. \quad (\text{A3})$$

The choice of equal non-vanishing entries would give the first family, so the recommended choice is

$$g = a = 0 \quad c = b = 0 \quad f = (2 - n)e \quad e = \frac{1}{2}(3 - n)d. \quad (\text{A4})$$

The characteristic equation is the solution for the replicon eigenvalue itself:

$$\lambda_R = P - 2Q + R.$$

The replicon eigenvalue is independent of n and identical in form to the result obtained by de Almeida and Thouless [7]. This eigenvalue is $\frac{n}{2}(n - 3)$ -fold degenerate.

1. The replica symmetric Ansatz

In order to analyse the stability of the replica symmetric Ansatz the quantities, defined in the Hessian are to be evaluated assuming replica symmetry.

$$\begin{aligned}
 A &= \beta J_0 [1 - \beta J_0 (\langle s_\alpha^2 \rangle - \langle s_\alpha \rangle^2)] = \beta J_0 [1 - \beta J_0 (z - m^2)] \\
 B &= \beta^2 J_0^2 [\langle s_\alpha \rangle^2 - \langle s_\alpha s_\beta \rangle] = \beta^2 J_0^2 [m^2 - q] \\
 C &= \beta^2 J^2 \beta J_0 [\langle s_\alpha \rangle \langle s_\alpha s_\beta \rangle - \langle s_\alpha s_\beta^2 \rangle] = \beta^2 J^2 \beta J_0 [mq - r] \\
 D &= \beta^2 J^2 \beta J_0 [\langle s_\gamma \rangle \langle s_\alpha s_\beta \rangle - \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma \rangle] = \beta^2 J^2 \beta J_0 [mq - u] \\
 P &= \beta^2 J^2 [1 - \beta^2 J^2 (\langle s_\alpha^2 s_\beta^2 \rangle - \langle s_\alpha s_\beta \rangle^2)] = \beta^2 J^2 [1 - \beta^2 J^2 (s - q^2)] \\
 Q &= \beta^4 J^4 [\langle s_\alpha s_\beta \rangle^2 - \langle s_\alpha^2 s_\beta s_\gamma \rangle] = \beta^4 J^4 [q^2 - v] \\
 R &= \beta^4 J^4 [\langle s_\alpha s_\beta \rangle^2 - \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma s_\delta \rangle] = \beta^4 J^4 [q^2 - w] \\
 U &= \beta \kappa [1 - \beta \kappa (\langle s_\alpha^2 \rangle - \langle s_\alpha \rangle^2)] = \beta \kappa [1 - \beta \kappa (z - z^2)] \\
 V &= \beta^2 \kappa^2 [\langle s_\alpha^2 \rangle^2 - \langle s_\alpha^2 s_\beta^2 \rangle] = \beta^2 \kappa^2 [z^2 - s] \\
 W &= \beta J_0 \beta \kappa [\langle s_\alpha \rangle (\langle s_\alpha^2 \rangle - 1)] = \beta J_0 \beta \kappa [m(z - 1)] \\
 X &= \beta J_0 \beta \kappa [\langle s_\alpha \rangle \langle s_\alpha^2 \rangle - \langle s_\alpha s_\beta^2 \rangle] = \beta J_0 \beta \kappa [mz - r] \\
 Y &= \beta^2 J^2 \beta \kappa \langle s_\alpha s_\beta \rangle [\langle s_\alpha^2 \rangle - 1] = \beta^2 J^2 \beta \kappa q [z - 1] \\
 Z &= \beta^2 J^2 \beta \kappa [\langle s_\alpha \rangle \langle s_\alpha s_\beta \rangle - \langle s_\alpha^2 s_\beta s_\gamma \rangle] = \beta^2 J^2 \beta \kappa [zq - v].
 \end{aligned} \tag{A5}$$

The second equality in each line results from the assumption of replica symmetry. Additional simplifications are due to the fact that for the $S = 1$ spin model there are additional relations, e.g., $S^2 = S^4$, etc. Using the previously defined functions $\phi_k(y)$, see equation (7), the replica symmetric correlation functions introduced above may be explicitly written as:

$$\begin{aligned}
 m &= \langle s_\alpha \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y) & t &= \langle s_\alpha^3 s_\beta \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y)^2 \\
 z &= \langle s_\alpha^2 \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_0(y) & u &= \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y)^3 \\
 q &= \langle s_\alpha s_\beta \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y)^2 & v &= \langle s_\alpha^2 s_\beta s_\gamma \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y)^2 \phi_0(y) \\
 r &= \langle s_\alpha s_\beta^2 \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y) \phi_0(y) & w &= \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma s_\delta \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_1(y)^4 \\
 s &= \langle s_\alpha^2 s_\beta^2 \rangle = \int \mathcal{D} y \phi_0(y)^2
 \end{aligned} \tag{A6}$$

2. Paramagnetic phase

As is seen from the definitions of the multispin correlation functions (see A5 and A6) some of these vanish identically in the paramagnetic phase. Furthermore some of the combinations appearing in the calculation of the eigenvalues, e.g. $[W - X] = 0$, vanish too. This simplifies significantly the stability analysis in the paramagnetic phase, because the Hessian $\mathcal{H}$ and the matrix of the fourth derivatives become diagonal.

- [1] Jefferson J. Arenzon, Mario Nicodemi, and Mauro Sellitto. Equilibrium properties of the Ising frustrated lattice gas. *Journal de Physique France*, September 1996. to be published.
- [2] A. Nihat Berker. Absence of temperature-driven first-order phase transitions in systems with random bonds. *J. Appl. Phys.*, 70(10):5941 – 5945, November 1991.
- [3] A. Nihat Berker. Critical behavior induced by quenched disorder. *Physica A*, 194:72 – 76, 1993.
- [4] M. Blume, V. J. Emery, and R. B. Griffiths. Ising Model for the λ Transition and Phase Separation in He^3 - He^4 Mixtures. *Phys. Rev. A*, 4(3):1071 – 1077, September 1971.
- [5] Carla Buzano, Amos Maritan, and Alessandro Pelizzola. A cluster variation approach to the random-anisotropy Blume-Emery-Griffiths model. *Journal of Physics C: Condensed Matter*, 6:327 – 338, 1994.
- [6] Francisco A. da Costa, Carlos S. O. Yokoi, and Silvio R. A. Salinas. First-order transition in a spin-glass model. *J. Phys. A*, 27:3365 – 3372, 1994.
- [7] 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, June 1978.
- [8] T. H. Diep. Private communication. 1997.
- [9] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F: Metal Physics*, 5:965 – 974, May 1975.
- [10] H. Ez-Zahraouy. The Bond Diluted Spin-1 Blume-Emery-Giffiths Model in a Transverse Field. *Physica Scripta*, 51:310 – 315, 1995.
- [11] Alexis Falicov and A. Nihat Berker. Tricritical and critical-endpoint phenomena under random bonds. preprint, 1995.
- [12] I. P. Fittipaldi and T. Kaneyoshi. Re-entrant behaviour of the anisotropic BEG model in the effective-field approximation. *Journal of Physics C: Condensed Matter*, 1:6513 – 6522, 1989.
- [13] S. K. Ghatak and D. Sherrington. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. *J. Phys. C: Solid State Physics*, 10:3149 – 3156, 1977.
- [14] R. B. Griffiths. First-order phase transitions in spin-one Ising systems. *Physica*, 33:689 – 690, 1967.
- [15] Robert B. Griffiths. Thermodynamics near the two-fluid critical mixing point in He^3 - He^4 . *Phys. Rev. Lett.*, 24(13):689 – 690, 1970.
- [16] R. Honmura and T. Kaneyoshi. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. *Journal of Physics C: Condensed Matter*, 12:3979 – 3992, 1979.
- [17] E. J. S. Lage and J. R. L. de Almeida. Stability conditions of generalised Ising spin glass models. *J. Phys. C: Solid State Physics*, 15:L1187 – L1193, 1982.
- [18] Ian D. Lawrie and Stéphane Sarbach. Theory of Tricritical Points. In C. Domb and J. L. Lebowitz, editors, *Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol.9*, Phase Transitions and Critical Phenomena, chapter 1, pages 1 – 161. Academic Press, London, September 1984.
- [19] P. J. Mottishaw and D. Sherrington. Stability of a crystal-field split spin glass. *J. Phys. C: Solid State Physics*, 18:5201 – 5213, 1985.
- [20] Snowman Daniel P. and Susan R. McKay. The effects of frustrated biquadratic interactions on the phase diagrams and criticality of the Blume-Emery-Griffiths model. *J. Appl. Phys.*, 76(10):7117, November 1994.
- [21] G. Parisi. Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 13:1887 – 1895, 1980.
- [22] Abdelouahab Sedeki. Rapport de stage du DEA. rapport interne, Université de Cergy-Pontoise, Groupe de Physique Statistique, 1994. unpublished.
- [23] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. Solvable model of a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35(26):1792 – 1796, June 1975.
- [24] J. W. Tucker. The effective-field theory of the isotropic Blume-Emery-Griffiths model. *Journal of Physics C: Condensed Matter*, 21:6215 – 6218, 1988.
- [25] J. W. Tucker, M. Saber, and L. Peliti. A new technique in the effective field theory of general spin S dilute Ising models. *Physica A*, 206:497 – 507, 1994.

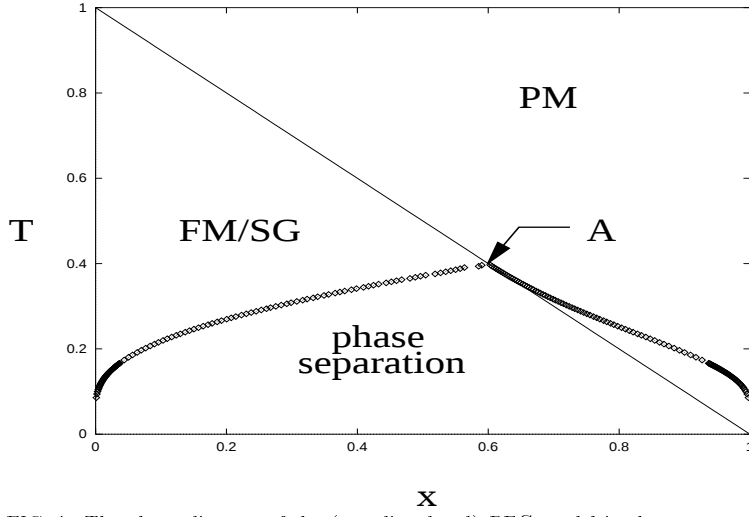


FIG. 1. The phase diagram of the (non-disordered) BEG model in the concentration/temperature-plane, i.e., $x-T$ -plane, for the bilinear coupling $J_0 = 1.0$ and for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. The thin line represents a transition of second order, whereas the diamonds indicate a transition of first order. (FM/SG stands for ferromagnetic phase or eventually spin glass phase, PM is the paramagnetic phase; the point A indicates the tricritical point)

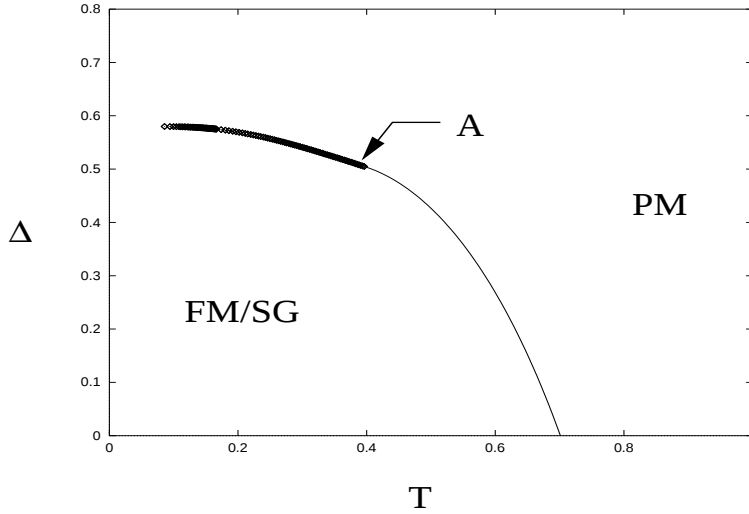


FIG. 2. The phase diagram of the (non-disordered) BEG model in the chemical potential/temperature-plane, i.e., $\Delta-T$ -plane, for the bilinear coupling $J_0 = 1.0$ and for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. The thin line represents a transition of second order, whereas the diamonds indicate a transition of first order. (FM/SG stands for ferromagnetic phase or eventually spin glass phase, PM is the paramagnetic phase; the point A indicates the tricritical point)

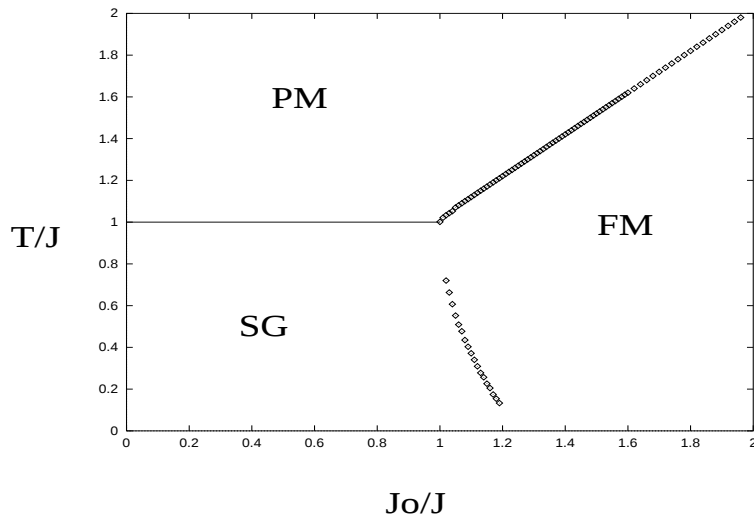


FIG. 3. The phase diagram of the SK model in the ferromagnetic coupling/temperature-plane, i.e., $J_0/J - T$ -plane. The shown lines are all transition of second order. (FM stands for ferromagnetic phase, SG for the spin glass phase and PM for the paramagnetic phase)

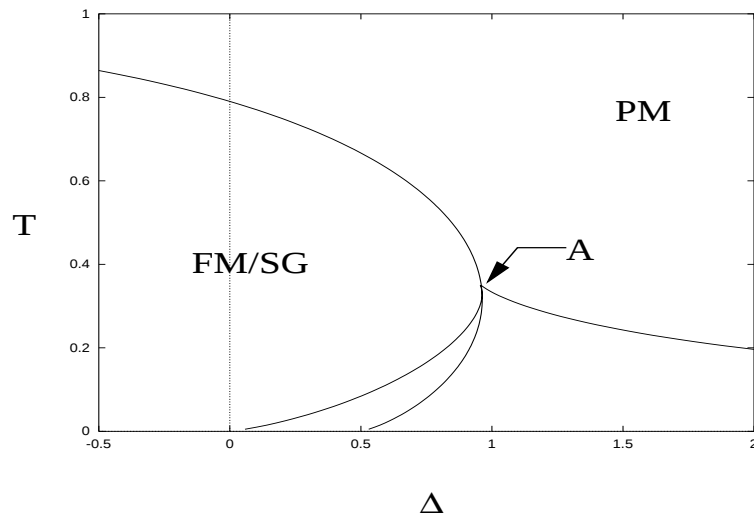


FIG. 4. The phase boundary of the GS-model ($K = 0.0$ and $J_0 = 0.0$) in the chemical potential/temperature-plane, i.e., $\Delta - T$ -plane. (FM/SG stands for ferromagnetic phase or eventually spin glass phase, PM is the paramagnetic phase; the point A indicates the tricritical point)

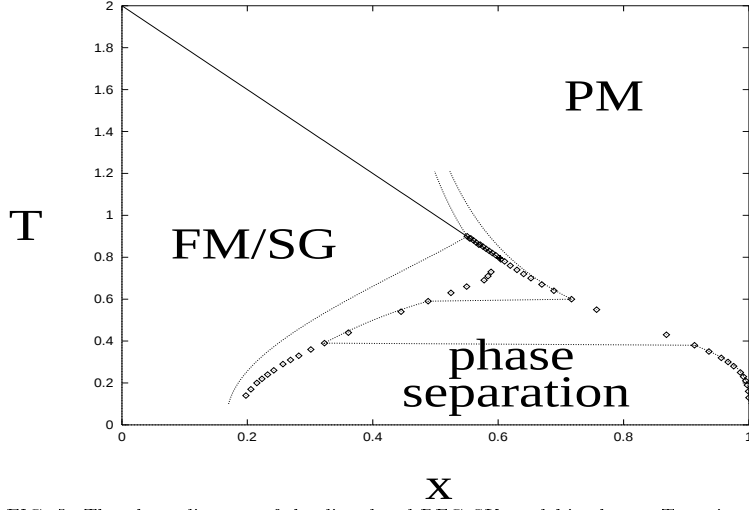


FIG. 5. The phase diagram of the disordered BEG-SK model in the $x-T$ -section for the bilinear couplings $J_0 = 2.0$, $J = 1.0$ and for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. The thin line and the dense lying diamond symbols represent the transition of second order, whereas the sparse lying diamonds indicate the first order transition. The two pointed lines are the free energy minima for two different chemical potentials ($\Delta = 0.6$ and 0.65) and varying the temperature (from $T = 0.0$ to $T = 1.2$). (FM/SG stands for ferromagnetic phase or eventually spin glass phase, PM is the paramagnetic phase)

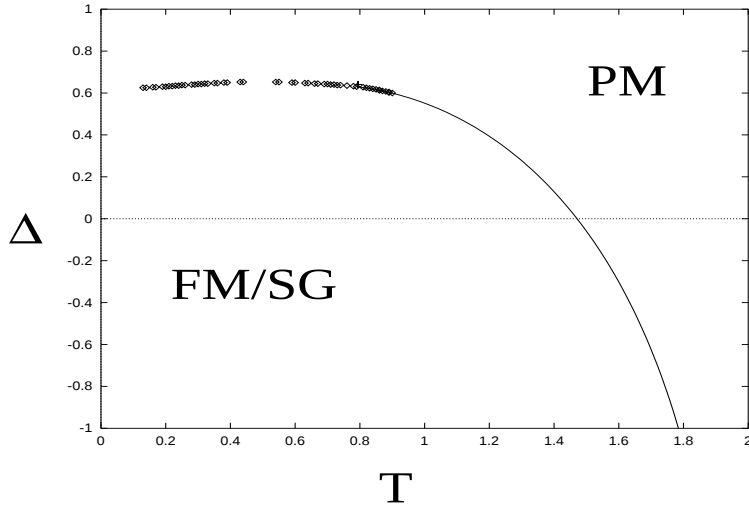


FIG. 6. The phase diagram of the disordered BEG-SK model in the $\Delta-T$ -section for the bilinear couplings $J_0 = 2.0$, $J = 1.0$ and for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. The thin line and the dense lying diamond symbols represent the second order transition, whereas the sparse diamonds indicate the transition of first order. (FM/SG stands for ferromagnetic phase or eventually spin glass phase, PM is the paramagnetic phase)

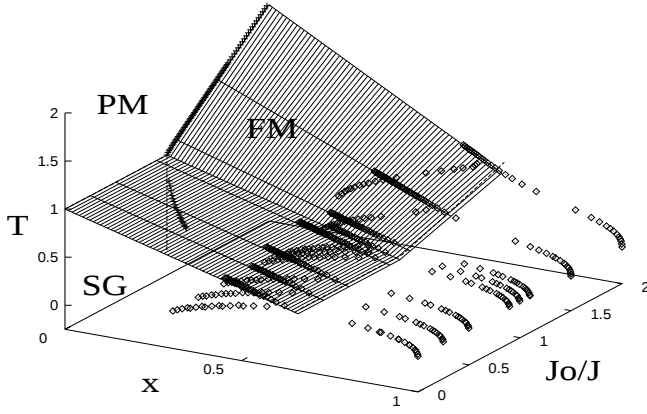


FIG. 7. The complete phase diagram of the disordered BEG-SK model, with the lines of stability and the line of tricritical temperature in the concentration/ferromagnetic coupling/temperature-representation, i.e., $x - J_0/J - T$ -plane, for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. (FM stands for ferromagnetic phase, SG for the spin glass phase and PM for the paramagnetic phase)

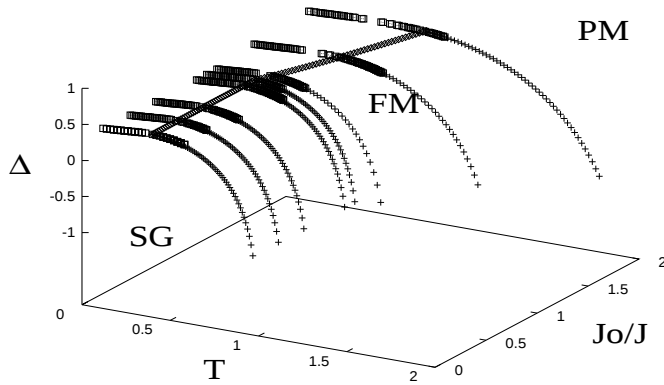


FIG. 8. The complete phase diagram of the disordered BEG-SK model, with the lines of stability and the line of tricritical chemical potential in the chemical potential/ferromagnetic coupling/temperature-representation, i.e., $\Delta - J_0/J - T$ -plane, for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$. (FM stands for ferromagnetic phase, SG for the spin glass phase and PM for the paramagnetic phase)

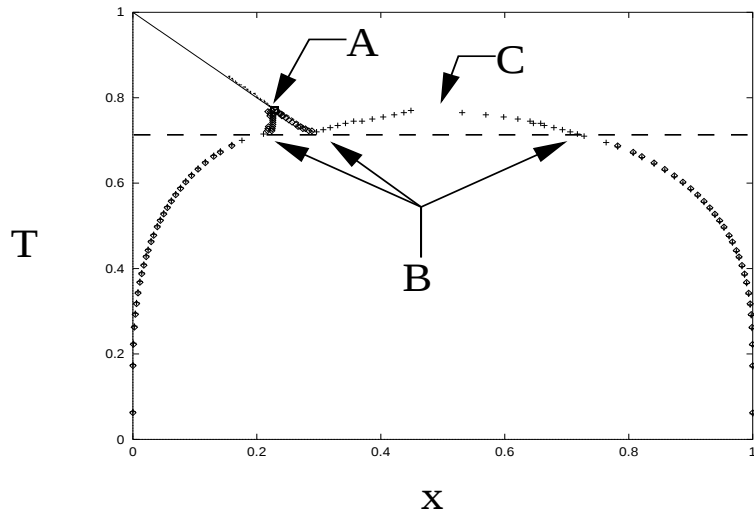


FIG. 9. The phase diagram of the non-disordered BEG model in the $x - T$ -section for the bilinear coupling $J = 1.0$ and for a rather strong quadrupolar coupling $K = 2.88$. The point A indicates the tricritical point, the point B represents the triple point and C is the critical end point.

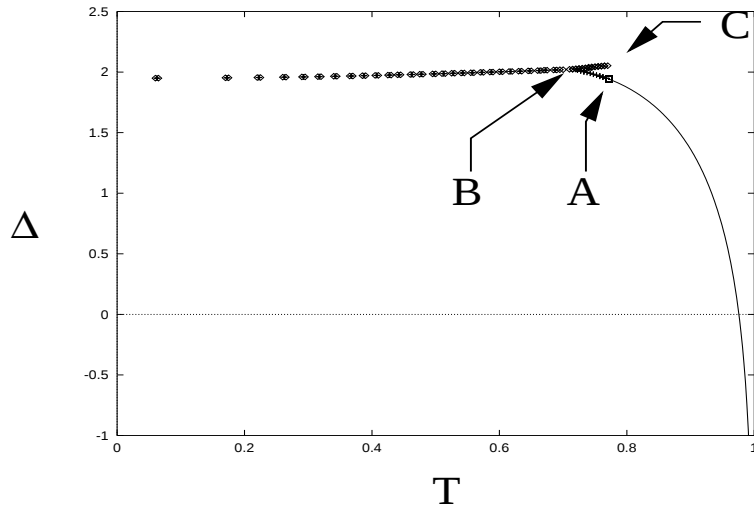


FIG. 10. The phase diagram of the non-disordered BEG model in the $\Delta - T$ -section for the bilinear coupling $J = 1.0$ and for a rather strong quadrupolar coupling $K = 2.88$. The point A indicates the tricritical point, the point B represents the triple point and C is the critical end point.

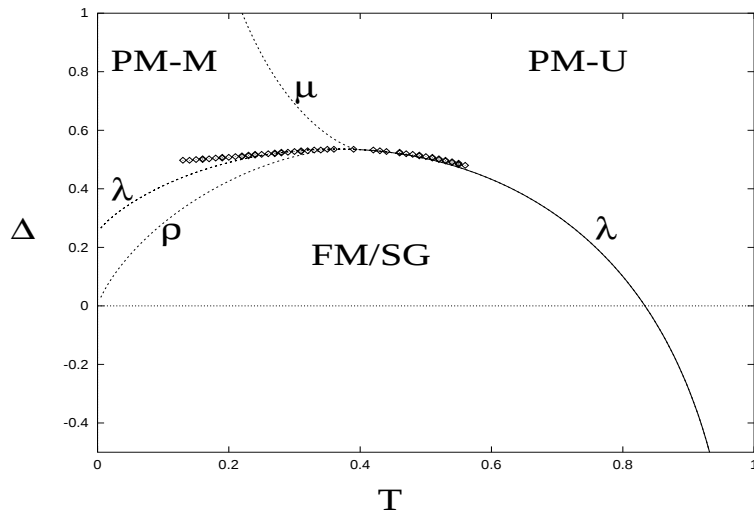


FIG. 11. The phase diagram of the disordered BEG-SK model, with the lines of stability in the chemical potential/temperature-representation, i.e., $\Delta - T$ -plane, for weak quadrupolar coupling $K = 0.16$ and a ferromagnetic coupling $\frac{J_F}{J} = 2.0$. The symbols have the following meanings: PM-M is the paramagnetic phase with many free energy minima, PM-U is the paramagnetic phase with an unique free energy minimum, FM/SG the ferromagnetic or eventually spin glas phase, μ gives the positvie sign branch, ϱ the negative sign branch of equation (22), respectively and λ is the second order transition line.

– Appendix A –
Calcul des répliques pour le modèle BEG

La hessienne a été donnée dans le texte principale et nous allons procéder ici à sa diagonalisation. Les coefficients de la hessienne sont donnés par

$$\begin{aligned}
 A &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha^2} = \beta J_o [1 - \beta J_o \langle s_\alpha^2 \rangle + \beta J_o \langle s_\alpha \rangle \langle s_\alpha \rangle] \\
 B &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha \partial m_\beta} = \beta^2 J_o^2 [\langle s_\alpha \rangle \langle s_\beta \rangle - \langle s_\alpha s_\beta \rangle] \\
 C &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\alpha} = \beta^2 J^2 \beta J_o [\langle s_\alpha s_\beta \rangle \langle s_\alpha \rangle - \langle s_\alpha^2 s_\beta \rangle] \\
 D &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial m_\gamma} \\
 P &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta}^2} \\
 Q &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\alpha\gamma}} \\
 R &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial q_{\gamma\delta}} \\
 U &= \frac{\partial^2 f}{\partial z_\alpha \partial z_\alpha} \\
 V &= \frac{\partial^2 f}{\partial z_\alpha \partial z_\beta} \\
 W &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha \partial z_\alpha} \\
 X &= \frac{\partial^2 f}{\partial m_\alpha \partial z_\beta} \\
 Y &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial z_\alpha} \\
 Z &= \frac{\partial^2 f}{\partial q_{\alpha\beta} \partial z_\gamma}
 \end{aligned}$$

La hessienne doit être évaluée au point symétrique dans les répliques. Mais avant de procéder nous introduisons une fonction ϕ afin d'alléger la notation :

$$\phi_k(y) = \frac{1}{Z(y)} \text{tr} [s^k e^{-\beta H_{\text{eff}}}] \quad (\text{II.A-1})$$

Dans le cas présent d'un modèle avec $s_i = -1, 0, 1$ cette fonction est très simple et elle prend les deux formes :

$$\begin{aligned}
 \phi_2(y) &= \frac{2 \cosh[\beta(J_o m + y J \sqrt{q} + h)]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2} \beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta(J_o m + y J \sqrt{q} + h)]} && \text{pour } k \text{ pair} \\
 \phi_1(y) &= \frac{2 \sinh[\beta(J_o m + y J \sqrt{q} + h)]}{e^{\beta \Delta + \frac{1}{2} \beta^2 J^2 q - \beta \kappa z} + 2 \cosh[\beta(J_o m + y J \sqrt{q} + h)]} && \text{pour } k \text{ pair.}
 \end{aligned}$$

Avec ces notations les équations du col s'écrivent comme :

$$\begin{aligned}
 m &= \langle s_\alpha \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y) \\
 z &= \langle s_\alpha^2 \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_2(y) \\
 q &= \langle s_\alpha s_\beta \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1^2(y).
 \end{aligned}$$

Ces équations déterminent les paramètres d'ordre. Le premier moment décrit l'aimantation spontanée, le deuxième moment homogène la densité et le deuxième moment hétérogène décrit le recouvrement

des deux configurations de spin. Les moments plus élevés sont donné ci-dessous.

$$\begin{aligned}
 r &= \langle s_\alpha s_\beta^2 \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y) \phi_2(y) \\
 s &= \langle s_\alpha^2 s_\beta^2 \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_2(y)^2 \\
 t &= \langle s_\alpha^3 s_\beta \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y)^2 \\
 u &= \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y)^3 \\
 v &= \langle s_\alpha^2 s_\beta s_\gamma \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y)^2 \phi_2(y) \\
 w &= \langle s_\alpha s_\beta s_\gamma s_\delta \rangle = \int \mathcal{D}y \phi_1(y)^4
 \end{aligned}$$

Si on effectue les calculs, on peut expliciter les éléments de la hessienne.

$$\begin{aligned}
 A &= \beta J_o [1 - \beta J_o (z - m^2)] & U &= \beta \kappa [1 - \beta \kappa (z - z^2)] \\
 B &= \beta^2 J_o^2 [m^2 - q] & V &= \beta^2 \kappa^2 [z^2 - s] \\
 C &= \beta^2 J^2 \beta J_o [mq - r] & W &= \beta J_o \beta \kappa [m(z - 1)] \\
 D &= \beta^2 J^2 \beta J_o [mq - u] & X &= \beta J_o \beta \kappa [mz - r] \\
 P &= \beta^2 J^2 [1 - \beta^2 J^2 (s - q^2)] & Y &= \beta^2 J^2 \beta \kappa q [z - 1] \\
 Q &= \beta^4 J^4 [q^2 - v] & Z &= \beta^2 J^2 \beta \kappa [zq - v] \\
 R &= \beta^4 J^4 [q^2 - w]
 \end{aligned}$$

Les vecteurs propres Nous allons maintenant décrire la diagonalisation de la hessienne. Cette diagonalisation va révéler trois familles des valeurs propres comme dans l'analyse de de Almeida et Thouless[dAT78]. Nous adaptons la notation à celle de Bray et Moore[BM78]. La première famille, qui est désigné comme la famille *longitudinale*, est définie par le système des équations comme suit :

$$\begin{aligned}
 a[U + (n-1)V - \lambda] + r[W + (n-1)X] + x[Y(n-1) + Z[\frac{n}{2}(n-1) - (n-1)]] &= 0 \\
 a[W + (n-1)X] + r[A + (n-1)B - \lambda] + x[C(n-1) + D[\frac{n}{2}(n-1) - (n-1)]] &= 0 \\
 a[2Y + (n-2)Z] + r[2C + (n-2)D] + x[P + 2(n-2)Q + R[\frac{n}{2}(n-1) - 2(n-1) - 1] - \lambda] &= 0.
 \end{aligned}$$

Le vecteur propre aura la forme :

$$\mathcal{L}_L = \begin{pmatrix} \varepsilon \\ \tau \\ \mu \end{pmatrix}. \tag{II.A-2}$$

La deuxième famille est définie par le système des équations modifié

$$\begin{aligned}
 a[U - V - \lambda] + b[W - X] + d(\frac{n}{2} - 1)[Y - Z] &= 0 \\
 a[W - X] + b[A - B - \lambda] + d(\frac{n}{2} - 1)[C - D] &= 0 \\
 2a[Y - Z] + 2b[C - D] + d(\frac{n}{2} - 1)[P + (n-4)Q + R(3-n) - \lambda] &= 0.
 \end{aligned}$$

et le vecteur propre aura la forme :

$$\mathcal{L}_{LA} = \begin{pmatrix} a \\ g & \alpha = \theta \\ a \\ b \\ c & \alpha = \theta \\ b \\ d \\ e & \alpha = \theta \\ e & \beta = \theta \\ d \end{pmatrix}. \quad (\text{II.A-3})$$

L'orthogonalité à la première famille exige :

$$\begin{aligned} c &= (1-n)a \\ g &= (1-n)b \\ e &= \left(1 - \frac{n}{2}\right)d. \end{aligned}$$

La troisième et dernière famille est désignée comme la famille *replicon* et est donnée par des vecteurs propres ayant la forme :

$$\mathcal{L}_{LA} = \begin{pmatrix} a \\ g & \alpha = \theta \\ a \\ b \\ c & \alpha = \theta \\ b \\ d \\ e & \alpha = \theta \\ f & (\alpha\beta) = (\theta\nu) \\ e & \beta = \nu \\ d \end{pmatrix}. \quad (\text{II.A-4})$$

De nouveau, il faut que la nouvelle famille soit orthogonale aux deux familles déjà construites et ceci exige :

$$\begin{aligned} a &= b \\ c &= d \\ g &= (2-n)f = (2-n)\frac{1}{2}(3-n)e \\ f &= \frac{1}{2}(3-n)e. \end{aligned}$$

La liberté pour choisir les valeurs de a et c n'est qu'une liberté apparente. Elles doivent être choisies égales à 0 afin d'éviter des valeurs propres triviales.

Les valeurs propres L'équation caractéristique de la hessienne est cubique car dans le modèle BEG apparaissent trois paramètres d'ordre. Cette équation peut s'écrire comme suit.

$$\lambda^3 + a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \quad (\text{II.A-5})$$

Nous donnons les coefficients pour la famille *longitudinal* dans la limite $n = 0$.

$$\begin{aligned} a &= -U + V - A + B - P + 4Q - 3R \\ b &= (W - X)^2 - (U - V)(P - 4Q + 3R) + (2Y - 2Z)(-Y + Z) \\ &\quad - (A - B)(P - 4Q + 3R) - (U - V)(A - B) + (-C + D)(2C - 2D) \\ c &= (U - V)(A - B)(P - 4Q + 3R) - (U - V)(-C + D)(2C - 2D) \\ &\quad - (W - X)^2(P - 4Q + 3R) + (W - X)(-Y + Z)(2C - 2D) \\ &\quad + (2Y - 2Z)(W - X)(-C + D) - (2Y - 2Z)(-Y + Z)(A - B) \end{aligned}$$

Pour donner les valeurs propres explicitement, il fallait résoudre les équations cubiques. Nous procédons en donnant la solution. Définissons

$$\begin{aligned} A &= \left(-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}\right)^{\frac{1}{3}} \\ B &= \left(-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}\right)^{\frac{1}{3}} \\ Q &= \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2 \\ p &= -\frac{a^2}{3} + b \\ q &= 2\left(\frac{a}{3}\right)^3 - \frac{1}{3}ab + c. \end{aligned}$$

Il est sous-entendu que nous choisissons seulement la racine réelle de la racine cubique. À l'aide de ces définitions nous pouvons écrire les solutions explicitement.

$$\begin{aligned} \lambda_{L1} &= A + B \\ \lambda_{L2} &= -\frac{1}{2}(A + B) + \frac{i}{2}\sqrt{3}(A - B) \\ \lambda_{L3} &= -\frac{1}{2}(A + B) - \frac{i}{2}\sqrt{3}(A - B) \end{aligned}$$

Appendix A

La deuxième famille obéit à la même structure pour sa solution, seuls les coefficients ont changé. Nous donnons ci-dessous ces coefficients pour la famille *longitudinal anomalous*.

$$\begin{aligned}
 a &= -U + V - A + B - P - (n-4)Q - (3-n)R \\
 &= -U + V - A + B - P + 4Q - 3R \\
 b &= (W-X)^2 - (U-V)(P + (n-4)Q + (3-n)R) + (2Y-2Z)\left(\frac{n}{2}-1\right)(Y-Z) \\
 &\quad - (A-B)(P + (n-4)Q + (3-n)R) - (U-V)(A-B) \\
 &\quad + \left(\frac{n}{2}-1\right)(C-D)(2C-2D) \\
 &= (W-X)^2 - (U-V)(P-4Q+3R) + (2Y-2Z)(-Y+Z) \\
 &\quad - (A-B)(P-4Q+3R) - (U-V)(A-B) + (-C+D)(2C-2D) \\
 c &= (U-V)(A-B)(P + (n-4)Q + (3-n)R) - (U-V)\left(\frac{n}{2}-1\right)(C-D)(2C-2D) \\
 &\quad - (W-X)^2(P + (n-4)Q + (3-n)R) + (W-X)\left(\frac{n}{2}-1\right)(Y-Z)(2C-2D) \\
 &\quad + (2Y-2Z)(W-X)\left(\frac{n}{2}-1\right)(C-D) \\
 &\quad - (2Y-2Z)\left(\frac{n}{2}-1\right)(Y-Z)(A-B) \\
 &= (U-V)(A-B)(P-4Q+3R) - (U-V)(-C+D)(2C-2D) \\
 &\quad - (W-X)^2(P-4Q+3R) + (W-X)(-Y+Z)(2C-2D) \\
 &\quad + (2Y-2Z)(W-X)(-C+D) - (2Y-2Z)(-Y+Z)(A-B)
 \end{aligned}$$

La deuxième égalité pour chaque coefficient est obtenu dans la limite $n \rightarrow 0$. Dans cette limite les coefficients sont réduits aux coefficients de la famille *longitudinal* et en conséquence les valeurs propres coïncident. La troisième valeur propre, celle de la famille *replicon*, est beaucoup plus simple et se trouve dans le texte principale.

– Annexe B –
Les modèles de p -spins

Le modèle de Sherrington et Kirkpatrick avec une interaction à p spins

Le modèle que nous allons discuter a été introduit par D. J. Gross et M. Mézard [GM84]. L'approche permet de résoudre exactement le problème d'un modèle d'Ising avec du désordre gelé. On s'aperçoit qu'après avoir moyenné sur le désordre, il suffit d'un pas de brisure dans le schéma de Parisi pour obtenir une solution stable. Ceci n'est pas vrai seulement pour le cas $p \rightarrow \infty$, discuté ci-dessous, mais aussi pour des interactions à nombre $p > 2$ fini des spins [GM84]. Le Hamiltonien de départ est celui de verre de spins d'Ising à p spins.

$$H = - \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} J_{i_1, \dots, i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} - h \sum_i s_i \quad (\text{II.B-1})$$

Gross et Mézard ont choisi une distribution gaussienne avec une moyenne qui s'annule et une largeur $\langle (J_{i_1, \dots, i_p})^2 \rangle = J^2$ non nulle :

$$P(J_{i_1, \dots, i_p}) = \sqrt{\frac{N^{p-1}}{\pi p! J^2}} \exp\left\{-\frac{J_{i_1, \dots, i_p}^2 N^{p-1}}{p! J^2}\right\}. \quad (\text{II.B-2})$$

On effectue la moyenne en utilisant l'astuce des répliques et on obtient pour le n -ième puissance de la fonction de partition :

$$\overline{Z^n} = \text{tr} e^{\beta h \sum_{i, \alpha} s_i^\alpha} \exp\left\{\frac{\beta^2 J^2 p!}{4 N^{p-1}} \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} \sum_{\alpha, \beta} s_{i_1}^\alpha \dots s_{i_p}^\alpha s_{i_1}^\beta \dots s_{i_p}^\beta\right\}. \quad (\text{II.B-3})$$

Ceci se simplifie en utilisant $\sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} = \frac{1}{p!} \sum_{1 \leq i_1 \dots i_p \leq N} = \frac{N^p}{p!}$ et le fait que le terme diagonal de la somme vaut $n N^p$. Nous allons définir un paramètre d'ordre comme suit : $q_{\alpha\beta}(s) = \frac{1}{N} \sum_i s_i^\alpha s_i^\beta$. Avec cette définition la fonction de partition s'écrit comme :

$$\overline{Z^n} = \text{tr} e^{\beta h \sum_{i, \alpha} s_i^\alpha} \exp\left\{n N \frac{1}{4} \beta^2 J^2 + N \frac{1}{4} \beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} (q_{\alpha\beta}(s))^p\right\}. \quad (\text{II.B-4})$$

Afin de pouvoir factoriser la trace et ainsi réduire le problème à un problème effectif à un site nous allons introduire le multiplicateur de *Lagrange* $\hat{q}_{\alpha\beta}$ par $\delta(N q_{\alpha\beta}(s) - \sum_i s_i^\alpha s_i^\beta)$ et intégrer sur le multiplicateur.

$$\begin{aligned} & \int \prod_{\alpha \neq \beta} \mathbf{d} q_{\alpha\beta} \prod_{\alpha \neq \beta} \delta(N q_{\alpha\beta} - \sum_i s_i^\alpha s_i^\beta) \\ &= \int \prod_{\alpha \neq \beta} \mathbf{d} q_{\alpha\beta} \int \prod_{\alpha \neq \beta} \frac{\mathbf{d} \hat{q}_{\alpha\beta}}{4\pi i} \exp\left\{-\frac{N}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta, i} \hat{q}_{\alpha\beta} s_i^\alpha s_i^\beta\right\} \end{aligned} \quad (\text{II.B-5})$$

$$(\text{II.B-6})$$

Ceci donne une trace factorisé et le problème est réduit à celui d'un site :

$$\text{tr} e^{\beta h \sum_{i, \alpha} s_i^\alpha} = \text{tr} \prod_i e^{\beta h \sum_{\alpha} s_i^\alpha} = \exp\{N \ln[\text{tr} e^{\beta h \sum_{\alpha} s_{\alpha}}]\}. \quad (\text{II.B-7})$$

La n -ième puissance de la fonction de partition moyenné vaut :

$$\overline{Z^n} = \int \prod_{\alpha \neq \beta} d q_{\alpha\beta} \int \prod_{\alpha \neq \beta} \frac{d \hat{q}_{\alpha\beta}}{4\pi i} e^{-nNG}, \quad (\text{II.B-8})$$

avec l'énergie libre donnée par :

$$f = -\frac{1}{4}\beta^2 J^2 - \frac{1}{n} \left[\frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} q_{\alpha\beta} - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 \sum_{\alpha \neq \beta} (q_{\alpha\beta})^p \right] - \frac{1}{n} \ln[\text{tr} e^{\beta h \sum_{\alpha} s^{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} s^{\alpha} s^{\beta}}]. \quad (\text{II.B-9})$$

$$(\text{II.B-10})$$

Pour résoudre cette équation il faut faire des suppositions sur la forme de la matrice du paramètre d'ordre. La plus simple consiste en supposant que la symétrie des répliques est :

$$\hat{q}_{\alpha\beta} = \hat{q} \quad q_{\alpha\beta} = q \forall \alpha \neq \beta. \quad (\text{II.B-11})$$

À cause de la définition du paramètre d'ordre $q_{\alpha\beta}$, cette matrice est sans trace $q_{\alpha\alpha} = 0$. En général, les $n(n-1)$ éléments restant sont différents de zéro. Dans la limite $n \rightarrow 0$ il en reste $\approx -n$, dans l'ordre le plus bas. Avec la supposition de la symétrie des répliques, il est possible de compléter le carré $\sum_{\alpha \neq \beta} \hat{q}_{\alpha\beta} s^{\alpha} s^{\beta} = \hat{q}(\sum_{\alpha} s^{\alpha})^2 - \hat{q} \sum_{\alpha} (s^{\alpha})^2$ et finalement à l'aide de la transformation *Hubbard-Stratonowich* il est possible de linéariser le carré.

$$\beta f = -\frac{1}{4}\beta^2 J^2 - \frac{1}{2}\hat{q}q + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^p - \frac{1}{n} \ln \left[\int \mathcal{D}z \text{tr} e^{\beta h \sum_{\alpha} s^{\alpha} + z\sqrt{\hat{q}} \sum_{\alpha} s^{\alpha} - \frac{1}{2}\hat{q} \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2} \right] \quad (\text{II.B-12})$$

Nous avons effectué la trace et en utilisant $\ln[\int \mathcal{D}t(\dots)^n] = n \int \mathcal{D}t \ln[\dots]$ dans la limite des petits n , on obtient finalement l'énergie libre sous la forme :

$$\beta f = \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^p + \frac{1}{2}\hat{q} - \frac{1}{2}\hat{q}q - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 - \int \mathcal{D}z \ln[2 \cosh(\beta h + z\sqrt{\hat{q}})]. \quad (\text{II.B-13})$$

Les équations de cols donnent en intégrant partiellement

$$\begin{aligned} \hat{q} &= \frac{1}{2} J^2 \beta^2 p q^{p-1} \\ q &= \int \mathcal{D}z \tanh^2(\beta h + z\sqrt{\hat{q}}). \end{aligned}$$

Il n'y a qu'une solution avec une énergie non divergente : $\lambda = 0, q = \tanh^2(\beta h)$. En regardant l'entropie on s'aperçoit qu'elle s'annule en-dessous d'une température critique. Ceci représente le même défaut de la solution symétrique comme dans le cas du modèle de Sherrington et Kirkpatrick. Dans ce cas-là il est possible de remédier aux défauts de la solution symétrique. Afin de posséder une solution stable il faut briser la symétrie. Pour un pas de brisure $q_{\alpha\beta} \rightarrow q_0, q_1$ on obtient l'énergie libre suivante

$$\beta f = -\frac{1}{4}\beta^2 J^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 (m-1)q_1^p - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m q_0^p - \frac{1}{2}(m-1)q_1 \hat{q}_1 - \frac{1}{2}\hat{q}_1 + \frac{1}{2}m q_0 \hat{q}_0 + \ln[2] + \frac{1}{m} \int \mathcal{D}z \ln \left[\int \mathcal{D}w \cosh^m(\beta h + z\sqrt{\hat{q}_0} + w\sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}) \right]. \quad (\text{II.B-14})$$

$$(\text{II.B-15})$$

Comme pas préliminaire, les équations de col peuvent être déduites pour $\hat{q}_0$ et $\hat{q}_1$ donnant la même forme que ci-dessus. Afin d'obtenir une brisure non-triviale c'est-à-dire qui ne se réduit pas à la solution symétrique on impose $q_0 < q_1 \leq 1$ et alors $q_1 = 1$ et par conséquent $\hat{q}_0 = 0$ et $\hat{q}_1 \rightarrow \infty$ quand $p \rightarrow \infty$. Avec cette supposition les intégrales peuvent être évaluées et l'énergie libre donne :

$$\begin{aligned} \beta f = & -\frac{1}{4}\beta^2 J^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2(m-1)q_1^p - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m q_0^p - \frac{1}{2}(m-1)q_1 \hat{q}_1 - \frac{1}{2}\hat{q}_1 \\ & + \frac{1}{2}m q_0 \hat{q}_0 + \frac{1}{2}m \hat{q}_1 + \frac{1}{2}m \hat{q}_0 \tanh^2(m\beta h) + \frac{1}{m} \ln 2 \cosh(m\beta h). \end{aligned} \quad (\text{II.B-16})$$

Les dérivées par rapport à $\hat{q}_0$ et $\hat{q}_1$ confirment les valeurs pour les paramètres d'ordre $q_0 = \tanh^2(m\beta h) < 1$ et $q_1 = 1$. Pour la brisure à un pas il reste une équation de col qui donne comme condition pour la sous-division de la matrice : $q_{\alpha\beta}$

$$m^2 \beta^2 J^2 = 4 [\ln[2 \cosh(m\beta h)] - m\beta h \tanh(m\beta h)]. \quad (\text{II.B-17})$$

À l'aide de cette équation et des valeurs des paramètres d'ordre au col, l'énergie libre se simplifie pour donner :

$$\beta f = -\frac{1}{2}\beta^2 J^2 + \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m + \frac{1}{m} \ln 2 \cosh(m\beta h). \quad (\text{II.B-18})$$

Les résultats sont consistants et en accord avec le modèle des énergies aléatoires de Derrida [Der80, Der81]. En effet Gross et Mézard montrent que les deux modèles dans la limite $p \rightarrow \infty$ deviennent identiques. Ils décrivent la même physique. Ces auteurs ont également montré qu'une brisure de symétrie à plusieurs pas se réduit toujours à celle d'un pas. Dans ce sens-là, le modèle à p spins est résolu exactement après la brisure à un pas. J'ai exposé ici en détail le calcul pour le modèle de verre de spin avec une interaction à p spins. Ceci sert dans ce qui suit comme référence.

Le modèle de Blume, Emery et Griffiths avec p -spins interaction

La généralisation du calcul précédent s'effectue en changeant dans le Hamiltonien de Blume, Emery et Griffiths le terme d'interaction linéaire

$$\sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \rightarrow \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} \quad (\text{II.B-19})$$

Ceci donne pour l'Hamiltonien complet :

$$H = - \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} J_{i_1 \dots i_p} s_{i_1} \dots s_{i_p} - \frac{K}{2N} \sum_{1 \leq i_1 \leq \dots \leq i_p \leq N} s_{i_1}^2 \dots s_{i_p}^2 + \Delta \sum_i s_i^2 - h \sum_i s_i \quad (\text{II.B-20})$$

Effectuons les mêmes manipulations comme dans le cas du modèle de verre de spins décrit plus haut, on obtient dans l'approximation de la symétrie des répliques une énergie libre comme suit

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{4}\beta^2 J^2 q^p + \beta \Delta r + \frac{1}{2}r \hat{q} + \frac{1}{2}r \hat{r} \\ & - \left(\frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{\beta K}{2} \right) r^p - \frac{1}{2} \hat{q} q - \int \mathcal{D}z \ln[1 + 2e^{\hat{r}/2} \cosh(\beta h + z \sqrt{\hat{q}})]. \end{aligned} \quad (\text{II.B-21})$$

$$(\text{II.B-22})$$

D'où on obtient des équations de col suivantes :

$$\begin{aligned}\hat{q} &= \frac{1}{2} J^2 \beta^2 p q^{p-1} \\ \left(\frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{\beta K}{2}\right) p r^{p-1} &= \frac{1}{2} \hat{r} + \beta \Delta + \frac{1}{2} \hat{q} \\ q &= \int \mathcal{D}z \frac{\sinh^2(\beta h + z\sqrt{\hat{q}})}{\left[\frac{1}{2}e^{-\hat{r}/2} + \cosh(\beta h + z\sqrt{\hat{q}})\right]^2} \\ r &= \int \mathcal{D}z \frac{\cosh(\beta h + z\sqrt{\hat{q}})}{\frac{1}{2}e^{-\hat{r}/2} + \cosh(\beta h + z\sqrt{\hat{q}})}.\end{aligned}$$

Ces équations permettent plusieurs solutions. Pour décider si la solution est acceptable ou non, nous regardons l'énergie libre et l'entropie :

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T} = \beta \frac{\partial \beta f}{\partial \beta} - \beta f. \quad (\text{II.B-23})$$

Pour ce qui suit, il est commode de définir $\kappa = \frac{\beta^2 J^2}{4} + \frac{\beta K}{2}$.

$$(i). \quad \begin{array}{ll} \hat{r} = \infty & r = 1 \\ \hat{q} = 0 & q < 1 \end{array}$$

$$\begin{aligned}\beta f &= -\kappa + \Delta\beta - \ln[2 \cosh(\beta h)] \\ S &= -\beta h \tanh(\beta h) \\ &\quad + \ln[2 \cosh(\beta h)] \geq 0\end{aligned}$$

Ce choix des paramètres permet une solution avec une entropie non-négative, mais comme le paramètre d'ordre r est la concentration de He^4 , la solution n'est pas très intéressante. Il n'y aura pas une séparation de phase.

$$(ii). \quad \begin{array}{ll} \hat{r} = \infty & r = 1 \\ \hat{q} = \infty & q = 1 \end{array}$$

Pour la prochaine possibilité, on constate que l'énergie libre diverge et alors cette solution n'est pas acceptable.

$$\begin{aligned}\beta f &= -\frac{1}{2}\beta K - \ln[2 \cosh(\beta h)] \\ &\xrightarrow{p \rightarrow \infty} -\infty.\end{aligned}$$

$$(iii). \quad \begin{array}{ll} \hat{r} = -2\Delta\beta & r < 1 \\ \hat{q} = 0 & q < 1 \end{array}$$

$$\begin{aligned}\beta f &= -\ln[2 \cosh(\beta h)] \\ S &= \beta \left[\frac{h \sinh(\beta h) - \Delta \cosh(\beta h)}{1 + 2e^{-\beta\Delta} \cosh(\beta h)} \right] \\ &\quad - \ln[1 + 2e^{-\beta\Delta} \cosh(\beta h)] < 0\end{aligned}$$

Cette solution n'a pas une énergie libre divergente mais l'entropie est négative pour toute température.

On se rend compte que dans la limite $p \rightarrow \infty$ la seule solution intéressante, symétrique en répliques, possède une entropie négative. La situation peut peut-être être sauvée en brisant la symétrie comme dans l'approche de Gross et Mézard. De nouveau nous exigeons de la solution que la symétrie soit non-trivialement brisée : $0 \leq q_0 < q_1 \leq 1$. L'énergie libre vaut :

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{4}\beta^2 J^2(m-1)q_1^p - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m q_0^p + \frac{1}{2}m q_0 \hat{q}_0 - \frac{1}{2}(m-1)q_1 \hat{q}_1 - \frac{1}{2}\hat{q}_1 r \\ & - \frac{1}{2}\hat{r}_1 r + \beta \kappa r^p - \beta \Delta r + \frac{1}{m} \int \mathcal{D}z \ln \left[\int \mathcal{D}w \left[1 + 2e^{\hat{r}/2} \cosh(\beta h + z\sqrt{\hat{q}_0} + w\sqrt{\hat{q}_1 - \hat{q}_0}) \right]^m \right]. \end{aligned} \quad (\text{II.B-24})$$

Comme auparavant, nous nous intéressons d'abord au paramètre d'ordre de verre de spin. À partir de l'énergie libre, les équations du col s'écrivent

$$\begin{aligned} \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m p q_0^{p-1} &= \frac{1}{2}m \hat{q}_0 \\ \frac{1}{4}\beta^2 J^2(m-1)p q_1^{p-1} &= \frac{1}{2}(m-1)\hat{q}_1. \end{aligned}$$

De nouveau les intégrales peuvent être évalués et donnent :

$$\begin{aligned} \beta f = & \frac{1}{4}\beta^2 J^2(m-1)q_1^p - \frac{1}{4}\beta^2 J^2 m q_0^p + \frac{1}{2}m q_0 \hat{q}_0 - \frac{1}{2}(m-1)q_1 \hat{q}_1 - \frac{1}{2}\hat{q}_1 r \\ & - \frac{1}{2}\hat{r} r + \beta \kappa r^p - \beta \Delta r - \frac{1}{2}\hat{r} - \frac{1}{2}\hat{q}_1 - \frac{1}{m} \ln [2 \cosh(m\beta h)] + \frac{1}{2}m \hat{q}_0 \tanh^2(m\beta h). \end{aligned} \quad (\text{II.B-25})$$

À partir de cette énergie libre simplifiée, les équations du col restantes s'écrivent

$$\begin{aligned} q_0 &= \tanh^2(m\beta h) \\ \frac{1}{2}m &= \frac{1}{2}(m-1)q_1 + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}r &= \frac{1}{2} \\ \beta \kappa p r^{p-1} &= \frac{1}{2}r + \frac{1}{2}\hat{q}_1 + \beta \Delta. \end{aligned}$$

Il découle de ces conditions qu'en brisant la symétrie des répliques, on n'obtient pas un modèle analogue à celui de Blume, Emery et Griffiths. La concentration de He^4 est ici fixée à être $1 - x = 1$ tel qu'il n'y aura pas une séparation de phase. Alors il n'est pas possible de garder les propriétés du modèle de Blume, Emery et Griffiths en changeant l'interaction linéaire en une interaction à p spins et considérer la limite $p \rightarrow \infty$. Ceci aurait permis d'étudier le modèle exactement. Nous sommes maintenant obligé d'appliquer le schéma complet de brisure des répliques afin d'avoir une solution stable. Nous commençons ce projet dans le texte principal. D'abord nous traitons le modèle au niveau des répliques symétriques. Ensuite nous analysons sa stabilité. Le calcul pour une brisure à un pas et à une infinité des pas a été effectué.

Chapitre III

Propriétés statistiques associées aux algorithmes heuristiques

Plan du chapitre

III.1 Motivations	104
III.2 Le problème de la bipartition de graphe	106
III.3 Des heuristiques pour la bipartition de graphe	108
III.4 Propriétés statistiques des coûts engendrés par des heuristiques	112
III.5 Qualités des solutions engendrées par des heuristiques	115
III.6 Discussion	120
III.7 Article soumis au SIAM Journal of Optimization	123
III.8 Proceedings de la 2eme Conférence Internationale des Metaheuristiques	141
Annexe A	157

L'optimisation combinatoire est un domaine de recherche qui traite de problèmes ayant de nombreuses origines. Comme je l'ai exposé dans l'introduction générale (chapitre I) l'une de ces origines est la physique statistique et les systèmes complexes. Ces problèmes peuvent souvent être identifiés à des systèmes désordonnés et frustrés tels que les verres de spins. Ces problèmes possèdent un représentant éminent : il s'agit du problème de bipartition de graphe.

Le sujet de ce chapitre est d'analyser la performance des algorithmes heuristiques à l'aide de méthodes empruntées à la physique statistique. Dans ce qui suit, je vais expliquer plus en détail pourquoi nous nous intéressons à l'optimisation combinatoire. Je vais donner la définition du problème de partition de graphe et présenter une correspondance entre ce problème et les verres de spins. Ensuite je discuterai de quelques algorithmes heuristiques. Enfin je présenterai des résultats concernant les propriétés statistiques des solutions obtenues par des algorithmes heuristiques. J'ai inclus dans cette étude numérique des algorithmes classiques ainsi qu'un nouvel algorithme hybride. Nous discuterons aussi du comportement des coûts en fonction de la taille des graphes : notre étude met en évidence la détérioration de la qualité des solutions engendrées par des heuristiques lorsque la taille du système croît.

En outre, nous avons établi des critères pour comparer les algorithmes heuristiques. Différentes caractérisations de la puissance d'un algorithme mènent à un classement des différentes heuristiques. Notre méthode tient compte à la fois de la qualité de la solution obtenue et du temps de calcul nécessaire pour l'obtenir. Nos résultats concernant les propriétés statistiques des heuristiques assurent que ce classement est robuste. Aussi la méthode peut être utilisée pour n'importe quel problème d'optimisation combinatoire.

– III.1 – Motivations

De nombreux problèmes d'optimisation combinatoire ayant une importance pratique sont $\mathcal{NP}$ -difficile. Pour de tels problèmes il est prohibitif d'utiliser des algorithmes de résolution exacte. De tels algorithmes garantissent l'obtention d'une solution optimale, mais le temps de calcul nécessaire croît typiquement exponentiellement avec la taille du système. Pour cette raison, ces algorithmes ne sont pas utilisés en pratique lorsque la taille est importante. Afin d'obtenir au moins une solution approchée, des algorithmes heuristiques sont utilisés à la place. D'habitude ces algorithmes trouvent une solution en un temps polynomial mais ne garantissent pas que la solution trouvée soit optimale [LR93].

La pratique exige le plus souvent que l'on compare différentes heuristiques quand à leurs propriétés *typiques*. Par contre, l'analyse théorique en informatique concerne en général le comportement d'un algorithme dans le plus mauvais des cas. Comme ce comportement peut être très différent du comportement typique ou moyen, une autre approche est nécessaire. Or justement, en physique statistique, on s'intéresse aux propriétés moyennes. Nous utiliserons donc le point de vue et les techniques de la physique statistique pour étudier les propriétés *statistiques* des heuristiques. Pour trouver le comportement moyen de nos algorithmes heuristiques, il faut effectuer une moyenne sur différentes instances. On choisit en général pour de telles études des instances aléatoires : le problème d'optimisation combinatoire devient alors un problème d'optimisation combinatoire stochastique. Ceci correspond en physique statistique des systèmes désordonnés à effectuer une moyenne sur le désordre.

Propriétés statistiques Considérons un problème d'optimisation combinatoire stochastique donné. Désignons par $\mathcal{C}_0$ son coût optimal pour une instance particulière. $\mathcal{C}_0$ est une variable aléatoire, les instances étant prises dans un ensemble. Pour certains problèmes d'optimisation combinatoire stochastiques, on peut montrer que la distribution de $\mathcal{C}_0$ devient piquée lorsque la taille des instances (N) devient grande. Les fluctuations relatives autour de la moyenne tendent alors vers zéro :

$$\frac{\overline{\mathcal{C}_0^2} - \overline{\mathcal{C}_0}^2}{\overline{\mathcal{C}_0}^2} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 0 \quad (\text{III.1-1})$$

où $\overline{\mathcal{C}_0}$ est la moyenne sur le désordre. Dans la limite de grande taille $N \rightarrow \infty$ la distribution du coût réduit tend vers une distribution δ . Ce comportement de la distribution, souvent appelé *auto-moyennage*, reflète la loi des grands nombres et est typique de processus dans lesquels un grand nombre de termes contribuent. Cette propriété a pu être démontré pour le problème du voyageur de commerce [BHH59, LLRS84], le problème de l'appariement minimale [Ste97], ainsi que quelques autres problèmes. En particulier, pour le problème de bipartition de graphe, il est possible de montrer que la distribution de $\mathcal{C}_0$ devient piquée à grand N en utilisant l'inégalité d'Azuma [Azu67].

En fait, on s'attend non seulement à ce que le coût *optimal* soit auto-moyennant, mais aussi à ce que d'autres coûts le soient. Prenons par exemple le cas des coûts associés aux solutions choisies au hasard. Il est assez facile de démontrer que ce coût aléatoire est auto-moyennant pour la plupart des problèmes d'optimisation combinatoire (voir par exemple Mühlenbein *et al.* [MGSK88]) et nous avons démontré que c'est le cas pour le problème de la bipartition de graphe. Suivons maintenant une analogie avec la physique statistique, et considérons toutes les solutions pondérées par le facteur de Boltzmann associé à leur coût. Dans tous les systèmes physiques, le coût est auto-moyennant à toute température. Notons que la température nulle redonne le cas de $\mathcal{C}_0$, et que la température infinie redonne le cas des solutions choisies au hasard. De façon plus générale, on s'attend à avoir des coûts auto-moyennants si les solutions sont engendrées par un processus stochastique qui n'introduit pas

trop de corrélations à grand N car on retombe alors sur les conditions permettant de satisfaire le théorème de la limite centrale.

Nous suggérons ici que la propriété d'auto-moyennage est assez générique, et qu'elle s'applique aux coûts trouvés par des algorithmes heuristiques. L'objet de ce chapitre est d'approfondir cette conjecture. Nous avons vérifié numériquement dans le cadre du problème de bipartition de graphe que le coût est auto-moyennant pour toutes les heuristiques considérées. La figure III-1 illustre cette propriété d'auto-moyennage dans ce problème pour un algorithme heuristique donné que nous présenterons plus tard.

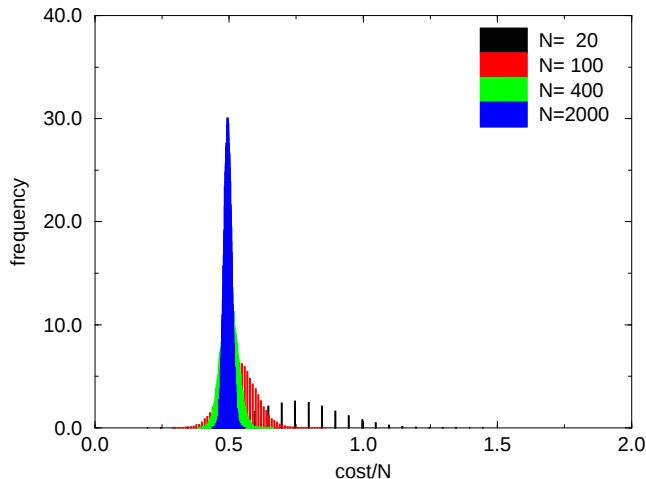


FIG. III-1: Distributions des coûts engendrées par un algorithme heuristique pour le problème de la bipartition de graphe (tailles du graphe $N = 20, 100, 500$, et 2000).

Pour certains problèmes d'optimisation combinatoire stochastiques il est possible de démontrer non seulement que le coût est auto-moyennant, mais aussi qu'il obéit une loi d'échelle à grand N . Par exemple, on aura le plus souvent une loi en puissance, $\mathcal{C} \sim N^\gamma$. Un résultat plus fort est qu'avec probabilité 1, $\mathcal{C}/N^\gamma \rightarrow \beta$ quand $N \rightarrow \infty$. Une telle loi d'échelle est connue pour le voyageur de commerce, mais n'a pas été démontré pour le problème de la bipartition sur des graphes lacunaires, graphes qui nous concernent dans ce chapitre et le suivant.

Un classement Supposons donnés un problème d'optimisation combinatoire et des algorithmes heuristiques correspondants. On peut classer ces algorithmes par la valeur moyenne du coût qu'ils obtiennent sur un ensemble donné d'instances. Si la moyenne est aussi la valeur typique du coût, le classement par la valeur moyenne est justifié. Pour le problème étudié dans ce chapitre, les coûts sont auto-moyennants, et donc la valeur moyenne donne la valeur typique quand N est grand. Nous illustrons le classement correspondant dans la figure III-2 où l'on voit que les recouvrement entre les distributions sont très faibles.

Dans la pratique, il est souhaitable de tenir compte non seulement de la qualité des solutions engendrées, mais aussi du temps de calcul utilisé par chaque heuristique car les écarts de vitesse entre les différents algorithmes peuvent être très grands. Nous allons donc introduire dans la section III.5 une méthode de classement qui pondère la qualité et la vitesse d'une heuristique. De façon imagée,

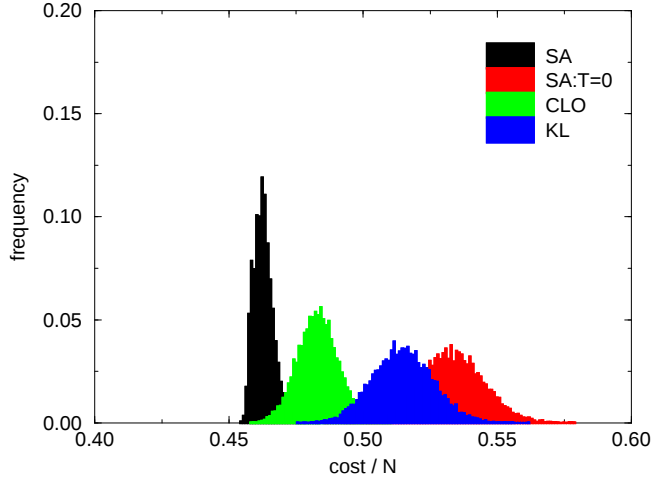


FIG. III-2: Distributions des coûts pour différentes heuristiques appliquées au problème de la bipartition de graphe (graphes de taille $N = 1000$).

notre quantification de la *performance* repose sur la possibilité de répéter une recherche heuristique, et revient à peu près à mesurer la qualité de l'heuristique par unité de temps de calcul.

– III.2 – Le problème de la bipartition de graphe

Le problème auquel je m'intéresse dans ce chapitre et celui de la partition d'un graphe, qui est appelé en anglais le problème *Min-Cut*. Plus précisément je vais étudier le problème de la bipartition de graphe où il faut partitionner les sommets d'un graphe en deux ensembles de même taille. Du fait de son importance pratique, le problème de la bipartition de graphe est un problème très étudié [KL70, Bui83, BHJL89]. La bipartition de graphe peut être rencontré dans des problèmes comme : le placement des composants électroniques (VLSI) [DK84, DK85, Joh96, Len90] [SM91, KGV83, Gro86], les calculs sur ordinateurs parallèles [BB87, LH94], ainsi que la pagination de mémoire et la segmentation des logiciels [Ker69]. Il s'agit d'un problème $\mathcal{NP}$ -difficile [GJ79].

Définition du problème d'optimisation Considérons un graphe $G(V, E)$ constitué de N sommets et d'arêtes $E_{ij} \in E$, avec $E_{ij} = 1$ si i, j sont reliés, $E_{ij} = 0$ sinon. Une bipartition de ce graphe est la séparation de l'ensemble des points V en deux sous-ensembles V_1 et V_2 . Le coût $\mathcal{C}$ de la coupure associé à une partition est la somme : $\mathcal{C} = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} E_{ij}$ portant sur les arêtes $E_{ij} \in E$ qui joignent les deux sous-ensembles. Le problème de la bipartition d'un graphe (PPG, cf. chapitre I, section I.3), consiste à trouver une coupure minimale telle que la taille des deux sous-ensembles soit identique, $|V_1| = |V_2| = N/2$. Pour la version stochastique du PBG, il faut spécifier les graphes utilisés. Soit $G(N, p)$ l'ensemble des graphes à N sommets dont les arêtes sont placées chacune avec une probabilité p . Cet ensemble représente une classe de graphes aléatoires. Le PBG sur de tels graphes est alors un problème d'optimisation combinatoire stochastique.

III.2 Le problème de la bipartition de graphe

Formulation en termes de spins d'Ising Nous exposons maintenant une formulation du PBG qui le ramène au problème de trouver l'état fondamental d'un verre de spins. Fu et Anderson [FA86] ont introduit une correspondance de la façon suivante. À chaque sommet $v_i \in V$ on associe un spin s_i qui peut prendre les valeurs ± 1 selon qu'il appartient au sous-ensemble V_1 ou V_2 . La condition que la taille des deux sous-ensembles soit la même se traduit par la contrainte :

$$\sum_{i=1}^N s_i = 0. \quad (\text{III.2-1})$$

Dans le langage de la physique statistique cette contrainte signifie que l'aimantation est nulle. Cette contrainte introduit effectivement une interaction antiferro-magnétique globale d'une portée infinie, conduisant à un système *frustré*. L'interaction entre spins est portée par des constantes de couplage $J_{ij} = 2E_{ij} - 1$. Comme les arêtes sont placées avec une probabilité p , la probabilité que J_{ij} soit égale à 1 est p . Il s'agit donc d'un modèle verre de spins du type Viana-Bray, mais avec une interaction globale antiferro-magnétique. Le Hamiltonien s'écrit de la façon suivante :

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} s_i s_j \quad \text{avec} \quad \sum_{i=1}^N s_i = 0. \quad (\text{III.2-2})$$

Comme $s_i s_j = \pm 1$ et que les contributions ne sont non-nulles que si s_i et s_j sont connectés, le Hamiltonien peut s'écrire :

$$H = -\frac{1}{2} \left[\sum_{\substack{i \in V_1 \\ j \in V_1}} + \sum_{\substack{i \in V_2 \\ j \in V_2}} + \sum_{\substack{i \in V_1 \\ j \in V_2}} + \sum_{\substack{i \in V_2 \\ j \in V_1}} \right] J_{ij} + \left[\sum_{\substack{i \in V_1 \\ j \in V_2}} + \sum_{\substack{i \in V_2 \\ j \in V_1}} \right] J_{ij} \quad (\text{III.2-3})$$

Le premier terme ne dépend pas de la partition (c'est-à-dire des spins) ; dans le cadre de cette discussion, nous le remplaçons par sa valeur moyenne, $-N(N-1)p/2$. Le second terme est deux fois la coupure de la partition considérée $\mathcal{C}$. On obtient à grand N :

$$H = -\frac{N(N-1)}{2}p + 2\mathcal{C} \quad \text{d'ou} \quad \mathcal{C} = \frac{N(N-1)}{4}p + \frac{H}{2}, \quad (\text{III.2-4})$$

avec la contrainte de aimantation zéro $\sum_{i=1}^N s_i = 0$. Le problème de la bipartition de graphe se ramène alors à la recherche de l'état fondamental d'un verre de spins. Jusqu'ici cette argumentation a été générale : la correspondance est valable pour les verres de spins sur tous types de graphes. Maintenant, nous allons discuter des différents types de graphes et des résultats correspondants.

Graphes aléatoires Dans toute la suite, nous allons nous restreindre aux graphes aléatoires. Ces graphes sont caractérisés par une probabilité p qu'une arête quelconque soit présente. Si on choisit pour la probabilité p une valeur constante, indépendante de la taille N , on obtient des graphes denses : la coordination $\alpha = p(N-1)$ est proportionnelle à la taille N du graphe. Nos calculs ont été effectués pour des graphes lacunaires où $p = O(1/N)$. Jusqu'à présent, il n'y a pas de solution exacte pour des verres de spins sur des graphes lacunaires. Dans la littérature deux ensembles de graphes lacunaires ont été étudiés : Dans un cas on fixe la coordination α et on place aléatoirement les arêtes de façon à ce que chaque sommet soit relié *exactement* à α sommets. Dans l'autre cas, on ne fixe pas la coordination

mais on prend $p \sim \alpha/N$ de sorte qu'il y a en moyenne α arêtes qui partent d'un sommet. Dans le prochain chapitre nous allons étudier les graphes à coordination fixe. Par contre dans ce chapitre nous étudions les graphes aléatoires lacunaires avec une coordination moyenne α . Viana et Bray [VB85] ont étudié ce problème analytiquement en utilisant l'approche des répliques sans brisure de symétrie. Cette approche donne des solutions instables, et une généralisation avec brisure de symétrie des répliques n'a pas encore vu le jour.

Résultats pour des graphes denses Fu et Anderson considèrent le cas des graphes denses, $G(N, p)$ avec p indépendant de N auquel cas on retombe sur le modèle SK qui a été résolu dans le cadre de la théorie des répliques [Par80a]. L'énergie de l'état fondamental $H(N, p)$ dans la limite de grand N s'écrit : $H(N, p) = -c(p(1-p))^{\frac{1}{2}} N^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(N)$. Pour utiliser ce résultat dans le cas de la bipartition de graphe, il est nécessaire de tenir compte de la contrainte d'aimantation nulle. Mézard et Parisi [MP86] ont montré qu'on peut négliger cette contrainte dans la limite de grande taille si la distribution des champs locaux est symétrique, ce qui est le cas quand $\alpha \gg 1$ et les deux modèles sont alors équivalents [MPV87]. Ainsi on peut reformuler l'expression pour l'énergie de l'état fondamental en laissant de côté la contrainte et on obtient pour la coupure minimale :

$$\overline{\mathcal{C}}_0 = \frac{N^2}{4}p - c(p(1-p))^{\frac{1}{2}} N^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(N), \quad (\text{III.2-5})$$

où c est une constante obtenue par des calculs numériques et qui vaut $U(T=0)/2 \approx 0.38$. Pour plus de détails concernant la solution du modèle SK due à Parisi, je renvoie le lecteur au paragraphe I.2. Le résultat (III.2-5) est une loi d'échelle $\overline{\mathcal{C}}_0/N^2 \rightarrow p/4$ pour le coût minimal. En outre, le coût minimal pour le problème de la bipartition des graphes denses est auto-moyennant. Fu et Anderson ont donc pu montrer la validité des lois d'échelle pour le problème de la bipartition de graphe sur l'ensemble $G(N, p)$ avec p fixe, indépendant de la taille N . On peut s'attendre à ce que ce résultat s'étende aux cas des coûts minimaux pour tous les ensembles $G(N, p)$, et en particulier aux graphes aléatoires lacunaires.

– III.3 – Des heuristiques pour la bipartition de graphe

Des heuristiques Afin de résoudre concrètement un problème d'optimisation combinatoire donné il faut un algorithme adapté. Pour le problème de la bipartition de graphe (PBG), plusieurs heuristiques ont été conçues. Je présente dans ce qui suit quelques algorithmes qu'on peut ranger en deux familles : la première est celle des algorithmes de recherche locale avec une profondeur variable et une liste de tabou. La deuxième est celle du recuit simulé. Il va de soi qu'il y a une grande variété d'algorithmes dans chacune de ces familles. De plus il y a des algorithmes hybrides qui combinent les deux familles. Pour cette étude nous avons choisi les algorithmes suivants, que je vais décrire en détail dans les paragraphes qui suivent :

- (i). L'algorithme de Kernighan et Lin (KL)
- (ii). Un algorithme Multilevel-KL
- (iii). Le recuit simulé (SA)
- (iv). L'algorithme *chained local optimization* (CLO)

KL L'algorithme de Kernighan et Lin [KL70] est un algorithme spécialement conçu pour le problème de la bipartition de graphe. Dans le PPG, le voisinage, c'est-à-dire l'ensemble des transformations admissibles, est constitué de tout échange d'un sommet $v_i \in V_1$ avec un sommet $v_j \in V_2$. La version la plus simple de la recherche locale, appelée λ -optimisation, consiste à considérer une suite de transformations élémentaires sur une configuration et à effectuer ces transformations tant qu'elles baissent le coût. Afin d'améliorer cette méthode Kernighan et Lin ont proposé l'astuce suivante : on engendre une suite de n ($n \leq N/2$) transformations élémentaires en respectant une liste tabou. La borne supérieure est due à la symétrie des échanges : après $N/2$ échanges on récupère des solutions potentiellement déjà construites. On n'exige pas que chaque transformation diminue le coût, mais on choisit une étape p de la suite telle que la sous-suite associée, de longueur variable $p < n$, baisse le coût. Si une baisse est obtenue, la suite des transformations est appliquée à la solution et la liste de tabou est effacée. Dans le cas contraire la recherche s'arrête et la dernière solution est déclarée optimale (KL-opt). La suite est construite de proche en proche en échangeant la paire qui produit le gain maximal en tenant compte des sommets déjà échangés ; ceci constitue une condition de tabou. Cette méthode permet d'augmenter le coût de temps en temps afin de descendre plus bas dans le paysage de coût, en passant au-dessus des barrières. Cette idée a été appliquée avec grand succès au problème de la bipartition de graphe [KL70], et dans une version adaptée, au problème du voyageur de commerce [LK73]. Pendant des années cet algorithme a été l'algorithme le plus performant et jusqu'aujourd'hui il y a peu d'algorithmes qui sont comparables, tenant compte de la généralité de l'approche. La complexité de cet algorithme est $\mathcal{O}(N \ln N)$ pour chaque étape, mais en général l'algorithme s'arrête après quelques étapes, indépendamment de N . Il existe une version $\mathcal{O}(N)$ qui utilise une structure de données très adaptée. Cette version due à Fiduccia et Mattheyses [FM82] n'est valable que pour des graphes avec des poids discrets.

Multilevel-KL Le progiciel *CHACO* [HL95a] est une collection de méthodes pour le problème de la bipartition de graphe. Nous nous sommes contentés d'utiliser la méthode de *multilevel-KL*. Cette méthode consiste à réduire la taille du graphe en le compactifiant. À chaque étape les sommets sont appariés et les arêtes sommées. Lorsque le graphe est petit un algorithme spectral est appliqué pour obtenir la première partition. Après avoir obtenu la première partition, le graphe compactifié est re-dispersé et l'algorithme KL est appliqué afin d'obtenir une partition KL-optimale. Ces pas sont effectués de manière récursive jusqu'à ce qu'on obtienne une partition KL-optimale du graphe initial. Pour une idée semblable, je renvoie à [BS94]. Cet algorithme donne des résultats comparables à ceux de KL mais il est beaucoup plus rapide que KL pour des grands graphes. Il a été appliqué avec succès à la partition de maillages qui interviennent dans la résolution des équations différentielles partielles discrétisées et qui d'habitude sont des problèmes de taille importante [HL95c, HL95b].

Le recuit simulé Le recuit simulé est un algorithme d'optimisation fortement inspiré d'une analogie avec le processus de la fonte et du trempage des métaux. Cette analogie est encore plus prononcée dans les versions ultérieures, comme le *Multiple Markov Chain* [MP92, Orl97, TvROW96], où le système effectue alors une marche des hautes températures vers les basses et *vice versa*. Le recuit simulé appartient aujourd'hui aux simulations standards et je renvoie le lecteur pour plus de détail à l'annexe III.8 ou aux livres de Binder [Bin86, Bin87] et van Laarhoven et Aarts [vLA85, vLA87].

Pour résumer on peut dire que le recuit simulé est une recherche de descente locale avec une faible probabilité de monter. Cette probabilité dépend d'un paramètre T appelé, par analogie, température. Cette probabilité de monter permet de sortir des minima locaux et occasionnellement de trouver l'état fondamental. Pour un schéma de refroidissement logarithmique il est démontré que dans la limite où

le temps d'attente devient infinie, la solution optimale est atteinte avec probabilité 1. Ce résultat est rassurant mais dans la pratique un *schéma de refroidissement logarithmique* n'est guère employé parce qu'il est trop lent. Habituellement le recuit simulé est utilisé avec un *schéma de refroidissement exponentiel*. Pour obtenir une meilleure performance de l'algorithme, des modifications ont été proposées. Kirkpatrick *et al.*, par exemple, introduisent un critère de terminaison du refroidissement avant d'atteindre la température finale (choisie près de zéro, $T_f \approx 0$). Ceci se fait en comparant les coûts trouvés aux dernières températures. S'il n'y a plus de changement avec 5 températures consécutives le système est supposé être figé et la dernière solution est retenue comme la solution optimale.

Le schéma générique du recuit simulé a subi des modifications afin d'adapter l'algorithme au problème de la bipartition de graphe. Souvent les algorithmes utilisent la fonction coût exacte et ils respectent toutes les contraintes. Ici l'implémentation du recuit simulé introduit une fonction de coût modifiée. Au lieu de respecter toutes les contraintes exactement, les violations des contraintes sont pénalisées à l'aide de termes supplémentaires dans la fonction de coût. Pour être concret, pour le PBG, la fonction coût utilisée est

$$C' = C + \gamma \sum_{i=1}^N s_i^2. \quad (\text{III.3-1})$$

La violation de la contrainte de partitions équilibrées a pour conséquence un coût élevé, si bien que les solutions optimales trouvées par cette méthode ont rarement un déséquilibre de partition plus grand que quelques unités. De plus il est facile de construire une solution admissible en rétablissant l'équilibre. Grâce à la nouvelle fonction coût il est possible d'utiliser un voisinage très simple, à savoir le déplacement d'un seul sommet d'un sous-ensemble vers l'autre. En conséquence le voisinage est de taille $\mathcal{O}(N)$ alors qu'il est de taille $\mathcal{O}(N^2)$ lorsqu'on doit tenir compte de toutes les paires de sommets qu'on peut échanger. Cette réduction de taille du voisinage est un grand avantage de cette fonction de coût. D'autres modifications du schéma générique concernent le choix des sommets à échantillonner et le critère pour décider si le recuit simulé a atteint l'équilibre. Le choix du sommet qui va-t-être échangé se fait normalement au hasard, mais des études [JAMS89] ont montré que le choix séquentiel à partir d'une permutation aléatoire donne de meilleurs résultats.

Ces changements ont pour conséquence une amélioration du recuit simulé. Néanmoins l'algorithme rencontre des difficultés pour notre problème. Nous avons montré que le PBG est équivalent à trouver les états fondamentaux de verres de spins. Dans les chapitres I et II j'ai exposé les propriétés particulières des verres de spins et souligné leur comportement particulier à basse température. Le paysage de l'énergie des verres de spins est un paysage comportant beaucoup de "creux", et à basse température, le recuit simulé ne permet plus de sortir d'une vallée assez profonde. Ceci est souhaitable si cette vallée contient le minimum global, mais dans le cas contraire l'algorithme se retrouve piégé et ne parvient pas à trouver la solution optimale. Les méthodes conçues pour éviter ce type de problème ne sont pas discutées ici, mais quelques commentaires se trouvent dans l'annexe III.8.

Chained Local Optimization L'algorithme *chained local optimization* [MO96] est une combinaison de la recherche locale due à Kernighan et Lin et du recuit simulé. Par l'introduction des optimisations intermédiaires du type KL, le paysage d'énergie est réduit aux solutions KL-opt et le recuit simulé n'échantillonne que ces solutions. Naturellement les solutions trouvées sont au moins aussi bonnes que celles trouvées par l'algorithme de Kernighan et Lin. Une idée semblable a été utilisée par [Luc92]. Nous discutons de l'algorithme CLO à l'aide de la figure III-3. Dans l'algorithme CLO le voisinage n'est plus l'échange d'un seul sommet mais l'échange d'un amas de sommets. Ceci fait que l'algorithme

III.3 Des heuristiques pour la bipartition de graphe

peut sortir des bassins d'attraction des solutions KL-opt et permet un échantillonnage plus efficace, comme nous le montrons dans le paragraphe qui suit. Au démarrage il faut choisir une partition initiale, une température initiale, et une température finale. On applique

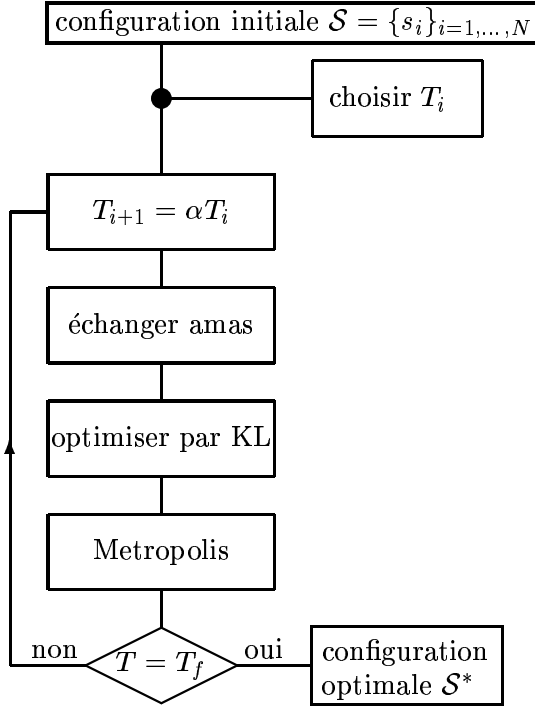


FIG 3 : Le schéma de l'algorithme CLO.

Voici en plus de détail le fonctionnement de l'algorithme utilisé dans notre étude. Une partition P_i sert de partition initiale. Nous supposons que P_i est équilibrée et optimisée par l'algorithme de Kernighan et Lin. Nous modifions la partition P_i en déplaçant un amas connexe de l'un des sous-ensembles (V_1 ou V_2) vers l'autre sous-ensemble. La partition P'_i ainsi obtenue n'est pas équilibrée. Cette partition va-t-elle être optimisée au moyen de l'algorithme de Kernighan et Lin. L'étape suivante consiste alors à déplacer un autre amas dans la direction opposée pour retrouver une partition équilibrée. De nouveau cette partition est soumise à l'algorithme de Kernighan et Lin pour obtenir la partition finale P_f . On applique alors le critère de Metropolis : La nouvelle partition P_f sera acceptée si le coût a diminué, et sinon elle sera acceptée avec une probabilité $p = e^{-\beta\Delta}$, où Δ est la différence des coûts des partitions P_i et P_f . Cette séquence d'opérations forme l'équivalent d'un pas dans l'algorithme de Metropolis, exposé ci-dessus. Dans notre schéma il faut remplacer la séquence : *échanger amas* → *optimiser par KL* → *Metropolis* par la séquence plus longue *déplacer amas* → *optimiser par KL* → *équilibrer partition* → *optimiser par KL* → *Metropolis*. La température peut alors être modifiée ou non. Dans les études que nous avons effectuées, nous avons renoncé à utiliser un schéma de refroidissement, de sorte que les simulations ont été effectuées à température nulle. Ceci correspond à une descente par recherche locale élargie. Mais dans le paragraphe III.5 je discuterai des résultats que l'on obtient si on applique un schéma de refroidissement : même avec un schéma très simple, on obtient des améliorations. Un autre paramètre de CLO est la taille des amas déplacés : nous avons choisi des tailles aléatoires entre 3 et 13. Naturellement le nombre des perturbations, c'est-à-dire le nombre de pas dans la descente, est aussi un

alors un schéma de refroidissement. À chaque température on optimise la partition avec l'algorithme de Kernighan et Lin. Ensuite cette solution est perturbée en échangeant un amas d'une certaine taille. Cette nouvelle configuration est optimisée à l'aide de l'algorithme KL. Les énergies des deux configurations sont comparées et le critère de Metropolis [MRR⁺53] est appliqué. Après un nombre fixe de perturbations la température est diminuée selon le schéma de refroidissement. Ces pas sont répétés jusqu'à ce que la température finale soit atteinte.

En fait nous avons dévié du schéma exposé ci-contre et avons utilisé une implémentation de l'algorithme adaptée au problème de la bipartition de graphe. La bipartition exige que les deux sous-ensemble construits soient de même taille. Kernighan et Lin ont conçu leur algorithme pour respecter cette contrainte. Nous avons utilisé une contrainte moins restrictive en exigeant seulement que les deux sous-ensembles de la bipartition soient de tailles identiques au moins un pas sur deux. En fait, un "pas" est un "meta-pas" parce qu'il consiste à déplacer un amas de spins suivi de l'optimisation de la nouvelle partition par l'algorithme de Kernighan et Lin.

paramètre. Si on choisissait un nombre de pas indépendant de la taille N du problème, l'algorithme ne serait pas meilleur que l'algorithme de Kernighan et Lin à grand N . Nous avons donc choisi un nombre de perturbations qui croît linéairement avec la taille du problème. Ce paramètre de proportionnalité $\lambda = 0.1$ est important parce que l'on obtiendra *a priori* une solution d'autant meilleure que λ est plus grand. Les résultats présentés dans la section suivante indiquent qu'en fait ce paramètre a été choisi trop petit $\lambda = 0.1$ et que le choix $\lambda = 1$ améliore ces résultats considérablement. Avec λ , l'algorithme CLO est d'une complexité $\mathcal{O}(N^2 \ln N)$ pour la descente complète. On suppose ici que l'algorithme KL termine après un nombre d'itérations indépendant de la taille du problème. Dans la pratique cette hypothèse est vérifiée. Soulignons que ce schéma (*cf.* FIG 3) est valable pour n'importe quel problème d'optimisation combinatoire en remplaçant l'algorithme KL par une procédure de recherche locale appropriée pour le problème à l'étude.

– III.4 – Propriétés statistiques des coûts engendrés par des heuristiques

Distribution des coûts L'utilisation d'une heuristique ne garantit pas de trouver la configuration optimale avec le coût $\mathcal{C}_0$. L'heuristique engendrera des configurations, dont les coûts $\mathcal{C}$ sont distribués selon d'une certaine distribution $P(\mathcal{C})$. Un exemple a été donné sur la figure III–2. Nous trouvons empiriquement que la distribution des coûts trouvée par nos heuristiques tend pour des grandes tailles vers une loi continue et on peut présumer qu'elle va tendre vers une gaussienne. Nous avons effectué des simulations afin d'étudier des propriétés statistiques des solutions engendrées par des heuristiques. Cette section expose nos résultats.

Cas des coupures aléatoires Une coupure aléatoire est une partition aléatoire, obtenue en choisissant $N/2$ sommets aléatoirement. Ces sommets constituent le sous-ensemble V_1 . Les sommets restants forment les sous-ensemble V_2 . Nous nous attendons à ce que la distribution des coûts obéisse à des lois d'échelle et à ce que le coût soit auto-moyennant. Ces propriétés sont vérifiées pour les coupures aléatoires. Nous renvoyons le lecteur à notre préirage reproduit dans l'annexe pour plus de détail [SM97]. Le fait que ces propriétés soient satisfaites pour les solutions optimales de certains problèmes d'optimisation combinatoire et pour les coupures aléatoires du PPG suggère qu'elles s'appliquent également aux distributions des coupures engendrées par des heuristiques.

Lois d'échelle pour $P(\mathcal{C})$ Considérons d'abord la moyenne de la distribution $P(\mathcal{C})$ engendrée par des algorithmes heuristiques en fonction de la taille du système. Nos résultats numériques suggèrent qu'elle obéit à une loi d'échelle linéaire :

$$\frac{\bar{\mathcal{C}}}{N} \equiv \bar{c} = c^* + \frac{\tilde{c}}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right) \quad (\text{III.4-1})$$

Dans la figure III–4 nous montrons ces données pour cinq algorithmes heuristiques avec les ajustages linéaires correspondants. Il est remarquable que chaque algorithme possède une valeur limite c^* qui lui est caractéristique. Il s'ensuit que chaque heuristique est caractérisée à grand N par un excès moyen du coût trouvé par rapport à l'optimum.

Nous avons aussi étudié la variance des coûts. Nous trouvons que la variance relative suit également

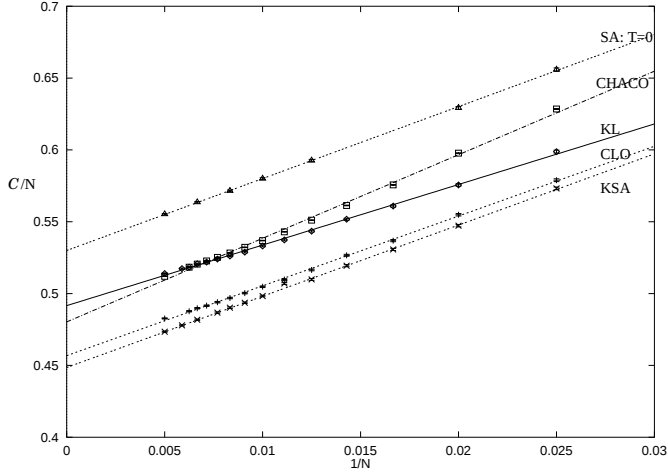


FIG. III-4: Valeurs moyennes des différents algorithmes et la limite de grande taille N .

une loi d'échelle linéaire :

$$\frac{\sigma^2(N)}{N} = \frac{\overline{\mathcal{C}^2} - \overline{\mathcal{C}}^2}{N} = (\sigma^*)^2 + \frac{\tilde{\sigma}^2}{N} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (\text{III.4-2})$$

Les données sont représentées sur la figure III-5 pour les mêmes cinq algorithmes heuristiques qu'avant.

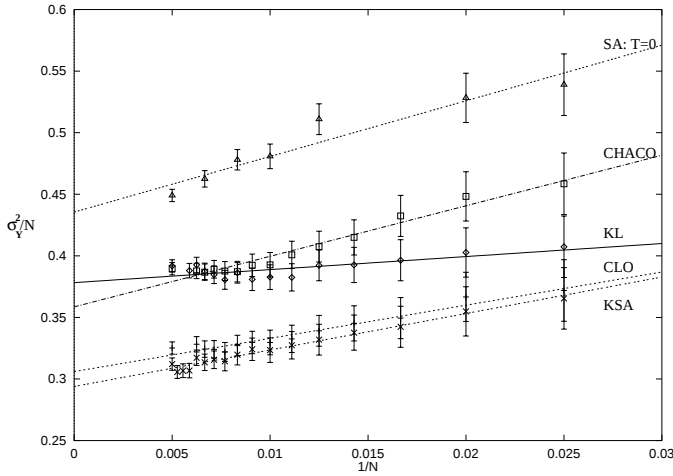


FIG. III-5: Variances relatives des coûts $\frac{\sigma^2(N)}{N}$ pour des différents algorithmes en fonction de $1/N$.

Coûts auto-moyennants Dans le cas des graphes denses, c'est-à-dire des verres de spins dans l'approximation du champ moyen, l'énergie est auto-moyennante. Pour le cas présent du PBG sur des graphes lacunaires un tel résultat n'est pas connu. Cependant nos résultats suggèrent fortement que les coûts trouvés par nos algorithmes heuristiques possèdent également cette propriété. En effet, en combinant les deux lois d'échelle (III.4-1) et (III.4-2), on trouve que la variance divisée par le carré

du coût moyen tend linéairement vers zéro :

$$\frac{\overline{\mathcal{C}^2} - \overline{\mathcal{C}}^2}{\overline{\mathcal{C}}^2} \sim \frac{1}{N} \rightarrow 0. \quad (\text{III.4-3})$$

Les coûts sont donc *auto-moyennants*, qu'ils soient engendré aléatoirement, ou par un algorithme heuristique, ou même très probablement par un algorithme exact.

La distribution des coûts est gaussienne Nos résultats numériques suggèrent que $P(\mathcal{C})$ devient gaussienne. Cette distribution est le résultat de deux distributions. Une distribution est celle des coûts pour un graphe donné, l'autre est celle associée à l'ensemble des graphes. Une coupure trouvée sur le graphe i et utilisant la j ème partition initiale peut s'écrire comme $c_{ij} = c + x_i + y_{ij}$. En fonction du graphe i et de la partition initiale, l'algorithme heuristique trouvera une coupure c_{ij} différente. La moyenne sur les optimisations à partir de différentes partitions initiales pour le graphe i est noté $\langle c_{ij} \rangle = c + x_i$. La moyenne sur tous les graphes est noté $\langle \overline{c_{ij}} \rangle = c$. De ceci suit que les moyennes $\langle y_{ij} \rangle$ et $\overline{x_i}$ s'annulent. La conjecture que c_{ij} est gaussienne suit si y_{ij} et x_i sont des distributions gaussiennes indépendantes. D'abord nous montrons que y_{ij} a une distribution gaussienne. La distribution de y_{ij} est obtenue en appliquant un algorithme donné sur un graphe un très grand nombre de fois. Ceci est montré à titre d'exemple dans la figure III-6. Nos résultats peuvent être résumés comme suit.

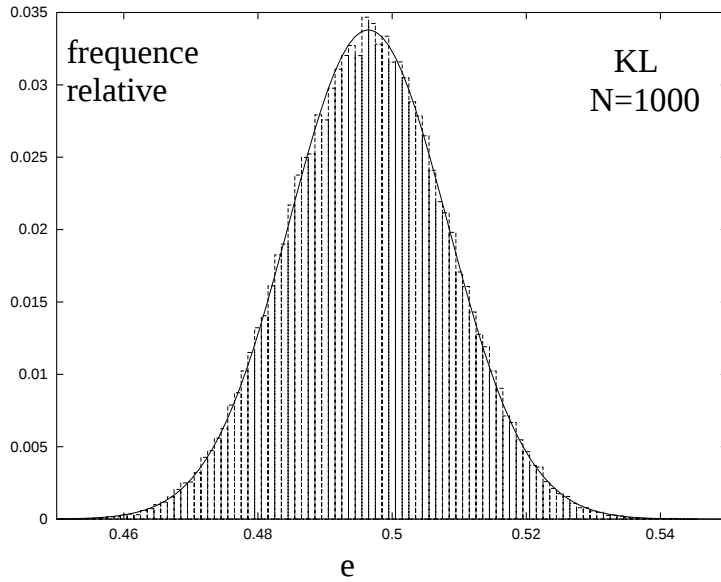


FIG. III-6: Distribution $P(e)$ des coûts réduits $e = \mathcal{C}/N$ engendrée par KL pour un graphe donné de taille $N = 1000$.

La distribution de y_{ij} devient étroite, $\sigma_y^2/N^2 \rightarrow 0$ et l'asymétrie y_{ij}^3/σ_y^3 s'annule dans la limite de grande taille. En outre, ces quantités sont indépendantes du graphe c'est-à-dire qu'elles sont plus ou moins les mêmes pour tous les graphes. Ceci a été vérifié en montrant que les fluctuations relatives de graphe à graphe de ces quantités s'annulent à grand N . Le comportement de toutes les heuristiques est le même. Afin d'étudier x_i , il faut optimiser le graphe i un grand nombre de fois afin d'obtenir la distribution c_{ij} pour ce graphe avec une précision suffisante. Ceci doit être répété pour plusieurs graphes. La distribution que nous avons déduite montre que x_i est distribué selon une gaussienne. En

outre, nous avons montré que les corrélations $\overline{\langle y_{ij}^2 \rangle} x_i$ entre les deux distributions sont négligeables et tendent vers zéro pour des graphes de grande taille. Ceci confirme notre hypothèse que la distribution de c_{ij} est composée de deux distributions gaussiennes x_i et y_{ij} . Naturellement ces résultats ne sont valables que pour des graphes de grande taille.

Le fait que la distribution soit gaussienne est compréhensible car la fonction coût de la bipartition de graphe est une somme d'un grand nombre de termes. Le théorème de la limite centrale montre que la distribution d'une somme de contributions *indépendantes* tend vers une distribution gaussienne. Ici les contributions sont faiblement corrélées mais pas trop pour empêcher l'obtention d'une distribution gaussienne. Il va de soi que l'argument s'applique aussi aux verres de spins [Bro59, FH91].

– III.5 – Qualités des solutions engendrées par des heuristiques

Dans cette section nous nous intéressons à la qualité des solutions engendrées par des heuristiques. On peut introduire différentes mesures de qualité. On peut considérer le plus mauvais cas, ou étudier la qualité en moyenne [BCLS87]. Nous proposons plusieurs critères et concluons avec une méthode pour ordonner des algorithmes. Cette dernière méthode tient compte de la qualité en moyenne et de la vitesse de l'heuristique.

La caractérisation de la qualité d'un algorithme Considérons la forme de la distribution $P(\mathcal{C})$ associée à une heuristique. La probabilité de trouver le minimum $P(\mathcal{C}_0)$ diminue quand la taille des graphes croît. Effectuant plusieurs démarrages de KL sur un graphe, on voit que déjà pour des tailles modestes l'algorithme ne trouve que très rarement la solution optimale. Comme illustration je donne dans la figure III–7 des résultats pour $N = 20, 50, 100, 170$.

Une autre caractérisation possible des différents algorithmes est d'utiliser $P(\mathcal{C}_0)$. J'ai effectué des simulations pour l'algorithme KL car il est un des plus rapides. Le résultat est que la probabilité moyennée sur plusieurs graphes $\langle P_{KL}(\mathcal{C}_0) \rangle$ décroît exponentiellement comme montre la figure III–8. Un ajustage linéaire de $\log[\langle P_{KL}(\mathcal{C}_0) \rangle]$ en fonction $1/N$ a été effectué. Ceci donne un très bon ajustage avec une pente $\gamma = 0.03$, correspondant à

$$\langle P_{KL}(\mathcal{C}_0) \rangle = e^{-\gamma \frac{1}{N}}. \quad (\text{III.5-1})$$

Cette décroissance est une propriété de l'algorithme indiquant que cet algorithme n'est plus capable de trouver l'optimum. Une remarque est appropriée : les déviations des trois courbes par rapport à la droite sont dues aux effets d'échantillonnage. Ces effets apparaissent pour les trois échantillonnages $M = 100, 1000$ et 10000 , mais pour des graphes de plus en plus grands, confirmant que l'échantillonnage est insuffisant pour obtenir $P(\mathcal{C}_0)$ précisément.

Les atouts de plusieurs démarrages de l'algorithme En appliquant un algorithme à un graphe donné on échantillonne la distribution $P(\mathcal{C})$ des coûts. Si la meilleure solution parmi plusieurs essais a été retenue, plusieurs démarrages améliorent la qualité de la solution. Désignons par $Q(\mathcal{C}) = \int^{\mathcal{C}} P(\tau) d\tau$ la distribution cumulée c'est-à-dire la probabilité de trouver un coût strictement plus petit que $\mathcal{C}$. Pour déterminer le meilleur coût $\mathcal{C}_k$ parmi k essais, nous procédons comme suit. Afin que $\mathcal{C}_k \geq \mathcal{C}$ il est nécessaire qu'aucune valeur inférieure à $\mathcal{C}$ n'ait été trouvée parmi les k essais. Cette probabilité est donnée par $(1 - Q(\mathcal{C}))^k$ et donc $Q_k(\mathcal{C}) = 1 - (1 - Q(\mathcal{C}))^k$. La distribution $P_k(\mathcal{C})$ est donnée par $P_k(\mathcal{C}) = Q_k(\mathcal{C} + 1) - Q_k(\mathcal{C})$, car il s'agit de valeurs entières.

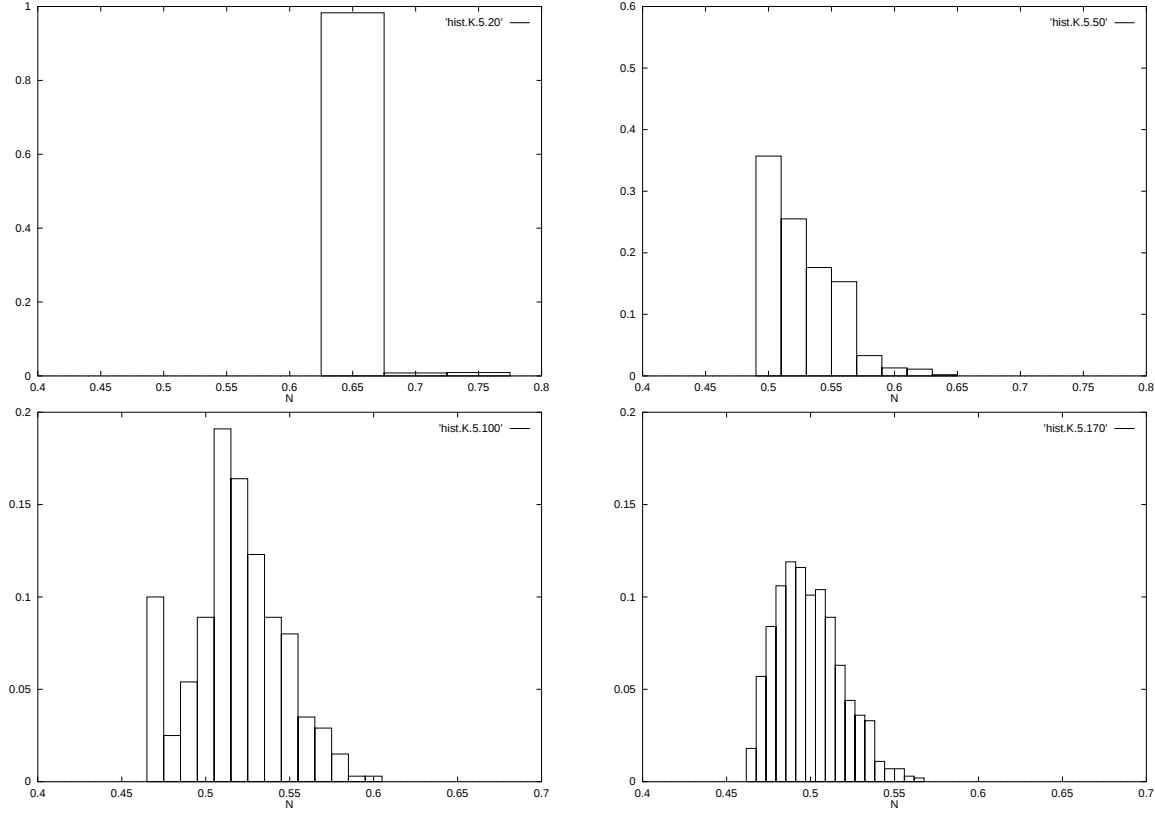
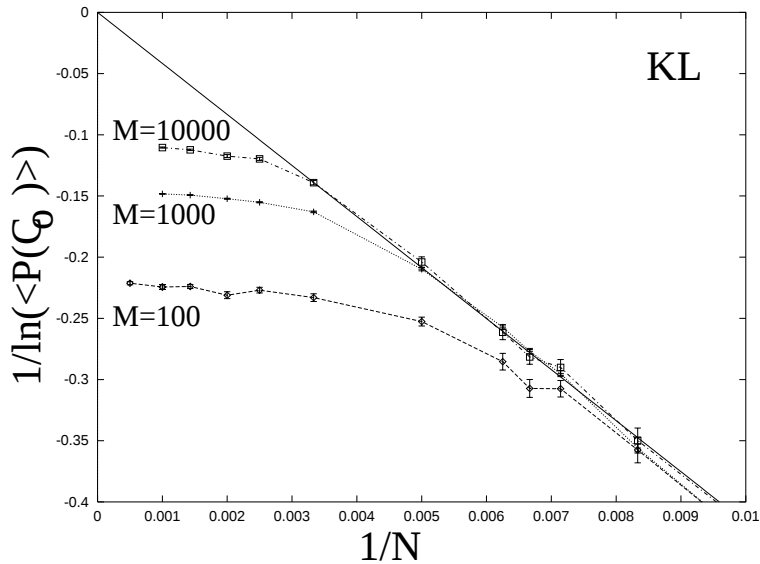


FIG. III-7: La distribution $P(\mathcal{C})$ de l'algorithme de KL pour quatre graphes avec $N = 20, 50, 100$, et 170 .

Timing Nous avons mesuré le temps de calcul pour chaque algorithme et chaque taille étudiée. Les données sont représentées dans les figures III-9. Nous avons mis dans chaque figure les algorithmes avec un comportement semblable. Nous avons trouvé empiriquement les comportements suivants pour algorithmes étudiés :

- (i). KL est d'une complexité d'ordre $\mathcal{O}(N \ln N)$.
- (ii). Multilevel-KL est d'une complexité d'ordre $\mathcal{O}(N \ln N)$.
- (iii). CLO est d'une complexité d'ordre $\mathcal{O}(N^2 \ln N)$.
- (iv). Le recuit simulé est d'une complexité d'ordre $\mathcal{O}(N)$, et dans le cas adaptif d'ordre $\mathcal{O}(N^{3/2})$.

Ordonner les algorithmes Afin de comparer des algorithmes heuristiques équitablement il faut tenir compte non seulement de la qualité des solutions engendrées mais aussi du temps nécessaire pour atteindre cette qualité. Nous avons fixé le temps disponible et nous avons déterminé la qualité de la solution que nous pouvons obtenir en ce temps en utilisant plusieurs démarrages. Si un algorithme est assez rapide pour être appliqué plusieurs fois, la méthode exposée dans le paragraphe III.5 ci-dessus, traitant le gain obtenu par plusieurs démarrages, est utilisée pour déterminer la qualité des solutions. La comparaison de la qualité des solutions obtenues par tous les algorithmes permet d'établir un classement. Le premier de ce classement pour des différentes tailles N et différents temps de calcul disponibles est donné dans la figure III-10. Afin d'alléger la figure nous avons omis le Multilevel-KL qui a donné des résultats très proches de ceux de KL. Le grand avantage du Multilevel-KL est sa grande


 FIG. III-8: $\ln[\langle P_{KL}(C_0) \rangle]$ en fonction de $1/N$.

vitesse pour de grands graphes issus de maillages [HL95c, HL95b, HL95a], mais ici, cet avantage est en grande partie perdu.

Combinaison du recuit simulé et de l'algorithme de Kernighan et Lin Dans les prétiages donnés à la fin de ce chapitre l'algorithme CLO n'a pas été appliqué avec un schéma de refroidissement. Même si on utilise un schéma très simple, par exemple une adaptation de celui proposé par Kirkpatrick *et al.* [KGV83, Kir84], nous obtenons des résultats supérieurs aux résultats précédents. Ceci est montré dans la figure III-11. Dans le tableau III.5 nous avons présenté les valeurs moyennes $\bar{C}/N$ pour quelques tailles de graphes et aussi l'écart en pourcentage entre les valeurs fournis par CLO avec refroidissement et les autres algorithmes.

N	50		100		200		∞	
CLO _{sans}	0.5549	1.3	0.5048	1.8	0.4827	2.3	0.4568	2.3
SA	0.5473	0.1	0.4983	0.5	0.4734	0.3	0.4486	0.5
CLO _{avec}	0.5480		0.4957		0.4719		0.4462	

TAB. III.1: Les valeurs moyennes $\bar{C}/N$ pour CLO sans et avec refroidissement, et du recuit simulé, ainsi que l'excès en pourcentage pour différentes tailles et pour la limite $N \rightarrow \infty$.

Pour la classification des algorithmes, ces résultats ont l'effet de pousser la frontière entre CLO et SA dans la figure III-10 vers les plus grandes tailles.

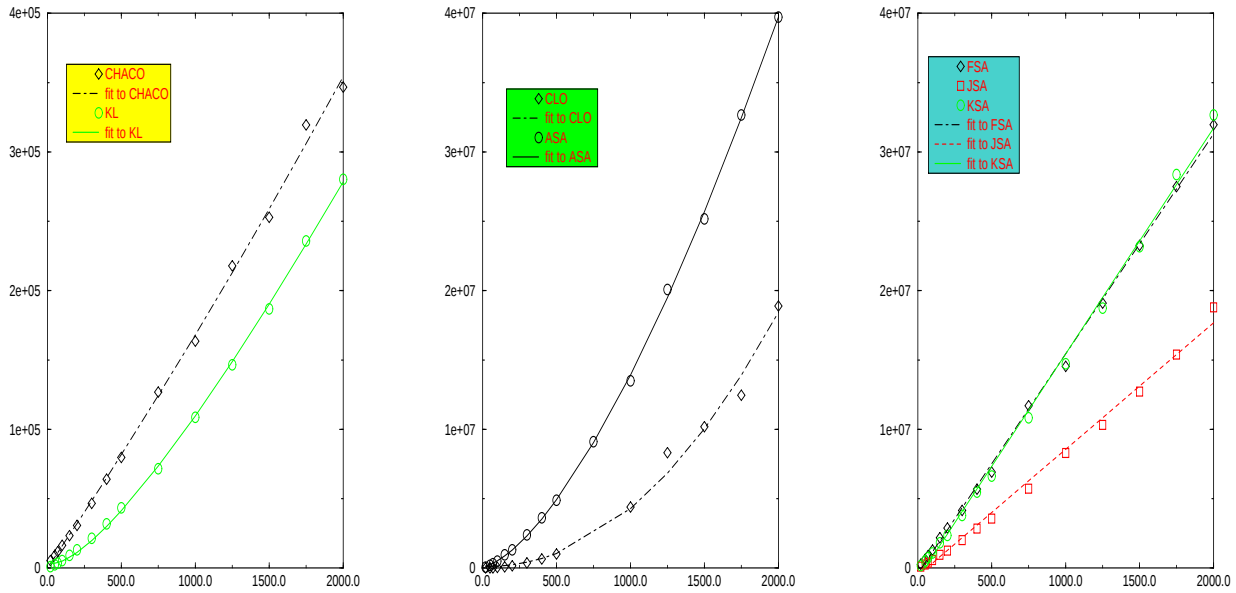


FIG. III-9: Le temps de calcul pour des différents algorithmes en fonction de taille des graphes.

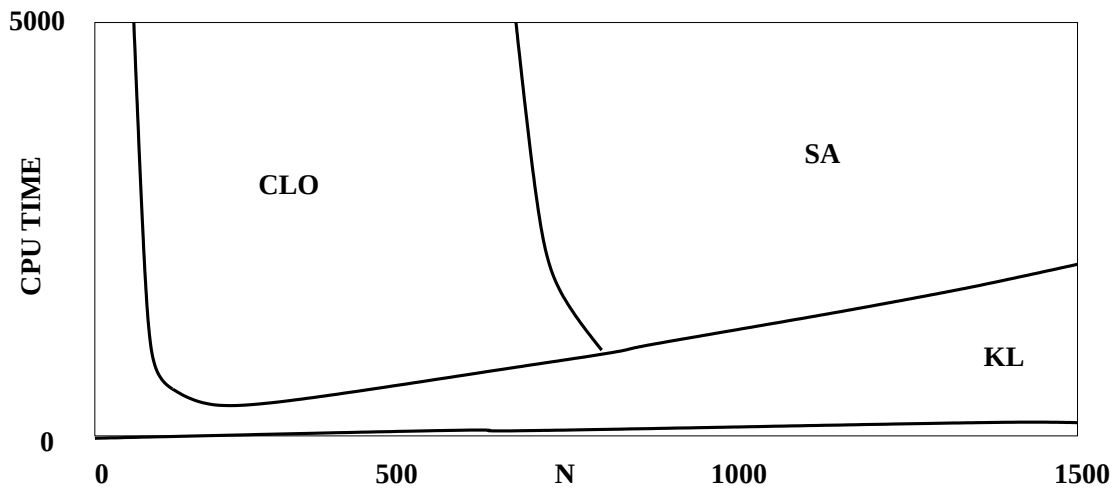


FIG. III-10: Premier du classement des algorithmes par rapport à la qualité et au temps de calcul pour des différents temps disponibles et différentes tailles des graphes.

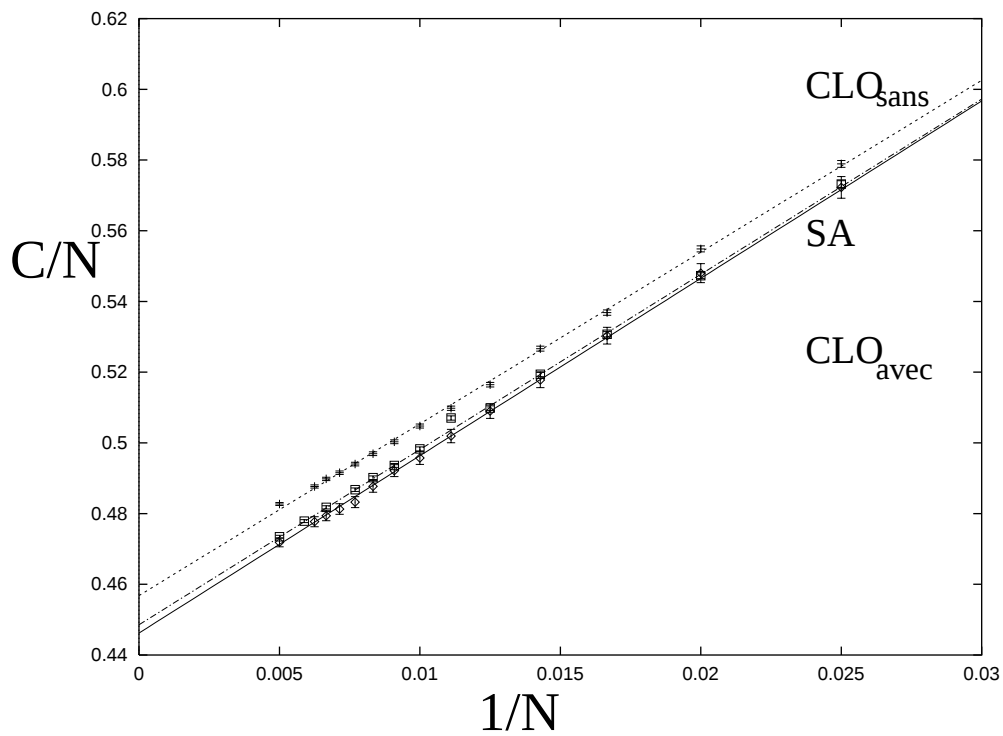


FIG. III-11: Valeurs moyennes de SA, CLO et CLO avec un schéma de refroidissement pour différentes tailles de graphes.

– III.6 – Discussion

Résumé Nous avons étudié le problème de la bipartition de graphe pour des graphes aléatoires creux avec une coordination aléatoire. D’abord nous avons traité analytiquement les coupures aléatoires. Ensuite nous avons effectué une étude numérique des coûts trouvés par des heuristiques. Dans le deuxième cas, nous trouvons que les coûts satisfont des lois d’échelle et sont auto-moyennants. Nous conjecturons que ces propriétés sont génériques et ne dépendent pas du problème d’optimisation, ni de l’algorithme heuristique à condition qu’il soit “local”.

Explications qualitatives Il est possible de motiver la présence de telles propriétés par une argumentation inspirée de la thermodynamique. La probabilité de Boltzmann à une température donnée est une fonction de l’énergie ou du coût qui diminue rapidement. Par contre le nombre d’états $\mathcal{N}(\mathcal{C})$ d’une énergie donnée, croît très vite avec l’énergie et exponentiellement avec N . La distribution des énergies $P(\mathcal{C})$ est donné par le produit de ces deux facteurs. En développant $P(\mathcal{C})$ autour de sa valeur maximale $\mathcal{C}^*$, la distribution est gaussienne quand $N \rightarrow \infty$. De plus, $\mathcal{C}^*$ croît linéairement avec N et l’écart-type σ de la distribution est d’ordre $\mathcal{O}(\sqrt{N})$; par conséquent la distribution des coûts $P(\mathcal{C})$ est auto-moyennante. Si on remplace le facteur de Boltzmann par la probabilité qu’un état soit un minimum local, on a toutes les raisons de penser que ces propriétés restent satisfaites.

Nous pouvons aussi comprendre qualitativement le cross-over entre le régime où $P(\mathcal{C})$ est dominé par $P(\mathcal{C}_0)$ et le régime gaussien. Pour rester proche d’un langage physique utilisons la formulation en termes de spins et négligeons la contrainte d’aimantation nulle. Considérons un graphe donné très grand, dont nous connaissons l’état fondamental. Prenons un algorithme heuristique et appliquons-le un très grand nombre de fois sur le graphe. Ceci engendre un grand nombre de solutions quasi-optimales, qui sont des excitations de l’état fondamental. Ces excitations prennent la forme d’amas des spins retournés par rapport à l’état fondamental. Pour chaque taille d’amas s nous pouvons engendrer un histogramme qui représente la probabilité $p(s)$ avec laquelle un amas de taille s est retourné. Pour les petits amas la fréquence est basse si

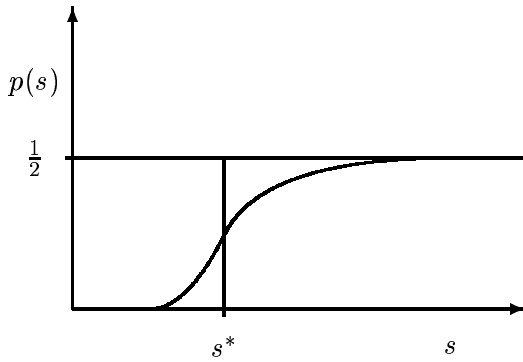


FIG 12 : La probabilité de trouver un amas retourné en fonction de la taille pour un algorithme heuristique.

l’heuristique est bonne, mais pour des amas de plus en plus grands la probabilité de trouver l’amas retourné tends vers $1/2$. Le comportement de cette probabilité en fonction de la taille s est représenté dans la figure III–12. À l’aide de cette identification nous pouvons introduire une température effective pour chaque s . Désignons par ϵ_0 l’énergie de l’état fondamental et par $\epsilon(s)$ l’énergie de l’état excité où un amas de taille s est retourné. Pour un tel système à deux états en équilibre la probabilité de l’état excité est donnée par $P(\epsilon(s)) = \frac{e^{-\beta\epsilon}}{e^{-\beta\epsilon_0} + e^{-\beta\epsilon}}$, avec $\beta = 1/T$. $P(\epsilon(s))$ étant donné par l’heuristique, nous pouvons associer une température T avec toute taille s . Un algorithme aléatoire engendre des solutions aléatoires ce qui correspond à une température infinie; un algorithme exact trouve toujours la solution optimale ce qui correspond à la température nulle.

Cette procédure introduit pour chaque algorithme une température $T(s)$. Pour associer une seule température à un algorithme, il suffit de spécifier la taille d’amas qui importe.

III.6 Discussion

En pratique on pourra dire que l'algorithme est capable de retourner des amas jusqu'à une taille caractéristique s^* . La taille s^* est la taille des amas au-delà l'algorithme n'est pas très différent d'un algorithme aléatoire. Cette interprétation permet de comprendre le comportement des différents algorithmes en fonction de la taille du problème. Pour N petit l'algorithme peut retourner tous les amas ; lorsque N grandit l'algorithme n'est plus capable de retourner certains amas. Cette taille d'amas s^* correspond à une taille critique du système au-delà de laquelle l'algorithme ne trouve l'optimum qu'avec une probabilité exponentiellement petite.

– III.7 – Article soumis au SIAM Journal of Optimization

Dans l'article qui suit nous traitons en détail le cas des coupures aléatoires et des coupures obtenues par différents algorithmes heuristiques. Nous introduisons les distributions de coût pour un graphe et pour plusieurs graphes. La distribution totale est la superposition de ces deux contributions. Les distributions sont étudiées en détail et nous trouvons qu'elles suivent des lois d'échelles, que les coûts sont automoyennants et qu'elles deviennent gaussiennes à grand N . Nous concluons en donnant notre méthode pour classer des algorithmes heuristiques en tenant compte à la fois de la qualité et de la vitesse.

1. Introduction. Algorithms for tackling combinatorial optimization problems [25] may be divided into two classes. Exact algorithms such as exhaustive search, branch-and-bound, or branch-and-cut, form the first class; they always find the optimum of the cost function which is to be minimized. However, for *NP*-complete problems, they require large computation resources, and in particular, large computation times. The second class consists of “heuristic” algorithms; these are not guaranteed to find the optimal (lowest cost) solution, nor even a solution very close to the optimum, but in practice they find good approximate solutions very fast. For problems in science, one’s main interest is in the optimal solution, so an exact algorithm is required. However, for many engineering applications, the heuristic approach may be preferable. There are several reasons for this: (i) The computational resources are simply insufficient to solve the instances of interest by exact methods; (ii) The cost function one wants to minimize is computationally very demanding, and limited resources force one to use an approximate cost function instead. This is the rule rather than the exception with very complex systems such as VLSI. If the true cost function cannot be used, there is little point in finding the true optimum for the wrong problem. (iii) Heuristic algorithms typically generate numerous “good enough” solutions, thus providing information about the statistical properties of low cost solutions. This information can in turn be used for generating better heuristics, or for finding new criteria for guiding the branching in exact algorithms such as branch-and-bound.

For almost any combinatorial optimization problem, it is very easy to devise heuristic algorithms which perform quite well; this is probably why so many such algorithms have been proposed to date. Usually they fall into just a few families, the most popular of which are local search, simulated annealing, tabu search, and evolutionary computation. The practitioner is frequently confronted with the problem of choosing which method to use. Thus he would like to rank these algorithms and determine which one is best for his “instance” (the set of parameters which completely specify the cost function). A difficulty then arises because most heuristic algorithms are stochastic, so that they can give many different solutions for a single instance. In general, the distributions of solution costs generated by the different heuristics overlap, so that the winning algorithm varies from one trial to another. Furthermore, it is necessary to balance the quality of the solutions found against the time necessary to find them since in practice heuristics run at very different speeds. The final goal of this paper is to do just this kind of balancing: in Section 8 we shall introduce a generally applicable ranking method which is based on the possibility of performing multiple runs from random starts for each algorithm until an allotted amount of computer time is exhausted. Our ranking method then determines whether it is better to have a fast heuristic which gives not so good solutions or a slower heuristic which can give better solutions.

Establishing a ranking on a *single* instance may be what is needed for a real world problem, but it is not a useful prediction tool. It is preferable to consider the effectiveness of a heuristic when it is applied to a *family* of instances. Since a detailed knowledge of the distribution of costs is necessary for our ranking procedure, the major part of this paper is an in depth study of the *statistics* of costs found by several classes of heuristics. The NP-complete [9] combinatorial optimization problem chosen for our study is the graph bisection problem, hereafter simply called the graph partitioning problem (GPP). This choice is justified by the wide range of practical applications of the GPP. These include host scheduling [3], memory paging and program segmentation [15], load balancing [19], and numerous aspects of VLSI-design such as logic partitioning [12] and placement [6, 17]. Because of these applications, the GPP has been used as a testing ground for many heuristics. For our work, a selection had to be made; in view of the previous studies by Johnson *et al.* [13], Lang and Rao [18], and Berry and Goldberg [4], we have restricted our study to iterative improvement heuristics based on local search and to simulated annealing. Having made a choice of optimization problem and algorithms, it remains to define the class of instances for the testbeds. Ideally, this family of instances should reflect the structure of the actual instances of interest to the practitioner. Since we do not have a particular application in mind, we shall follow the studies of [13, 18, 4], and consider an ensemble of sparse random graphs. From our numerical study, we have found that all of the heuristics tested share the following properties when the random graphs become large: (i) each algorithm can be characterized by a fixed percentage excess above the optimum cost; (ii) the partitions generated have a *distribution* of costs which becomes peaked, both within a given graph and across all graphs; (iii) these distributions tend towards Gaussians. Because of these properties, our ranking of heuristics on large graphs is largely determined by the mean costs found, and thus a constant speed-up factor has only a very small effect on the ranking. We expect this property to hold for most problems and heuristics of practical interest, leading to a very robust ranking.

The paper is organized as follows. In Section 2 we define the GPP as well as the ensemble of random graphs used for our testbed. Section 3 derives properties of random partitions, and shows that the

distribution of cut sizes has a relative width which goes to zero as the instance size grows. In Section 4 we argue why this property should hold also for the distribution of costs found by *heuristic* algorithms based on local iterative processes. In Section 5 we discuss the heuristic algorithms we have included in our tests. Section 6 gives the mean and standard deviation of the costs found as a function of graph size; the distribution for the costs is indeed found to be peaked. This leads to a first ranking which, however, does not take into account computation times. To implement our speed-dependent ranking, we must determine the *distribution* of cut sizes found by the different algorithms. This is the subject of Section 7, where evidence is given that the distribution on any typical graph tends towards a Gaussian in the limit of large graphs. In Section 8 we present our ranking method which takes into account both the quality of the solutions as well as the speed of the heuristics. In Section 9, finally, we discuss the results and conclude.

2. Minimum cuts. The graph partitioning (or graph “bisection”) problem (GPP) can be defined as follows. Consider a graph $G = (V, E)$ which consists of a set of N vertices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ and a set of (non-oriented) edges connecting pairs of vertices. It is convenient to introduce the matrix E_{ij} , called the connectivity matrix, given by

$$E_{ij} = \begin{cases} 1 & : \text{ if } v_i \text{ is connected to } v_j \\ 0 & : \text{ otherwise} \end{cases}$$

Since the edges are non-oriented, $E_{ij} = E_{ji}$. (Some of what will be discussed applies to weighted graphs; then E_{ij} will represent the weight of the ij edge.) A partition of G is given by dividing the vertices of G into two disjoint subsets V_1 and V_2 such that $V = V_1 \cup V_2$. The number of edges connecting V_1 to V_2 is called the cut of the partition, and will be denoted by $\mathcal{C}$. It is given by

$$(2.1) \quad \mathcal{C}[V_1, V_2] = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} E_{ij}.$$

The GPP (or “Min-cut” problem) consists of finding the partition (V_1, V_2) for which the cost (2.1) is minimum subject to given constraints on the sizes of V_1 and V_2 . The GPP is *NP*-complete [9]. In the standard formulation to which we shall restrict ourselves in this work, V_1 and V_2 have equal sizes.

For our study, it is necessary to fix an ensemble of graphs for the testbed. We have chosen $G(N, p)$ the ensemble of random graphs of N vertices where each edge is present with probability p . The choice of $G(N, p)$ is justified by its tractable mathematical properties and by the fact that many workers [13, 18, 4] have used graphs in this ensemble to test heuristics. The problem of finding the properties of the minimum cut size when the graphs belong to such an ensemble is sometimes called the *stochastic* GPP. Let us review some of the known results for this problem; this will serve to motivate our conjectures for the behavior of cuts obtained from *heuristics*. For each graph G_i , call $\mathcal{C}_0$ its minimum cut size. Taking G_i from the ensemble $G(N, p)$, $\mathcal{C}_0$ is a random variable. Following derivations now standard in a number of other stochastic combinatorial optimization problems (COP), it is possible to show using Azuma’s inequality [1] that the distribution of $\mathcal{C}_0$ becomes peaked as $N \rightarrow \infty$. This means that as N becomes large, $(\mathcal{C}_0 - \langle \mathcal{C}_0 \rangle) / \langle \mathcal{C}_0 \rangle$, the relative fluctuations about the mean, tend to zero. This property, often referred to as “self-averaging”, is typical of processes to which many terms contribute. For certain stochastic COP, it is possible to show further that the mean minimum cost satisfies a power scaling law in N , so that $\mathcal{C}_0 / N^\gamma$ converges in probability to a limiting value as $N \rightarrow \infty$. In the case of the stochastic GPP, there is no formal proof that such property hold. Nevertheless, it is believed that such a scaling holds: Within the $G(N, p)$ ensemble at p fixed, calculations show that $\mathcal{C}_0 / N^2 \rightarrow p/4$ with probability one as $N \rightarrow \infty$ [8]. As will be shown in the next section, this is also the limiting behavior of random cuts, and so the ensemble at p fixed is not a challenging one for heuristics. The reason for this “uninteresting” scaling is the high number of edges connecting to any vertex. Thus we consider in this work the ensemble $G(N, p)$, $p = \alpha / (N - 1)$ with α fixed; α is the mean connectivity (number of neighbors of a vertex) of the graphs. These graphs are sparse, in contrast to the dense graphs obtained by taking p to be independent of N . For this version of the stochastic GPP, one expects $\mathcal{C}_0 / N$ to tend towards a constant with probability one as $N \rightarrow \infty$. A major motivation for this work is our expectation that an identical scaling law should hold if we replace $\mathcal{C}_0$ by the cost found by a heuristic algorithm, albeit that the limiting constant depends on the heuristic. To motivate such a property, the next section analyzes random cut sizes; then in Section 4 we consider the “statistical physics” of the GPP so as to interpolate between the case of minimum cuts and that of random cuts.

3. Cuts of random partitions. Here we show explicitly that a large N scaling law holds for the cut sizes of random partitions, and that asymptotically these random cuts have a Gaussian distribution with a relative variance proportional to $1/N$.

Consider any graph in $G(N, p)$. One can always write the cut size of a random partition as $\mathcal{C} = X + Y$ where X is the mean (random) cut size for the graph under consideration, and $\langle Y \rangle = 0$. ($\langle \cdot \rangle$ is the average over the random partitions.) A straightforward calculation gives $X = \sum E_{ij} N / [2(N-1)]$. In the ensemble $G(N, p)$ of random graphs, it is easy to calculate the first few moments of X . In particular, we find $\langle X \rangle = pN^2/4$ and $\langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = p(1-p)N^3/[8(N-1)]$. ($\langle \cdot \rangle$ is the average over the ensemble $G(N, p)$.) We also see that X is the sum of $M = N(N-1)/2$ independent random variables; this implies that the k th cumulant (connected moment) of the distribution of X satisfies

$$(3.1) \quad \langle X^k \rangle_c = (N-1)^2 \left[\frac{N}{2(N-1)} \right]^{k+1} \langle E_{ij}^k \rangle_c.$$

At large N , we then have $\langle X^k \rangle_c \sim N^2$ in the constant p ensemble, and $\langle X^k \rangle_c \sim \alpha N$ in the $p \sim \alpha/N$ ensemble.

The random variable Y is more subtle as it is the sum of M correlated variables. Nevertheless, for any graph, it is possible to compute the moments of Y , and we have done this explicitly for the second and third moments. (The expressions are too long to be given here.) If we average Y^2 both over random partitions and over $G(N, p)$, we obtain:

$$(3.2) \quad \langle \langle Y^2 \rangle \rangle = \frac{p(1-p)}{8} N^2(N-2)/(N-1).$$

The calculations get significantly more complicated for the higher moments. In order to keep to simple expressions, we limit ourselves to the ensemble with $p = \alpha/(N-1)$. Then we find:

$$(3.3) \quad \langle \langle Y^2 \rangle \rangle = \frac{\alpha}{8} N + O(1), \quad \langle \langle Y^3 \rangle \rangle = -\frac{\alpha}{8} + O\left(\frac{1}{N}\right).$$

Furthermore, the graph to graph fluctuations of $\langle Y^2 \rangle$ become negligible in relative magnitude, so that the ratio of a typical variance and of the mean variance goes to 1 at large N . This however is not true for the higher moments; for instance, we find that the typical value of $\langle Y^3 \rangle$ grows as $N^{1/2}$, but taking in addition the mean over graphs leads to a N independent behavior. Finally, one can show that $\langle Y^k \rangle_c / \langle Y^2 \rangle^{k/2} \rightarrow 0$ with probability one. This shows that as $N \rightarrow \infty$, Y has a Gaussian distribution, of zero mean, and of variance growing linearly with N , whose coefficient is graph independent.

Coming back to $\mathcal{C} = X + Y$, the cut size of a random partition, we find that the normalized correlation coefficients between powers of X and Y tend to zero at large N , and thus X and Y become independent random variables in that limit. This, along with the results previously derived, shows that at large N , $\mathcal{C}$ itself has a Gaussian distribution. From these results, we deduce the large N behavior:

$$(3.4) \quad \frac{\langle \langle (\mathcal{C} - \langle \mathcal{C} \rangle)^2 \rangle \rangle}{\langle \langle \mathcal{C} \rangle \rangle^2} \sim \frac{4}{\alpha N},$$

so that relative deviations from the mean go to zero. Thus the distribution of $\mathcal{C}$ becomes peaked, and $\mathcal{C}/N \rightarrow \alpha/4$ with probability one as $N \rightarrow \infty$. The convergence of the distribution of $\mathcal{C}/N$ to a delta function is referred to as the self-averaging of $\mathcal{C}$.

The scaling of the variances can be summarized at large N by writing

$$(3.5) \quad c \equiv \frac{\mathcal{C}}{N} \sim \langle c \rangle + \frac{\sigma_X^*}{\sqrt{N}} x + \frac{\sigma_Y^*}{\sqrt{N}} y$$

where x and y are independent Gaussian random variables of zero mean and unit variance; $\sigma_X^* = \sqrt{\alpha/8}$ is the standard deviation (rescaled by $1/\sqrt{N}$) of X , and $\sigma_Y^* = \sqrt{\alpha/8}$ that of Y . Thus σ_Y^* describes the

fluctuations of the cut sizes within a graph, and σ_X^* describes the fluctuations of the mean cut size from graph to graph.

We have used these analytical results to test the validity of our computer programs. The first two moments of X allowed us to test our generation of random graphs in $G(N, p)$. Similarly, a check on our random number generator was obtained by verifying on several graphs that the second moment of Y found by the numerics was in agreement with our formulae. Finally, we also checked that the reduced cut size has a limiting Gaussian distribution, with a third moment which scaled to zero at large N . (For this check, we performed random partitions on 100 000 graphs for $N = 100, 500, 1000$, and 2000 .)

4. Statistical physics of the GPP. We saw that cut sizes of random partitions in $G(N, p)$ have a self-averaging property; we conjectured that this property also holds for the minimum cut. It is possible to interpolate between these two kinds of partitions (random and min-cut) by following the formalism of statistical physics. For any given graph, consider the “Boltzmann” probability distribution p_B , defined for an arbitrary partition P of cut size $\mathcal{C}(P)$:

$$(4.1) \quad p_B(P) = \frac{e^{-\mathcal{C}(P)/T}}{Z} .$$

Z is chosen so that p_B is normalized (a probability distribution) and T is an arbitrary positive parameter called the temperature. When $T \rightarrow \infty$, we recover the ensemble of random partitions where all partitions are equally probable, while when $T \rightarrow 0$, the ensemble reduces to the partitions of minimum cut size. For intermediate values of the temperature, the partitions are weighted according to an exponential of their cut size. In this “Boltzmann” ensemble, one can define the moments of the cut sizes just as was done in the case of random partitions. In most statistical physics problems, it is possible to show that the quantity in the exponential of Eq. (4.1) (here, the cut size) is self-averaging. For *random* graphs, however, the proofs are inapplicable; nevertheless, other evidence indicates that the cut size is self-averaging at any temperature [24]. This self-averaging can be understood qualitatively at low temperature as follows. The number $\mathcal{N}(\mathcal{C})$ of partitions of cut size $\mathcal{C}$ is a sharply increasing function of $\mathcal{C}$, the Boltzmann factor is a sharply decreasing function of $\mathcal{C}$, and the probability distribution $P(\mathcal{C})$ of $\mathcal{C}$ is given by the product of these two functions. Using naive but standard statistical physics arguments for $\mathcal{N}(\mathcal{C})$, one finds that $P(\mathcal{C})$ has a peak at $\mathcal{C}^*(T)$ which grows linearly with N , and that the width of the distribution is $O(\sqrt{N})$, and thus $\mathcal{C}$ is self-averaging. Furthermore, this kind of argument says that $P(\mathcal{C})$ becomes Gaussian at large N , a result which is usually correct in statistical physics systems.

A number of statistical physics results have been obtained for the ensemble of dense random graphs, i.e., for $G(N, p)$ at p fixed. In particular, highly technical calculations [24, 8] indicate that the cut sizes are self-averaging at all temperatures, that is as $N \rightarrow \infty$, relative fluctuations within a fixed graph become negligible, as well as those from graph to graph. The mean cut size (over all graphs or within a graph with probability one) is given by

$$(4.2) \quad \langle \mathcal{C} \rangle = \frac{pN^2}{4} - U(T)\sqrt{p(1-p)}N^{3/2} + O(N)$$

as $N \rightarrow \infty$. In this expression, $U(T)$ is a function of temperature only, there is no dependence on p as long as p is independent of N . The limit $T \rightarrow 0$ gives the expected (and typical) value of the minimum cut, with $U(T=0) = 0.3816..$ Although there is no proof yet that these calculations are exact, there is general agreement in the statistical physics community that the results are correct.

The case of sparse random graphs ($p \sim 1/N$) has also been studied within the statistical physics approach [2, 5]. So far, however the problem has proven to be intractable. Nevertheless, it is expected that the cut sizes are self-averaging at any temperature and that the mean of the distribution scales linearly with N at large N .

The property of self-averaging seems quite generic. The reason it should hold in these systems is that the cut size of a partition is the sum of a large number of random variables which are not *too* correlated. It is very plausible that the cut size is self-averaging whenever partitions are generated by an iterative process involving just a few vertices at a time. All local search methods, and modifications thereof such as simulated annealing, fall into this category. Thus our claim is that any heuristic algorithm which generates partitions iteratively according to local (in vertex space) criteria will lead to cut sizes which are self-averaging. Thus the distribution of cut sizes found by any such heuristic should become peaked

as $N \rightarrow \infty$. We will see in the sections to follow that this is indeed born out empirically for all of the heuristics which we have investigated.

5. Algorithms used in the testbed. In view of the previous arguments, we have restricted ourselves to local heuristics. Without trying to be complete nor representative, we have studied the statistics of cut sizes for three types of local search and four versions of simulated annealing algorithms. In this section we sketch the workings of these heuristics. In Sections 6 and 7, we show that the same self-averaging properties hold for all these algorithms in spite of their significant differences. There is thus no reason to believe that our claims are affected by the details of local algorithms; rather, the properties are most likely generic to dynamics which are local.

5.1. Kernighan-Lin (KL). In simple local search, one performs elementary transformations to a feasible solution of the COP as long as they decrease the cost, a procedure sometimes called λ -opting [20]. A more sophisticated version consists in using “variable depth” search: one builds a sequence of p elementary transformations, usually according to a greedy criterion. p is not set ahead of time, and depends on the sequence of costs found. The elementary transformations are not imposed to decrease the cost, but the sequence of length p must do so if it is to be applied to the current solution. Such a procedure was first proposed by Kernighan and Lin [16], in fact in the framework of the GPP. Hereafter we will refer to their algorithm as “KL”. The elementary transformation they use is the exchange of a pair of vertices, one vertex in V_1 being exchanged for one in V_2 . A sequence of such exchanges is built up in a greedy and tabu fashion by performing a “sweep” of all the vertices: at each step of the sweep, one finds the best (largest cost gain) pair to exchange among those vertices which have not yet been moved in the sweep (tabu condition). The sweep has length $N/2$. When the sweep is finished one finds the position p along the sequence of exchanges generated where the cut size is minimum. If this minimum leads to an improved partition, the transformation of p exchanges is performed on the partition and another sweep is initiated; otherwise the search is stopped and the partition is “KL-opt”, *i.e.*, it is a local minimum under KL.

The KL algorithm is deterministic although it is possible to introduce stochasticity to break degeneracies in selecting the best pair to exchange. Its computational complexity is not easy to estimate because the number of sweeps is not known in advance. (This is a generic difficulty in estimating the speed of iterative improvement heuristics.) However, in practice, one finds that KL finishes in a “small” number of sweeps. Thus the computational complexity is estimated to be a few times that of performing the last sweep, known as the check-out sweep. For our study, we have used our own implementation of KL [22], which uses heaps to find the best pair to exchange at each step. For sparse graphs, this leads to $\mathcal{O}(N \ln N)$ operations per sweep. A nearly identical KL is provided in the Chaco software package, which gives sensibly identical results. A faster implementation of the algorithm has been given by Fiduccia and Mattheyses [7] whenever the use of a radix sort is possible; then the time for each sweep is $\mathcal{O}(N)$.

In terms of quality of solutions found, KL is quite good. What is surprising is that although Kernighan and Lin proposed their method over 20 years ago, KL remains relatively unchallenged, at least as a general purpose method applicable to any kind of graph, regardless of its structure. Of course, for special kinds of graphs, such as meshes, other heuristics (e.g., spectral bisection) perform better [4, 11, 13, 14].

5.2. A multilevel KL-algorithm: CHACO. The Chaco software package includes a number of heuristics for partitioning graphs. (For information about this package, see the *Chaco user’s guide* [10].) For our purposes, we have used only its “multilevel” generalization of KL, hereafter referred to simply as CHACO. The CHACO algorithm is based on a coarse graining or “compactification” of the graph to be partitioned. At each level, vertices are paired using a matching algorithm, and paired vertices are then considered as the vertices of the next higher level of compactification. Because of this process, it is necessary to have weighted edges; the weights are also propagated to the higher level. The compactification is repeated until a sufficiently small graph is obtained to which spectral bisection is applied to get a first partition. Then this partition is used as the starting partition in KL for the graph at the level below it. This process is recursive, until one obtains a KL-opt partition of the original graph. (Note that this construction is deterministic, and does not require an initial “random” partition.) Such a multilevel strategy has been very successful for unstructured 2 and 3 dimensional meshes [11, 14], both in terms of solution quality (much better than for KL alone), and in terms of speed (much faster than KL because of the hierarchical nature). However, the usefulness of CHACO on random graphs is not *a priori* obvious, both in terms of speed and quality of solutions.

5.3. Simulated Annealing algorithms. We have chosen as a third comparative algorithm simulated annealing (SA). SA is based on a set of elementary moves, just like local search, but now moves which increase the cost are accepted with (low) probability. Because of this, it is sometimes appropriate to consider SA as a noisy local search method. Simulated annealing is really a family of algorithms. To include some of the different bells and whistles proposed for this algorithm, we have considered four variations. These are: (i) the SA as first introduced by Kirkpatrick *et al.* [17] (referred to as FSA) where the initial and final temperatures are fixed ahead of time by the user and where a predetermined number of trial moves are performed at each temperature; (ii) Kirkpatrick *et al.* also proposed to determine the initial and final temperatures of the schedule dynamically. They set the initial temperature at the beginning of the run using the criterion that about 80% of the trial moves are accepted at that temperature. Similarly, they stop the cooling if for 5 cooling steps the energy does not decrease. We will refer to this method as KSA. (iii) Johnson *et al.* [13] improved the speed of this algorithm by allowing an early exit to the next temperature of the schedule; the condition they proposed for exiting is having accepted a minimum number of moves. Also they modified the termination criterion to having an acceptance rate less than a threshold value. We will refer to this version as JSA. All three of these SA methods use an exponential cooling schedule with a cooling factor of 0.95. (iv) The last SA variation consists in using an *adaptive schedule* whereby the next temperature value is determined on the fly according to the energy fluctuations at the current temperature. We have chosen for this variation the implementation of van Laarhoven and Aarts [26, 27].

It is clear that in order to obtain the claimed gain it is essential to spend a long time in the freezing phase of the cooling. Since this would increase the computation times significantly we have chosen not to use a very good tuned adaptive schedule but one which provides a cooling factor of the same magnitude as in the other SA algorithms presented. Resulting at the cost of solution quality in comparable computation times for the sizes of the instances we are interested in.

In SA, one can use the same elementary moves as in local search, *i.e.*, for the GPP, pair exchanges. However, once a low cost partition is obtained, it will take a long time (or a lot of luck) to find further good exchanges. Finding a good *pair* is best done by finding the first vertex to transfer and then the second, *i.e.*, by using a *sequential* process. This suggests relaxing the constraint of having balanced partitions, and replacing it by a penalty function which keeps the sizes of V_1 and V_2 nearly equal (small *off-balance*). We have followed a slightly different approach where each move destroying the balance must be followed by a move restoring the balance. Then the Markov chain explores the partitions which are balanced and those with “off-balance” of ± 1 . It is easy to see that this method is equivalent to having the cost of all the other partitions equal infinity; at fixed temperature, one generates for long chains, partitions with cut sizes given by the Boltzmann factor, within the constraint for the “off-balance”. Indeed, the succession of accept/reject decisions makes the global probability distribution Boltzmannian in this space, so that we guarantee the same convergence properties as in the standard case.

Some remarks concerning our implementations are in order. First, at fixed temperature, we perform a certain number of “sweeps”. In each sweep, every vertex is sequentially considered as a candidate for changing sides of the partition; if the move were to violate our limit on the “off-balance”, the move is rejected (in fact, it simply is not considered). A sweep thus requires $O(N)$ operations. Our sweeps use random *permutations* rather than a fixed or random ordering of the vertices. The use of random permutations should – according to certain authors [13, 26, 27] – result in an enhancement of the quality of the solutions found. Second, the maximum number of sweeps at any temperature is set to $\alpha\lambda$, with $\lambda = 10$ for all of our implementations. For FSA and KSA, this is in fact the (actual) number of sweeps, so that their computational complexity is $O(\alpha\lambda N)$ times the number of temperature steps used. The cases of JSA and ASA are more difficult to evaluate. In practice we find that JSA is faster than KSA, but not by more than a constant factor. ASA on the other hand spends quite a lot of time at intermediate temperatures, all the more so that N increases; empirically, we have found an $O(N^{3/2})$ complexity.

In terms of quality, we are aware of no systematic study on sparse random graphs. In a previous SA work on the GPP, Van Laarhoven and Aarts used an adaptive decrement rule [26, 27] and claim a gain of about 13% over simpler non-adaptive algorithms. They also compared their results to those from the algorithm used by Johnson *et al.* for the GPP, who claimed an enhancement of about 5% for JSA over the Kernighan-Lin algorithm. The small gain found by Johnson [13] is, according to van Laarhoven and Aarts [26, 27], due to the use of a non-adaptive choice of the temperature decrement rule. However, we have found for sparse random graphs that the different variants of simulated annealing are nearly indistinguishable in terms of quality of solutions. This may be due to our not using a penalty term or to the different kinds of graphs used in the present study.

5.4. Chained-Local-Optimization (CLO). The chained-local-optimization (CLO) strategy is a synthesis of local search and of simulated annealing [23]. The essential idea is to have simulated annealing sample not all solutions, but only locally optimal solutions. This strategy is guaranteed to be at least as good as local search, and has been successfully applied to the traveling salesman problem [21] and to the partitioning of unstructured meshes [22].

In this work, we use KL as the local search engine. Given any initial KL-opt partition P_i , the simplest implementation of CLO will: (i) apply a perturbation or “kick” to modify significantly the partition (in practice this means exchanging *clusters* of vertices); (ii) run KL on the modified partition so as to reach a new KL-opt partition P_f ; (iii) apply the accept/reject procedure for going from the initial partition (P_i) to the final one (P_f). This defines the analogue of one move of a simulated annealing algorithm, except that many modifications to the partition have occurred in this single step. The temperature may be modified according to a schedule if desired, but for simplicity, we have set the temperature to zero in all of our runs.

As was discussed in the context of simulated annealing, it is inefficient to exchange vertices or clusters simultaneously, it is better to do it sequentially. Our present CLO algorithm thus proceeds as follows. Given P_i an initial balanced KL-opt partition, choose a (connected) cluster of p vertices in V_1 (or V_2), and move them into V_2 (respectively V_1). KL-optimize this partition to generate an intermediate (off-balanced) partition. Now choose a cluster of p vertices in V_2 (V_1) and move them into V_1 (V_2); KL-optimize this modified partition to generate P_f , the final (and *balanced*) partition. This whole procedure is our “simulated annealing” step, and we apply the accept/reject criterion for going from P_i to P_f .

When running CLO on irregular meshes [22], it was possible to perform large kicks, exchanging many vertices at once. Unfortunately, for sparse random graphs, we find that the acceptance when doing so becomes low. We have thus used “small” kicks, creating clusters of sizes varying randomly between 3 and 13. Given such small kicks, KL usually terminates in just 2 sweeps, and the speed of CLO per kick is about half that of KL.

Consider now the limit of large N . Using the analogy with simulated annealing, if a fixed (N -independent) number of small kicks are used, it can be expected that CLO will perform no better than KL itself. We have thus chosen to use a number of kicks which scales linearly in N , namely λN with $\lambda = 0.1$. This choice of course influences the quality of the solutions generated, a larger value of λ giving *a priori* better results. The computational complexity is of order $N^2 \log(N)$.

6. Self-averaging of the cut size. In the rest of this paper, we study the statistical properties of the cut sizes generated by the algorithms described in Section 5 when applied to random initial partitions. The ensemble of graphs used is that of random graphs with mean connectivity $\alpha = p(N - 1) = 5$ (see Section 2). This value was chosen because at much larger connectivities, the ratio between the best and worst cut size approaches 1, and at lower connectivities, algorithms taking explicit advantage of disconnected parts of the graph will outperform general purpose heuristics. In order to minimize effects associated with our finite sample of graphs in the ensemble, we have benchmarked all the algorithms on the *same* graphs. The number of graphs used during the production runs was 10 000 with values of N ranging between 50 and 200; however, because the CHACO algorithm was so fast, we have also performed runs on 100 000 graphs for that heuristic.

The purpose of this section is to give numerical evidence that the distribution of cut sizes becomes peaked in the limit of large graphs, for each of the heuristics considered. (Further properties of the distribution will be given in Section 7.) We find that each algorithm generates cut sizes for which both the mean and variance scale linearly in N . From this behavior, it is clear that the distribution of cut sizes becomes peaked at large N , i.e., that the cut sizes are self-averaging. Also, assuming (cf. Section 2) that the minimum (*i.e.*, optimum) cut size scales linearly with N at large N , we see that each heuristic algorithm leads to a fixed percentage excess above the true optimum. (Note that the worst cut size also has a linear scaling in N .) This percentage excess provides a first ranking of the algorithms, which, however, does not take into account the speed of execution.

If $\mathcal{C}(i, m)$ is the cut obtained by a heuristic for the graph G_i and an initial partition m , define the mean cut per vertex $\langle \langle c \rangle \rangle$ by:

$$(6.1) \quad \langle \langle c \rangle \rangle \equiv \left\langle \left\langle \frac{\mathcal{C}(i, m)}{N} \right\rangle \right\rangle,$$

where the averages are over initial partitions and over the ensemble of graphs studied (cf. Section 3 for

the notation). We compute these ensemble averages numerically using the standard estimator (hereafter, overlines refer to numerical averages):

$$(6.2) \quad \bar{c} \equiv \frac{\sum_i \sum_m \mathcal{C}(i, m)}{N \sum_i \sum_m 1} \approx \langle \langle c \rangle \rangle.$$

The approximation is due to a statistical error e associated with fluctuations of $\mathcal{C}(i, m)$ both with m and i . It is not difficult to see that for our problem, one does not need to perform an average over m and that in particular it is enough to consider any finite number R of partitions for each graph G_i . Furthermore, the statistical error e is not very sensitive to R , making it numerically inefficient to take a large value for R . Because of this, we have performed the numerical averages with $R = 1$, and this leads to a simple expression for e , the statistical error on $\bar{c}$:

$$(6.3) \quad e^2 = \frac{\langle \langle (c - \langle c \rangle)^2 \rangle \rangle}{\sum_i 1} \approx \frac{(\overline{c^2} - \bar{c}^2)}{\sum_i 1}.$$

Figure 6.1 shows the dependence of $\bar{c}$ on $1/N$. (The error bars are too small to be visible. Also, in order to avoid cluttering the figure, we have included among the simulated annealing algorithms only KSA; the other implementations of simulated annealing give nearly identical results.)

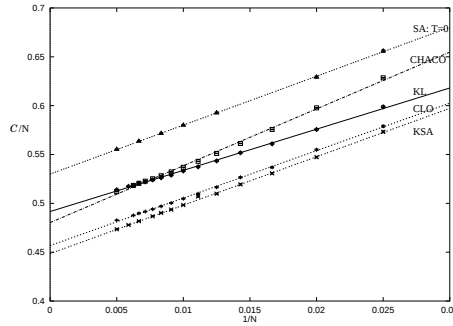


FIG. 6.1. Scaled mean cut sizes for the different algorithms.

For all algorithms, there seems to be a limiting large N value for $\bar{c}$, the convergence to this limit being linear in $1/N$. We have thus fitted the data to a linear function:

$$\frac{\bar{C}}{N} \equiv \bar{c} \approx A + \frac{B}{N}.$$

The values of the A and B coefficients obtained from the fits are given in Table 6.1, and the χ^2 values show that the fits are good.

An identical analysis can be performed on the *variance* of the cuts found by the different algorithms. Figure 6.2 shows the dependence on N for the rescaled quantity $N(\overline{c^2} - \bar{c}^2)$. The large N scaling is apparent, just as it was for $\bar{c}$.

The mean and variance of $\mathcal{C}$ thus scale linearly with N at large N . Then the relative width of the distribution of $\mathcal{C}$ is proportional to $1/\sqrt{N}$, showing that the distribution for the cut sizes becomes peaked for all the algorithms investigated. (One can also say that the distribution of $\mathcal{C}(i, m)/N$ tends towards a delta function as $N \rightarrow \infty$, which is what we mean by self-averaging.) Since the fluctuations of $\mathcal{C}(i, m)$ include both graph to graph fluctuations and fluctuations within a graph, we can conclude that the relative fluctuations within a fixed typical graph also go to zero. Thus each algorithm will in the large N limit give a fixed percentage excess above the minimum for almost all graphs and almost all initial random partitions.

algorithm	A	B	% excess
KSA	0.4485	4.95	0.00
FSA	0.4489	4.92	0.08
ASA	0.4499	4.96	0.32
JSA	0.4513	4.88	0.63
CLO	0.4568	4.85	1.8
CHACO	0.4802	5.81	7.1
KL	0.4916	4.21	9.6
SA $T = 0$	0.5302	4.79	18.2

TABLE 6.1

Estimates for the large N value and slope of the mean cut size per vertex and percentage excess relative to the KSA heuristic.

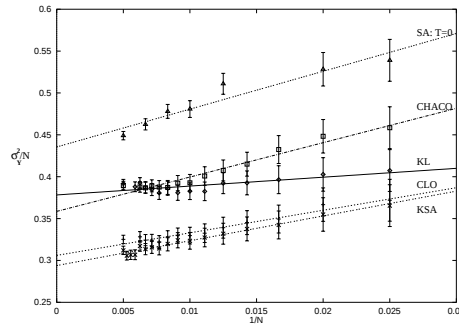


FIG. 6.2. Scaled variance of the cut sizes for the different algorithms.

A speed independent ranking. Since each algorithm is characterized by a percentage excess, we can introduce a ranking of the different heuristics according to their excess in the large N limit. (Of course, this ranking does not take into account the speed of the algorithms!) For our test and implementation of the different heuristics, the winners are in the class of simulated annealing. The best is KSA; using this as the reference rather than the true min cut size (which is unknown), JSA has an excess of 0.63%, ASA an excess of 0.32%, and FSA an excess of 0.08%. The next best heuristic is the CLO-algorithm, followed by CHACO, and finally KL. (The results for the excesses are given in Table 6.1.) We have also included for general interest the excess obtained by a zero temperature “simulated annealing”: 18.21%; note that it gives much less good results than KL, while true simulated annealing gives much better results than KL.

As a comment, let us remark that the relative solution quality of the algorithms is determined to higher accuracy than the absolute quality. Simply put, the cut sizes obtained by the different algorithms are correlated because they are performed on the same graphs, so that the statistical error on $\langle c_{CLO} - c_{KL} \rangle$ for instance is 3.2 times smaller than the statistical error on $\langle c_{CLO} \rangle$ alone. This is why it is possible to give reliable values for the excesses of the different simulated annealing algorithms even though their solution quality is very similar. Nevertheless the ranking for the simulated annealing algorithms is not without ambiguity. The FSA algorithm is, for larger N , within the statistical error of the KSA algorithm, and hence we have no evidence that one is better than the other.

The other algorithms are easily ranked. KL and Chaco are 9.6% and 7.1% worse than KSA, but CLO is only 1.8% worse. The comparison with KL is qualitatively (though not quantitatively) similar to that given by Johnson *et al.* [13] and by van Laarhoven and Aarts [27]. Both claimed a gain of the SA-algorithm over the KL-algorithm of about 5% and 13%, respectively. The difference with our results has several origins. First, we have performed an average over an ensemble of graphs. Second, our graphs have slightly different characteristics from the ones they use. Third we have not introduced a penalty term in our implementation of simulated annealing; this probably affects the quality of the solutions

found.

7. Distribution of cut sizes. In this section we deepen the statistical study of $\mathcal{C}$. As shown in the previous section, the distribution of $\mathcal{C}/N$ tends towards a delta function; it is natural to ask *how* this limit is reached, and to understand the nature of intra- and inter-graph fluctuations. It is convenient to use the framework introduced in Section 3 but where *random* partitions are replaced by the partitions found by applying one of our heuristics to a random start. For each graph G_i , and each initial partition m , we define

$$\mathcal{C}(i, m) = X(i) + Y(i, m)$$

where $\langle Y(i, m) \rangle = 0$ so that $X(i)$ is the average cut size found on graph G_i , and $Y(i, m)$ gives the fluctuation of the cut size about its mean for that graph. For each of our heuristics, our study indicates that for a large random graph G_i , Y has a nearly Gaussian distribution, and that the width of this distribution is essentially independent of i . We study this distribution at large N and show that its width is self-averaging and that its (relative) asymmetry goes to zero. Finally, we have evidence that X and Y become independent variables at large N . These properties will lead to a fast and robust ranking of the heuristics in Section 8.

Figure 7.1 shows the distribution of cut sizes found by KL on one $N = 1000$ graph chosen at random from $G(N, p)$ with $p = \alpha/(N - 1)$. Superposed is a Gaussian with the same mean and variance. The figure gives good evidence that the distribution of Y for that graph is very close to a Gaussian. Then an obvious question is whether the distribution of Y is similar across different graphs. For each of our heuristics, we find that the answer is yes, as indicated by the following study of the moments of Y . (Note that for the CHACO algorithm, the default parameter setting generates the initial starting partition deterministically by application of the coarse graining strategy, then a spectral method is applied. Since there is no “random” initial partition, there are no fluctuations in the cut size as a function of m and so little in this section applies to CHACO with these parameter settings.)

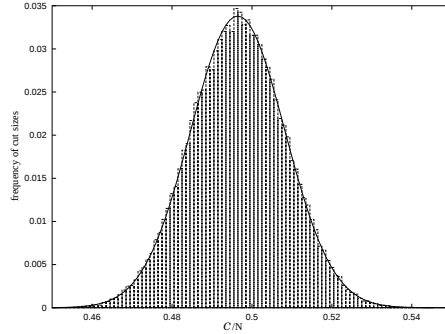
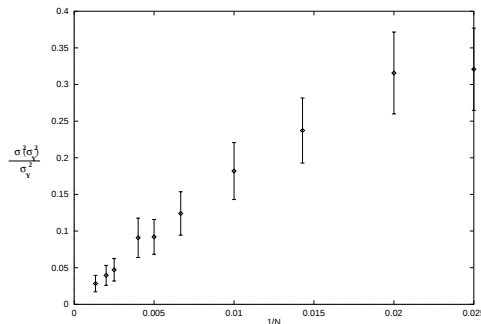


FIG. 7.1. Histogram of KL cut sizes for one $N = 1000$ graph with overlaid Gaussian.

To quantify how $\sigma_Y^2(i) \equiv \langle Y^2(i, m) \rangle$ varies from graph to graph, we measured its mean and variance over i . First, we measured the ratios $\langle \sigma_Y^2(i) \rangle / N$. For each heuristic, the data extrapolates to a limiting value as N becomes large. Comparing with the results for the mean cut size, we found that the algorithms which lead to the best cut sizes also have the smallest widths for the Y distribution. Second, we studied the *variance* of $\sigma_Y^2(i)$, i.e., $\sigma^2(\sigma_Y^2(i))$. This study requires high statistics, and so was performed to high accuracy only for KL, the fastest of our algorithms; however the other algorithms show qualitatively the same behavior. Figure 7.2 displays for KL the dependence on $1/N$ of the relative variance of $\sigma_Y^2(i)$, i.e., the inter-graph variance of $\sigma_Y^2(i)$ divided by the square of its mean. As can be seen from the figure, the ratio goes to zero at large N , showing that $\sigma_Y^2(i)$ is self-averaging. Simply put, this means that the width (over m) of the Y distribution has relative fluctuations from graph to graph which disappear as $N \rightarrow \infty$. (Our lower statistics data for the other heuristics are consistent with this conclusion.)

Following the statistical physics analogy given in Section 4 there is reason to believe, that the distribution of Y tends towards a Gaussian as in the case of random partitions. To test this conjecture, we


 FIG. 7.2. Relative variance of the intra-graph cut size variance σ_Y^2 .

have measured the asymmetry of the distribution of Y on numerous graphs for KL. First, we find that the typical asymmetry is small, and that the mean of the third moment of Y satisfies

$$\frac{\langle Y^3(i, m) \rangle}{\langle \sigma_Y^2(i) \rangle^{3/2}} \rightarrow 0$$

as $N \rightarrow \infty$. Second, we have checked that the average of the squared asymmetry also is small, *i.e.*,

$$\frac{\langle (Y^3(i, m))^2 \rangle}{\langle \sigma_Y^2(i) \rangle^3} \rightarrow 0.$$

These properties give strong evidence that the distribution of Y for any graph tends towards a Gaussian of zero mean and of variance AN as $N \rightarrow \infty$, where A depends on the heuristic but not on the actual graph.

The distribution of $X(i)$ can be studied similarly. The previous section gave its mean as a function of N and also showed that it is self-averaging. It is of interest to quantify the decrease with N of its relative variance. We have found that the distribution of X is roughly compatible with a Gaussian distribution of width proportional to $\sqrt{N}$ for each of the algorithms. (Unfortunately, a quantitative test of this requires very high statistics.) However, the distribution of $X(i)$ is not essential for our ranking procedure as will be clear in the next section, so we have not studied it in greater depth.

Finally, to completely specify the statistics of $\mathcal{C}(i, m)$, it is necessary to describe the correlations between $X(i)$ and $Y(i, m)$. We have found numerically that these variables are nearly uncorrelated, with in particular the correlation between $X(i)$ and $\sigma_Y^2(i)$ tending towards zero as $N \rightarrow \infty$. Assuming that this holds and that X has a Gaussian distribution, then the distribution of $\mathcal{C}(i, m)$ is also Gaussian. Our measurement of the asymmetry (jointly over i and m) of $\mathcal{C}(i, m)$ is compatible with this property at large N . (The total variance is then given by the sum of the variances of X and Y .) This can be summarized mathematically by introducing two Gaussian random variables x and y of zero mean and unit variance, and modeling the rescaled cut size as the following sum:

$$c(i, m) = \langle c(N) \rangle + \frac{\sigma_X^*}{\sqrt{N}} x(i) + \frac{\sigma_Y^*}{\sqrt{N}} y(i, m).$$

This equation is then the exact analogue of what was derived for the cut sizes of random partitions (see Eq. 3.5).

8. A speed dependent ranking of heuristics. In this section we come back to the initial motivation for this work, namely the necessity of comparing heuristics of very different speeds. The possibility of doing so is very relevant, as for most combinatorial optimization problems local search is notoriously fast and simulated annealing notoriously slow. Any meaningful ranking must determine whether it is better to have a fast heuristic which gives not so good solutions, or a slower heuristic giving better solutions. We now show how to introduce such a ranking when considering first just one graph, and then generalize to an ensemble of graphs. Finally, we illustrate what this ranking gives in the case of the heuristics in our testbed when applied to sparse random graphs.

The case of one graph. Consider a single graph G on which one is to provide a ranking. One has a number of different heuristics which give various cut sizes and run at different speeds. To take into account both the speed of the algorithms and the quality of the solutions they generate, we fix the amount of computation time allotted per algorithm. Call this time τ (measured for instance in CPU seconds on a given machine). Each heuristic then generates (non-optimal) solutions during that time using multiple random initial starts. Suppose that the speed of the algorithm of interest is such that k independent starts can be performed in the allotted time τ . (We shall assume that the execution time is insensitive to the random initial start, as this is the case in practice with our heuristics. Knowledge of the speed of the algorithm then gives the value of k which can be used.) For each of the k runs, there is a “best-found” cost. The output at the end of the multiple runs is the best of these k costs, hereafter called “best-of- k ”. The different algorithms are then ranked on the basis of the *ensemble mean* of their “best-of- k ” (the value of k depending on τ and on the algorithm). This ensemble average is the average over the random numbers used both for the random initial starts and for running the algorithms (if any). This establishes a ranking for a particular graph and for a given amount of computation time τ .

It is inefficient to perform the average just mentioned in a “direct” way, i.e., by extracting values of “best-of- k ” over many multiple runs; it is far better to compute the average starting with the *distribution* of the “best-found” cut sizes associated with single random starts. Call $P(C)$ the probability of finding a “best-found” cut size of value C , and $Q(C)$ the associated cumulative distribution, i.e., the probability of finding a cut size (strictly) smaller than C . Since the cut sizes are integer valued, we then have $P(C) = Q(C+1) - Q(C)$. Introducing the analogous probabilities $\tilde{P}_k$ and $\tilde{Q}_k$ for the “best-of- k ” values, one has:

$$1 - \tilde{Q}_k(C) = (1 - Q(C))^k.$$

The distribution for “best-of- k ” can thus be generated from that of “best-found”, and then C^* , the mean of “best-of- k ”, is easily extracted. (This construction explains why we studied the distribution of single cut sizes in Section 7.) Note also that it is possible to extract C^* for a whole range of τ values with essentially no extra work since τ affects only k and the determination of the mean of “best-of- k ” represents a negligible amount of work once the distribution of “best-found” is known.

The quantity C^* is in effect a quantitative measure of the effectiveness of the algorithm. Of course, C^* depends on the amount of computation resources allotted, i.e., τ . As τ increases, k increases (in jumps of unity), and C^* decreases. The broader the distribution of “best-found”, the faster the decrease of C^* and the more useful it is to perform multiple runs.

To establish the ranking, simply order the algorithms according to their C^* . In general, this ranking may depend on τ , and clearly it is sensitive to the lower tail of the distribution of “best-found”. Consider for instance two heuristics H_1 and H_2 having two overlapping distributions for “best-found”, with averages satisfying $\langle C_{H_1} \rangle < \langle C_{H_2} \rangle$. In the mean, H_1 seems better than H_2 , but if H_2 is significantly faster, and if the tail of the distribution extends well into the domain of C_{H_1} , then one can have $C_{H_2}^* < C_{H_1}^*$. H_2 may then be the more effective algorithm, assuming of course that τ is large enough so that indeed H_2 can be run multiple times. Some general properties may be derived for instance assuming that the distribution for C_{H_1} and C_{H_2} are simply shifted with respect to one another. Then if the tail of the distributions falls off as an exponential or faster, H_2 will *not* become more effective than H_1 as $\tau \rightarrow \infty$.

Ranking on an ensemble of graphs. The extension of this ranking to an ensemble of graphs is straight-forward. Assume that C^* is known for each graph G and for each heuristic. C^* is a (real number) measure of the effectiveness of the heuristic on that graph, given an amount of computation time τ . We can then generalize this measure from one graph to an ensemble of graphs by considering $\langle C^* \rangle$, the mean of C^* over the relevant ensemble. The final ranking is then simply given by the ordering of the algorithms according to their mean effectiveness.

Our expectation is that in a relatively homogeneous ensemble, the effectiveness (and thus the ranking) will be nearly the same for essentially all sufficiently large graphs and so the average behavior is also the typical behavior. We can expect this to happen whenever the distribution of cut sizes associated with the different heuristics do not overlap too much and have the same pattern regardless of the graph. This is what occurs in the case of our ensemble of random graphs: indeed, we saw that each algorithm leads to a fixed percentage cost excess at large N and that the distribution of costs is peaked. Then two algorithms have non overlapping distributions as $N \rightarrow \infty$ (unless they lead to the same percentage excess). It is then clear that at large N , the mean ranking is the same as the typical ranking. It is also clear that

increasing the amount of computer resources (τ and thus k) or speeding up the algorithm, while keeping the quality of its solutions the same, does very little to improve its ranking.

Illustration. For each value of N and τ , we can follow the procedure just given to obtain $\mathcal{C}^*$ for the different heuristics of interest for any given graph G , and repeat this for many graphs in $G(N, p)$. There are, however, a number of possible speed-ups in our case because of the statistical properties derived in the previous sections. First, although in principle the “best-of- k ” construction has to be repeated for each graph, the results of Section 7 provide a short-cut. Since the distribution for “best-found” is (to high accuracy) Gaussian, it is possible to map the mean of “best-found” to that of “best-of- k ” once and for all: the mapping is just a shift by a k -dependent number of standard deviations. Second, noting that at fixed N , the variance of this Gaussian as well as the speed of the algorithm is essentially constant from graph to graph, we can calculate $\langle \mathcal{C}^* \rangle$ (the average over graphs) in terms of: (i) the CPU time necessary to find one “best-found”; (ii) the mean cut size, $\langle X(i) \rangle$; (iii) the variance of the intra-graph cut sizes, $\langle Y^2(i, m) \rangle$, which is graph independent at large N . These quantities were measured for a number of values of N , and then fits were performed to interpolate to arbitrary values of N . From these fits, it is possible to compute analytically the values of $\langle \mathcal{C}^* \rangle$ for any values of N and τ , and in particular the “winning” algorithm (the first in our ranking). From this, define regions in (N, τ) space where a given heuristic is the winner, leading to a “diagram” as in Figure 8.1.

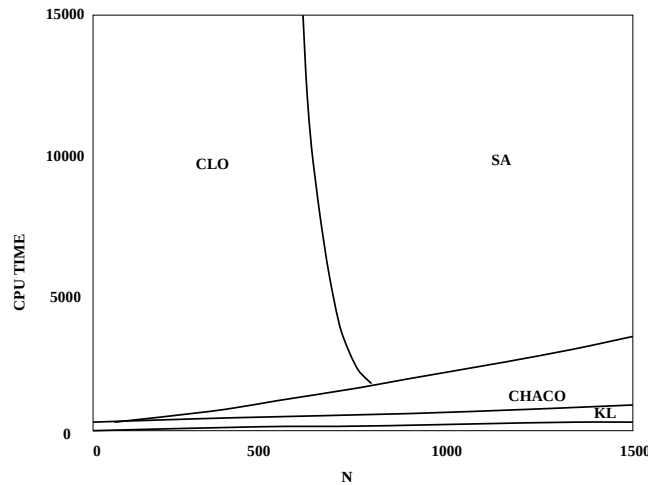


FIG. 8.1. Ranking diagram

In our construction of this diagram, we have included JSA in our ranking but not FSA, KSA, nor ASA. This is because for our choice of parameters, all of the simulated annealing algorithms tested gave very similar quality solutions, but JSA was slightly faster. Although the *effectiveness* of all these algorithms are nearly identical, their ranking depends on N and τ because of the discrete jumps in k . (Whenever one algorithm increases its k before the others, it may change its ranking.) In the diagram of Figure 8.1, we have labeled the different regions according to the associated “winner”, and have indicated the boundaries separating them. (Again, because of the discrete nature of k , we have smoothed these curves.) The labeling “SA” in fact corresponds to JSA. The CPU time is expressed in multiples of CPU-cycles. To give these units a machine independent and less technical meaning it is enough to say that the lower boundary of CHACO corresponds to the time CHACO needs to run once.

From this diagram, we see that at large N , given enough CPU time, the best algorithm is simulated annealing, simply because its mean excess cost is lower than for the other algorithms. In this limit, the distributions for the cut sizes overlap very little, so the ranking is relatively insensitive to the algorithm’s speed: using multiple random starts does *very* little to improve the quality of the solutions found as fluctuations about the mean become negligible. At smaller values of N , the fluctuations arising from different random starts are not negligible, so faster algorithms can outperform simulated annealing by

using the best of k runs. If we compare KL, CHACO, and CLO, we see that CLO is a bit slower but leads to substantially better solutions, and so is the winner if the amount of CPU time is enough for it to run. The other algorithms are competitive only if neither CLO nor simulated annealing can terminate a run. This explains why the KL region is nearly invisible, squeezed under the CHACO region, itself below the CLO and SA region. (Note: that on our random graphs, CHACO is *slower* than KL and that “best-found” and “best-of- k ” are identical within the default settings of CHACO).

9. Discussion and Conclusions. We have studied the *statistics* of cut sizes generated by graph partitioning heuristics, both within a given graph and over all graphs. Motivated by a statistical physics analogy and by what happens for random partitions (Section 3), we obtained strong numerical evidence that the cut sizes generated on sparse random graphs are self-averaging, *i.e.*, that their distribution becomes peaked as the number of vertices N becomes large. (Quantitatively, this simply means that the *relative* fluctuations about the mean tend to zero as $N \rightarrow \infty$.) For the mean cut size, we found a linear dependence on N , showing that each heuristic leads to a fixed excess percentage cut size above the true minimum. We expect analogous properties to hold for all local heuristics applied to any combinatorial optimization problem in which each variable is coupled to just a few others.

We also investigated how the distribution of cut sizes approaches its limiting large N behavior, and gave evidence that on typical graphs the distribution of cut sizes generated becomes Gaussian as $N \rightarrow \infty$. In that limit, each heuristic is then characterized by a mean cut size (over all graphs) and a variance describing the fluctuations in the cut sizes on any typical graph. This variance seems to scale linearly with N in the large N limit and to be self-averaging also.

The principal motivation for this work was to introduce a method to rank heuristics while taking into account both the quality of the solutions found and the speed of the algorithms. Knowledge of the distribution of cut sizes allows one to establish a meaningful ranking of the heuristics by assuming that the algorithms may be applied to different random starts and the best of k runs used as the final result. Although this ranking can be done by brute force, we have used the properties just described to demonstrate it on the heuristics in our testbed. At “large” values of N ($N > 700$), the winner is almost always simulated annealing. In fact, at large N , the distributions associated with the algorithms we have tested do not overlap significantly, so that the use of multiple runs to explore the tail of the distributions is not effective. For smaller values of N , the faster algorithms are more competitive, and we find that the winner is CLO except when the allotted time is too short for running even one run of CLO. Since the graph to graph fluctuations in the variance of the cut sizes found are small, this ranking “in the mean” is also in almost all cases the ranking on individual graphs; it is thus very robust.

A number of questions remain open. How can one characterize the distribution of $X(i)$, the mean cut size on graph i ? To what extent do similar properties hold for heuristics which are manifestly not local? Can the information found help generate better heuristics? Indeed, it is worth pointing out that although simulated annealing is a general purpose method, it outperforms the other heuristics which were specifically developed for the graph partitioning problem. This suggests that some improvements in these methods might be obtainable by suitable modifications.

10. Acknowledgement. We are indebted to Bruce Hendrickson and Robert Leland for providing us with their software package Chaco 2.0. We also thanks S. W. Otto and N. Sourlas for stimulating discussions. G.R.S. acknowledges support from an Individual EC research grant under contract number ERBCHICT941665, and O.C.M. acknowledges support from the Institut Universitaire de France. Furthermore, G.R.S. would like to express his gratitude to Professor J.M. Gómez Gómez for his generous hospitality at the Department of Theoretical Physics of the *Universidad Complutense de Madrid*, where part of this work was accomplished.

REFERENCES

- [1] X. AZUMA, *Weighted sums of certain dependent random variables*, Tohoku Math. Journal, 19 (1967), pp. 357–367.
- [2] J. R. BANAVAR, D. SHERRINGTON, AND N. SOURLAS, *Graph bipartitioning and statistical mechanics*, J. Phys. A, 20 (1987), pp. L1 – L8.
- [3] M. BERGER AND S. BOKHARI, *A partitioning strategy for non-uniform problems on multiprocessors*, IEEE Transactions on Computers, C-36 (1987), p. 570.
- [4] J. W. BERRY AND M. K. GOLDBERG, *Path optimization for graph partitioning problems*. preprint, 1994.
- [5] C. DE DOMINICIS AND Y. GOLDSCHMIDT, *Replica symmetry breaking in finite connectivity systems: a large connectivity expansion at finite and zero temperature*, J. Phys. A, 22 (1989), pp. L775 – L781.
- [6] A. DUNLOP AND B. KERNIGHAN, *A procedure for placement of standard-cell VLSI circuits*, IEEE Transactions on Computer-Aided Design, CAD-4, No. 1 (1985), p. 92.

- [7] C. FIDUCCIA AND R. MATTHEYSES, *A linear-time heuristic for improving network partitions*, in Proceedings of the 19th Design Automation Workshop, 1982, p. 175.
- [8] Y. FU AND P. ANDERSON, *Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimization*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 19 (1986), p. 1605.
- [9] M. R. GAREY AND D. S. JOHNSON, *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*, Freeman, New York, 1979.
- [10] B. HENDRICKSON AND R. LELAND, *The Chaco user's guide: Version 2.0*, Tech. Report SAND94-2692, Sandia National Labs, Albuquerque, NM, June 1995.
- [11] ———, *A multilevel algorithm for partitioning graphs*, in Proc. Supercomputing '95, ACM, November 1995.
- [12] F. JOHANNES, *Partitioning of VLSI circuits and systems*, in Proceedings of the 33rd Design Automation Conference, Las Vegas, June 1996.
- [13] D. JOHNSON, C. ARAGON, L. MCGEOCH, AND C. SCHEVON, *Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation, part I (graph partitioning)*, Operations Research, 37 (1989), pp. 865–892.
- [14] G. KARYPIS AND V. KUMAR, *A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs*, SIAM Journal on Scientific Computing, (1997). to appear.
- [15] B. KERNIGHAN, *Some Graph Partitioning Problems Related to Program Segmentation*, PhD thesis, Princeton University, 1969. Princeton, NJ.
- [16] B. KERNIGHAN AND S. LIN, *An efficient heuristic procedure for partitioning graphs*, Bell System Technical Journal, 49 (1970), pp. 291 – 307.
- [17] S. KIRKPATRICK, C. GELATT, AND M. VECCHI, *Optimization by simulated annealing*, Science, 220 (1983), pp. 671–680.
- [18] K. LANG AND S. RAO, *Finding near-optimal cuts: an empirical evaluation*, in Proceedings of the Fourth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms, 1993.
- [19] R. LELAND AND B. HENDRICKSON, *An empirical study of static load balancing algorithms*, in Scalable High Performance Computing Conference, IEEE Computer Society Press, 1994, pp. 682–685.
- [20] S. LIN, *Computer solutions of the traveling salesman problem*, Bell System Technical Journal, 44 (1965), pp. 2245–2269.
- [21] O. MARTIN, S. W. OTTO, AND E. W. FELTEN, *Large-step Markov chains for the TSP incorporating local search heuristics*, Operations Res. Lett., 11 (1992), pp. 219–224.
- [22] O. C. MARTIN AND S. W. OTTO, *Partitioning of unstructured meshes for load balancing*, Concurrency: Practice and Experience, 7 (1995), pp. 303–314.
- [23] ———, *Combining simulated annealing with local search heuristics*, Ann. Operations Res., 63 (1996), pp. 57–75.
- [24] M. MEZARD, G. PARISI, AND M. A. VIRASORO, eds., *Spin Glass Theory and Beyond*, no. 9 in World Scientific Lecture Notes in Physics, World Scientific, Singapore, First ed., 1987.
- [25] C. H. PAPADIMITRIOU AND K. STEIGLITZ, *Combinatorial Optimization: Algorithms and Complexity*, Prentice Hall, INC., Englewood Cliffs, New Jersey, 1982.
- [26] P. J. M. VAN LAARHOVEN AND E. H. L. AARTS, *Statistical cooling: A general approach to combinatorial optimization problems*, Philips J. Res., 40 (1985), pp. 193 – 226.
- [27] ———, *Simulated Annealing: Theory and Applications*, Mathematics and Its Applications, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1987, chapter 4 – 6, pp. 39 – 98.

– III.8 – Proceedings de la 2eme Conférence Internationale des Metaheuristiques

Le modèle que nous nous sommes proposé pour une étude numérique est le problème de la bipartition d'un graphe. Nous utilisons une gamme des algorithmes heuristiques pour accomplir ce projet. Dans cette contribution nous étudions en plus grand détail les distributions de coût générés par des algorithmes heuristiques sur un graphe. Ceci nous permet d'identifier des différents regimes de la performance d'un algorithme donné. Un algorithme idéal trouvera toujours la solution optimale pour n'importe quelle instance. Pour une certaine taille suffisamment modeste un algorithme heuristique possède une distribution similaire à celle d'algorithme idéal, mais agrandissant la taille la distribution engendrée par l'algorithme heuristique perd cette similarité et la distribution devient étendue vers des coûts plus élevés. Faire croître la taille plus la distribution devient bimodale : il apparaît un deuxième maximum qui se trouve à un écart relatif fixe de la solution optimale. Pour des tailles encore plus grandes la distribution devient gaussienne centrée autour un moyen qui se trouve toujours à un écart relatif fixe de la solution optimale. Ce comportement a été trouvé pour tous les algorithmes heuristiques que nous avons étudiés : l'algorithme de KL, le recuit simulé et les algorithmes hybrides. Un algorithme possède la possibilité d'améliorer la qualité de la solution qu'il trouve si on le démarre plusieurs fois d'un différent point initial. Nous avons quantifié ce gain et utilisé la distribution dérivée afin d'estimer la qualité que va atteindre chaque algorithme en le démarrant plusieurs fois. Les lois d'échelles et le fait que les distributions sont auto-moyennantes nous permet d'établir de tels résultats. Nous discutons également d'autre moyen pour introduire un ordre dans les algorithmes par rapport à leur qualité et vitesse. Par exemple nous étudions la probabilité de trouver la solution optimale par l'algorithme de KL. Comme nous avons déjà déduit que la distribution change d'une distribution très pointue à une distribution gaussienne avec une moyenne à un écart fixe de la solution optimale, la probabilité de trouver la solution optimale doit nécessairement diminuer. Nous avons trouvé que la probabilité de trouver la solution optimale décroît exponentiellement. La similarité du comportement de chacun des algorithmes étudiés suggère que tous les algorithmes heuristiques souffrent de cette détérioration de la qualité. Enfin nous proposons une méthode très fiable pour établir une classification des heuristiques.

Procedure for ranking heuristics applied to graph partitioning

Georg R. Schreiber *and Olivier C. Martin[†]

Division de Physique Théorique[‡]

Institut de Physique Nucléaire

Université Paris-Sud

F-91406 Orsay Cedex

France

MIC '97

held at Sophia Antipolis, France, July 21 — 24, 1997

Abstract

We introduce a procedure for ranking heuristic algorithms which takes into account both speed and quality. To illustrate our procedure, we characterize local search and simulated annealing methods on the graph partitioning problem, and determine the ranking as a function of the allotted computation time. We further discuss the properties of the heuristics as one goes from small to large graphs. In the limit of large graphs, we show why the mean quality becomes the major factor in determining the ranking.

*e-mail: georg@spht.saclay.cea.fr, also at: Service de Physique Théorique, C.E.A.-Saclay, F - 91191 Gif-sur-Yvette Cedex, France

[†]e-mail: martino@ipno.in2p3.fr

[‡]Unité de Recherche des Universités Paris XI et Paris VI associée au C.N.R.S.

1 Introduction

Many combinatorial optimization problems of theoretical or industrial interest are NP-complete [4]. It is convenient to divide the algorithms for tackling such difficult problems into two classes, “exact” and “heuristic”. In the first class, the algorithms will terminate and find the minimum cost solution in a predetermined number of operations. Exact algorithms [17] include exhaustive search, branch and bound, and branch and cut, and typically require computation times which grow exponentially with the problem size N . In the other class, heuristic algorithms do not provide any guarantee of finding the optimum, but are much faster, running typically in times which grow only as a power of N .

Frequently, for large problems, one simply cannot afford to use exact algorithms. The practitioner is then confronted with the question of which heuristic is best for him, given his problem and his computational resources. In this paper, we introduce a framework to answer quantitatively when it is better to use a slow heuristic giving good solutions rather than a faster heuristic leading to less good solutions. This question often arises in practice: simulated annealing usually generates the best solutions but does so very slowly; on the contrary local search heuristics generate less good solutions but are significantly faster. If the practitioner is sharply limited by his amount of computation time, he will choose one of the faster algorithms, whereas if he has ample time, he may be better off using one of the slower algorithms. But alternatively, he may in fact be better off by taking advantage of the possibility of running the faster algorithms multiple times and taking the best solution from these multiple runs. The determination of which heuristic is best is thus not given *a priori*, but depends on the following factors: (i) the speed of each algorithm; (ii) the statistical properties of the solutions generated by each heuristic; (iii) the total amount of computation time available to the practitioner. Given these three factors, this paper provides a procedure for ranking the heuristics.

Our ranking procedure is quite general; nevertheless, in order to be explicit as well as pedagogical, we illustrate it on the graph partitioning problem (GPP). This choice was guided both by its numerous industrial applications and by the fact that many heuristics have been proposed for the GPP. We have selected just a few of these for our study, namely heuristics based on local search and variants of simulated annealing. Using our implementations of these algorithms, we rank them, first on individual graphs, and then on an ensemble of graphs. We find that for tractable problems, i.e., for “small” graphs, where one can find the optimum with high probability, it is the fastest algorithms which are the most effective. On the contrary, as the problem size increases, the speed of the heuristic loses its relevance and the ranking is dominated by the quality of the solutions generated, except when the computation time is so short that only the fastest algorithms can run to completion.

The paper is organized as follows. In Section 2 we define the graph partitioning problem and briefly describe the heuristics and the graphs used in our study. The reader interested in the detailed workings of the algorithms is referred to the appendix. Section 3 shows that each heuristic is characterized by a *distribution* of solution costs. From these distributions we introduce several measures of quality of the heuristics without taking into account speed. To introduce a speed-dependent ranking, we must quantify the improvement in costs obtained by performing multiple starts; we provide an efficient way to do this in Section 4. If one fixes the total amount of computation time τ available for multiple starts, then the faster the algorithm the larger the number of starts k . The associated improvement depends on k and allows us in Section 5 to give our promised speed-dependent ranking as a function of τ . In order to understand qualitatively these results, we study in Section 6 the behavior of the costs as a function of N , the number of vertices of the graphs. In the *ensemble* of sparse random graphs, we find that all heuristics have a transition between “easy” graphs at small N and “difficult” graphs at large N where the distribution of costs becomes peaked and Gaussian. In Section 7 we introduce a ranking of the heuristics on this ensemble of sparse graphs. This ranking has the satisfying property that although it is based on an average behavior, in fact it corresponds to the behavior of “all” graphs in the large N limit.

2 Framework of the study

A graph $G = (V, E)$ is a set of N vertices $V = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ and a set of (non-oriented, un-weighted) edges connecting pairs of vertices. A partition of G is specified by dividing the vertices of G into two disjoint subsets V_1 and V_2 such that $V = V_1 \cup V_2$. The number of edges connecting V_1 to V_2 is called the cost C of the partition. The graph partitioning problem (GPP) consists of finding the partition (V_1, V_2) for which the cost is minimized subject to given constraints on the sizes of V_1 and V_2 . In the standard

formulation, sometimes called graph bisection, V_1 and V_2 have equal sizes, and we shall restrict ourselves to this case in our work.

The GPP is a well studied problem, both theoretically and empirically, and it belongs to the class of NP-complete problems. Its main industrial applications are placement in VLSI design [12, 2] and partitioning in synthesis [7]. Because of these applications, numerous heuristics have been proposed; the most commonly used methods are simulated annealing [11] and adaptations of the variable depth search introduced by Kernighan and Lin [10]. In our study we have limited ourselves to the following heuristics:

1. Kernighan and Lin (KL)
2. Simulated Annealing (SA)
3. Chained Local Optimization (CLO)
4. Zero-Temperature Simulated Annealing ($SA_{T=0}$)

Some explanations concerning the algorithms and their implementations are given in the appendix. However, the details of these algorithms are not central to our claims which are meant to apply to any “local” algorithm. By local, we mean that solutions are iteratively modified by applying small changes as in local search. With this perspective, all simulated annealing based heuristics are clearly local, and KL is local in the sense that it builds on small changes. Similarly, CLO [16] is local because it consists in embedding KL local searches inside a simulated-annealing-type Markov chain: after a KL-opt partition is generated, it is perturbed and then re-optimized; if the new local minimum is better than the old one, it is accepted, otherwise an acceptance/rejection criterion is applied. For this work the temperature in the SA-like part of CLO has been set to zero and hence only down-hill moves are accepted. Similarly, the $SA_{T=0}$ algorithm is a SA algorithm for which the temperature has been set to zero.

In the first part of this paper, these heuristics are applied to two graphs, of size $N = 100$ and $N = 1000$, so that the reader gets a flavor of what happens for different instance sizes. The graphs of industrial interest tend to be sparse, so we have chosen these two graphs at random among random graphs with mean connectivity α equal to 5 (α is the mean number of neighbors of any vertex). This choice of α is motivated by the fact that values smaller than 4 lead to very large fluctuations in the minimum cost from graph to graph, and specialized algorithms can find the optimum much more efficiently than general purpose heuristics. Also, for much larger values of α , the difference between the minimum and maximum cost becomes small, so all heuristics lead to similar cut sizes. This choice of $\alpha = 5$ will also be used in the last part of the paper where we rank the heuristics on the ensemble of random graphs with that mean connectivity.

3 Speed-independent ranking

In the following sections, we assume that we are given one instance (graph) of a combinatorial optimization problem and a collection of heuristics to be ranked. The heuristics considered are stochastic in the following sense: even if there are no random processes in the algorithms, as for example in our implementation of KL, the solutions (partitions) generated differ from one run to another if one uses different starting solutions. If we call $\mathcal{C}$ the cost of the best solution generated in a run, then each algorithm is characterized by a *distribution* $P(\mathcal{C})$ of costs found, specific to the instance and to the algorithm. As an example we show in Figure 1 the distributions for the four algorithms under study generated on our instance of size $N = 1000$. It is not straightforward to find a satisfactory ranking whenever the distributions associated with the different algorithms overlap because the best solution found is not systematically given by the same heuristic. This is indeed what happens in our study: we find that the distributions associated with the four algorithms of our test-bed are strongly overlapping, especially for the $N = 100$ graph. The problem, mathematically, is thus to establish a ranking given arbitrary distributions for the costs generated. There is no *unique* answer to this ill-posed question, but there are two measures of “quality” which are very natural which we now discuss.

Ranking based on the mean cost $\bar{\mathcal{C}}$

Suppose one runs each algorithm just once; it is easy to rank the heuristics according to the cost they generate. However such a ranking is stochastic, *i.e.*, it varies from run to run, so it is not satisfactory.

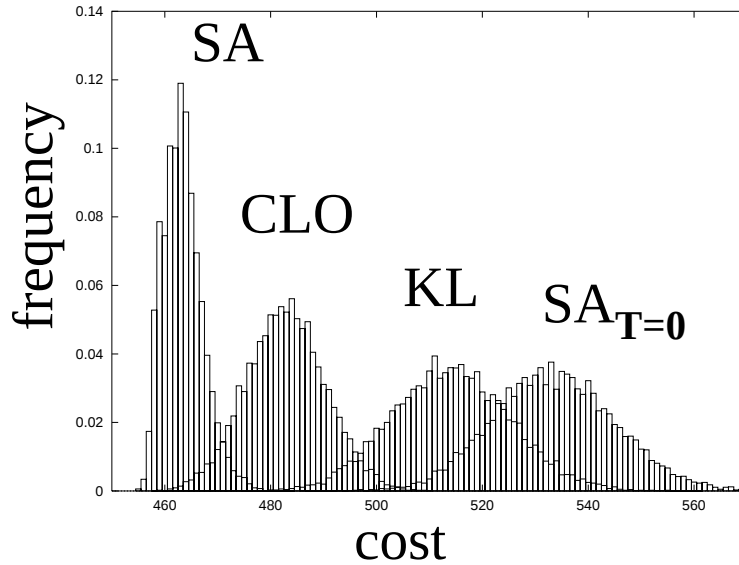


Figure 1: Distribution $P(C)$ for the different algorithms and for the graph of size $N = 1000$.

Consider then *averaging* this ranking over all possible runs. The result is no longer stochastic, but has undesirable features such as sensitivity to near ties. Thus we do not average the ranking over runs, but rank the algorithms on the basis of their mean cost $\bar{C} = \sum_c CP(C)$. This ranking has the nice property that it depends only on the distribution of costs associated with each heuristic, so the relative ranking of two algorithms is not affected by other algorithms included in the tests.

We have computed the mean cost for each of our heuristics on two graphs of size $N = 100$ and 1000 using the distributions obtained numerically with high statistics. These means are given in Table 1, and lead to the same ranking on both of our graphs: SA is first, CLO second, KL third, and $SA_{T=0}$ is fourth.

N	100			1000	
Algorithm	$\bar{C}$	$P(C_0)$	$\min_i \{C_i\}$	$\bar{C}$	$\min_i \{C_i\}$
$SA_{T=0}$	65.33	0.01	57	533.61	493 [*]
KL	60.35	0.15	57	514.06	475
CLO	57.66	0.65	57	482.85	458
SA	57.10	0.94	57	463.39	455

Table 1: Mean costs, values for $P(C_0)$, and best cost found in a run of 10^4 starts for the different algorithms on the two graphs of size $N = 100$ and $N = 1000$ respectively.

Ranking based on the frequency of the optimum C_0

Another ranking possibility is to look at the frequency with which each algorithm finds the optimum C_0 . In general one doesn't know where the optimum is; however, if the same minimum is found many times, there is good reason to believe it is the optimum, and this is the empirical approach we take. Then we rank the algorithms according to their probability of finding the optimum using one run, $P(C_0)$. This ranking could in general differ from the one based on the mean cost, but since the heuristics tend to minimize the costs, it seems *a priori* likely that the ranking will be similar if not identical in the two

cases. This expectation is reinforced by our numerical results. In Table 1 we give the values of $P(C_0)$ for each algorithm on the $N = 100$ graph. $P(C_0)$ is very small for the worst algorithm ($SA_{T=0}$) and quite large for the best (SA). These probabilities were obtained from 10 000 random starts, so the putative optimum was found over 7000 times by SA, justifying our “empirical” approach of labeling the best found as the optimum. However, things are very different for the $N = 1000$ graph. The best solution (with a cost of 456) was found only once among the $5 \times 10\,000$ runs, so there is no evidence that it is the optimum. Thus we cannot give reliable estimates for $P(C_0)$ at $N = 1000$, but can only say that $P(C_0)$ is much smaller than in the $N = 100$ case. This is not surprising, as the larger or more difficult the problem, the less likely a heuristic algorithm is to find the optimum. This will be made more quantitative in Section 6. Since we do nevertheless want to get a ranking, we determine the value of the best cost found by each of the algorithms in their 10 000 trials and use that as the basis of the ranking. Again, we see that the ranking is the same as before, giving further evidence that the ranking methods are robust.

4 Multiple starts

One may consider improving upon an algorithm by running it k times from different random starts and taking the best solution found out of the k costs generated. This is a frequently adopted approach; since it is the basis of our speed-dependent ranking, we now cover in detail the improvement associated with such multiple starts.

First, it is necessary to introduce a bit of notation. For a given algorithm, characterized by $P(C)$, let $Q(C)$ be the associated cumulative distribution, *i.e.*, the probability of finding a cost strictly smaller than C . Taking the best of k independent costs each generated with the distribution $P(C)$ leads to a “best-of- k ” cost, hereafter called C_k . Let the distribution of C_k be given by P_k , and the associated cumulative distribution by Q_k . Then Q_k satisfies $Q_k(C) = 1 - (1 - Q(C))^k$. Since the costs in the present problem are integer valued, we have $P_k(C) = Q_k(C + 1) - Q_k(C)$ so that the distribution of P_k is given by

$$P_k(C) = (1 - Q(C))^k - (1 - Q(C + 1))^k. \quad (1)$$

From this P_k distribution, one can perform a ranking as was done previously from P .

Consider first the ranking based on the probability of finding the optimum cost C_0 . Since $P(C_0) = P_1(C_0)$ is this probability using one random start, then the probability of finding the optimum using k random starts is simply

$$P_k(C_0) = 1 - (1 - P_1(C_0))^k.$$

It is easy to see from this that the ordering of the different $P_k(C_0)$ is k -independent; thus the ranking based on the best-of- k is the same as the ranking based on the probability of finding the optimum, $P_1(C_0)$.

Consider then instead the ranking based on the mean of C_k . This mean is given by:

$$\overline{C}_k = \sum_C C P_k(C). \quad (2)$$

In Figure 2 we show what happens to the cost distribution $P(C)$ of KL when the “best-of- k ” procedure is applied on the $N = 1000$ graph. (Here we have measured the distribution $P(C)$ from 10^6 random starts.) The figure shows the computed distributions $P_k(C)$ for $k = 10$ and $k = 100$, and the measured distribution $P(C)$ corresponding to the case $k = 1$. Qualitatively, taking the best of k costs has the effect of exploring the bottom tail of the distribution of $P(C)$, so that the P_k curve is shifted towards lower values and tends to be more asymmetrical than $P(C)$. It is worth pointing out that our procedure for calculating P_k and its mean $\overline{C}_k$ is quite efficient. A much less efficient method consists of performing runs to generate many C_k values, and then taking the mean of these. The statistical error associated with such a method is far greater than with the method we use.

How does the resulting ranking depend on k ? It is easy to see that when $k \rightarrow \infty$ the ranking based on $\overline{C}_k$ becomes identical to the one based on $P(C_0)$. When $k = 1$ we also saw that the two rankings methods gave identical results (cf. Section 3). This suggests that the ranking based on $\overline{C}_k$ is not sensitive to k and this is indeed what we have found: for our four heuristics, both at $N = 100$ and $N = 1000$, this ranking is in fact independent of k ! So again, the different measures we have introduced to quantify quality lead to the *same* ranking. In this respect, our rankings are very satisfactory. However, they are clearly missing a very relevant criterion for the practitioner: *speed*.

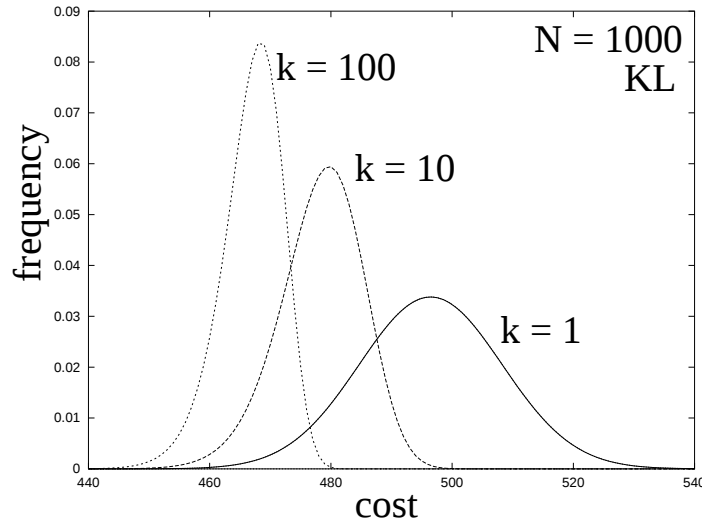


Figure 2: Behavior in k of the probability distribution of $\mathcal{C}_k$ for KL.

5 Speed-dependent ranking

Taking into account the speed of the different algorithms is an important problem in practice, in particular because SA, the winner of the rankings so far, is significantly slower than most other heuristics. The object of this section is thus to introduce and to illustrate a speed-dependent ranking procedure.

We assume the user has a given amount of CPU time, τ , to run a heuristic; hence (s)he may run the algorithm several times from random starts until all the CPU time is used up. Let k_A be the number of times the algorithm A can be rerun in the time τ . Our speed-dependent ranking uses the “best-of- k_A ” costs, but where k_A now depends on the speed of the algorithm. *A priori*, the resulting ranking is a function of τ .

Determination of k_A

The methods developed in Section 4 are directly applicable here. One word of caution is necessary however: in general, the execution time of a heuristic may depend on the initial solution it is applied to. Fortunately, we have found that the execution times of $SA_{T=0}$, SA, and CLO are insensitive to the initial partition. This is not the case for KL however: there, the execution time per KL sweep is essentially constant, but the *number* of KL sweeps used to reach a KL-opt partition does depend on the initial partition. Since KL is fast compared to SA and CLO, whenever these algorithms can be run, KL can be run from many random starts, and so these CPU-time fluctuations will average out. Thus for any algorithm A , we will specify k_A , the number of times A can be run in time τ , in terms of the *mean* execution time T_A of the algorithm, setting k_A to be the integer part of τ/T_A .

We have measured the values of T_A for our four heuristics, for the $N = 100$ and $N = 1000$ graphs. From this, for any choice of τ , we get the list of the k_A , and can compute the probability distribution of the “best-of- k_A ” costs for each algorithm. Then the ranking can be performed as before, either on the basis of the probability of finding the optimum, or on the basis of the mean of “best-of- k_A ”.

Ranking based on the probability that $\mathcal{C}_{k_A} = \mathcal{C}_0$

For a fixed algorithm A , P_{k_A} is the distribution it generates for “best-of- k_A ”. It will generate a $\mathcal{C}_{k_A}$ equal to the optimum cost $\mathcal{C}_0$ with a probability $P_{k_A}(\mathcal{C}_0)$. Just as in Section 3, we can rank the algorithms on the basis of this probability which is given by

$$P_{k_A}(\mathcal{C}_0) = 1 - (1 - P_1(\mathcal{C}_0))^{k_A}. \quad (3)$$

Obviously, when we compare two algorithms A and A', if A is both faster and finds the optimum more frequently (has a larger value of $P_1(C_0)$), then A will be ranked better than A'. The interesting case is when one of the algorithms is faster but has a smaller value for $P_1(C_0)$.

The ranking following from Eq.(3) can be deduced to a large extent by introducing the following approximation. Suppose the integer nature of k_A is neglected, so that k_A is replaced by τ/T_A in Eq. (3). Then the resulting ranking corresponds exactly to ordering the algorithms according to increasing values of $(1 - P_1(C_0))^{1/T_A}$. (This quantity is the probability of *not* finding the optimum in *one* trial, taken to the power $1/T_A$.) With this approximation, the ranking is τ -independent, and shows exactly how quality ($P_1(C_0)$) and speed ($1/T_A$) balance each other in this speed-dependent ranking. It is appropriate to introduce for each algorithm the quantity

$$p_0 = 1 - (1 - P_1(C_0))^{1/T_A} . \quad (4)$$

p_0 can be thought of as the probability per unit CPU time of finding C_0 . The ranking then simply orders the algorithms according to their p_0 .

For the actual ranking, we must take k_k to be the *integer part* of τ/T_A . When τ is large enough for all the k_A to be big, taking or not the integer part leads to negligible differences. Then the analysis just given holds and the ranking will be given by the ordering of the p_0 , and thus will be τ -independent. Only when τ is such that some of the k_A are small can there be a change in the ranking.

This analysis is confirmed on our test-bed for the $N = 100$ graph. For that graph, we can measure $P_1(C_0)$ for each algorithm, and perform the complete ranking as a function of τ . In the large τ limit, the ranking is given by ordering the R_0 values; we find that KL is best, followed closely by CLO, SA is third, and $SA_{T=0}$ last. KL comes out the winner because its high speed (small value of T_A) more than compensates its low value of $P_1(C_0)$. If we take into account the integer nature of k_A , we in fact the same ranking, with the understanding that if an algorithm cannot run to completion it is removed from the ranking.

In Table 2 we illustrate this ranking by taking $\tau = T_{SA}$, and give the corresponding values of the k_A and $P_{k_A}(C_0)$. (No results are given at $N = 1000$ as we are not able to measure the associated $P_1(C_0)$.)

As a side-remark, we can use this framework to answer a question arising in the context of simulated annealing. Let α denote a cooling schedule spanning the time τ . Is better to choose a faster schedule, α' , and to improve the cost found by using multiple starts? The answer is given in terms of $P_1(C_0; \alpha)$ and $P_k(C_0; \alpha')$, where k is the number of times the algorithm with the schedule α' can be rerun in the time one SA with the schedule α is performed. If $P_1(C_0; \alpha) < P_k(C_0; \alpha')$ it is better to run k times the algorithm with the faster schedule α' .

Ranking based on the mean of “best-of- k_A ”

The ranking we now consider is obtained by ordering the algorithms according to their mean for “best-of- k_A ”. This method leads to a different balancing of quality and speed compared to the previous one. Nevertheless, it is easy to see that in the limit of infinite τ , the two rankings are identical; this is because for truly huge values of τ , C_k is almost always equal to C_0 .

The results for this ranking on our test-bed are as follows. For the $N = 100$ graph, the ranking as a function of τ is the same as that found using the probability that $C_{k_A} = C_0$ and in particular, the winner is KL. This should be plausible from the results given in Table 2. When we go to the $N = 1000$ graph, the ranking is changed and SA becomes the winner. Indeed, we find that for all τ , the ranking is from best to worst: SA, CLO, KL, $SA_{T=0}$, with the understanding that when an algorithm cannot run to completion, it is removed from the ranking. The reason for this new ranking is as follows: when going from $N = 100$ to $N = 1000$, KL and CLO have slowed down compared to the two others, and the quality of SA has risen enough compared to that of KL to put it in the winning position.

Going back to the distributions given in Figures 1 and 2, we can justify *a posteriori* the ranking. Indeed, the distributions P_1 do not overlap too much. Going to the distributions P_k , the overlap *decreases*, so that using speed (large values of k_A) to compensate lesser quality becomes impossible. Thus the ranking is determined by the quality much more than by the speed. We did not show the P_1 distributions for $N = 100$ because they are so overlapping, and there indeed KL is able to overcome its typically larger values of C by its speed; this is no longer the case at $N = 1000$. This leads us rather naturally to try to understand the behavior of the distributions as N grows. Our conclusion will be that for large instances the ranking is determined mainly by the mean of P_1 because multiple starts do very little to shift this mean.

Algorithms												
SA _{T=0}				KL			CLO			SA		
N	k	$\mathcal{C}_k$	$P_k(\mathcal{C}_0)$	k	$\mathcal{C}_k$	$P_k(\mathcal{C}_0)$	k	$\mathcal{C}_k$	$P_k(\mathcal{C}_0)$	k	$\mathcal{C}_k$	$P_k(\mathcal{C}_0)$
100	46	57.9	0.35	62	57.0	0.99996	8	57.0	0.9998	1	57.1	0.938
1000	147	515.9	—	126	486.6	—	3	476.6	—	4	465.3	—

Table 2: The number of runs, k_A , the mean of “best-of- k ”, and the probability that $\mathcal{C}_{k_A} = \mathcal{C}_0$ for the different algorithms.

6 Behavior as a function of graph size

How does the distribution of costs change as one goes from small to large graphs? When the instance sizes are small, there are very few (if more than one) local minima, and a heuristic will find the optimum with very high probability; then $P(\mathcal{C}_0) \sim 1$ and the distribution is dominated by the frequency of finding the optimum cost. In this regime, the distribution resembles that of an exact algorithm. But when the instance size becomes large, there are *many* local minima, and the problem becomes difficult: the probability of finding the optimum goes to zero.

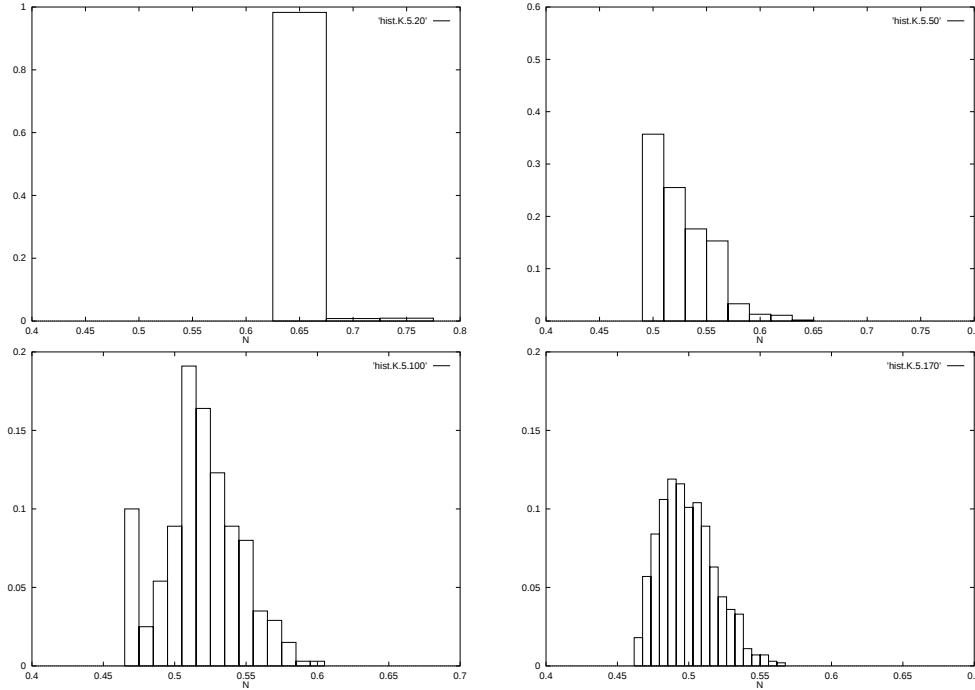


Figure 3: $P(\mathcal{C})$ for the KL-algorithm on four graphs with $N = 20, 50, 100$, and 170 .

We illustrate these trends in Figure 3 where we show the distribution of costs generated by the Kernighan-Lin algorithm on graphs with increasing values of N . In the first histogram, the distribution is completely dominated by the probability of finding the optimum, $P(\mathcal{C}_0) = 0.98$. This problem size is thus extremely easy to “solve”. Increasing the instance size to $N = 50$, we find that the distribution is still decreasing, but much more slowly than before and $P(\mathcal{C}_0)$ is no longer nearly 1: $P(\mathcal{C}_0) = 0.35$. Going on to $N = 100$, the distribution becomes bimodal, with a maximum away from the minimum. Finally, for $N = 170$, the peak at the minimum cost has disappeared and the distribution has become bell shaped. All in all, as N increases, the quality of the algorithm, as measured for instance by $P(\mathcal{C}_0)$, deteriorates monotonically.

We found this same behavior for all the algorithms we have studied; the main difference from one algorithm to the other is simply the value in N where there is a transition from easy or “well-solved” to hard or “poorly-solved” instances. The better the algorithm’s quality, the later in N the transition occurs.

Scaling of the distributions with N

Up to now, for each N , we have used just one graph in the ensemble of sparse random graphs. It is more appropriate to consider the whole ensemble and to extract typical as well as mean properties. We did this in previous work [18], and so simply summarize some of our results here.

Let $\langle \rangle$ denote hereafter averages over the ensemble of sparse random graphs with $\alpha = 5$. Consider first the mean cost $\langle C \rangle$ generated by an algorithm. We found in [18] that as $N \rightarrow \infty$, $\langle \bar{C} \rangle / N$ tends to a constant characteristic of the algorithm. The same behavior was found for the variance of the costs. These results show that $\sigma^2(C) / \langle \bar{C} \rangle^2 \rightarrow 0$, *i.e.*, that the distributions become peaked in the large N limit, and typical costs are very “close” to the mean cost. Further properties we discovered were that the distribution of C within individual graphs becomes Gaussian as $N \rightarrow \infty$, and that graph to graph fluctuations in the width of these Gaussians become negligible. A consequence of this is that in the ensemble of random graphs we consider, the shift from $\bar{C}$ to $\bar{C}_k$ will be the same for all graphs in the limit of large N . This is relevant for the ranking in Section 7.

Scaling of $\langle P(C_0) \rangle$ with N

There are good reasons to believe that just as for the costs generated by heuristics, the minimum cost C_0 has the large N asymptotics $\langle C_0 \rangle / N \rightarrow c^*$, a constant depending only on α . Then each algorithm can be characterized by a fixed percentage excess cost in the solutions it generates as $N \rightarrow \infty$. Since $P(C)$ is peaked, the probability of finding the optimum goes to zero at large N . We have investigated numerically how quickly $P(C_0)$ goes to zero. Motivated by a result for random cuts and by the fact that empirically $P(C)$ is nearly Gaussian [18], we have tested numerically whether $P(C_0)$ decreases exponentially with N . We show our results for KL in Figure 4. For each value of N , we have averaged over 100 to 1000 graphs,

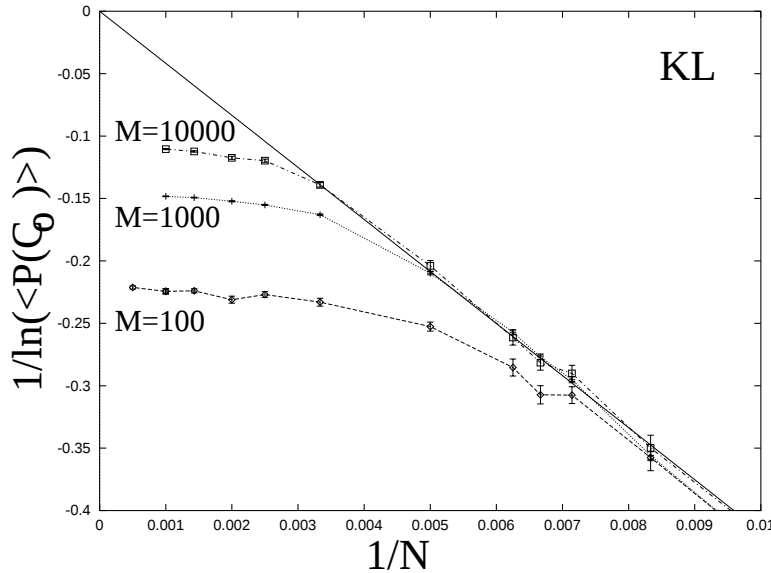


Figure 4: Behavior in N of the probability of finding the optimum with KL.

each graph being sampled M times. For each graph, we have estimated $P(C_0)$ from the frequency of occurrence of the “best-found” among the M random starts. Because M is finite, our estimator for $P(C_0)$

is biased, and can only be reliable when $MP(C_0) \gg 1$. When this condition is not satisfied, the sampling is inadequate, and we will necessarily find a frequency near $1/M$. Figure 4 shows the resulting estimators for three different sampling depths, $M = 100, 1000, 10\,000$. The correct (unbiased) $\langle P(C_0) \rangle(N)$ function is the limit of the frequencies measured as $M \rightarrow \infty$. The curve shows the cross-over to the $\mathcal{O}(1/M)$ behavior, but also shows that there is a large M limit at fixed N . Since we expect $P^{\text{KL}}(C_0) \sim e^{-\gamma N}$, we have plotted $-1/\ln \langle P(C_0) \rangle$ as a function of $1/N$. Note that $-1/\ln[M] = -0.217, -0.145$ and -0.109 for the different sampling depths. The onset of the $\mathcal{O}(1/M)$ behavior indicates that the algorithm with that sampling depth is not able to find the optimal solution, and thus the “best-found” is not the same as C_0 . Although it is clear that for large N a good sampling becomes very difficult to obtain, the extrapolation fits well to our exponential guess, and we find $\gamma \approx 0.03$. Exponential behavior is also found for the other algorithms, but the corresponding data are noisier.

7 Ranking in the ensemble

The rankings presented previously are appropriate for a user needing to solve a given instance. However, from the point of view of a study of (meta-)heuristics, it is arbitrary to rank on a single graph. Instead, it is preferable to generalize the rankings so they can deal with an ensemble of graphs. Following Section 3, we see that it is best to rank on the basis of averages. In the present context, this means that we must obtain for each graph a measure of the algorithm’s “effectiveness” as was done previously, and then we must average this quantity over the ensemble. The measure of the effectiveness can be either speed-independent (such as $\bar{C}$ and $P(C_0)$) or speed-dependent (such as $\bar{C}_{k_A}$ and $P_{k_A}(C_0)$).

Speed-independent ensemble ranking

We have sampled the ensemble of random sparse graphs of mean connectivity $\alpha = 5$, and for each of the 100 graphs generated, we have found the distribution $P(C)$. The resulting averages of $\bar{C}$ and $P(C_0)$ are given in Table 3 for the ensembles at $N = 100$ and $N = 1000$. (As mentioned in the previous section, the cost per vertex has a limiting value at large N , so in fact Table 3 gives the rescaled costs $\langle \bar{C} \rangle/N$.) We see that we recover the ranking that was obtained on the individual graphs used in Section 3. This

N	SA _{T=0}		KL		CLO		SA	
	$\langle \bar{C} \rangle/N$	$\langle P(C_0) \rangle$	$\langle \bar{C} \rangle/N$	$\langle P(C_0) \rangle$	$\langle \bar{C} \rangle/N$	$\langle P(C_0) \rangle$	$\langle \bar{C} \rangle/N$	$\langle P(C_0) \rangle$
100	0.5688	0.01	0.5274	0.10	0.4990	0.47	0.4930	0.97
1000	0.5253	—	0.5044	—	0.4731	—	0.4523	—

Table 3: Average cost per vertex and average probability $\langle P(C_0) \rangle$ in the ensembles with $N = 100$ and $N = 1000$ for the different algorithms.

can be understood in view of the statistical properties given in the previous section. At large N , the distributions are peaked about some (algorithm-dependent) constant, and have relative widths which go to zero as $1/\sqrt{N}$. In this limit, the distributions of the different algorithms no longer overlap, and the ranking on typical graphs is the same as the ranking obtained from the ensemble mean. The ranking is thus very robust at large N , but in fact this robustness extends to smaller values also in that the ranking on a typical graph is nearly always the same as the ranking in the ensemble.

Speed-dependent ensemble ranking

Here the ranking is obtained by taking the ensemble average of either $\bar{C}_{k_A}$ or $P_{k_A}(C_0)$ and ordering the algorithms accordingly. As in the case of the speed-independent ranking, it is not possible in practice to measure $P_{k_A}(C_0)$ for N much beyond 200, so no corresponding results are given. The $\bar{C}_{k_A}$ however can be determined to good precision as long as k_A is not too large, *i.e.* as long as τ is not too big. Fortunately, once τ is such that the slowest algorithm can run a few times, the ranking becomes insensitive to τ . On the contrary, when τ is such that one of the k_A is small and jumps discontinuously, then the ranking may change with τ .

Using the ranking based on the ensemble average of $\bar{C}_{k_A}$, we obtain a “best” heuristic for each value of N and τ . Our results can be summarized by a “ranking diagram” in the (N, τ) plane where each

point is labeled by the best algorithm at those (N, τ) values. (τ is measured in CPU units given by our computer. The reader can identify his CPU units by using the fact that the lower boundary of the SA region corresponds to the time it takes SA to run exactly once at those values of N .) We have represented a smoothed version of this diagram in Figure 5, where the smoothing of the boundaries between the different regions renders the figure more readable. We see that for small graphs, KL is the winner. For intermediate graphs, CLO is the winner as soon as it can run. For large graphs, SA is the winner if it can run, otherwise KL is the winner. (For large graphs, our CLO is slower than our SA.)

These results can be understood qualitatively as follows. At large N , the distributions $P(C)$ are peaked and have an overlap which is negligible. Using the “best-of- k ” procedure does not shift significantly the typical costs generated, so the ranking is not affected. This means that the large N limit of the speed-dependent ranking is the speed-independent ranking; thus quality dominates the ranking at the expense of speed, and SA is the winner. On the contrary, at small N , the problems are “well solved” and it is more effective for any given CPU time to use multiple runs of a fast algorithm like KL. KL is thus the winner for “small” N . At intermediate values of N , the quality-speed balance begins to favor quality, so KL is no longer competitive; CLO is still faster than SA and has almost as good solutions, so it is the winner.

It may be of interest to note that most of the ranking diagram can be understood in the approximation where the individual graph distributions $P(C)$ are replaced by Gaussians of mean and variance given by their ensemble average. The computation of the effectiveness measure can then be done very quickly for the whole diagram, and reproduces the actual ranking for $N > 150$. The reason for this is simply that the distributions are in practice close to Gaussian for these values of N , and graph to graph fluctuations become very small. This explains why the ensemble based ranking is the same as for the particular graphs we considered in Section 5: the ranking on typical graphs is almost always the same, and is thus equal to the ranking in the ensemble.

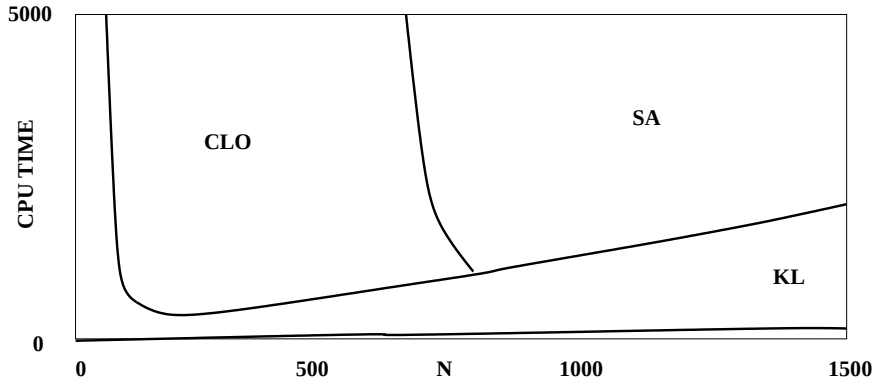


Figure 5: The ensemble ranking diagram

8 Discussion and Conclusion

We have introduced procedures for ranking heuristic algorithms on combinatorial optimization problems. Our methods are based on using the probability distribution of the costs generated by each heuristic on an instance of interest, and allows one to balance speed and quality in quantifying the effectiveness of an algorithm. In its simplest measure, the effectiveness is given by the probability per unit of CPU time of finding the minimum cost solution (see Eq.4). We found that the rankings based on the mean costs were the same as those based on the probability of finding the optimum solution; this indicates that our ranking procedures are robust.

We have also shown how to generalize the rankings to the case of an ensemble of instances. The corresponding rankings reveal in fact the typical behavior; indeed, at large N , the ranking on individual instances is almost always given by the ensemble based ranking.

Our methods are in no way restricted to the GPP nor to the heuristics we use; one can perform such

rankings on many algorithms for any combinatorial optimization problem. Most likely, the properties we have found, and in particular the sharpness of the distributions as $N \rightarrow \infty$, are generic to local algorithms. We expect to always find a transition from easy (small N) problems to difficult (large N) problems. At small N , speed may overcome lesser quality, but at large N , the ranking will be dominated by the average cost generated by the algorithms. (We have checked this claim of genericity on the GPP by using a hierarchical variant [5] of KL and the different versions of simulated annealing described in the appendix.)

9 Acknowledgements

We are indebted to S.Otto and V. Zissimopoulos for constructive criticisms. We thank B. Hendrickson and R. Leland for providing us with their software package CHACO 2.0. G.R.S. acknowledges support from a Individual EC research grant under contract number ERBCHBICT941665, and O.C.M. acknowledges support from the Institut Universitaire de France.

A Algorithms

Many heuristics have been proposed for solving the graph partitioning problem. Since our goal was to introduce and study a ranking procedure rather than to benchmark all GPP heuristics, a selection had to be made. Guided by the notion of “locality”, we have chosen several types of local search heuristics and four variations of simulated annealing. In this appendix we sketch the workings of the heuristics used in the present work. We begin by presenting a variable depth search (KL). Then we present the versions of simulated annealing (SA) studied, and we conclude with a hybrid algorithm combining local search ideas and simulated annealing (CLO).

A.1 Kernighan-Lin (KL)

The simplest use of local search, sometimes called λ -opting [13], consists of performing elementary transformations to feasible solutions of the combinatorial optimization problem as long as they decrease the cost. To improve upon λ -opting, Kernighan and Lin [10] proposed a “variable depth” search: a sequence of p elementary transformations is generated, where the depth p depends on the sequence of costs found. The elementary transformations are not imposed to decrease the cost, but the sequence of length p must do so if the transformation sequence is to be applied to the current solution. Such a procedure was first proposed by Kernighan and Lin [10] in the framework of the GPP, and later extended to the traveling salesman problem [14]; it is a very powerful meta-heuristic which can also be fine-tuned to the application. We refer to Kernighan and Lin’s GPP algorithm as “KL”. Pair exchanges constitute the elementary transformations; each putative exchange sequence is built up in a greedy fashion: one adds to the exchange sequence the best (largest cost gain) pair of vertices among those vertices which have not yet been moved (this is a tabu condition). When the sequence has been generated up to some maximum depth, (this is called a sweep), the position p along that sequence which minimizes the cost is determined. If this minimum leads to an improvement, the transformation of p exchanges is applied, the tabu list is emptied, and a new KL sweep is initiated. Otherwise the search is stopped and the solution is said to be “KL-opt”, *i.e.*, it is a local minimum under the KL algorithm.

We estimate the computational complexity of the KL algorithm in terms of the time it takes to perform one sweep. For sparse graphs, each full depth sweep requires $\mathcal{O}(N \ln N)$ operations. In our practice, KL requires a handful sweeps before stopping. The number of sweeps does not seem to grow significantly with the problem size. Thus we obtain a complexity of $\mathcal{O}(N \ln N)$. A faster implementation of the algorithm has been given by Fiduccia and Mattheyses [3]. They use radix sort to find the best pair to exchange at each step and obtain an $\mathcal{O}(N)$ time for each sweep. In our implementation of KL we use heaps because of their simplicity and because the radix sort is not applicable to general weighted graphs. Even though it is possible to introduce stochasticity to break degeneracies in selecting the best pair to exchange, our version of the KL algorithm is deterministic [15].

Kernighan and Lin proposed their method over 25 years ago and it remains relatively unchallenged, at least as a general purpose method applicable to any kind of graph, regardless of its structure.

A.2 A multilevel KL-algorithm: CHACO

It is possible to use coarse-grained strategies for local search just as is done for solving PDEs. We used in our work a software package [5] made available to us by Bruce Hendrickson and Robert Leland. This algorithm is based on using iterative improvements on multiple levels of coarse-graining of the graph considered. At each level, vertices are paired using a matching algorithm, and paired vertices are then considered as the vertices of the next higher level of coarsening. Because of this process, it is necessary to have weighted edges; the weights are also propagated to the higher level. The coarsening is repeated until a sufficiently small graph is obtained to which spectral bisection is applied to get a first partition. Then this partition is used as the starting partition in KL for the graph at the level below it. This process is recursive, until one obtains a KL-opt partition of the original graph. (Note that this construction is deterministic, and does not require an initial “random” partition.) Such a multilevel strategy has been very successful for unstructured 2 and 3 dimensional meshes [6, 9], both in terms of solution quality (much better than for KL alone), and in terms of speed (much faster than KL because of the hierarchical nature). However, the usefulness of CHACO on random graphs is not *a priori* obvious. In numerical experiments on our ensemble of random graphs, we have found that CHACO is better than KL both in terms of quality and speed when N is large enough.

A.3 Simulated Annealing algorithms

Simulated annealing (SA) performs elementary moves, but moves which increase the cost are now accepted with a temperature dependent probability [1]. For simulated annealing, many enhancements have been proposed. We have restricted ourselves to: (i) the SA as first introduced by Kirkpatrick *et al.* [11], referred to as FSA, where the initial and final temperatures are fixed ahead of time and where at each temperature a predetermined number of trial moves are attempted; (ii) Kirkpatrick *et al.* also proposed to set the initial and final temperatures self-consistently. The highest temperature is set so that 80% of trial moves are then accepted; the lowest temperature is reached when the best energy found is the same over the previous 5 temperatures. We will refer to this method as KSA. (iii) Johnson *et al.* [8] improved the speed of this algorithm by allowing an early exit to the next temperature of the schedule when a minimum number of moves has been accepted at that temperature. They also modified the halting criterion to having an acceptance rate less than a threshold value. We will refer to this version as JSA. All these SA methods use an exponential cooling schedule with a cooling factor of ≈ 0.95 . (iv) The last SA variation, referred to as ASA, consists in using an *adaptive schedule*: the next temperature value is determined on the fly according to energy fluctuations at the current temperature. Our implementation follows van Laarhoven and Aarts [19, 20]. We have chosen to use a schedule so that the computation times for the different SA algorithms are similar.

In SA the same elementary moves as in local search may be used, *i.e.*, for the GPP, pair exchanges. Finding a good *pair* is best done by finding the first vertex to transfer and then the second, *i.e.*, by a *sequential* process. This suggests relaxing the constraint of having balanced partitions, and replacing it by a penalty term. We have followed a slightly different approach where each move destroying the balance must be followed by a move restoring the balance. The algorithm explores the partitions which are balanced and those with “off-balance” of ± 1 . The global probability distribution remains Boltzmannian in this enlarged space, so that we guarantee the same convergence properties as in the standard case.

The computational complexity is given by the following reasoning. At each temperature, a certain number of “sweeps” will be performed. In each sweep, every vertex is taken sequentially from a random *permutation* and considered as a candidate for changing sides of the partition. A sweep thus requires $O(N)$ operations. The maximum number of sweeps at any temperature is set to $\alpha\lambda$, with $\lambda = 10$ for all implementations and with $\alpha = 5$ for all graphs. For FSA and KSA, this is in fact the number of sweeps, so that their computational complexity is $O(\alpha\lambda N)$ times the number of temperature steps used. In practice we find that JSA is faster than KSA, but not by more than a constant factor. ASA on the other hand spends quite a lot of time at intermediate temperatures, all the more so that N increases; empirically, we have found an $O(N^{3/2})$ complexity.

For the sparse random graphs under consideration, we have found that the different variants of simulated annealing are nearly indistinguishable in terms of quality of solutions. Thus for the main text of this paper, whenever we give “SA” results, the data come from FSA runs; the results for the other versions of SA are nearly identical except for speed issues, but there again the other algorithms are not much faster.

A.4 Chained-Local-Optimization (CLO)

The chained-local-optimization (CLO) strategy is a synthesis of local search and of simulated annealing [16]. The essential idea is to have simulated annealing sample not all solutions, but only locally optimal solutions. In the present work, the mentioned locally optimal solutions are KL-opt. This strategy is guaranteed to be at least as good as local search.

The simplest implementation of CLO proceeds as follows. Any balanced KL-opt partition P_i serves as the initial partition. (i) Apply a perturbation or “kick” to modify significantly the partition. In practice this means exchanging *clusters* of vertices. But as was discussed in the context of simulated annealing, simultaneous exchange of vertices or clusters is inefficient because there are $\sim N^2$ configurations to explore. Therefore it is better to create the perturbation sequentially with only $\sim N$ configurations to visit. Hence choose a connected cluster of p vertices in V_1 (or V_2), and move them into V_2 (respectively V_1). KL-optimize this partition to generate an intermediate (off-balanced) partition. Now restore the balance by choosing a cluster of p Vertices in V_2 (V_1) and move them into V_1 (V_2). (ii) Run KL on the modified partition so as to reach a new KL-opt partition P_f , the final and *balanced* partition. This whole procedure is our “large” move. (iii) Apply the accept/reject procedure for going from the initial partition P_i to the final one P_f . (iv) Iterate.

These steps define the analogue of one move of a simulated annealing algorithm, except that many modifications to the partition have occurred. The temperature may be modified according to a schedule if desired, but for simplicity, we have set the temperature to zero in all of our runs. We have used rather “small” kicks, creating each time clusters of sizes varying randomly between 3 and 13. Consider now the limit of large N . Using the analogy with simulated annealing, if a fixed, N -independent number of small kicks are used, it can be expected that CLO will perform no better than KL itself. We have thus chosen to use a number of kicks which scales linearly in N , namely λN with $\lambda = 0.1$. This choice of course influences the quality of the solutions generated, a larger value of λ giving *a priori* better results. To investigate the complexity of the algorithm we use the already determined complexity of KL and the above discussed scaling in N to obtain a computational complexity of order $N^2 \log(N)$.

References

- [1] K. Binder. Introduction: Theory and “technical” aspects of Monte Carlo simulations. In K. Binder, editor, *Monte Carlo Method in Statistical Physics*, volume 7 of *Topics in Current Physics*. Springer-Verlag, Berlin, New York, 2nd edition, 1986.
- [2] A.E. Dunlop and B.W. Kernighan. A placement procedure for polycell VLSI circuits. In *IEEE Proceedings CAD, Santa Clara*, page 51, 1984.
- [3] C.M. Fiduccia and R.M. Mattheyses. A linear-time heuristic for improving network partitions. In *Proceedings of the 19th Design Automation Workshop*, page 175, 1982.
- [4] M. R. Garey and D. S. Johnson. *Computers and Intractability: A Guide to the Theory of NP-Completeness*. Freeman, New York, 1979.
- [5] B. Hendrickson and R. Leland. The Chaco user’s guide: Version 2.0. Technical Report SAND94-2692, Sandia National Labs, Albuquerque, NM, June 1995.
- [6] B. Hendrickson and R. Leland. A multilevel algorithm for partitioning graphs. In *Proc. Supercomputing ’95*. ACM, November 1995.
- [7] F.M. Johannes. Partitioning of VLSI circuits and systems. In *Proceedings of the 33rd Design Automation Conference*. Las Vegas, June 1996.
- [8] D.S. Johnson, C.R. Aragon, L.A. McGeoch, and C. Schevon. Optimization by simulated annealing: An experimental evaluation, part I (graph partitioning). *Operations Research*, 37:865–892, 1989.
- [9] G. Karypis and V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 1997. to appear.
- [10] B. Kernighan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *Bell System Technical Journal*, 49:291 – 307, 1970.
- [11] S. Kirkpatrick, C. Gelatt, and M. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220:671–680, 1983.
- [12] T. Lengauer. Combinatorial algorithms for integrated circuit layout. *Wiley-Teubner Series in Computer Science*, 1990.
- [13] S. Lin. Computer solutions of the traveling salesman problem. *Bell System Technical Journal*, 44:2245–2269, 1965.
- [14] S. Lin and B. Kernighan. An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem. *Operations Research*, 21:498–516, 1973.
- [15] O. C. Martin and S. W. Otto. Partitioning of unstructured meshes for load balancing. *Concurrency: Practice and Experience*, 7(4):303–314, 1995.
- [16] O. C. Martin and S. W. Otto. Combining simulated annealing with local search heuristics. *Ann. Operations Res.*, 63:57–75, 1996.
- [17] C. H. Papadimitriou and K. Steiglitz. *Combinatorial Optimization: Algorithms and Complexity*. Prentice Hall, INC., Englewood Cliffs, New Jersey, 1982.
- [18] G. R. Schreiber and O. C. Martin. Cut size statistics of Graph Bisection Heuristics. *preprint*, 1997. submitted to *SIAM Journal on Optimization*.
- [19] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. Statistical cooling: A general approach to combinatorial optimization problems. *Philips J. Res.*, 40(4):193 – 226, 1985.
- [20] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. *Simulated Annealing: Theory and Applications*, chapter 4 – 6, pages 39 – 98. Mathematics and Its Applications. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1987.

– Annexe A –
Le recuit simulé

Nous allons ici présenter une esquisse du recuit simulé. À la racine du recuit simulé se trouve l'algorithme de Metropolis [MRR⁺53] que je vais expliquer dans le paragraphe qui suit.

Algorithme de Metropolis L'algorithme de Metropolis a donné naissance à une vaste industrie de simulations du type *Monte Carlo*. Nous discutons l'algorithme de

Metropolis à l'aide de la figure III-13. Supposons qu'une configuration de N spins $\mathcal{S} = \{s_1, \dots, s_N\}$ soit donné. Le pas élémentaire d'algorithme de Metropolis consiste, dans un cas très simple, sans contraintes, à retourner un spin, choisi au hasard ou une méthode approprié (permutation aléatoire [JAMS89]), et à calculer l'énergie associé E' . Désignons le nouvel état par $\mathcal{S}'$. Un tel cas peut être par exemple un verre de spin. Pour la bipartition de graphe il y a une contrainte et il faut en tenir compte, soit en retournant des paires de spins ou en ajoutant un terme de pénalisation [JAMS89]. Selon que la différence $\Delta = E' - E$ des énergies entre l'ancienne configuration $\mathcal{S}$ avec l'énergie E et la nouvelle configuration $\mathcal{S}'$ avec l'énergie E' , soit positive ou négative, la nouvelle configuration $\mathcal{S}'$ sera acceptée ou rejetée. Si la différence Δ est négative la configuration sera acceptée. Par contre si la différence Δ est négative on calcule $p = e^{-\beta\Delta}$ et tire un nombre aléatoire $x \in [0, 1]$. La nouvelle configuration sera accepté si $p \geq x$, sinon elle sera rejeté.

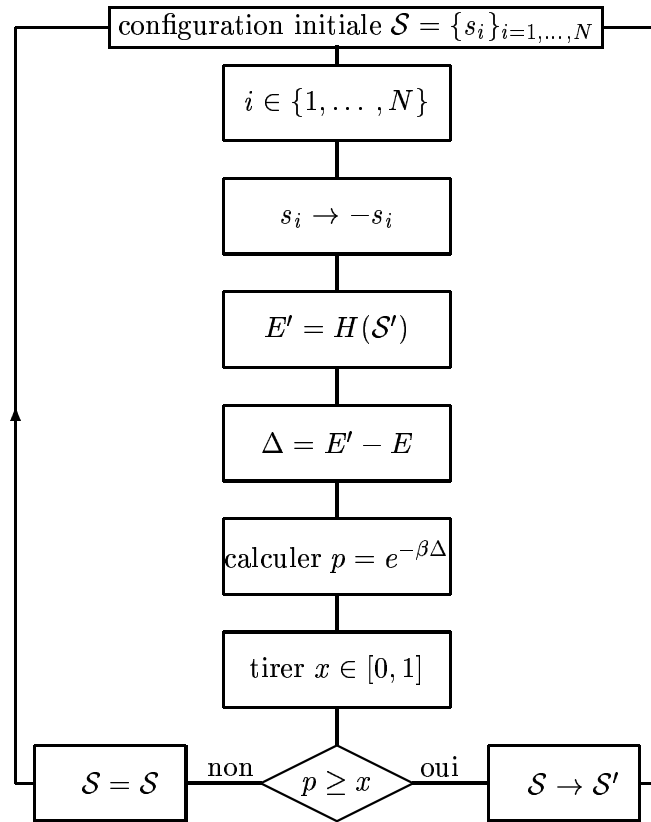


FIG 13 : Le schéma de fonction de l'algorithme de Metropolis.

Dans cette schéma la température inverse $\beta = 1/T$ est le seul paramètre. Ce pas basique est à la base de beaucoup de simulations, par exemple des modèles qui simulent le mouvement dynamique des molécules dans un récipient. Il existe d'autres dynamiques comme par exemple celle de *Glauber* [Gla63] ou celle de *Langevin*. Pour ça, il faut introduire de *soft*-spins et modifier l'Hamiltonien. Le modèle est formulé avec des variables continues qui dépend explicitement du temps et obéissent à l'équation de *Langevin*. Pour le reste du paragraphe je me contente de présenter l'algorithme de Metropolis car il est très simple et facile à programmer. En plus, les configurations seront visitées selon leur poids

de *Boltzmann*, assurant que la balance détaillée est satisfaite. Ceci permet plus facilement de décrire mathématiquement ces états.

Algorithme du recuit simulé Une partie fondamentale du recuit simulé consiste en l'algorithme de Metropolis discuté ci-dessus. Comme une conséquence de l'utilisation de cet algorithme, les configurations $\mathcal{S}$ sont dans l'équilibre thermique données par leurs poids de *Gibbs*.

$$p(\mathcal{S}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta H[\mathcal{S}]}, \quad (\text{III.A-1})$$

où $\mathcal{Z}$ est une normalisation $\mathcal{Z} = \sum_{\mathcal{S}} e^{-\beta H[\mathcal{S}]}$. À une température donnée il suffit d'utiliser l'algorithme de Metropolis afin d'échantillonner les configurations selon leurs poids de Gibbs. La solution d'un problème de physique statistique ou de l'optimisation combinatoire est très souvent le minimum d'une fonction de coût ou d'énergie. En regardant le poids de Gibbs, on s'aperçoit que la limite intéressante pour la minimisation est celle de la basse température. À basse température les contributions dominantes viennent des états de faible énergie et dans la limite $T \rightarrow 0$ il ne reste que des états fondamentaux qui ont une probabilité non-négligeable. De ce fait l'algorithme va s'approcher des états fondamentaux en baissant la température. Dans ce qui suit je vais exposer le fonctionnement du

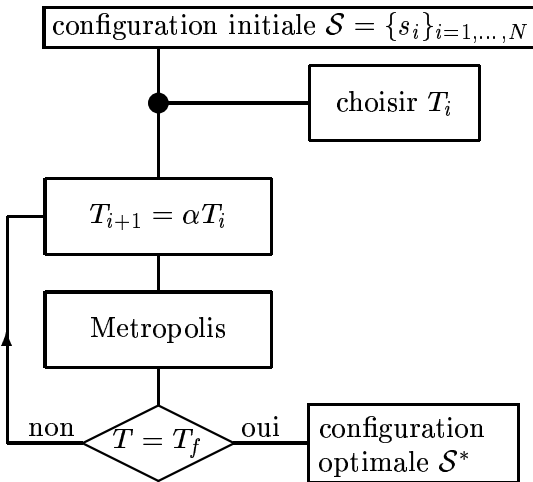


FIG 14 : Le schéma de fonction du recuit simulé.

recuit simulé. Une représentation graphique ci-contre (figure III-14) reproduit le schéma décrivant le recuit simulé. Selon le schéma de refroidissement une température initiale T_i et finale T_f et en plus un facteur de refroidissement α doivent être choisis. À la température initiale qui est assez élevée afin que tous les états puisse être visités avec une probabilité non-négligeable, la configuration actuelle est modifié et l'algorithme de Metropolis est appliqué afin de décider si la nouvelle configuration $\mathcal{S}'$ est acceptée ou rejetée. L'algorithme de Metropolis est appliqué jusqu'à ce que le système soit thermalisé, c'est-à-dire en équilibre. Si on est intéressé aux quantités physiques à température non nulle, il est possible de les mesurer maintenant. Ceci représente la partie Monte Carlo du recuit simulé. Après avoir atteint l'équilibre la température va être baissée et de nouveaux on attend jusqu'à ce que l'équilibre soit atteinte. Ceci est répété jusqu'à ce que la température a atteint la température finale. La dernière solution est supposée être la solution optimale.

Le schéma ci-dessus est un schéma générique et est valable pour n'importe quel problème d'optimisation. C'est un des avantages importants du recuit simulé. Si on change le problème, des modifications minuscules vont faire fonctionner le recuit simulé aussi pour ce problème. En fait il ne faut changer que la fonction coût, définir un nouveau voisinage et changer les transformations élémentaires pour explorer le voisinage.

Selon le choix du schéma de refroidissement, les paramètres sont nombreux et il faut les ajuster pour obtenir des meilleurs résultats.

- (i). température initiale T_i

- (ii). température finale T_f
- (iii). facteur de pénalisation γ
- (iv). schéma de refroidissement/facteur de refroidissement α

Astuces pour éviter le piégeage Dans cette annexe je ne vais pas discuter les différents astuces pour éviter, que dans la phase de basse température, l'algorithme du recuit simulé soit piégé dans un état métastable de faible énergie. Il y a notamment la version *recuit simulé sans rejet* où une distribution modifiée est calculée et selon cette distribution le système va être échantillonné. La distribution tient compte du nombre important des rejets à basse température et évite ainsi de perdre un temps de calcul important en calculant des configurations qui seront rejetées [Kra89, Kra94, GS86]. Une autre méthode très puissante est celle du *Multiple Markov Chain*[MP92, Orl97]. Comme annoncé au début de cette annexe, cette méthode suit encore mieux l'analogie de figer et fondre. On introduit un chemin entre différentes températures : Un refroidissement ou un réchauffement du système est permis si la transition est acceptée selon le critère de Metropolis. L'avantage ne consiste pas en accélérant l'algorithme principale mais en assurant qu'un système échantillonne une large partie de l'espace de phase. Cet algorithme ne va pas être piégé dans un bassin d'attraction d'un minimum local, car le système, étant dans un minimum local, peut être chauffé et peut ainsi sortir du bassin d'attraction du minimum dernier.

Chapitre IV

Verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires

Plan du chapitre

IV.1 Introduction	162
IV.2 Application de l'optimisation combinatoire à l'étude des verres de spins	165
IV.3 Nouvel algorithme pour trouver les états fondamentaux	168
IV.4 L'énergie du fondamental	170
IV.5 Propriétés des états fondamentaux	174
IV.6 Preprint	181
Annexe A	187
Annexe B	189

Comme exposé dans les chapitres précédants, la recherche des états fondamentaux des verres de spins appartient à la classe des problèmes $\mathcal{NP}$ -difficiles. L'étude des problèmes d'optimisation combinatoire permet de mieux comprendre les verres de spins d'un point de vue algorithmique et numérique et inversement, l'étude des verres de spins par la physique statistique peut apporter à l'optimisation combinatoire de nouvelles connaissances (voir à ce sujet le chapitre III). Dans ce chapitre nous allons utiliser cette correspondance pour concevoir un nouvel algorithme qui permet de trouver les états de plus basse énergie des verres de spins. Nous considérons ici les verres des spins sur des graphes aléatoires lacunaires possédant une connectivité finie. Ce type de modèle peut être considéré comme une approximation moins grossière aux verres de spins réels que le modèle de Sherrington et Kirkpatrick, ce modèle-là ayant une coordination infinie. Dans nos simulations nous étudions des graphes à coordination fixée. Ce choix a été motivé par des résultats analytiques et une conjecture due à Banavar, Sherrington et Surlas. Cette conjecture donne l'énergie du fondamental en fonction de la coordination. Nous avons testé cette conjecture avec une bonne précision numérique. Enfin, nous étudions les propriétés des états fondamentaux. Nous montrons que la distribution du paramètre d'ordre reste non-triviale et qu'une forme d'ultramétrie est satisfaite pour toutes valeurs de la coordination.

– IV.1 – Introduction

Présentation des différents modèles Les verres de spins peuvent être modélisés par de nombreuses approches. Un premier modèle conçu pour décrire des verres de spins a introduit l'interaction RKKY [RK67, Kas56, Yos57]. Edwards et Anderson ont ensuite proposé de remplacer cette interaction par des interactions aléatoires entre plus proches voisins [MPV87, FH91]. Puis Sherrington et Kirkpatrick ont présenté une solution du modèle EA dans l'approximation de champ moyen. Dans ce sens le modèle SK est le plus simple des modèles verres de spins. Le Hamiltonien de ce modèle est le suivant

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j - h \sum_i s_i. \quad (\text{IV.1-1})$$

Ce modèle a été résolu par Parisi [Par80b]. Sa solution donne une transition d'une phase paramagnétique vers une phase de verre de spins. Le modèle SK est un modèle champ moyen : il permet l'interaction entre n'importe quels spins et la coordination est *extensive*. Pour obtenir un modèle plus réaliste on pourrait revenir au modèle EA (en exigeant que l'interaction ne soit qu'entre plus proches voisins). La coordination serait alors finie, c'est-à-dire *intensive*. Pour ce modèle sur réseau, des nombreuses simulations ont été effectuées [Rie95, BY86b]. L'existence d'une transition de phase à une température finie a été confirmée pour le modèle SK analytiquement [Par80b] et par des simulations [BY86b]. Pour des dimensions finies les simulations essaient de répondre à plusieurs questions. Y-a-t-il une température de transition finie ? Est-ce que la phase de verre de spins persiste en présence d'un champ magnétique ? Est-ce que l'espace des paramètres d'ordre est organisé suivant une structure ultramétrique ? Est-ce que la solution de Parisi fournit une approximation adéquate pour un verre de spins en dimension finie, ou est-ce que le modèle des gouttelettes [FH88] donne-t-il une description plus satisfaisante ? Les simulations ont pu donner des réponses partielles à ces questions. Le modèle EA en différentes dimensions a été étudié par Binder, Morgenstern, Young, Rieger et d'autres [BY86b, Rie95]. Ces auteurs confirment l'existence d'une phase de verre de spins. Marinari *et al.* [MPRLR96, CMP96] trouvent à l'aide de simulations Monte Carlo qu'en dimension $d \geq 3$ la solution de Parisi donne une bonne description qualitative de la phase de verre de spins. Des études citées ci-dessus sont en grande partie des simulations Monte Carlo et donc ont été effectuées à température finie. Les simulations de ce type ont des problèmes à basse température dont nous parlerons dans la section suivante où nous exposons aussi quelques aspects algorithmiques. Les études mentionnées ci-dessus se sont concentrées sur deux cas extrêmes : le cas de la dimension infinie qui a pu être traitée analytiquement et les modèles sur réseaux en dimension finie avec des interactions entre proches voisins qui ont été abordés numériquement. Mais le cas de graphes aléatoires à coordination intensive n'a guère été étudié. Nous proposons ici une étude numérique de ces modèles.

Les modèles EA et SK peuvent être formulés avec différentes distributions pour des couplages. Le modèle SK original a été formulé avec une distribution gaussienne. À cause de la continuité de cette distribution l'état fondamental est unique avec probabilité 1. Mais on peut démontrer qu'il y a un grand nombre d'états avec énergie E pour lesquels la différence d'énergie $E - E_0$ est d'ordre $\mathcal{O}(1)$, où E_0 est l'énergie du fondamental. Dans la limite thermodynamique il y a un grand nombre d'états ayant un écart constant d'énergie par rapport à l'état fondamental [PP95] [TF80] [MPV87] [BM80]. Dans le cas de couplages n'ayant que deux valeurs ($P(J_{ij}) = \frac{1}{2}\delta(1 - J_{ij}) + \frac{1}{2}\delta(1 + J_{ij})$) il existe un grand nombre d'états fondamentaux dégénérés. Cette dégénérescence est due à la possibilité d'avoir une énergie d'excitation nulle pour un spin ou un amas de spins. L'existence de cette dégénérescence nous permet de trouver un grand nombre d'états fondamentaux pour des systèmes de taille modeste.

IV.1 Introduction

Nous sommes alors en mesure d'étudier les propriétés des états fondamentaux, comme le degré de dégénérescence, la distribution des recouvrements $P(q_{\alpha\beta})$, et l'ultramétrie de l'espace des états fondamentaux, et de vérifier si les résultats du modèle SK persistent pour les verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires. Notre étude nous permet donc de décider si les particularités de la solution de Parisi sont un artefact du modèle à coordination infinie ou si elles sont présentes aussi pour une approximation plus réaliste.

Graphes aléatoires Un graphe G est donné par N sommets et des arêtes E_{ij} entre des sommets. Un graphe aléatoire est engendré en mettant une arête avec une certaine probabilité p entre deux sommets choisis au hasard. Nous désignons l'ensemble de ces graphes par $G(N; p)$. L'arête E_{ij} est en général pondérée ; nous avons choisi pour notre étude un poids $+1$ et -1 avec probabilité $1/2$. Suivant la probabilité p choisie pour la présence des arêtes on obtient un graphe aléatoire dense ou lacunaire. Une probabilité p indépendante de la taille engendre des graphes aléatoires denses qui correspondent au modèle SK. Une probabilité p inversement proportionnel à la taille engendre des graphes aléatoires lacunaires. Ces graphes ont une coordination α finie et sont ainsi une approximation plus réaliste que le modèle SK.

Cas des graphes aléatoires lacunaires Nous nous intéressons à des verres de spins à coordination finie. On peut introduire une coordination finie en plaçant le modèle sur un réseau, mais dans ce cas la portée des interactions est elle aussi finie. Afin de disposer d'un modèle intermédiaire nous allons utiliser des graphes aléatoires lacunaires. Ces graphes n'ont pas de corrélation spatiale et la coordination est restreinte à des valeurs finies. Il en existent deux versions : une version possède une coordination fixée et identique à chaque sommet du graphe ; l'autre a une coordination fixée en moyenne, c'est-à-dire que le nombre de voisins d'un site peut fluctuer. De tels graphes sont lacunaires. Nous nous limiterons ici à considérer des graphes aléatoires lacunaires avec une coordination fixée. Comme la probabilité pour que deux spins soient liés est d'ordre $\frac{1}{N}$, il y a un nombre fini de liens par spin. Ces graphes constituent le cadre approprié pour notre étude. Ils ne se prêtent pas à une représentation visuelle car une notion de distance entre les sommets du graphe fait défaut. Les verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires et le modèle SK sont différents au niveau de la réalisation du désordre. Pour le modèle SK il faut tirer des couplages J_{ij} pour chaque paire de spins (i, j) . Dans le cas des graphes aléatoires lacunaires il faut préciser quel spin interagit avec quel autre spin. Un verre de spins sur un tel graphe est alors engendré en tirant au hasard un graphe lacunaire. Puis on tire au hasard pour chaque arête e_{ij} du graphe une valeur du couplage $J_{ij} = \pm 1$ correspondant.

Dans le cas de $G(N; p)$ avec $p = \alpha/(N - 1)$ on obtient le modèle de Viana et Bray[VB85] (cf. [KS87]). Ce modèle a été traité analytiquement par l'approximation d'une solution symétrique dans les répliques. Le Hamiltonien s'écrit

$$H = - \sum_{i < j} J_{ij} s_i s_j, \quad (\text{IV.1-2})$$

avec $s_i = \pm 1$ et aucune restriction sur la somme. Le modèle de Viana et Bray se distingue du modèle SK, par la distribution des couplages J_{ij} . Cette distribution est supposée être de la forme

$$P(J_{ij}) = \frac{\alpha}{N} P_\alpha(J_{ij}) + (1 - \frac{\alpha}{N}) \delta(J_{ij}), \quad (\text{IV.1-3})$$

où $P_\alpha(J_{ij})$ est une distribution quelconque. Afin d'obtenir une limite thermodynamique dans laquelle l'énergie libre est extensive, $F = Nf$, Sherrington et Kirkpatrick changent l'échelle de la distribution

gaussienne $J_0 = \frac{\tilde{J}_0}{N}$ et $J = \frac{\tilde{J}}{\sqrt{N}}$. Ceci revient à dire que les couplages sont faibles d'ordre $N^{-1/2}$. Dans le cas présent Viana et Bray traitent les couplages comme forts, d'ordre 1, mais ils sont dilués parce que seule une fraction α/N est présente. La coordination moyenne est donné par α et la limite $\alpha \rightarrow \infty$ permet de retrouver le cas du modèle SK. Ce modèle à α fini est une approximation moins grossière que le modèle SK et les auteurs le comparent avec de vrais systèmes physiques qui montrent un comportement verre de spins : $\text{Eu}_x\text{Sr}_{1-x}\text{S}$. Cette substance est bien décrite par un modèle avec des interactions à courte portée. Des tels modèles sont actuellement inaccessibles à des solutions exactes, mais l'approche de Viana et Bray représente une bonne approximation. En fait leur modèle nécessite, comme le modèle de de Dominicis et Goldschmidt [DG89, GdD89], l'introduction d'une infinité de paramètres d'ordre [MP87] $q_{\alpha\beta}, q_{\alpha\beta\gamma}, \dots$ pour lesquels il n'existe pas actuellement de théorie comme celle de Parisi avec un schéma de brisure de la symétrie des répliques. Viana et Bray déduisent le diagramme de phase (*cf.* la figure I-5) dans l'approximation de la symétrie des répliques. Ils trouvent qu'il y a une phase de verre de spins comme pour le modèle SK [SK75].

Dans le cas d'une coordination α fixée en chaque sommet, des calculs analytiques ont été effectués dans le cadre des répliques avec l'Ansatz de Parisi et brisure de la symétrie des répliques [DG89] Les résultats ont été obtenus sous la forme d'un développement de l'énergie en puissances inverses de la coordination. Ces calculs prédisent qu'à des températures plus basses que la température de transition mais voisines de celle-ci, l'énergie possède un développement en puissances de $1/\alpha$. À des températures plus basses le développement est en puissances de $1/\sqrt{\alpha}$. Ces auteurs suggèrent que cette particularité pourrait venir du fait que leur calcul utilise un schéma de brisure de la symétrie des répliques à un pas. Cette suggestion est motivée par l'observation que le coefficient du terme $1/\sqrt{\alpha}$ diminue quand on passe de la solution symétrique à la solution avec brisure de symétrie des répliques à un pas. Dans ce modèle il est évident que l'approximation de brisure à un pas n'est pas suffisante. Ainsi les résultats n'ont pas permis de déduire les propriétés des états fondamentaux, et il n'existe pas, à notre connaissance, de solution analytique plus complète de ce problème.

Les calculs cités ci-dessus ne permettent pas de conclure, mais ils suggèrent qu'une phase de verre de spins existe également à coordination finie. Ceci est en accord avec une interpolation entre les résultats de la solution SK et les simulations sur réseau. Pour ces derniers modèles il est aujourd'hui établi qu'en basse dimension il y a une phase de verre de spins et que la température de transition est finie [BY86b, Rie95]. Malgré ce consensus des questions importantes restent ouvertes pour les modèles à coordination finie.

- (i). Une ligne AT existe-t-elle ?
- (ii). La distribution du paramètre d'ordre reste-elle non triviale ?
- (iii). Est-ce qu'il y a une ultramétrie ?

Ces questions nous ont conduit à notre étude. L'approche que nous avons choisie est purement numérique et est motivée par le besoin de mieux comprendre l'effet d'une faible coordination. Les approches analytiques souffrent de problèmes techniques importants qui jusqu'à présent ne sont pas résolus. Bien sûr d'autres problèmes interviennent lorsqu'on étudie un problème numériquement. Les études que nous avons présentées dans le chapitre précédent III vont nous aider à minimiser ces problèmes. Dans la prochaine section nous discuterons les approches déjà proposées, puis dans la section IV.3 nous exposerons l'approche que nous avons choisie.

– IV.2 – Application de l'optimisation combinatoire à l'étude des verres de spins

L'utilisation de méthodes numériques permet d'étudier des propriétés des verres de spins actuellement inaccessibles au calcul analytique. En physique statistique on s'intéresse en général à des systèmes en équilibre à température finie. Le cas de la température nulle est particulière car elle est inaccessible aussi bien aux expériences qu'aux simulations traditionnelles. Le but de cette section est de motiver l'utilisation des méthodes de l'optimisation combinatoire qui sont *per naturem* des simulations à $T = 0$.

Utilité d'une approche à température nulle L'optimisation combinatoire peut être interprétée comme la recherche des états fondamentaux d'un système "physique", les états fondamentaux étant les états de plus basse énergie. On peut se demander à quoi sert l'étude de ces états si les résultats ne sont valables que pour une valeur particulière de la température, c'est-à-dire à $T = 0$. Il y a plusieurs raisons pour effectuer de telles études.

- (i). Très souvent on utilise des extrapolations à la température nulle de calculs effectués pour des températures finies et on ne dispose d'aucun moyen pour vérifier ces prédictions. L'étude des états fondamentaux permet une telle vérification.
- (ii). Les simulations effectuées afin d'étudier les propriétés des systèmes en équilibre à basse température se heurtent à des difficultés de thermalisation. À titre d'exemple, les simulations Monte Carlo sont effectuées à une température finie en échantillonnant le système via une certaine dynamique. Or il est très difficile d'assurer que le système se trouve à l'équilibre. En-dessous de la température critique, la simulation se retrouve piégée dans des minima locaux. En conséquence ces simulations ont une erreur systématique difficile à contrôler. Donc il est préférable d'avoir une information exacte, venue de l'étude des états fondamentaux, au lieu d'avoir des informations à faible température mais dont on ne sait pas si les états échantillonnés représentent un état d'équilibre.
- (iii). Un point important est aussi l'étude du système à température nulle. Par exemple certaines transitions de phase peuvent être confinées à la température nulle, comme pour les verres de spins en dimension $d = 2$.
- (iv). Enfin il est possible de vérifier l'existence de la ligne AT en étudiant le système à température nulle.

Approche numérique pour étudier les états fondamentaux Déterminer l'état fondamental d'un verre de spins est un problème $\mathcal{NP}$ -difficile. Comme nous l'avons dit dans l'introduction générale I.3 pour de tels problèmes il existe deux catégories d'algorithmes, les algorithmes exacts et les algorithmes heuristiques. L'utilisation des algorithmes exacts est prohibitive à cause du temps de calcul nécessaire (*cf.* III.3), et donc il est préférable d'utiliser des heuristiques. De nombreux travaux traitent des verres de spins en deux dimensions en utilisant des algorithmes d'optimisation pour trouver les états fondamentaux [Bar82, BJGR86] [BC88, Rie95], mais il y a peu de travaux concernant les verres de spins en dimension supérieure. Le cas de la dimension deux est particulière du fait qu'il existe des algorithmes très performants. Pour des verres de spins en dimensions quelconques il existe de nombreuses méthodes heuristiques. Le recuit simulé est aussi une méthode utilisée pour étudier les états fondamentaux [Sou84, Ruj88]. Dans les paragraphes suivants je présenterai quelques uns de ces algorithmes d'optimisation combinatoire :

- (i). La recherche locale et ses améliorations

- (ii). Les algorithmes par séparation et évaluation
- (iii). Les algorithmes génétiques

Le premier algorithme que je discuterai est la recherche locale, avec une brève description de l'algorithme de Kernighan et Lin. Une modification de la recherche locale a déjà été utilisée pour trouver les états fondamentaux [Har95]. Ensuite j'exposerai le principe de *séparation et évaluation*. Quelques algorithmes de ce type sont passés en revue dans [LW66]. Cet algorithme est en fait un algorithme exact, mais en l'arrêtant prématurément il devient une heuristique. Cette heuristique a été utilisée pour étudier les états fondamentaux de certains verres de spins, cf. [Bar82, BMRP82] [GJR87] [dSDJ⁺95, KK94]. Par la suite j'exposerai le principe des algorithmes génétiques. Un algorithme de ce genre a été utilisé par Pál [Pál96a, Pál96b] afin d'étudier les états fondamentaux du modèle d'Edwards et Anderson sur un réseau cubique avec des interactions à courte portée. Pour terminer cette section je discuterai des propriétés de ces différents algorithmes.

Recherche locale améliorée La recherche locale étant un algorithme de descente pure, cette méthode va se trouver piégée facilement dans des minima locaux. Mais quelques modifications et améliorations [GL97] [INR97] font de cet algorithme une heuristique performante et comparable aux algorithmes détaillés ci-dessous. D'autre part cette heuristique est très rapide et facile à implémenter. Je décrirai brièvement le fonctionnement de la recherche locale et ensuite je discuterai de quelques astuces pour la rendre plus performante.

La recherche locale consiste en une descente dans l'espace des énergies. On définit un voisinage qui spécifie les possibles modifications d'une configuration. Une telle modification pourrait être par exemple le retournement d'un nombre fixe de spins. Une configuration initiale est modifiée et l'énergie de la nouvelle solution est comparée à celle de la solution initiale. Si l'énergie a diminué, la nouvelle solution est acceptée et devient la solution initiale pour une nouvelle itération. Cette procédure est répétée tant que l'énergie continue à diminuer. À partir de cette dynamique, il est facile de voir que la descente va être arrêtée dès qu'une solution localement minimale est atteinte. Des astuces qui peuvent être utilisées afin de rendre la recherche plus puissante sont [GL97] :

- (i). l'introduction d'une liste de tabou,
- (ii). l'utilisation de voisinages variables,
- (iii). l'utilisation d'une descente guidée,
- (iv). la possibilité d'une profondeur variable.

L'algorithme de Kernighan et Lin pour des verres de spins Un exemple très réussi d'une telle amélioration est l'algorithme de Kernighan et Lin [KL70]. Cet algorithme a été conçu pour le problème de bipartition de graphe, mais peut être adapté facilement au problème des verres de spins. Pour la bipartition de graphe, le voisinage consiste à échanger des paires de spins afin de respecter la contrainte de taille de la partition. Pour les verres de spins, ce voisinage peut être remplacé par un voisinage où un ou plusieurs spins sont retournés. L'algorithme de Kernighan et Lin est une recherche locale avec une liste de tabou de profondeur variable. Le spin qui permet le meilleur gain en le retournant et qui ne se trouve pas encore dans la liste de tabou est retourné et mis dans la liste de tabou. On itère jusqu'à ce que $N/2$ spins soient mis dans la liste de tabou. On détermine la longueur de la suite de retournement qui donne le gain maximal. Si ce gain est positif on effectue cette suite de retournements des spins. Si aucune amélioration n'est obtenue, l'algorithme s'arrête en déclarant la solution KL-optimale.

Séparation et évaluation Dans l'introduction générale I.3 nous avons montré que le problème de trouver l'état fondamental d'un verre de spin est en fait un problème de *Max-Cut*. Cette formulation du problème permet de le récrire sous la forme d'un problème de programmation linéaire entière avec contraintes. Pour les détails je renvoie le lecteur à l'annexe IV.6. Je me contenterai ici d'un aperçu très bref. L'algorithme de séparation et évaluation commence avec une solution initiale d'un programme linéaire simplifié où seule une partie des inégalités est utilisée. Cette solution initiale est modifiée en rajoutant certaines des inégalités qui définissent les contraintes du problème. La solution trouvée peut être non entière. Si une contrainte n'est pas satisfaite par une telle solution, l'algorithme effectue un branchement en regardant les deux solutions obtenues en imposant que la solution soit entière. Des inégalités (coupures) sont ajoutées au fur et à mesure de façon que le programme linéaire tend vers le problème du départ. Ces pas sont poursuivis jusqu'à ce que la solution finale respecte toutes les contraintes c'est-à-dire qu'elle soit la solution du problème complet. Cet algorithme est en principe exact, mais d'habitude on arrête l'algorithme avant qu'il ait trouvé toutes les inégalités violées, qui sont en nombre exponentiel.

Algorithmes génétiques Des algorithmes génétiques [Hol75, Gol89, GA93] ont été utilisés pour étudier les états fondamentaux des verres de spins. Une *population* de solutions initiales est engendrée et chacune de ces solutions est optimisée à l'aide d'un algorithme d'optimisation locale **L**. Une boucle itérative est parcourue autant de fois qu'on le désire ou jusqu'à ce qu'un critère de terminaison soit satisfait. La boucle consiste à choisir un sous-ensemble de la population et à appliquer aux membres de ce sous-ensemble des opérations de mélange (*cross-over*) ou de modification aléatoire (*mutation*). Les *individus* obtenus sont optimisés de nouveau avec l'algorithme **L** et sont unis à la *population* initiale. Les meilleures solutions parmi les *individus* sont choisies (*sélection*). Celles-ci forment la nouvelle *génération*. Dans une application spécifique l'algorithme d'optimisation locale **L** et les opérations génétiques doivent être choisis de façon appropriée. Dans le problème des verres de spins le *croisement* peut consister à échanger entre deux solutions une séquence de spins, et la *mutation* peut être le retournement d'un amas de spins.

Brève discussion des heuristiques Certes les heuristiques ne garantissent pas de trouver la solution optimale, mais leur performance est déterminée par leur capacité de trouver une bonne solution en pratique. Comparons les résultats obtenus numériquement par une recherche locale aux prédictions analytiques pour l'optimum. Kinzel [Kin86] a étudié le cas du modèle SK dont l'état fondamental a une énergie par spin $e = -0.7633$. Il trouve que la recherche locale se retrouve piégée avec une probabilité tendant vers 1 dans des états métastables, et conduit à une énergie de $e = -0.7$. Ce résultat est proche en esprit de ce que nous avons trouvé dans le chapitre III. Nous avons constaté que l'énergie des solutions quasi-optimales est auto-moyennante et que la valeur limite de cette énergie est fixée à un certain pourcentage au-dessus de la solution optimale. Dans le cas présent l'écart vaut 8.3%, ce qui est assez important. Nous en concluons qu'on peut avoir un grand écart entre la solution exacte et celle proposée par une heuristique. Mais il faut ajouter que la recherche locale sous sa forme naïve est l'un des algorithmes les moins performants et qu'il existe des algorithmes heuristiques plus performants comme ceux que nous venons de discuter. Les algorithmes cités ci-dessus sont des algorithmes plutôt sophistiqués. Nous allons maintenant introduire un autre algorithme de recherche locale modifiée. L'algorithme que nous proposons dans cette thèse est proche de l'algorithme de Kernighan et Lin. Nous l'avons conçu pour étudier des états fondamentaux d'un verre de spins sur des graphes aléatoires lacunaires.

– IV.3 – Nouvel algorithme pour trouver les états fondamentaux

Dans cette section je vais exposer le nouvel algorithme qui a été utilisé dans cette partie de la thèse. Cet algorithme est inspiré de l'algorithme de Kernighan et Lin et de CLO (*cf.* paragraphe III.3) et est une généralisation d'un algorithme d'optimisation de chemins [BG94]. Dans les algorithmes KL et CLO les modifications d'une configuration sont des retournements de spins. Ces retournements de spins représentent le voisinage utilisé le plus souvent pour des systèmes de spins. Nous avons ici élargi ce voisinage : au lieu de retourner des spins isolés, nous regardons des retournements d'amas de spins. Ces amas sont construits à partir d'un spin promettant un gain maximal, et de façon à maximiser le gain associé au retournement complet de l'amas, la taille de cet amas étant variable. Dans un premier temps des modifications sont appliquées jusqu'à obtention d'une solution "amas-optimale", c'est-à-dire une solution telle qu'on ne trouvera plus un amas avec un gain positif. Ensuite la partie CLO prend effet : la solution est perturbée en retournant un amas au hasard. Puis on recommence l'amas-optimisation. Avec un schéma de refroidissement l'algorithme s'arrête lorsque que le système est gelé ou après un nombre prédéterminé de perturbations.

L'algorithme Amas-KL-CLO Considérons d'abord la partie de l'algorithme qui est inspiré de KL. Une configuration $\mathcal{S}$ est une spécification de tous les spins (chaque spin a une orientation donnée $s_i = 1$ ou $s_i = -1$). Une configuration initiale $\mathcal{S}$ est créée aléatoirement en spécifiant pour chaque spin une orientation au hasard. Cette configuration est modifiée en choisissant un amas $\mathcal{A}$ de la façon suivante : le spin s_i du site i qui promet le meilleur gain $E_i = H(\mathcal{S})$ est retourné. À partir de ce spin, on construit un voisinage $\mathcal{V}$ qui contient tous les spins qui sont liés au spin s_i . Chacun des voisins $s_j \in \mathcal{V}$ va être étudié afin de trouver lequel, par exemple s_j , donne le meilleur gain d'énergie E_j . Celui-ci va être retourné : $s_j \rightarrow -s_j$ et ajouté à l'amas $\mathcal{A} = \mathcal{A} \cup \{j\}$. Ce processus est poursuivi jusqu'à ce qu'une taille maximale soit atteinte : $|\mathcal{A}| = A$. Par symétrie, on choisit la taille maximale $A = N/2$. Dans l'implémentation de l'algorithme nous avons en fait pris tantôt $A = N/2$ et tantôt $A = 20$ dans le but de savoir si des amas plus petits peuvent être choisis sans trop de perte de qualité. Empiriquement, nous n'avons pas pu constater de différence significative entre la performances correspondant à ces deux choix. Pour effectuer nos simulations nous avons donc choisi la taille $A = 20$. Dès que l'amas atteint sa taille maximale, on prend pour nouvelle configuration $\mathcal{S}'$ celle qui a la plus faible énergie $H(\mathcal{S}')$ parmi les configurations utilisées lors de l'itération. Les pas sont effectués suivant la méthode de l'algorithme de descente. Le gain total $\Delta = H(\mathcal{S}) - H(\mathcal{S}')$ entre l'ancienne configuration et la configuration obtenue en retournant l'amas est

calculé, et si le gain est positif la configuration actuelle $\mathcal{S}'$ devient la nouvelle configuration : $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}'$.

Il est possible de généraliser cette descente à un recuit simulé. La décision $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}'$ est alors prise suivant le schéma de Metropolis. Si le gain Δ est positif la nouvelle configuration est acceptée, sinon elle est acceptée avec probabilité $p = e^{\beta\Delta}$. Un schéma de refroidissement peut être employé mais nous ne l'avons pas encore utilisé. Ce nouvel algorithme a une complexité d'ordre $\mathcal{O}(N \ln N)$ si on utilise une taille maximale d'amas indépendante de N .

On peut employer cet algorithme dans un CLO en perturbant la configuration optimale par retournement d'un amas choisi aléatoirement, et itérant l'optimisation locale. Nous n'avons pas utilisé cette approche CLO dans nos simulations, pour éviter d'avoir trop de paramètres à fixer, préférant la simplicité à l'optimalité.

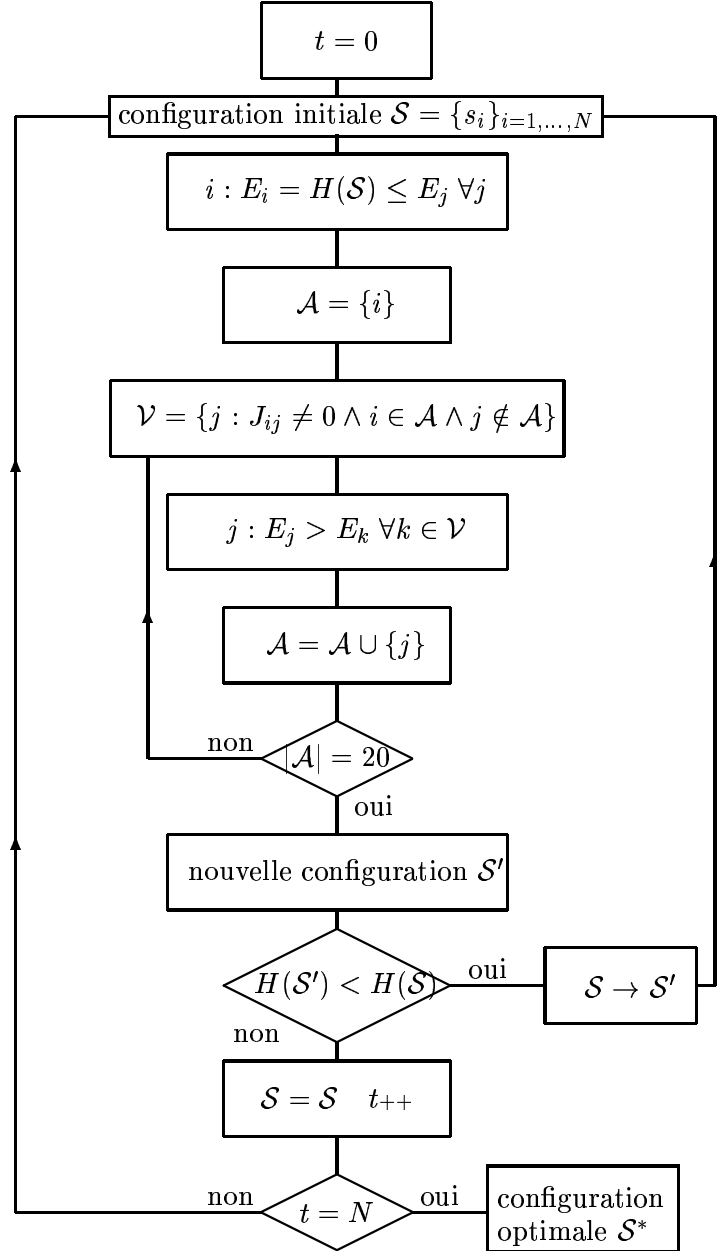


FIG 1 : Le schéma de fonctionnement du nouvel algorithme.

Performance du nouvel algorithme L'algorithme précédent a été comparé à deux algorithmes classiques. Le premier est une adaptation de l'algorithme de Kernighan et Lin, décrit brièvement ci-dessus, et le deuxième est le recuit simulé. Nous avons exposé dans le chapitre III une méthode pour comparer différentes heuristiques. Nous avons restreint l'étude à la comparaison des distributions des énergies. Nous avons mesuré le temps de calcul pour chaque algorithme afin de les comparer, mais nous n'avons pas effectué une analyse aussi complète que celle de la section III.5. Nous présentons d'abord

dans le tableau IV.1 ci-dessous les valeurs des énergies moyennes pour des tailles représentatives et les temps de calcul correspondants en unités u quelconques.

N	20		60		100	
KL	1.2981 ± 0.0042	6u	1.3524 ± 0.0022	34u	1.3744 ± 0.0016	79u
EKL	1.3267 ± 0.0037	417u	1.3883 ± 0.0018	1531u	1.3972 ± 0.0013	2918u
EKLCLO	1.3281 ± 0.0037	2066u	1.3989 ± 0.0016	7483u	1.4139 ± 0.0012	13703u
SA	1.3281 ± 0.0037	330u	1.3986 ± 0.0016	1735u	1.4184 ± 0.0011	3824u
N	150		200			
KL	1.3857 ± 0.0013	158u	1.3897 ± 0.0011	269u		
EKL	1.3990 ± 0.0012	5232u	1.4008 ± 0.0010	7864u		
EKLCLO	1.4186 ± 0.0010	23199u	1.4147 ± 0.0008	31533u		
SA	1.4285 ± 0.0009	71451u	1.4323 ± 0.0007	11344u		

TAB. IV.1: Comparaison des différents algorithmes.

Dans la section III.5 nous avons montré que pour des grandes tailles la possibilité de redémarrer l'algorithme n'améliore pas de façon sensible la qualité des solutions. En effet aux grandes tailles la distribution des énergies engendrées tend vers une gaussienne. Nous donnons ici d'abord les valeurs de la taille jusqu'à laquelle les algorithmes ne trouvent typiquement qu'une seule solution et ensuite les valeurs pour lesquelles les distributions deviennent bimodales.

	KL	EKL	EKLCLO	SA		KL	EKL	EKLCLO	SA
N_{unique}	20	60	100	150	N_{bimodal}	100	200	> 200	> 200

Pour les tailles étudiées tous les algorithmes considérés trouvent, après un nombre suffisant d'essais, la solution optimale avec une probabilité non-négligeable. Ceci assure que nous pouvons estimer l'erreur systématique comme nous l'avons fait dans l'annexe IV.6. La comparaison des algorithmes confirme que le nouvel algorithme EKL est plus performant que KL. Mais comme c'était à prévoir EKL est moins performant que le recuit simulé; notons cependant que pour les tailles étudiées EKL est plus rapide.

– IV.4 – L'énergie du fondamental

Cadre des simulations Dans le reste de ce chapitre nous exposons les résultats de notre étude des verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires. La coordination des ces graphes est finie et fixée. Ce choix a été motivé par des travaux antérieurs portant sur ces graphes. Nous avons étudié plusieurs valeurs de la coordination : $\alpha = 3, 4, 5$ et 7 . Nous avons calculé numériquement l'énergie du fondamental moyennée sur ces graphes. Les valeurs pour des graphes de tailles données ont été obtenues avec une haute précision grâce à une estimation de l'erreur systématique que je vais maintenant esquisser. (La méthode est exposée plus en détail dans l'annexe IV.6). Considérons le problème pour un graphe donné. Nous notons l'énergie par spin $e = E/N$. L'utilisation d'une heuristique introduit une erreur systématique parce qu'un tel algorithme ne garantit pas de trouver l'énergie optimale e_0 . En démarrant cette heuristique k fois, on obtient une solution de meilleure qualité ($e_k \leq e_1$). Nous avons quantifié le gain en énergie qui en résulte dans le chapitre précédent III.5. La solution trouvée à partir de k démarrages possède une énergie distribuée suivant une certaine loi P_k , de moyenne $\bar{e}_k$. L'erreur systématique $\Delta_s = \bar{e}_k - e_0$ est la différence entre l'énergie moyenne en utilisant k démarrages $\bar{e}_k$ et l'optimum e_0 . Jusqu'à maintenant nous avons considéré un graphe donné. Nous cherchons en fait

à calculer la moyenne $\langle \Delta_s \rangle$ sur l'ensemble des graphes. L'estimation de cette erreur systématique moyenne possède donc une incertitude statistique et nous choisissons le nombre N_{Δ_s} de graphes dans l'échantillonnage de sorte que cette erreur statistique σ_{Δ_s} soit faible.

Une autre série de simulations a été utilisée pour estimer la moyenne $\langle e_k \rangle$. Nous avons utilisé un nombre k d'optimisation pour chaque graphe afin d'assurer que l'erreur systématique est donnée par Δ_s . La moyenne $\langle e_k \rangle$ est obtenu avec une erreur statistique. De nouveau la taille N_{e_k} de l'échantillonnage a été choisie de telle sorte que l'erreur statistique σ_{e_k} soit faible. Je donne ici la formule finale que nous avons utilisé pour estimer l'énergie du fondamental, corrigée de l'erreur systématique :

$$\langle e_0 \rangle = \langle e_k \rangle \pm \frac{\sigma_{e_k}}{\sqrt{N_{e_k}}} - \langle \Delta_s \rangle \pm \frac{\sigma_{\Delta_s}}{\sqrt{N_{\Delta_s}}}. \quad (\text{IV.4-1})$$

Nous avons choisi d'atteindre une erreur systématique relative inférieure à 10^{-2} et une erreur statistique relative inférieure à 0.2%. Nous avons estimé l'erreur systématique sur $N_{\Delta_s} = 100$ graphes pour chaque taille N étudiée. Pour l'estimation de $\langle e_k \rangle$ nous avons utilisé $N_{e_k} = 1000$ graphes. La valeur choisie pour le nombre d'essais k varie selon la taille des graphes et la coordination α : nous trouvons $10 \leq k \leq 500$. À cause de nos limitations en temps nous nous sommes limités à étudier des graphes de taille modeste : $N = 20, 40, 60, 80, 100, 120, 150$. Pour ces tailles nous avons estimé avec une bonne précision l'énergie de l'état du fondamental. Considérons maintenant la limite de grande taille, $N \rightarrow \infty$. Afin d'extrapoler il faut comprendre les effets de taille finie ; ceci est l'objet du paragraphe suivant. Étant donné une paramétrisation des effets de taille finie, nous avons trouvé par une analyse en χ^2 le meilleur ajustage à nos résultats. La valeur de l'énergie du fondamental à $N = \infty$ est obtenue par cet ajustage. À cause des erreurs statistiques sur les valeurs de l'énergie pour chaque taille, la valeur extrapolée possède également une erreur statistique, obtenue à l'aide d'une technique qui est décrite dans l'annexe IV.6. Nous mesurons la qualité de nos ajustages au moyen du χ^2 réduit ($= \chi_r^2$) : c'est le χ^2 divisé par le nombre de degrés de liberté dans l'ajustage donné par le nombre de données moins le nombre de paramètres dans l'ajustage. Dans le cas où la paramétrisation des effets de taille finie est correcte, le χ_r^2 doit être proche de 1. Ce sont ces valeurs de l'énergie sur lesquelles se base notre test de la conjecture de Banavar *et al.*. Nous exposons maintenant les résultats de nos simulations.

Les effets de taille finie Nous trouvons que l'énergie est auto-moyennante (voir le dernier paragraphe de cette section) ce qui nous permet de nous limiter aux valeurs moyennes de la densité d'énergie $e = E/N$ de l'état fondamental. L'extrapolation à la limite $N \rightarrow \infty$ a été obtenue par une analyse des effets de taille finie. Afin de trouver la loi d'échelle nous avons essayé plusieurs ajustages. Nous avons utilisé l'analyse en χ^2 pour comparer les différents ajustages. Nos données suggèrent un développement en puissances de $1/N$:

$$e_0(N) = e_0 + \frac{1}{N}e_1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (\text{IV.4-2})$$

Les valeurs de χ^2 indiquent que ces ajustages sont fiables pour cette loi linéaire sur tout le domaine des tailles N utilisées. Ceci se voit facilement à partir de la figure IV-2 où nous montrons nos résultats pour différentes valeurs de la coordination α . Les valeurs extrapolées avec leurs χ^2 sont données dans le tableau IV.2. Les résultats de nos simulations nous donnent la possibilité de tester une conjecture concernant le comportement de l'énergie en fonction de la coordination.

La conjecture de Banavar, Sherrington et Sourlas L'énergie de l'état fondamental est une quantité intéressante en elle même, mais aussi parce qu'il existe une conjecture concernant son comportement en fonction de la coordination dans la limite de grande taille. Nous avons vu que l'énergie

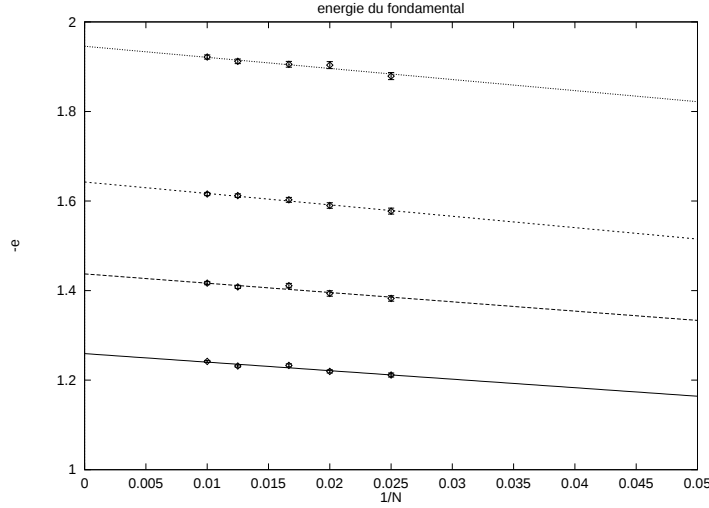


FIG. IV-2: Effets de taille finie de l'énergie par spin de l'état fondamental pour les coordinations $\alpha = 3, 4, 5$ et 7 (de bas en haut).

α	3	4	5	7
simulations e_0	1.2552	1.4397	1.6369	1.9518
conjecture e_0	1.2548	1.4672	1.6530	1.9735
différence en%	0.032	-1.87	-0.97	-1.10
χ_r^2	1.3	1.4	1.6	1.4

TAB. IV.2: Comparaison des énergies par spin corrigées de l'erreur systématique pour les différentes coordinations dans la limite de grand N avec la formule de Banavar *et al.*. Nous donnons les χ_r^2 et l'excès en pourcentage entre conjecture et simulations.

des états fondamentaux obéit une loi d'échelle linéaire à grand N et qu'il est possible d'extrapoler vers la valeur limite avec une bonne fiabilité. Ayant calculé ces énergies limites, nous nous proposons de tester une conjecture de Banavar, Sherrington et Sours. Banavar *et al.* proposent la formule suivante pour le comportement de l'énergie de l'état fondamental dans la limite de grande taille [BSS87] :

$$\frac{N_{cut}}{N_{edges}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{c}{\sqrt{\alpha + c^2 - 2}} \right). \quad (\text{IV.4-3})$$

Cette formule est donnée pour le problème de la bipartition de graphe, mais grâce à la correspondance avec les verres de spins (Fu et Anderson [FA86]), il est possible de reformuler cette équation pour le cas des verres de spins. Cette correspondance relie le coût $\mathcal{C}$ d'une coupure à l'énergie E d'un verre de spins : $\mathcal{C} = N_{cut} = \frac{1}{4}\alpha N - \frac{1}{2}E$. Sachant que $N_{edges} = \frac{\alpha}{2}N$, la formule de Banavar *et al.* devient :

$$e_0 = -\frac{\alpha c}{2\sqrt{\alpha + c^2 - 2}}, \quad (\text{IV.4-4})$$

IV.4 L'énergie du fondamental

avec une valeur de la constante $c = 1.5266 \pm 0.0002$. Cette formule est empirique, mais elle reproduit correctement deux cas limites. Pour le cas $\alpha = 2$, la formule donne $e_0 = -1$, ce qui est exact. Dans le cas limite d'une coordination extensive $\alpha = p(N - 1)$ avec p indépendant de N , nous récupérons le cas du modèle SK. Dans cette limite le graphe devient dense et on peut comparer la valeur donnée par la conjecture à celle prédite par la solution de Parisi :

$$H(N, p) = -U(T = 0) (p(1 - p))^{\frac{1}{2}} N^{\frac{3}{2}} + \mathcal{O}(N). \quad (\text{IV.4-5})$$

La formule empirique se réduit pour les grandes valeurs de la coordination à $E_0 = -\frac{1}{2}cp^{\frac{1}{2}}N^{\frac{3}{2}}$. Cette identification donne la constante $c = 2U(T = 0)$, obtenue dans le cadre de la solution du modèle SK (cf. paragraphe I.2).

Nous avons testé cette conjecture grâce à notre estimation de l'erreur systématique discutée au début de cette section. Nous avons trouvé un accord relativement bon entre les valeurs des simulations et celles prédites par la conjecture, mais notons néanmoins que les valeurs théoriques sont à la limite de ce qui est attendu par les fluctuations statistiques ; une étude avec une meilleure statistique serait souhaitable. Nos résultats sont représentés sur la figure IV-3 et dans le tableau IV.2. Dans ce tableau nous avons aussi indiqué la déviation de l'énergie estimée à celle prédite en pourcentage.

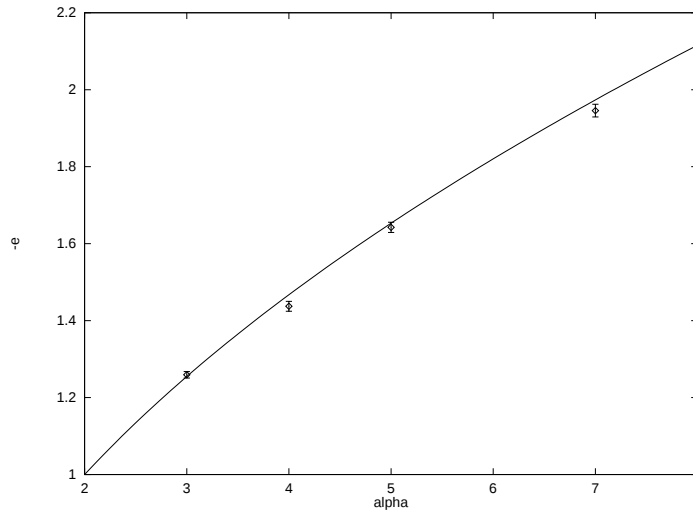


FIG. IV-3: Comparaison de la conjecture (courbe) aux valeurs obtenues par des simulations.

de Dominicis et Goldschmidt [DG89, GdD89] ont effectué des calculs analytiques pour ce problème. Ils utilisent la méthode des répliques et calculent perturbativement le comportement de l'énergie en fonction de la coordination. Ce calcul prédit à très basse température un développement de l'énergie du fondamental en l'inverse de la racine carré de la coordination $\frac{1}{\sqrt{\alpha}}$. Pour la suite nous posons $\alpha = M + 1$. Au premier ordre d'approximation leur résultat s'écrit :

$$\frac{1}{\sqrt{M}}e_0 = -\sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{18\pi}} \frac{1}{\sqrt{M}} + \left(\frac{7}{12} - \frac{1}{9\pi} \right) \frac{1}{M} + \dots \right) = -0.798 \left(1 - \frac{1}{\sqrt{M}} 0.133 + \frac{1}{M} 0.548 + \dots \right). \quad (\text{IV.4-6})$$

Au deuxième ordre d'approximation ces auteurs étudient les effets d'une brisure de la symétrie des

répliques à un pas, et obtiennent :

$$\frac{1}{\sqrt{M}}e_0 = -0.765 + \frac{1}{\sqrt{M}}0.010 - \frac{1}{M}0.390 + \dots \quad (\text{IV.4-7})$$

Le coefficient du terme en $\frac{1}{\sqrt{M}}$ a beaucoup diminué. de Dominicis et Goldschmidt suggèrent que ce terme disparaîtra dans un schéma de brisure à une infinité de pas. Si on développe la formule empirique par rapport à la coordination on obtient

$$e_0 = -\frac{c\sqrt{\alpha}}{2} \left(1 - \frac{c^2 - 2}{2\alpha} + \dots \right) = -\sqrt{M}\frac{c}{2} \left(1 + \frac{1}{M}\frac{3 - c^2}{2} + \dots \right) = -\sqrt{M} \left(0.763 + \frac{1}{M}0.255 + \dots \right) \quad (\text{IV.4-8})$$

Ceci est un développement en $1/\alpha$, mais le désaccord numérique entre les deux formules n'est pas très grand. De plus les coefficients du terme en $1/\alpha$ pour les deux développements sont comparables.

Une autre conjecture de Banavar *et al.* concerne la présence d'une structure ultramétrique. Ces auteurs soupçonnent l'existence d'une transition entre le cas des graphes à haute coordination, dont le paramètre d'ordre possède une structure ultramétrique, et le cas des graphes à basse coordination, dont le paramètre d'ordre n'est pas organisé selon une structure ultramétrique. Pour une coordination $\alpha = 2$ il est possible de démontrer l'absence d'ultramétrie. Il existe donc une transition ; la question se pose de savoir pour quelle valeur de la coordination α apparaît cette transition ? Nous donnons une réponse à cette question dans la section suivante, où nous discutons les propriétés des états fondamentaux.

L'énergie auto-moyennante Nous avons vu que l'énergie moyennée sur l'ensemble des graphes obéit à une loi d'échelle qui permet d'extrapoler à la limite de grande taille. Si l'énergie est auto-moyennante, ces extrapolations sont pertinentes pour l'énergie typique du fondamental. Notre étude numérique nous a permis de confirmer que l'énergie du fondamental est bien auto-moyennante. Dans la figure IV-4 nous montrons pour une valeur de la coordination $\alpha = 5$ la variance de l'énergie σ^2 divisé par N^2 . Cette quantité tend vers zéro, comme attendu. Cette propriété a été vérifiée pour toutes les valeurs de la coordination que nous avons étudiées, $\alpha = 3, 4, 5, 7$. Nous allons voir dans la section suivante qu'il existe d'autres quantités qui ne sont pas auto-moyennantes.

– IV.5 – Propriétés des états fondamentaux

Pour les verres de spins sur des graphes denses on sait que la distribution du paramètre d'ordre $P(q_{\alpha\beta})$ est non triviale, et que cette distribution n'est pas auto-moyennante. Cette non trivialité équivaut à la brisure de la symétrie des répliques. De plus l'espace des paramètres d'ordre est organisé suivant une structure ultramétrique. Nous avons cherché à voir si ces propriétés remarquables persistent pour les verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires. Notre étude numérique nous a permis d'établir pour ces graphes les propriétés suivantes :

- (i). La distribution du paramètre d'ordre $P(q_{\alpha\beta})$ est non triviale.
- (ii). La distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ n'est pas auto-moyennante ; ses fluctuations ne disparaissent pas à la limite $N \rightarrow \infty$.
- (iii). L'espace du paramètre d'ordre possède une forme d'ultramétrie.

Afin d'étudier ces propriétés il est nécessaire d'obtenir les états fondamentaux pour chaque réalisation du désordre. C'est ce que nous avons fait avec notre nouvel algorithme.

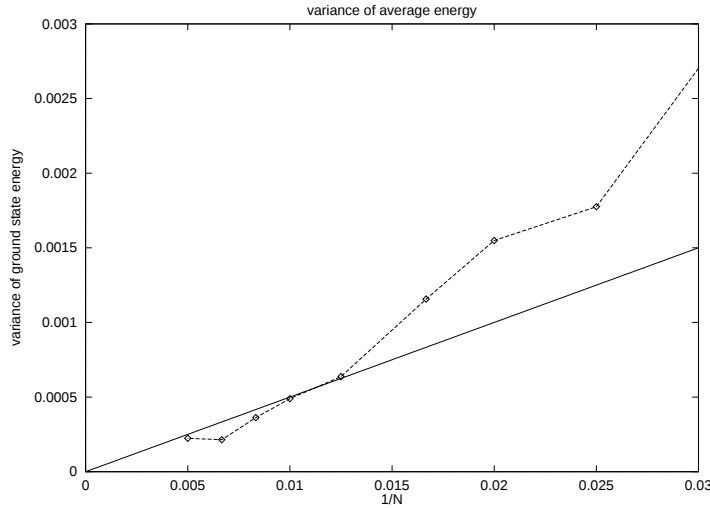


FIG. IV-4: Variance divisée par l'énergie au carré en fonction de $1/N$ pour une coordination de $\alpha = 5$.

Le paramètre d'ordre Pour chaque graphe nous avons engendré un grand nombre d'états fondamentaux. Dans notre implementation toute configuration obtenue par optimisation est placée dans une liste, sauf si cet état a déjà été trouvé. Si un état d'énergie inférieure à celle de la liste est trouvée, toute la liste est effacée et l'état trouvé constitue la première entrée dans la nouvelle liste. Les différents états possèdent un recouvrement entre eux. Ce recouvrement est donné par

$$q_{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N s_i^\alpha s_i^\beta. \quad (\text{IV.5-1})$$

Ceci n'est autre que le paramètre d'ordre du modèle dans l'approche des répliques. À partir de notre liste des états fondamentaux nous calculons tous les recouvrements $q_{\alpha\beta}$ et nous engendrons ainsi un histogramme. Pour chaque réalisation du désordre c'est-à-dire pour chaque graphe on obtient une distribution de ces recouvrements $P_J(q_{\alpha\beta})$. Cette distribution est calculée pour chaque graphe et la distribution $P(q_{\alpha\beta}) = \langle P_J(q_{\alpha\beta}) \rangle$ est obtenue en moyennant sur les différents graphes.

Du fait que nous avons étudié des verres de spins en absence de champ magnétique ($h = 0$), la distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ doit être symétrique puisque le retournement de tous les spins d'un état ne change pas son énergie. Au cours de nos simulations, bien que nous n'ayons pas imposé cette symétrie nos résultats la satisfont ce qui indique une statistique suffisante.

Non-trivialité de $P_J(q_{\alpha\beta})$ Nous avons d'abord étudié si les distributions $P(q_{\alpha\beta}; N)$ deviennent piquées et sont réduites à des distributions triviales dans la limite de grande taille. Nous trouvons que ce n'est pas le cas. Dans la figure IV-5 nous donnons un exemple d'une distribution du paramètre d'ordre moyennée $P(q_{\alpha\beta})$ pour une taille du graphe de $N = 120$ et une coordination $\alpha = 4$. Cette distribution $P(q_{\alpha\beta})$ est à comparer avec la distribution obtenue soit par des simulations du modèle SK, soit par la solution analytique de ce modèle due à Parisi. Dans la figure IV-6 je donne à titre d'exemple des esquisses de ces deux distributions.

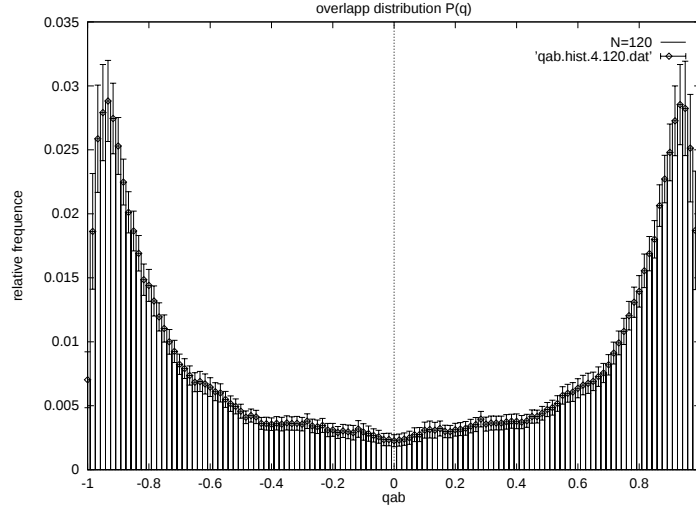


FIG. IV-5: La distribution du paramètre d'ordre $P(q_{\alpha\beta})$ à $N = 120$ et $\alpha = 4$.

Caractère non auto-moyennant de $P_J(q_{\alpha\beta})$ Nous avons pu confirmer numériquement que la distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ est non auto-moyennante. En considérant l'ensemble des graphes, on s'aperçoit que $P_J(q_{\alpha\beta})$ a des fluctuations qui ne disparaissent pas à grand N . Ce résultat est attendu, car le modèle de Sherrington et Kirkpatrick possède également une distribution $P_J^{\text{SK}}(q_{\alpha\beta})$ non auto-moyennante. La propriété de l'auto-moyennage signifierait que la distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ tend vers une distribution fixe $P_\infty(q_{\alpha\beta})$ lorsque N grandit. Afin de vérifier que la distribution n'est pas auto-moyennante (excluant ainsi aussi une distribution triviale), nous avons étudié la moyenne q de la distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ et ses fluctuations. Dans la figure IV-7 je présente les valeurs moyennées $q = \sum_{q_{\alpha\beta}} |q_{\alpha\beta}| P_J(q_{\alpha\beta})$ pour différentes tailles du système. Pour toutes coordinations étudiées, la moyenne q ne montre presque pas de dépendance en N . Cette moyenne ne tend pas non plus vers 1, excluant ainsi la possibilité d'une distribution piquée autour de $q_{\alpha\beta} = \pm 1$. Dans la figure IV-8 je donne les valeurs de la variance $\sigma^2(q) = \langle q^2 \rangle - \langle q \rangle^2$ de q . La variance tend vers une constante non nulle et de nouveau elle ne montre pas de dépendance en taille. En conséquence la distribution de $|q_{\alpha\beta}|$ n'est ni triviale, ni auto-moyennante.

$$\frac{\sigma^2(q)}{\langle q \rangle^2} \not\rightarrow 0. \quad (\text{IV.5-2})$$

Nous avons ainsi trouvé :

- (i). La distribution $\overline{P_J(q_{\alpha\beta})}$ tend vers une limite $P(q_{\alpha\beta})$ à grand N . Cette distribution limite est non triviale c'est-à-dire qu'elle n'est pas une somme de distributions δ en $\pm q$.
- (ii). La distribution $P_J(q_{\alpha\beta})$ n'est pas auto-moyennante.

Reger *et al.* ont étudié les verres de spins sur réseau en $d = 4$ et conclurent que la solution de Parisi du modèle SK décrit quantitativement assez bien leurs données. Ceci est en accord avec notre résultat que les propriétés de la solution du modèle de Sherrington et Kirkpatrick persistent à coordination finie.

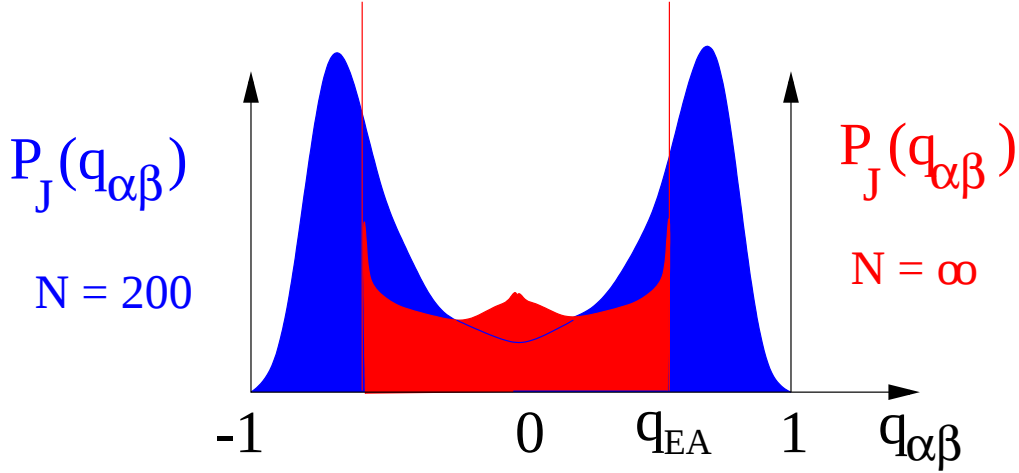


FIG. IV-6: La distribution du paramètre d'ordre $P_J(q_{\alpha\beta})$ obtenue par des simulations du modèle SK (à $N = 200$) et par la solution analytique due à Parisi ($N = \infty$).

Ultramétrie Un autre aspect de la solution du modèle SK a été découvert par Mézard *et al.* [MPS⁺84] : les recouvrements sont organisés suivant une structure ultramétrique. Définissons une distance entre deux états comme suit

$$d_{\alpha\beta}^2 = \frac{1}{2} (1 - q_{\alpha\beta}). \quad (\text{IV.5-3})$$

Dans le modèle SK, cette métrique est ultramétrique. Supposons que nous ayons ordonné les recouvrements de trois états α , β et γ de sorte que $q_{\min} \equiv q_{\alpha\gamma} \leq q_{\text{mid}} \equiv q_{\beta\gamma} \leq q_{\max} \equiv q_{\alpha\beta}$. L'ultramétrie signifie que $d_{\min} \leq d_{\text{mid}} = d_{\max}$ ou en terme des recouvrements $q_{\max} \geq q_{\text{mid}} = q_{\min}$. Autrement dit, les triangles $(\alpha\beta\gamma)$ sont tous, soit isocèles, soit équilatéraux.

Dans notre modèle de verre de spins sur des graphes aléatoires lacunaires, demandons si les distances $d_{\alpha\beta}$ obéissent à une ultramétrie. Suivant Bhatt et Young [BY86a], nous introduisons une variable mesurant le degré d'ultramétrie :

$$u = d_{\max} - d_{\text{mid}}. \quad (\text{IV.5-4})$$

On peut motiver ce choix comme suit. Dans un triangle isocèle la hauteur divise la base en deux sections de même taille. Dans un triangle quelconque la hauteur divise le triangle en deux triangles rectangles. En utilisant le théorème de *Pythagore* on déduit que le triangle est isocèle si $\tilde{u} = (d_{\max}^2 - d_{\text{mid}}^2)/d_{\min}^2 = 0$. Cette quantité est bornée ($\tilde{u} \leq 1$). Le comportement principal est déjà décrit par la variable u ci-dessus qui est aussi bornée ($u \leq 1$). Ces bornes sont des conséquences de l'inégalité triangulaire ; dans le cas ultramétrique, on a $u = 0$. Pour le modèle SK la validité de l'ultramétrie est justifiée seulement dans la limite de grande taille (*cf.* [RAdD89]). Par conséquent pour les tailles finies il y a des déviations à l'ultramétrie. Les inégalités triangulaires donnent $d_{\text{mid}} - d_{\min} \leq d_{\max} \leq d_{\text{mid}} + d_{\min}$. L'ultramétrie exige $d_{\max} = d_{\text{mid}}$. À cause des corrections de taille finie, il est difficile de distinguer ces deux propriétés [MPV87].

Nous avons étudié la présence d'une structure ultramétrique dans nos données. Pour chaque instance nous comparons tous les états fondamentaux en calculant leurs recouvrements $q_{\alpha\beta}$. Ceci permet

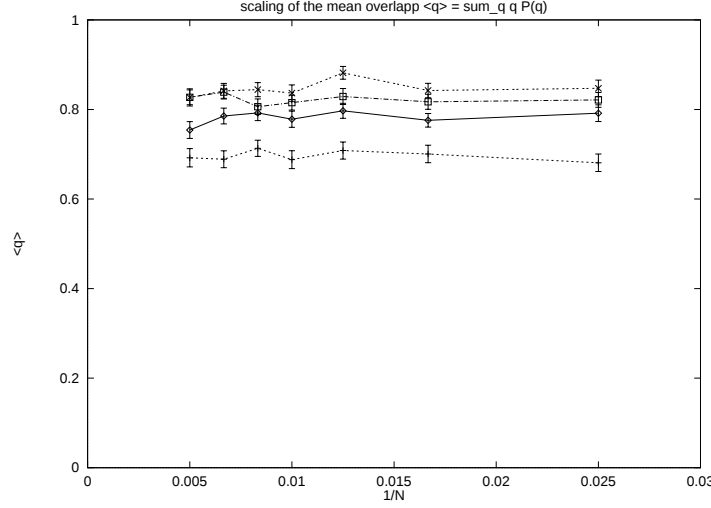


FIG. IV-7: La moyenne q de la distribution du paramètre d'ordre $P(|q_{\alpha\beta}|)$ pour les différentes coordinations $\alpha = 3, 4, 5$ et 7 en fonction de la taille $1/N$.

de calculer les valeurs de u pour tous les triangles. Ces valeurs sont mise dans un histogramme qui présente une approximation numérique de la distribution $p_J(u)$. Cette distribution de probabilité $p_J(u)$ doit être positive et piquée en zéro s'il y a ultramétrie : $p_J(u) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \delta(u)$ pour tout graphe. Nous nous intéressons d'abord à la moyenne sur tous les graphes c'est-à-dire à $\overline{p_J(u)}$. Nous avons vérifié le comportement attendu pour différentes coordinations. Dans la figure IV-9 nous présentons des valeurs moyennes $\hat{u} = \int \overline{p_J(u)} u du$ de la distribution $\overline{p_J(u)}$ en fonction de la taille du système. Le signal d'ultramétrie est assez net à α grand, et devient moins convaincant pour α petit. Dans les données une violation de l'ultramétrie se refléterait par une valeur finie de $\hat{u}$ dans la limite de grande taille. Nos résultats suggèrent que l'espace des états fondamentaux est organisé hiérarchiquement pour toutes les valeurs de la coordination $\alpha \geq 3$. Par conséquent il n'y a pas de transition entre $\alpha = 3$ et $\alpha \gg 1$ contrairement à ce que pensaient Banavar *et al.*

Notons que pour une coordination $\alpha = 2$ il n'y a pas d'ultramétrie. On peut s'en convaincre facilement par le raisonnement suivant. Lorsque $\alpha = 2$ un graphe donné est formé de boucles disjointes et alors on a à faire à un ensemble de verres de spins en dimension $d = 1$, avec des conditions aux bords périodiques. Les boucles sont frustrées avec probabilité $1/2$. Ceci vient du fait que le lien qui ferme une boucle détermine si elle est frustrée ou non avec des probabilités égales (symétrie de $P(J_{ij})$). En déplaçant le lien non satisfait sur une boucle frustrée par retournement des spins, un recouvrement quelconque peut être produit. Il s'ensuit que la distribution du paramètre d'ordre est non triviale et consiste en deux contributions, l'une concentrée en $q_{\alpha\beta} = \pm 1$, et l'autre uniformément distribuée de -1 à $+1$. Cette distribution est présentée dans la figure IV-10. Intéressons-nous maintenant à l'ultramétrie sur une boucle frustrée. Considérons trois configurations différentes $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2$ et $\mathcal{S}_3$, $\mathcal{S}_1$ étant la configuration de référence. $\mathcal{S}_2$ et $\mathcal{S}_3$ se distinguent de $\mathcal{S}_1$ par le retournement de m_2 spins contigus pour la configuration $\mathcal{S}_2$ et de m_3 spins contigus pour la configuration $\mathcal{S}_3$. Supposons pour la suite que $m_3 > m_2$. À cause de la contrainte que les boucles soient fermées, la différence de recouvrement entre les configurations $\mathcal{S}_2$ et $\mathcal{S}_3$ vaut : $m_3 - m_2$, de sorte que les recouvrements

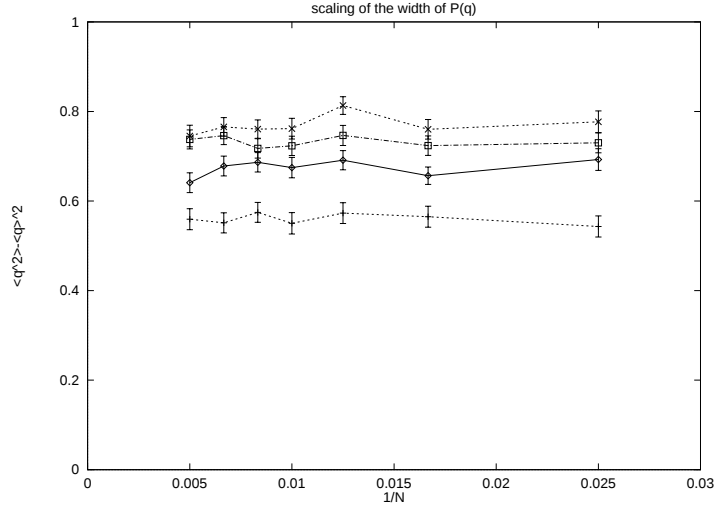


FIG. IV-8: Variance $\sigma^2(|q_{\alpha\beta}|)$ q en fonction de $1/N$.

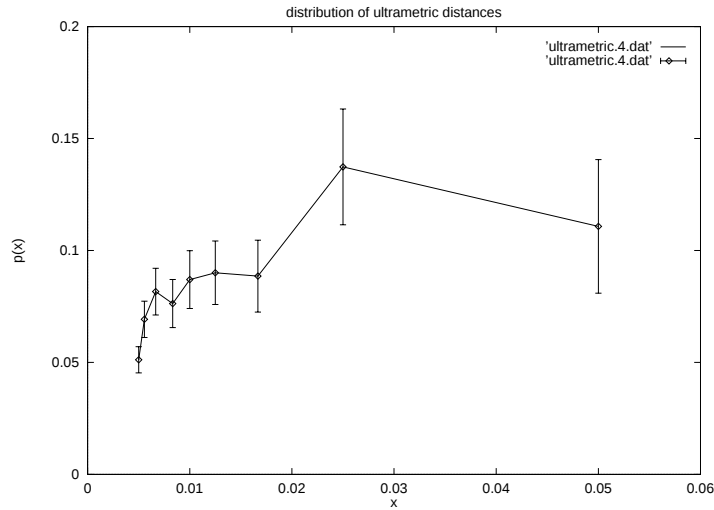


FIG. IV-9: Moyenne de la distribution $\overline{p_J(u)}$ en fonction de $1/N$ ($\alpha = 4$).

$q_{\alpha\beta}$ forment toujours des triangles dégénérés, c'est-à-dire “aplatis”. L'ultramétrie exige que $m_2 \leq m_3 - m_2 = m_3$. Il s'ensuit que l'ultramétrie n'est pas satisfaite. Pour une basse coordination ($\alpha = 2$) il n'y a donc pas d'ultramétrie. En conséquence il doit apparaître une transition pour une certaine valeur α_c de la coordination. Nos données suggèrent que $\alpha_c < 3$.

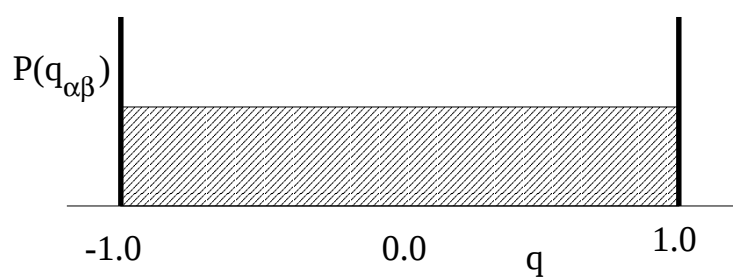


FIG. IV-10: La distribution $P(q_{\alpha\beta})$ pour une boucle frustrée.

– IV.6 – Preprint

Le pré tirage qui suit est un preprint. Dans cet article, nous étudions des propriétés des verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires à température nulle. Afin d'obtenir des états fondamentaux nous proposons un nouvel algorithme heuristique. Premièrement nous testons une conjecture due à Banavar, Sherrington et Surlas pour des graphes avec une connectivité finie et fixe. Les verres de spins sur ces graphes constituent une approximation intermédiaire entre le modèle SK et les modèles sur réseau. Notre travail est donc un pas afin de comprendre quelles particularités de la solution SRSB du modèle SK persistent quand la connectivité est finie. Nous trouvons que cette conjecture reproduit les données numériques avec une précision d'environ un pourcent jusqu'à la connectivité la plus basse ($\alpha = 3$). Ensuite nous trouvons que la distribution du paramètre d'ordre parmi les états fondamentaux est non-triviale et qu'elle n'est pas automoyennante. En outre nous avons trouvé que ces états forment une structure ultramétrique.

Ground state properties of spin glasses on sparse random graphs

G. R. Schreiber* and O. C. Martin†

Division de Physique Théorique,† Institut de Physique Nucléaire, Université Paris-Sud, F-91406 Orsay Cedex, France

We study the ground states of $J = \pm 1$ spin glasses on random graphs of fixed connectivity. Finite size scaling is applied to obtain the infinite volume limit of the ground state energy density. The results are compared to a conjecture of Banavar, Sherrington, and Surlas. We also study the distribution of the overlaps between the different ground states of each graph. We find that the spin glass order parameter is not self-averaging, and that ultrametricity holds at large scales.

Introduction. — Numerous numerical studies have been performed to investigate the behavior of spin glasses. In spite of the generally accepted mean field solution of the SK-model [10] proposed by Parisi [7], a good understanding lacks both at finite connectivity and in finite dimensions. Similarities between the properties of the SK model and those of more realistic finite dimensional short-range models have been put forward [3,11]. Our purpose here is to find which mean-field or SK properties carry over to the finite connectivity models. Indeed, a way to get closer to the lattice spin glass models is to consider spin glasses on sparse random graphs having a fixed connectivity α . (Note that the limit $\alpha \rightarrow \infty$ brings us back to the SK model, while the case $\alpha = 2d$ can naturally be considered as the most appropriate mean field model of the d -dimensional hypercubic lattice model.) This approach also allows one to separate the effects of finite dimensions from those associated with finite connectivity.

For spin glasses on sparse graphs, the analytic calculations have been almost exclusively performed within the replica symmetric formalism. At present, the nature of the replica symmetry breaking remains unknown. Furthermore, the predictions [4], for the temperature and connectivity dependence remain unclear. In 1986, Banavar, Sherrington, and Surlas [1] studied the energy by means of simulated annealing and came up with a conjecture. In the present work, we test their conjecture for the ground state energy, and clarify which “mean field” (SK-like) properties associated with the ground states hold in these finite connectivity models.

The Hamiltonian we consider is given by:

$$H = - \sum_{\{ij\}} J_{ij} s_i s_j \quad (1)$$

where the spins lie at the vertices of a graph and take on the values $s_i = \pm 1$. The couplings J_{ij} take on the values ± 1 if the two vertices i and j are connected by an edge, and $J_{ij} = 0$ otherwise. Our runs were performed on random graphs of fixed connectivity at each vertex. When performing the average over the quenched disorder, we average over the different realizations of both the graphs and the J_{ij} couplings. The disorder averages on an observable Θ will be denoted by $\bar{\Theta}$.

Finite Size Scaling — In order to determine the ground states for each realization, we have conceived a new algorithm which is rather fast and gives high quality solutions [8]. We use the data obtained for small and medium sized graphs to extrapolate to the large N limit. We have done this for each connectivity studied: $\alpha = 3, 4, 5$ and 7 . We find that the following dependence on N describes well the data for the ground state energy density e_0 :

$$\bar{e}_0(N) = e_0^* + \frac{A^*}{N}, \quad (2)$$

and the χ^2 s confirm that the fits are quite good. The data is plotted for the different values of the connectivity and as function of $1/N$ in Figure 1. Our best estimates

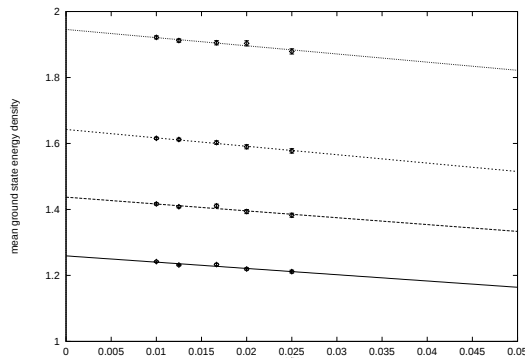


FIG. 1. Size dependence of the mean ground state energy density.

of the limiting ground state energy density e_0^* for the different values of the connectivity are given in Table I.

Conjecture of Banavar et al. — Over a decade ago, Banavar, Sherrington, and Surlas [1] gave an empirical formula for the ground state energy density in a graph partitioning problem. Following an argument of Mézard and Parisi on these same kind of random graphs, the conjectured formula can be mapped to one for the spin glass problem we consider, and leads to:

$$e_0 = \frac{\alpha c}{2\sqrt{\alpha + c^2 - 2}}, \quad (3)$$

where $c = 1.5266 \dots$. Banavar *et al.* built this formula so that the $\alpha \rightarrow \infty$ limit reduces to the SK case and so that the $\alpha = 2$ case gives the exact answer. The ground state energy density predicted by this formula is compared to our numerical results in Table I. Within our precision,

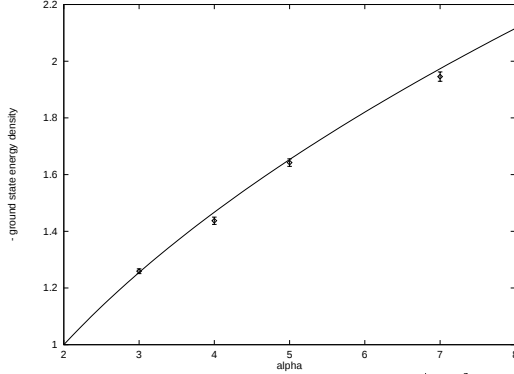


FIG. 2. The ground state energy density $-e_0^*$ as function of the connectivity. The continuous line represents equation (3) and the data points are the results of our numerical study. The error bars give the statistical errors.

the empirical formula describes the numerical results very well for all values of α .

We have also confirmed that these mean energy densities are in fact the *typical* values at large N , that is the ground state energy is self-averaging. (Such a result is not a priori obvious in this disorder ensemble and a proof of self-averaging is still lacking.) Figure 3 shows the ratio of the variance and the mean energy squared. This quantity tends to zero and hence the distribution of ground state energies becomes peaked in the large N limit.

Systematic error estimate — Let us briefly explain how we have computed the ground states. We employ a heuristic algorithm, *i.e.* an algorithm which gives no guarantee of finding an optimal solution. (Exact algorithms provide a guarantee, but they are too slow for our purposes.) The heuristic algorithm gives only an estimate e of the ground state energy density e_0 . It thereby introduces a systematic error Δ_s , *a priori* unknown. However, this systematic error may be estimated as follows. We sample several times one graph to gen-

TABLE I. Comparison of the ground state energy densities given by the conjecture and found numerically in the present study.

α	2	3	4	5	7
conjecture	1	1.254	1.467	1.653	1.973
numerical	1	1.255	1.440	1.637	1.952

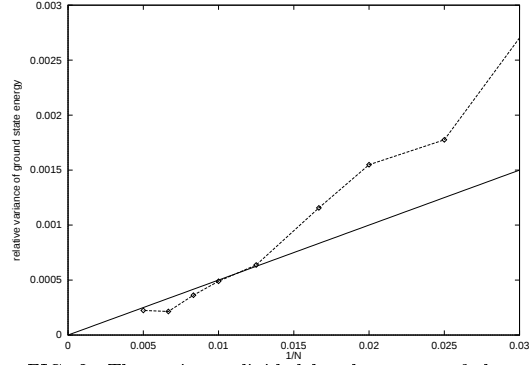


FIG. 3. The variance divided by the square of the mean energy.

erate the distribution $P(e)$ of values of e found by the algorithm. By restarting the algorithm k times and retaining the best among the k starts, the solution may be improved. As exposed in previous work [9] it is possible to quantify the corresponding gain by calculating the distribution of this “best-of- k ”:

$$P_k(e) = [1 - (1 - P(e - 1))^k] - [1 - (1 - P(e))^k]. \quad (4)$$

The mean value found after k runs is the mean over this distribution, $\langle e_k \rangle = \int e P_k(e) de$. By running on one graph many times, the distribution $P(e)$ can be generated to high precision and we take as an estimate for the optimal solution e_0 the lowest energy found e_k . If the sampling is sufficient this should give the ground state energy density. Our estimate of the systematic error for that graph is then given by $\Delta_s = \langle e_k \rangle - e_0$. Since we are interested in the average over graphs we get the following final formula for the ground state energy

$$\bar{e}_0 = \overline{\langle e_k \rangle}_{G(A)} - \overline{\langle \Delta_s \rangle}_{G(B)} \pm \sigma \quad (5)$$

where $G(A)$ and $G(B)$ are two independent ensembles of graphs. Due to their independence the statistical error is given by:

$$\sigma^2 = \frac{\sigma_A^2}{|G(A)|} + \frac{\sigma_B^2}{|G(B)|} \quad (6)$$

where σ_A, σ_B denotes the variance of the observable A, B . Now in order to get, let's say, a precision of 10^{-3} in the estimate of the ground state energy, we proceed as follows. For $G(B)$, we generate with high precision the distributions $P(e)$ for each graph and then choose k such that $\langle \Delta_s \rangle < 10^{-3}$. The high precision leads to $e_0 \approx e$. With this value of k we then perform the independent runs on $G(A)$. The cardinality of $G(A)$ and $G(B)$ is chosen so as to minimize the total statistical error, with $\sigma < 10^{-3}$. The determination of an optimal k allows one to have good statistics for $G(A)$; in general

$|G(A)| \gg |G(B)|$. This procedure gives a rather accurate estimate of the ground state energy $\bar{e}_0$ as long as the algorithm has a non-negligible probability $P(e_0)$ of finding the optimum.

A new efficient algorithm — We will now quickly discuss our new algorithm, which allowed for a non-negligible probability of finding the optimum in a short time. For more details see [8]. From a promising vertex of the graph, we grow a cluster and the spins in this cluster are flipped if the final cluster obtained gives an overall improvement. The basic step is imbedded in a pure descent algorithm, where a cluster optimal solution is perturbed by a random cluster flip. This algorithm is close in spirit to the Kernighan and Lin algorithm [5] and an enhanced version thereof [6].

Overlap distribution. — In the $J_{ij} = \pm 1$ model, the ground state energy is highly degenerate. (Empirically, the number of different ground states grows exponentially with N .) This allows us to consider the distribution $P(q_{\alpha\beta})$ of the order parameter $q_{\alpha\beta}$ giving the overlap between the different ground states. In Figure 4 we show this distribution at $\alpha = 4$ and $N = 120$. The distribution

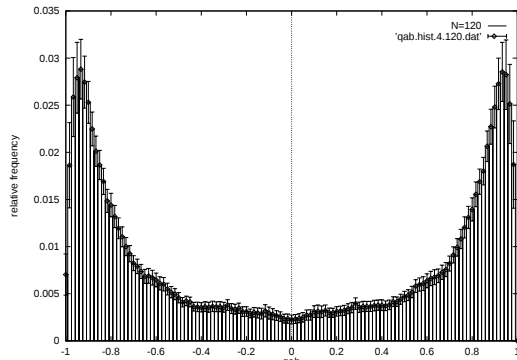


FIG. 4. Distribution $P(q)$ of the order parameter for $\alpha = 4$ and $N = 120$.

is non-trivial and the numerical evidence indicates that the distribution remains non-trivial in the limit $N \rightarrow \infty$. To this end we have studied the mean and the width of the distribution for $|q|$. We show in Figures 5 and 6 the dependence of the mean and variance of this quantity as a function of $1/N$. As $N \rightarrow \infty$, both of these quantities seem to tend towards a constant, giving evidence that the distribution remains non-trivial in this limit. We have also found that $P(q)$ is not self-averaging (no data shown).

Ultrametricity — The last topic of our study concerns the presence of ultrametricity among the ground states. Ultrametricity appears between the different pure states in the SK model. The high degeneracy of ground states in the model we consider allows us to investigate this question at zero temperature at finite N and to ex-

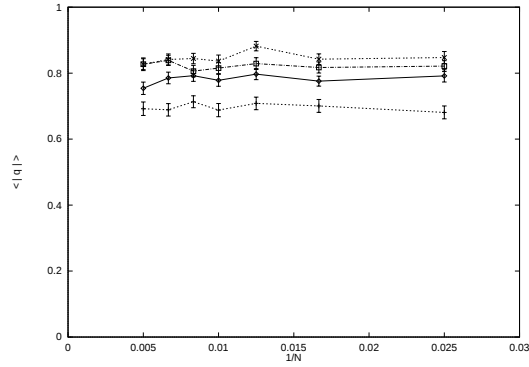


FIG. 5. Mean of the distribution $P(|q|)$.

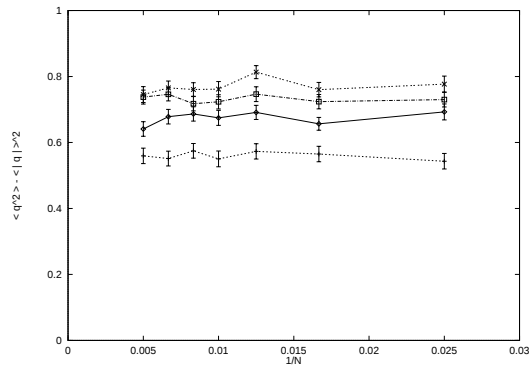


FIG. 6. Variance of the distribution $P(|q|)$.

trapolate to the $N \rightarrow \infty$ limit. It is of major interest to understand whether this kind of ultrametricity extends to the Edwards-Anderson model. We will show here that ultrametricity is present in our finite connectivity model, and is thus not an artefact of the infinite connectivity of the SK model.

In close analogy to what was considered by Bhatt and Young [2] in their study of the SK model, we have considered the quantity

$$x = \frac{q_{\text{mid}} - q_{\text{min}}}{q_{\text{max}}}, \quad (7)$$

with the obvious meaning of min, mid, max: $q_{\text{min}} \leq q_{\text{mid}} \leq q_{\text{max}}$. If the distance metric between ground states is ultrametric, the distribution $p(x)$ of x should tend to a δ -distribution $p(x) \rightarrow \delta(x)$ in the large N -limit. In Figure 7 we show the average $\hat{x} = \int x p(x) dx$ of x as a function of $1/N$ for the case $\alpha = 4$. All our data suggest that $\hat{x} \rightarrow 0$, indicating that ultrametricity is present down to very low values of the connectivity. Necessarily at a value of the connectivity of $\alpha = 2$ the ultrametricity has to disappear. This is seen as follows: in that case

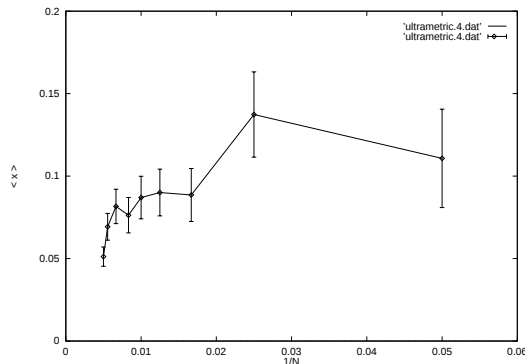


FIG. 7. The average $\hat{x}$ as function of $1/N$ ($\alpha = 4$).

the graph is a collection of loops. Half of those loops are frustrated, half are not. On the frustrated loops, *any* overlap can be created by shifting an unsatisfied bond. Then the overlaps will not satisfy the condition of ultrametricity, which, for one loop, corresponds to $q_3 = 2q_2$. This argumentation extends to an ensemble of loops, so that ultrametricity does not hold. Hence there will be a transition as a function of the connectivity between systems without and systems with ultrametricity. Our data give support to the presence of ultrametricity down to very small values of the connectivity. Only at $\alpha = 3$, which is the smallest non-trivial connectivity, is the evidence not so strong. We thus expect the critical value of the connectivity to be close to $\alpha = 3$.

Conclusions. — In the present work we used a powerful algorithm inspired from combinatorial optimization to study the ground state properties of spin glasses on random graphs with fixed connectivity. We find that the ground state energy obeys scaling and is selfaveraging. An empirical formula proposed by Banavar *et al.* giving the behavior of the ground state energy as a function of the connectivity was found to be accurate to the level of about 1%. We also wanted to determine which qualitative properties of the SK model applied to these fixed connectivity models. Firstly, we find that the order parameter distribution is non-trivial, and is not selfaveraging. Secondly, we have confirmed the presence of ultrametricity down to small values of the connectivity. Near $\alpha = 3$ there seems to appear a transition where ultrametricity goes from absent to present. Thus our numerical results support the conjecture that the mean-field qualitative predictions carry over to more realistic models with finite connectivity, as for example the one studied in the present work.

Acknowledgments. — We are grateful to J. Houdayer and N. Sourlas for discussions. G.R.S., acknowledges support from an Individual EC research grant under contract number ERB4001GT941144, and O.C.M.

acknowledges support from the Institut Universitaire de France. The Division de Physique Théorique is an Unité de Recherche des Universités Paris XI et Paris VI associée au CNRS.

* E-mail address: schreiber@ipno.in2p3.fr

† E-mail address: martino@ipno.in2p3.fr

‡ Unité de Recherche des Universités Paris XI et Paris VI associée au C.N.R.S.

- [1] J. R. Banavar, D. Sherrington, and N. Sourlas. Graph bipartitioning and statistical mechanics. *J. Phys. A*, 20:L1 – L8, 1987.
- [2] R. N. Bhatt and A. P. Young. *J. Magn. Matter*, 54–57:191, 1986.
- [3] K. Binder and A. P. Young. Spin Glasses: Experimental Facts, theoretical concepts and open questions. *Reviews of Modern Physics*, 58:801, 1986.
- [4] C. De Dominicis and Y. Y. Goldschmidt. Replica symmetry breaking in finite connectivity systems: a large connectivity expansion at finite and zero temperature. *J. Phys. A*, 22:L775–L781, 1989.
- [5] B. Kernighan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *Bell System Technical Journal*, 49:291 – 307, 1970.
- [6] O. C. Martin and S. W. Otto. Combining simulated annealing with local search heuristics. *Ann. Operations Res.*, 63:57–75, 1996.
- [7] G. Parisi. Magnetic properties of spin glasses in a new mean field theory. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 13:1887 – 1895, 1980.
- [8] G. R. Schreiber. *Systèmes désordonnés et frustrés: Modèles Champ Moyen et Aspects d’Optimisation Combinatoire*. Dissertation, Université Paris XI, Orsay, Orsay, November 1997.
- [9] G. R. Schreiber and O. C. Martin. Cut size statistics of Graph Bisection Heuristics. *preprint*, 1997. submitted to *SIAM Journal on Optimization*.
- [10] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. Solvable model of a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35(26):1792 – 1796, June 1975.
- [11] L. van Hemmen and I. Morgenstern, editors. *Heidelberg Colloquium on Glassy dynamics and Optimization*. Springer Verlag, Heidelberg, FRG, 1987.

– Annexe A –
Détails algorithmiques

L'algorithme brancher et couper

Nous avons vu dans l'introduction générale I.4 que le problème de trouver les états fondamentaux d'un verre de spins peut être formulé comme un problème de *Max-Cut*. Le problème de *Max-Cut* consiste à trouver une partition maximale d'un graphe $G(E, V)$. Le graphe est donné par un ensemble V de N points qu'il faut diviser en deux sous-ensembles V_1 et V_2 . Les sous-ensembles peuvent être identifiés, dans le cas d'un verre de spin, avec des spins $s_i = 1$, disons pour V_1 et avec des spins $s_i = -1$ pour V_2 . Les sommets (ou les spins) sont connectés par des arêtes $E_{ij} \in E$, E étant l'ensemble des arêtes du graphe $G(V, E)$. Le coût de la partition doit être maximale pour une solution. Ce coût est donné par la somme sur les liens $E_{ij} \in E$ qui connectent les deux sous-ensembles $\mathcal{C} = \sum_{i \in V_1, j \in V_2} E_{ij}$. Le *Max-Cut* est en général un problème $\mathcal{NP}$ -difficile. Grâce à cette identification il est possible de récrire le problème sous la forme d'un *programme linéaire*. Définissons le vecteur d'incidence $\chi^{(V_1, V_2)} \in R^{|E|}$ en posant $\chi_a^{(V_1, V_2)} = 1$ avec $a = (i, j)$ pour chaque arête $E_{ij} = E_a$ coupée, c'est-à-dire liant V_1 et V_2 , et $\chi_a^{(V_1, V_2)} = 0$ sinon. Considérons l'enveloppe convexe de ces vecteurs d'incidence dans $R^{|E|}$ et désignons la par $P_C(G)$. À chaque partition correspond un vecteur $\chi^{(V_1, V_2)}$. Toutes les coupures engendrent le polyèdre de coupure $P_C(G)$. Dans ce polyèdre de coupure il faut maintenant pour une réalisation donnée des couplages $J_{ij} = u_a$ trouver le maximum de

$$\max_{\vec{x} \in P_C(G)} \{\vec{u}^T \vec{x}\}. \quad (\text{IV.A-1})$$

Le produit scalaire $\vec{u}^T \vec{x}$ est la fonction coût qui est maintenant linéaire. Il existe des algorithmes bien adaptés à ce type de problèmes, comme par exemple la méthode du simplexe ou la méthode de l'ellipsoïde [Chv83]. Le problème ici n'est pas de résoudre le problème linéaire, mais de définir proprement le polyèdre de coupure $P_C(G)$. Le fait qu'il s'agit d'un problème $\mathcal{NP}$ -difficile se traduit ici par le fait que devoir écrire toutes les égalités et inégalités qui définissent $P_C(G)$ est $\mathcal{NP}$ -difficile, parce que le nombre des contraintes qu'il faut écrire est exponentiel dans la taille du problème. L'observation qui rend le problème traitable, est le fait que d'une part un grand nombre de ces inégalités sont redondantes et d'autre part une bonne approximation est obtenue en regardant un polyèdre $P(L; G)$ qui contient le $P_C(G)$. Ce polyèdre $P(L; G)$ est défini par un ensemble d'inégalités restreint qui va être raffiné de proche en proche à l'aide de procédure *branch and cut*. Je vais maintenant décrire le principe de cette méthode, qui peut s'appliquer dans un cadre général [Die95, Thi95a]. Le polyèdre $P(L; G)$ est défini par L inégalités. Ces L inégalités sont choisies de façon que $P(L; G)$ contienne le polyèdre de coupure $P_C(G)$ et que l'enveloppe convexe des solutions $0 \leq x_a \leq 1$ constitue $P_C(G)$. Cela signifie que les solutions x qui satisfont les L inégalités comprennent les solutions du problème initial et que l'enveloppe des solutions obtenues par restriction aux valeurs entières ($x_a \in [0, 1]$) redonne les solutions du problème initial. Afin d'obtenir cet ensemble d'inégalités, on commence avec un petit nombre d'inégalités et une solution initiale du problème correspondant. Puis on introduit d'autres inégalités qui conservent la solution comme solution de l'ancien ensemble mais modifie le vecteur x qu'il devienne aussi solution du nouvel ensemble d'inégalités. On appelle cette partie de l'algorithme le *cutting plane algorithm*, parce que chaque inégalité supplémentaire introduit un plan dans l'espace $R^{|E|}$. Le nombre des inégalités est augmenté de proche en proche, mais il peut arriver que la solution optimale à un moment donné contienne des composantes non entières, par exemple $0 < x_a < 1$. On regarde alors les deux solutions obtenues en posant $x_a = 0$ et $x_a = 1$. Ces deux

solutions sont présentés au *cutting plane algorithm*, afin de trouver d'autres inégalités violées. Le fait que une solution non entière engendre deux autres solutions a donné le nom de *branch and cut* à l'ensemble de ces manipulations. Un point intéressant est que le problème de trouver une inégalité violée peut être résolu en temps polynomial [GLS88]. La difficulté consiste comme exposé ci-dessus à trouver toutes les inégalités qui définissent le polyèdre de coupure $P_C(G)$ et dans le cas de verres de spin il en existe un nombre exponentiel.

– Annexe B –
Traitement des erreurs

Résumé de l'erreur systématique Δ_s

Les heuristiques ne garantissent pas de trouver toujours la solution optimale. Ceci est atteint seulement en utilisant un algorithme exact, mais les algorithmes exacts sont trop lents. Il est possible que la solution trouvée par une heuristique soit une solution quasi-optimale, c'est-à-dire un état excité et non pas l'état fondamental. Par conséquent une heuristique ne donne qu'une estimation. Cette estimation de l'énergie des états fondamentaux est entachée d'une erreur systématique Δ_s , qui n'est pas *a priori* connue. Nous expliquons ici comment on peut évaluer cette erreur systématique Δ_s , d'abord pour un graphe donné.

Erreur systématique pour une instance La probabilité de trouver la solution optimale dépend de la qualité de l'algorithme utilisé et de l'instance considérée. Pour une discussion de la qualité de différentes heuristiques voir la section III.5. Supposons pour la suite que l'énergie du fondamental est e_0 . Nous avons vu dans le paragraphe III.4 qu'en appliquant l'heuristique plusieurs fois sur une instance donnée, une certaine distribution en énergie $P(e)$ est engendrée. La plus basse énergie trouvée par la heuristique est désignée e_b . Nous supposons que le nombre des essais est suffisamment grand, ce que nous permet à identifier $e_b = e_0$. Nous avons vu dans le paragraphe III.5 comment on peut quantifier le gain obtenu en effectuant plusieurs, disons k démarrages et en ne retenant que la meilleure solution. La distribution originale $P(e)$ est remplacée par une distribution décalée

$$P_k(e) = [1 - (1 - P(e - 1))^k] - [1 - (1 - P(e))^k]. \quad (\text{IV.B-1})$$

Si on optimise alors une instance k fois, l'estimation obtenue sera la moyenne de la distribution décalée :

$$\overline{e_k} = \int e P_k(e) \, de. \quad (\text{IV.B-2})$$

L'erreur systématique après k essais est alors :

$$\Delta_s = \overline{e_k} - e_b = \overline{e_k} - e_0. \quad (\text{IV.B-3})$$

La deuxième égalité est obtenue en supposant que l'heuristique a été appliquée un nombre de fois suffisamment grand afin que $e_b = e_0$.

Pour obtenir une certaine précision il est indispensable de pouvoir borner l'erreur systématique. Dans le cas présent il est possible de la minimiser autant qu'on veut en variant le nombre k des démarrages, toujours supposé que $e_b = e_0$. Ceci vient du fait que $P_k(e) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \delta(e_0)$.

Comme l'estimation e_k est toujours supérieure ou égale à l'énergie du fondamental ($e_k \geq e_0$), l'erreur systématique doit être soustraite. Au cours des simulations on ne calcule pas e_b , mais on n'obtient que l'estimation e_k obtenu après k démarrages. L'estimation de l'énergie fondamentale pour un graphe donné vaut :

$$e_0 = e_k - \Delta_s. \quad (\text{IV.B-4})$$

Ceci est la formule de l'énergie fondamentale, corrigée de l'erreur systématique, utilisable pour une instance. Il faut souligner que l'estimation de l'erreur systématique d'une part et de l'énergie fondamentale d'autre part sont deux estimations indépendantes.

Erreur systématique pour plusieurs instances La relation pour plusieurs instances s'obtient en moyennant sur les différentes instances.

$$\langle e_0 \rangle = \langle e_k \rangle - \langle \Delta_s \rangle \quad \text{avec} \quad \langle \Delta_s \rangle = \langle (\overline{e_k} - e_b) \rangle \quad (\text{IV.B-5})$$

En pratique les deux estimations doivent être effectuées indépendamment sur deux ensembles de graphes. La taille de ces ensembles doit être choisie appropriément afin que l'erreur statistique reste plus petite que l'erreur systématique.

Comment borner l'erreur systématique en pratique ? Comment pouvons-nous borner l'erreur systématique ? Supposons que les graphes ont été optimisés un très grand nombre ($l = 1000$) de fois. Nous espérons ainsi assurer que la solution optimale a été trouvée $e_b = e_0$. Nous obtenons donc une distribution $P(e)$ avec une précision suffisante. L'erreur systématique est donnée par l'équation IV.B-3. Nous voulons obtenir l'énergie fondamentale avec une certaine erreur systématique (afin de confirmer ou infirmer la conjecture de Banavar, Sherrington et Sourlas, cf. IV.4), disons inférieure à $\Sigma < 10^{-2}$. À partir de la distribution $P(e)$ nous calculons $P_k(e)$ pour une séquence des valeurs de k et l'erreur systématique associée $\Delta_s(k)$. Nous choisissons le k le plus petit qui garantit une erreur systématique inférieure à la borne Σ . La supposition que e_0 est atteint est d'autant plus fiable que $\overline{e_k}$ est proche de e_b pour des valeurs petites de k . C'est le cas si l'algorithme heuristique utilisé est suffisamment efficace.

L'énergie fondamentale corrigée de l'erreur systématique et l'erreur statistique Naïvement on pourrait écrire pour l'énergie fondamentale corrigée de l'erreur systématique :

$$\langle e_0 \rangle = \langle e_k \rangle - \langle (\overline{e_k} - e_b) \rangle. \quad (\text{IV.B-6})$$

Mais dans ce cas les données ne sont plus indépendantes et l'estimation de l'erreur statistique n'est pas facile. Afin d'obtenir une estimation indépendante nous avons adopté l'approche suivante. Nous avons effectué les calculs sur deux différents ensembles des graphes, $G(A)$ contenant $N_A = 1000$ graphes et $G(B)$ contenant $N_B = 100$ graphes. L'ensemble $G(A)$ sert à estimer l'énergie fondamentale et le deuxième ensemble $G(B)$ sert à estimer l'erreur systématique. Comment avons-nous estimé l'énergie fondamentale ? Les graphes de l'ensemble $G(A)$ ont été optimisés l fois afin d'obtenir une estimation e_l (le meilleur parmi l essais). Le nombre l est obtenu en exigeant que l'erreur systématique soit bornée par $\langle \Delta_s \rangle_{G(B)} < \Sigma < 10^{-2}$, comme discuté ci-dessus.

Il intervient aussi une erreur statistique, qui se somme à l'erreur systématique $\Sigma = \Delta_s + \sigma$. Nous exigeons que cette erreur soit plus petite que l'erreur systématique. Il ne reste que l'erreur statistique, que nous avons cherché à minimiser en choisissant un nombre de graphes $N_A = 1000$ et $N_B = 100$ assez important pour les deux ensembles $G(A)$ et $G(B)$. La formule finale pour l'énergie fondamentale est donnée par

$$\langle e_0 \rangle = \langle e_k \rangle_{G(A)} \pm \frac{\sigma_{e_k}}{\sqrt{N_A}} - \langle \overline{e_k} - e_0 \rangle_{G(B)} \pm \frac{\sigma_{\Delta_s}}{\sqrt{N_B}}, \quad (\text{IV.B-7})$$

Les erreurs statistiques σ_{e_k} et σ_{Δ_s} sont associées aux deux simulations indépendantes et valent $\sigma_X = \sqrt{\langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2}$. L'erreur statistique se peut écrire comme

$$\sigma^2 = \frac{\sigma_{e_k}^2}{N_A} + \frac{\sigma_{\Delta_s}^2}{N_B}, \quad (\text{IV.B-8})$$

N_A et N_B étant la taille des deux ensembles $G(A)$ et $G(B)$. Ceci garantit que nous avons une estimation fiable de l'erreur statistique.

Validité de l'estimation de l'erreur systématique Afin que cette idée de l'estimation de l'erreur systématique puisse être appliqué il est indispensable que la heuristique possède pour toutes les tailles de graphe étudié une probabilité non négligeable de trouver l'optimum : $P(e_0) \neq 0$. Ceci est nécessaire car pour un graphe donné $\Delta_s = \overline{e_k} - e_0 \sim (1 - P(e_0))^k$. Si la probabilité $P(e_0)$ est trop faible le nombre des démarrages k nécessaire pour obtenir une erreur systématique inférieure à une borne donnée va croître très vite.

L'erreur de l'analyse des effets de taille finie

Dans la section IV.4 nous nous intéressons à l'énergie fondamentale dans la limite de grande taille. Afin d'obtenir la valeur limite, nous avons utilisé une extrapolation basées sur l'analyse des effets de taille finie. Cette analyse suggère que l'énergie fondamentale admet un développement de la forme

$$e(N) = e_0 + \frac{1}{N}e_1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^2}\right). \quad (\text{IV.B-9})$$

Nous avons distingué les différentes possibilités pour les ajustages à l'aide de l'analyse en χ^2 . Le ajustage linéaire se révèle comme très fiable. Pour des raisons pratiques nous discutons les résultats en termes de χ_r^2 , le χ^2 réduit. Afin de confirmer ou infirmer la conjecture il est quand même nécessaire d'avoir une information sur l'erreur statistique de la valeur de l'énergie extrapolée à $N \rightarrow \infty$. Le ajustage utilisé IV.B-9 est un ajustage à deux paramètres : e_0 et e_1 . Supposons que le ajustage soit optimal pour des valeurs e_0^* et e_1^* , donnant $\chi_r^2(e_0^*, e_1^*) \approx 1$. Afin de déduire l'erreur nous fixons un paramètre, disons e_0 à une valeur $\tilde{e}_0$ et permettons au paramètre restant e_1 de varier afin d'optimiser le χ^2 . Le χ^2 devient ainsi une fonction de $\tilde{e}_0$. La valeur de $\tilde{e}_0$ est alors modifiée jusqu'à ce que le χ^2 dévie de ± 1 de sa valeur optimale $\chi^2(e_0^*, e_1^*)$. La valeur $\tilde{e}_0^+$ correspond à $\chi^2(e_0^*, e_1^*) - 1$ et $\tilde{e}_0^-$ à $\chi^2(e_0^*, e_1^*) + 1$. De cette manière on obtient une valeur de l'énergie $e_0 \in [\tilde{e}_0^-, \tilde{e}_0^+]$ avec un niveau de confiance de 95%.

$$e_0 = e_0^* \pm \delta \quad \text{avec} \quad \delta = \max\{e_0^* - \tilde{e}_0^-, \tilde{e}_0^+ - e_0^*\}. \quad (\text{IV.B-10})$$

C'est ce δ qui donne lieu aux barres d'erreur représentées dans la figure IV-3.

Principales notations

$\equiv$	égal par définition à	$\mathcal{O}(N^k)$	indication de la complexité : le temps d'exécution de l'algorithme croît avec la k ème puissance
$G(E, V)$	graphe avec des sommets V et des arêtes E	N	taille du système
V_1, V_2	sous-ensemble des sommets	$\sum_{\langle i, j \rangle}$	somme sur les voisins i et j les plus proches
v_i	sommet	$T \rightarrow T_c^-$	la température T approche la température critique T_c d'en-sous
$\sim$	le comportement dominant	$T \rightarrow T_c^+$	la température T approche la température critique T_c d'en-sus
$\mathcal{C}_0$	coût de la solution optimale ^(†)	$[(\dots)]_{t_0}$	représente une moyenne sur tous les temps initiaux t_0
$P(\mathcal{C})$	distribution des coûts ou la probabilité d'un coût $\mathcal{C}$	c	coût spécifique $c = \mathcal{C}/N$
$\{s_i\}_{i \in \{1, \dots, N\}}$	collection des spins labellés par l'indice i parcourant tous les valeurs de 1 jusqu'à N , configuration de spins	$P_J(q_{\alpha\beta})$	la distribution du paramètre d'ordre pour une réalisation des couplages J_{ij}
$\sum_{\{s_i\}_{i \in \{1, \dots, N\}}}$	somme parcourant tous les configurations	$P(q_{\alpha\beta})$	la distribution du paramètre d'ordre moyennée sur le désordre
T	température ^(‡)	σ	la déviation standard $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$
β	l'invers de la température $\beta = 1/T$	E	l'énergie
s_i	spin au site i	e	l'énergie spécifique $e = E/N$, erreur statistique ou la base des logarithmes népériens.
J_{ij}	couplage entre des spins à i et j		
$\mathcal{C}$	coût d'une partition ou coupure		

^(†) Cette solution est en générale inaccessible.

^(‡) À ne pas confondre avec le temps t ou T .

F	énergie libre
f	énergie libre relative F/N
h	champ magnétique
K	couplage quadrupolaire
e^L, e^{LA}, e^R	les vecteurs propres
$\lambda^L, \lambda^{LA}, \lambda^R$	les valeurs propres
Δ	différence d'énergies ou potentiel chimique
$q_{\mathbf{EA}}$	paramètre d'ordre d'Edwards et Anderson
q_0	paramètre d'ordre en RS
$q_0, \dots, q_k$	paramètres d'ordre en RSB à k pas
$q_{\alpha\beta}$	paramètres d'ordre
$q(x)$	fonction de paramètre d'ordre de Parisi en SRSB
$\mathcal{H}$	matrice Hesseienne
H	Hamiltonien
$\overline{\mathbf{X}}$	Moyenne thermique habituelle de la quantité $\mathbf{X}$
$\langle \mathbf{X} \rangle$	Moyenne sur le désordre de la quantité $\mathbf{X}$

Glossaires

SK	modèle de D. Sherrington et S. Kirkpatrick
EA	modèle de S. F. Edwards et P. W. Anderson
AT	J. R. L. de Almeida et D. J. Thouless
RKKY	M. Ruderman, C. Kittel, T. Kasuya et K. Yosida
RS	symétrie de répliques
kRSB	brisure de symétrie de répliques à k pas
∞RSB	brisure de symétrie de répliques à une infinité de pas
SRSB	brisure spontanée de symétrie de répliques
PdOC	problème d'optimisation combinatoire
PPG/BPG	problème de la bipartition de graphe
VS/SG	verres de spins ou phase verres de spins
PM	phase paramagnétique
FM	phase ferromagnétique

Bibliographie générale

- [AdM84] J.-C. Anglès d'Auriac and R. Maynard. On the random antiphase state in the $\pm j$ spin glass model in two dimensions. *Solid State Communications*, 49 :785 – 790, 1984.
- [AdS97] J.-C. Anglès d'Auriac and N. Sourlas. The 3-d Random Field Ising Model at zero temperature. *Europhysics Letters*, 39(5) :473 – 478, 1997.
- [AM76] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Saunders College, Cornell University, Philadelphia, 1976.
- [AMO93] R. K. Ahuja, T. Magnati, and J. Orlin. *Network Flows*. Prentice Hall, London, GB, 1993.
- [AW89] M. Aizenman and J. Wehr. *Phys. Rev. Lett.*, 62 :2503, 1989.
- [Azu67] X. Azuma. Weighted sums of certain dependent random variables. *Tohoku Math. Journal*, 19 :357–367, 1967.
- [Bar82] F. Barahona. *J. Phys. A*, 15 :3241, 1982.
- [BB86] P. Baldi and E. B. Baum. Bounds on the Size of Ultrametric Structures. *Phys. Rev. Lett.*, 56(15) :1598 – 1600, 1986.
- [BB87] M. Berger and S. Bokhari. A partitioning strategy for non-uniform problems on multi-processors. *IEEE Transactions on Computers*, C-36(5) :570, 1987.
- [BC88] F. Barahona and A. Casari. On the magnetisation of the ground states in two dimensional Ising spin glasses. *Computer Physics Communications*, 49 :417–421, 1988.
- [BCLS87] T. Bui, S. Chaudhuri, F.T. Leighton, and M. Sipser. Graph bisection algorithms with good average case behavior. *Combinatorica*, 7 :3 :171, 1987.
- [Ber91] A. N Berker. Absence of temperature-driven first-order phase transitions in systems with random bonds. *J. Appl. Phys.*, 70(10) :5941 – 5945, November 1991.
- [Ber93] A. N. Berker. Critical behavior induced by quenched disorder. *Physica A*, 194 :72 – 76, 1993.
- [BG94] J. W. Berry and M. K. Goldberg. Path optimization for graph partitioning problems. preprint, 1994.
- [BH89] A. N. Berker and K. Hui. *Phys. Rev. E*, 63 :2433, 1989.
- [BHH59] J. Beardwood, J. H. Halton, and J. M. Hammersley. The shortest path through many points. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 55 :299–327, 1959.
- [BHJL89] T. Bui, C. Heigham, C. Jones, and T. Leighton. Improving the performance of the Kernighan-Lin and simulated annealing graph bisection algorithms. In *26th ACM/IEEE Design Automation Conference*, page 775, 1989.

-
- [Bin86] K. Binder. Introduction : Theory and “technical” aspects of Monte Carlo simulations. In K. Binder, editor, *Monte Carlo Method in Statistical Physics*, volume 7 of *Topics in Current Physics*. Springer-Verlag, Berlin, New York, 2nd edition, 1986.
- [Bin87] K. Binder. A simple introduction to Monte Carlo simulation and some specialized topics. In K. Binder, editor, *Applications of the Monte Carlo Method in Statistical Physics*, volume 36 of *Topics in Current Physics*. Springer-Verlag, Berlin, New York, 2nd edition, 1987.
- [BJGR86] F. Barahona, M. Jünger, M. Grötschel, and G. Reinelt. An application of combinatorial optimization to statistical physics and circuit layout design. *preprint*, 50 :417–421, 1986.
- [Blu66] M. Blume. Theory of the first-order magnetic phase change in UO_2 . *Phys. Rev.*, 141(2) :517 – 524, 1966.
- [BM78] A. J. Bray and M. A. Moore. Replica-symmetry breaking in spin-glass theories. *Phys. Rev. Lett.*, 41(15) :1068–1072, 1978.
- [BM80] A. J. Bray and M. A. Moore. Some observations on the mean-field theory of spin glasses. *Journal of Physics C : Condensed Matter*, 13 :419–434, 1980.
- [BMRP82] F. Barahona, R. Maynard, R. Rammal, and Uhry J. P. *J. Phys. A*, 15 :673, 1982.
- [BMRU80] I. Bieche, R. Maynard, R. Rammal, and J. P. Uhry. *J. Phys. A*, 13 :2553, 1980.
- [Boe96] K. D. Boese. *Models for Iterative Global Optimization*. PhD thesis, University of California, Los Angeles, USA, 1996.
- [Bro59] R. Brout. *Phys. Rev.*, 115 :824, 1959.
- [BS76a] K. Binder and K. Schröder. *Phys. Rev. B*, 14 :2142, 1976.
- [BS76b] K. Binder and K. Schröder. *Solid State Commun.*, 18 :1361, 1976.
- [BS94] S. Barnard and H. Simon. A fast multilevel implementation of recursive spectral bisection for partitioning unstructured problems. *Concurrency : Practice and Experience*, 6(2) :101–117, April 1994.
- [BSS87] J. R. Banavar, D. Sherrington, and N. Sourlas. Graph bipartitioning and statistical mechanics. *J. Phys. A*, 20 :L1 – L8, 1987.
- [Bui83] T. Bui. On bisecting random graphs. Master’s thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1983. Cambridge, MA.
- [BY86a] R. N. Bhatt and A. P. Young. *J. Magn. Matter*, 54–57 :191, 1986.
- [BY86b] K. Binder and A. P. Young. Spin Glasses : Experimental Facts, theoretical concepts and open questions. *Reviews of Modern Physics*, 58 :801, 1986.
- [Cap66] H. W. Capel. On the possibility of first-order phase transitions in Ising systems of triplet ions with zero-field splitting. *Physica*, 32 :966 – 988, 1966.
- [Chv83] V. Chvátal. *Linear Programming*. Freeman, San Francisco, USA, First edition, 1983.
- [CM72] V. Cannella and J. A. Mydosh. *Phys. Rev. B*, 6 :4220, 1972.
- [CM74] Cannella and Mydosh. In *Proceedings*, volume 2 of *International Conference on Magnetism*, page 74, Nauka, Moscow, 1974.
- [CMB71] V. Cannella, J. A. Mydosh, and J. Budnick. *J. Appl. Phys.*, 42 :1689, 1971.
- [CMP96] A. Cacciuto, E. Marinari, and G. Parisi. A Numerical Study of Ultrametricity in Finite Dimensional Spin Glasses. *cond-mat/9608161*, 1996.
-

- [Coo71] S. A. Cook. In *Proceedings of the 3rd Annual ACM Symposium on Theory of Computing*, ACM Symposium on Theory of Computing, page 151, New York, 1971. Association for Computing Machinery.
- [CPPS90] S. Caracciolo, G. Parisi, S. Patarnello, and N. Sourlas. 3d Ising spin-glasses in a magnetic field and mean-field theory. *Europhysics Letters*, 11(8) :783 – 789, 1990.
- [CS87] A. Cresanti and H. Sompolinsky. Dynamics of Spin Systems with Randomly Asymmetric Bonds : Langevin Dynamics and a Spherical Model. *Phys. Rev. A*, 36 :4922–4939, 1987.
- [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, June 1978.
- [dCYS94] Francisco A. da Costa, Carlos S. O. Yokoi, and Silvio R. A. Salinas. First-order transition in a spin-glass model. *J. Phys. A*, 27 :3365 – 3372, 1994.
- [Der80] B. Derrida. Random-Energy Model : An Exactly Solvable Model of Disordered Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :79, March 1980.
- [Der81] B. Derrida. Random-Energy Model : An Exactly Solvable Model of Disordered Systems. *Phys. Rev. B*, 240 :2613–2626, March 1981.
- [Der91] U. Derigs. *Programming in networks and graphs*, volume 300 of *Lecture Notes in Economics and Mathematical Systems*. Springer Verlag, Berlin Heidelberg, FRG, First edition, 1991.
- [DG89] C. De Dominicis and Y. Y. Goldschmidt. Replica symmetry breaking in finite connectivity systems : a large connectivity expansion at finite and zero temperature. *J. Phys. A*, 22 :L775–L781, 1989.
- [Die95] M. Diehl. Determination of exact ground states of Ising spin glasses with a branch-cut algorithm. Diplomarbeit, Universität Köln, Köln, FRG, 1995.
- [DK84] A. E. Dunlop and B. W. Kernighan. A placement procedure for polycell VLSI circuits. In *IEEE Proceedings CAD, Santa Clara*, page 51, 1984.
- [DK85] A.E. Dunlop and B.W. Kernighan. A procedure for placement of standard-cell VLSI circuits. *IEEE Transactions on Computer-Aided Design*, CAD-4, No. 1 :92, 1985.
- [DKT91] C. De Dominicis, I. Kondor, and T. Temesvari. Short-range corrections to the order parameter of the Ising spin glass above the upper critical dimension. *J. Phys. A*, 24 :L301–L308, 1991.
- [DKT94] C. De Dominicis, I. Kondor, and T. Temesvari. *J. Phys. I*, 4 :128, 1994.
- [dSDJ⁺95] C. de Simone, M. Diehl, M. Jünger, P. Mutzel, G. Reinelt, and G. Rinaldi. *J. Stat. Phys.*, 80 :487, 1995.
- [EA75] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F : Metal Physics*, 5 :965 – 974, June 1975.
- [Edm67a] J. Edmonds. Optimum branchings. *J. Res. Nat. Bur. Standards, Sect. B*, 71 :233–240, 1967.
- [Edm67b] J. Edmonds. Systems of distinct representatives and linear algebra. *J. Res. Nat. Bur. Standards, Sect. B*, 71 :241–247, 1967.
- [Edm72] J. Edmonds. Optimum branchings. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 19 :248–264, 1972.
- [Edw70] S. F. Edwards. In R. W. Douglas and B. Ellis, editors, *Proceedings of the Third International Conference on Amorphous Materials*, page 279, New York, 1970. Wiley.

- [FA86] Y. Fu and P.W. Anderson. Application of statistical mechanics to NP-complete problems in combinatorial optimization. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 19 :1605, 1986.
- [FB95a] A. Falicov and A. N Berker. Correlated random-chemical-potential model for the phase transitions of helium mixtures in porous media. *Phys. Rev. Lett.*, 74(3) :426 – 429, January 1995.
- [FB95b] A. Falicov and A. N Berker. Tricritical and critical-endpoint phenomena under random bonds. preprint, 1995.
- [FF62] L. R. Ford and D. R. Fulkerson. *Flows in Networks*. Princeton University Press, Princeton, New Jersey, 1962.
- [FH88] D.S. Fisher and D.A. Huse. *Phys. Rev. B*, 38 :386, 1988.
- [FH91] K. H. Fischer and J. A. Hertz. *Spin Glasses*. Cambridge Studies in Magnetism : 1, Edts. David Edwards and David Melville. Cambridge University Press, Cambridge, GB, First edition, 1991.
- [FM82] C. M. Fiduccia and R. M. Mattheyses. A linear-time heuristic for improving network partitions. In *Proceedings of the 19th Design Automation Workshop*, page 175, 1982.
- [GA93] Conference on genetic algorithms. In *Proceedings of the n-th International Conference on Genetic Algorithms*. Lawrence Erlbaum Associates und Morgan Kaufmann Publishers, 1985 - 1993.
- [GdD89] Y. Goldschmidt and C. de Dominicis. Replica symmetry breaking in the spin glass model on lattices with finite connectivity : application to graph partitioning. Saclay-preprint SPhT/89-102, Commissariat à l'Energie Atomique, CEN de Saclay, Service de Physique Théorique, Service de Physique Théorique, Orme de Merisiers, F - 91191 Gif sur Yvette, September 1989. submitted to Physical Review B.
- [GJ79] M. R. Garey and D. S. Johnson. *Computers and Intractability : A Guide to the Theory of NP-Completeness*. Freeman, New York, 1979.
- [GJR87] M. Grötschel, M. Jünger, and G. Reinelt. Calculating Exact Ground States of Spin Glasses : A Polyhedral Approach. In L. van Hemmen and I. Morgenstern, editors, *Heidelberg Colloquium on Glassy dynamics and Optimization*. Springer Verlag, Heidelberg, FRG, 1987.
- [GL97] F. Glover and M. Laguna. *Tabu Search*. Kluwer Academic Publishers, University of Colorado, Boulder, USA, First edition, 1997. cf. Journal of Heuristics, which devotes itself to developments in local search and related topics.
- [Gla63] R.J. Glauber. Time-dependent Statistics of the Ising Model. *Journal of Mathematical Physics*, 4 :294–307, 1963.
- [GLS88] M. Grötschel, L. Lovász, and A. Schrijver. *Geometric algorithms and combinatorial optimization*. Springer Verlag, Berlin-Heidelberg, FRG, 1988.
- [GM84] D. J. Gross and M. Mézard. The simplest spin glass. *Nuclear Physics*, B240(FS12) :431–452, 1984.
- [Gol89] D. E. Goldberg. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison Wesley, Reading, MA, USA, First edition, 1989.
- [Gri64] R. B. Griffiths. A proof that the free energy of a spin system is extensive. *Journal of Mathematical Physics*, 5(9) :1215 – 1222, 1964.

- [Gri66] R. B. Griffiths. Spontaneous magnetization in idealized ferromagnets. *Phys. Rev.*, 152(1) :240 – 246, 1966.
- [Gri67] R. B. Griffiths. First-order phase transitions in spin-one Ising systems. *Physica*, 33 :689 – 690, 1967.
- [Gro86] L. K. Grover. A new simulated annealing algorithm for standard cell placement. In *IEEE Proceedings in Computer Aided Design*, page 378, 1986.
- [GS77] S. K. Ghatak and D. Sherrington. Crystal field effects in a general S Ising spin glass. *J. Phys. C : Solid State Physics*, 10 :3149 – 3156, 1977.
- [GS86] J. M. Greene and K. J. Supowit. Simulated annealing without rejection moves. In *IEEE Transactions on Computer-Aided Design, CAD-5*, page 221, 1986.
- [Har95] A. Hartmann. Fast Approximation of Spin Glass Groundstates using Cluster-Exact Calculations. *Preprint Institut für Theoretische Physik, Universität Heidelberg*, 1995.
- [HB89] K. Hui and A. N. Berker. Random-Field Mechanism in Random-Bond Multicritical Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62(21) :2507 – 2510, 1989.
- [Her65] C. Herring. *Direct Exchange between Well Separated Atoms*, volume 2 of *Magnetism*. Academic Press, Edts. G.T.Rado and H. Suh, New York, USA, First edition, 1965.
- [HHS95] E. Henriques, V. Henriques, and S. Salinas. Monte Carlo mean-field method for spin systems. *Physical Review B*, 51(13) :8621 –8623, April 1995.
- [HK79] R. Honmura and T. Kaneyoshi. Contribution to the new type of effective-field theory of the Ising model. *Journal of Physics C : Condensed Matter*, 12 :3979 – 3992, 1979.
- [HKP91] John Hertz, Anders Krogh, and Richard G. Palmer. *Introduction to the Theory of Neural Computation*. Allan M. Wylde, Santa Fe, 1991.
- [HL95a] B. Hendrickson and R. Leland. The Chaco user's guide, Version 2.0. Technical Report SAND94-2692, Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM, June 1995.
- [HL95b] B. Hendrickson and R. Leland. A multilevel algorithm for partitioning graphs. In *Proc. Supercomputing '95*. ACM, November 1995.
- [HL95c] Bruce Hendrickson and Robert Leland. An improved spectral graph partitioning algorithm for mapping parallel computations. *SIAM J. Sci. Comput.*, 16(2) :452–469, 1995.
- [HN95] K. Hukushima and K. Nemoto. Exchange Monte Carlo Method and Application to Spin Glass Simulations. *cond-mat/9512035*, 1995.
- [Hol75] J. H. Holland. *Adaptation in Natural and Artificial Systems*. University of Michigan Press, Ann Arbor, Michigan, USA, First edition, 1975.
- [Hor92a] H. Horner. Dynamics of learning and generalization in a binary perceptron model. *Zeitschrift für Physik B – Condensed Matter*, 87 :371–376, 1992.
- [Hor92b] H. Horner. Dynamics of learning for the binary perceptron problem. *Zeitschrift für Physik B – Condensed Matter*, 86 :291–308, 1992.
- [IM75] Y. Imry and S. K. Ma. Random-field instability of the ordered state of continuous symmetry. *Phys. Rev. Lett.*, 35(21) :1399 – 1401, 1975.
- [INR97] Université de Versailles INRIA, PRiSM. Second International Conference on Metaheuristics. In *Book of Abstracts*, Sophia-Antipolis, France, 1997.
- [Isi25] E. Ising. *Z. Phys.*, 31 :253, 1925.

- [JAMS89] D.S. Johnson, C.R. Aragon, L.A. McGeoch, and C. Schevon. Optimization by simulated annealing : An experimental evaluation, part I (graph partitioning). *Operations Research*, 37 :865–892, 1989.
- [Joh96] F.M. Johannes. Partitioning of VLSI circuits and systems. In *Proceedings of the 33rd Design Automation Conference*. Las Vegas, June 1996.
- [Kac70] M. Kac. In Nordita, editor, *Trondheim Theoretical Physics Seminar*, number 286 in Nordita Publ., Copenhagen, Danmark, 1970. Nordita, Nordita.
- [Kas56] T. Kasuya. *Prog. Theor. Phys.*, 16 :45, 1956.
- [KB63] M. W. Klein and R. Brout. *Phys. Rev.*, 132 :2412, 1963.
- [Ker69] B.W. Kernighan. *Some Graph Partitioning Problems Related to Program Segmentation*. PhD thesis, Princeton University, Princeton, NJ, 1969.
- [KGV83] S. Kirkpatrick, C. Gelatt, and M. Vecchi. Optimization by Simulated Annealing. *Science*, 220 :671–680, 1983.
- [Kin83] K. Kinzel, W. Binder. Optimization by simulated annealing : Quantitative studies. *Phys. Rev. Lett.*, 50 :1509, 1983.
- [Kin86] W. Kinzel. *Phys. Rev. B*, 33 :5086, 1986.
- [Kir84] S. Kirkpatrick. Optimization by simulated annealing : Quantitative studies. *Journal of Statistical Physics*, 34 :975–986, 1984.
- [Kit88] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley, 1988.
- [KK94] T. Klotz and S. Kobe. *J. Phys. A*, 27 :L95, 1994.
- [KL70] B. Kernighan and S. Lin. An efficient heuristic procedure for partitioning graphs. *Bell System Technical Journal*, 49 :291 – 307, 1970.
- [KMM⁺93] P. Keblinski, W.-J. Ma, A. Maritan, J. Koplik, and J. R. Banavar. Molecular dynamics of phase separation in narrow channels. *Physical Review E*, 47(4) :2265 – 2268, 1993.
- [KR94] W. Kerler and P. Rehberg. Simulated-tempering approach to spin-glass simulations. *cond-mat/9402049*, 1994.
- [Kra89] W. Krauth. *Physique Statistique des Réseaux de Neurones et de l'Optimisation Combinatoire*. PhD thesis, Université Paris-Sud, Paris, France, 1989.
- [Kra94] M. Krauth. A rapid dynamical monte carlo algorithm for glassy systems. *J. Phys. A : Math Gen*, 27 :L715, 1994.
- [KS87] I. Kanter and H. Sompolinsky. Mean-field theory of spin-glasses with finite coordination number. *Phys. Rev. Lett.*, 58(2) :164 – 167, January 1987.
- [KS94] S. Kirkpatrick and B. Selman. Critical behaviour in the satisfiability of random boolean expressions. *Science*, 264 :1297 – 1301, 1994.
- [KT73] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. *J. Phys. C*, 6 :1181, 1973.
- [LdA82] E. J. S. Lage and J. R. L. de Almeida. Stability conditions of generalised Ising spin glass models. *J. Phys. C : Solid State Physics*, 15 :L1187 – L1193, 1982.
- [Len20] W. Lenz. *Z. Phys.*, 21 :613, 1920.
- [Len90] T. Lengauer. Combinatorial algorithms for integrated circuit layout. *Wiley-Teubner Series in Computer Science*, 1990.

- [LH94] R. Leland and B. Hendrickson. An empirical study of static load balancing algorithms. In *Scalable High Performance Computing Conference*, pages 682–685. IEEE Computer Society Press, 1994.
- [Lin70] T. F. Lin. *J. Math Phys*, 11 :1584, 1970.
- [LK73] S. Lin and B. Kernighan. An effective heuristic algorithm for the traveling salesman problem. *Operations Research*, 21 :498–516, 1973.
- [LL69] L. D. Landau and E. M. Lifschitz. *Statistical Physics*. Theoretical Physics. Pergamon Press, London, GB, Second edition, 1969.
- [LLRS84] E. L. Lawler, J. K. Lenstra, A. H. G. Rinnooy Kan, and D. B. Shmoys, editors. *The Traveling Salesman Problem*. John Wiley and Sons, 1984.
- [LR93] K. Lang and S. Rao. Finding near-optimal cuts : an empirical evaluation. In *Proceedings of the Fourth Annual ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, 1993.
- [LS84] I. D. Lawrie and S. Sarbach. Theory of Tricritical Points. In C. Domb and J. L. Lebowitz, editors, *Phase Transitions and Critical Phenomena, Vol.9*, Phase Transitions and Critical Phenomena, chapter 1, pages 1 – 161. Academic Press, London, 1984.
- [Luc92] V.B.F. Lucks. Large-step local optimization for the graph-partitioning problem. Master’s thesis, Cornell University, School of OR& IE, 1992. Ithaca, NY.
- [LW66] E.L. Lawler and D.E. Wood. Branch-and-bound methods : A survey. *Operations Research*, 14, No. 4 :699, 1966.
- [Mar60] W. Marshall. *Phys. Rev.*, 118 :1519, 1960.
- [MCBB94] A. Maritan, M. Cieplak, T. Bellini, and J. R. Banavar. Nematic-Isotropic Transition in Porous Media. *Physical Review Letters*, 72(26) :4113 – 4116, June 1994.
- [MCS⁺92] A. Maritan, M. Cieplak, M. R. Swift, F. Tooigo, and J. R. Banavar. Random-Anisotropy Blume-Emery-Griffiths Model. *Phys. Rev. Lett.*, 69(2) :221 – 224, July 1992.
- [MG95] K. Moon and S. M. Girvin. Critical behavior of superfluid ⁴he in aerogel. *Physical Review Letters*, 75(7) :1328 – 1331, August 1995.
- [MGSK88] H. Mühlenbein, M. Georges-Schleuter, and O. Kramer. Evolution algorithms in combinatorial optimization. *Parallel Computing*, 7 :65, 1988.
- [Mid95] A. A. Middleton. *Phys. Rev. E*, 52 :R3337, 1995.
- [MO96] O. C. Martin and S. W. Otto. Combining simulated annealing with local search heuristics. *Ann. Operations Res.*, 63 :57–75, 1996.
- [MP86] M. Mézard and G. Parisi. Mean-field equations for the matching and the travelling salesman problems. *Europhysics Letters*, 2 :913–918, 1986.
- [MP87] M. Mézard and G. Parisi. On the solution of the random link matching problems. *Journal de Physique*, 48 :1451 – 1459, 1987.
- [MP92] E. Marinari and G. Parisi. Simulated tempering : a new monte carlo scheme. *Europhys. Lett.*, 6(19) :451 – 458, 1992.
- [MP96] M. Mézard and G. Parisi. A tentative study of the glass transition. *J.Phys. A : Math. Gen.*, 29 :6515–6524, 1996. et les références citées.
- [MPRLR96] E. Marinari, G. Parisi, J. Ruiz-Lorenzo, and F. Ritort. Numerical Evidence for Spontaneously Broken Replica Symmetry in 3D Spin Glasses. *Physical Review Letters*, 76(5) :843 – 846, January 1996.

-
- [MPS⁺84] M. Mézard, G. Parisi, N. Sourlas, G. Toulouse, and M. Virasoro. Replica Symmetry Breaking and the Nature of the Spin Glass Phase. *J. Phys. A.*, 45 :843–854, 1984.
- [MPV85] M. Mézard, G. Parisi, and M.A. Virasoro. Random free energies in spin glasses. *Le Journal de Physique – Lettres*, 46 :L217 – L222, March 1985.
- [MPV87] M. Mezard, G. Parisi, and M. A. Virasoro, editors. *Spin Glass Theory and Beyond*. Number 9 in World Scientific Lecture Notes in Physics. World Scientific, Singapore, First edition, 1987.
- [MRR⁺53] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of State Calculations for Fast Computing Machines. *Journal of Chemical Physics*, 21 :1087 – 1092, 1953.
- [MS85] P. J. Mottishaw and D. Sherrington. Stability of a crystal-field split spin glass. *J. Phys. C : Solid State Physics*, 18 :5201 – 5213, 1985.
- [MSC⁺91] A. Maritan, M. R. Swift, M. Cieplak, M. H. W. Chan, M. W. Cole, and J. R. Banavar. Ordering and phase transitions in random-filed Ising systems. *Physical Review Letters*, 67(14) :1821 – 1824, September 1991.
- [MY82] Mackenzie and Young. Lack of Ergodicity in the Infinite-Range Ising Spin Glass. *Physical Review Letters*, 49(5) :301 – 304, 1982.
- [Myd87] J. A. Mydosh. Recent experiments on Spin Glasses : An Overview. In L. van Hemmen and I. Morgenstern, editors, *Heidelberg Colloquium on Glassy dynamics and Optimization*. Springer Verlag, Heidelberg, FRG, 1987.
- [NB91] Roland R. Netz and A. N Berker. Monte carlo mean-field theory and frustrated systems in two and three dimensions. *Physical Review Letters*, 66(3) :377 – 380, 1991.
- [NC59] De Nobel and Chantier. 1959.
- [NSS86] S. Nahar, S. Sahni, and E. Shragowitz. Simulated annealing and combinatorial optimization. In *Proceedings of the 23rd Design Automation Conference*, page 293, 1986.
- [Ogi85] A. T. Ogielski. Dynamics of three-dimensional Ising spin glasses in thermal equilibrium. *Physical Review B*, 32(11) :7384 – 7398, 1985.
- [Ogi86] A. T. Ogielski. *Physical Review Letters*, 57 :1251, 1986.
- [Orl97] E. Orlandini. Monte Carlo Study of Polymer Systems by Multiple Markov Chain Method. *CEA-DSM preprint*, 1997. to appear.
- [Pál96a] K. F. Pál. *Physica A*, 223 :283, 1996.
- [Pál96b] K. F. Pál. The ground state of the cubic spin glass with short-range interactions of Gaussian distribution. *Physica A*, 233 :60 – 66, 1996.
- [Par80a] G. Parisi. The order parameter for spin glasses : A function on the interval 0–1. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 13 :1101–1112, June 1980.
- [Par80b] G. Parisi. A sequence of approximated solutions to the SK-model for spin glasses. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 13 :L115–L121, 1980.
- [Par88] Giorgio Parisi. *Statistical Field Theory*. Frontiers in Physics, edt. David Pines. Addison-Wesley Publishing Company, San Diego, California, USA, First edition, 1988.
- [Per97] A. Percus. communication privée. 1997.
- [PP95] G. Parisi and M. Potters. On the number of Metastable States in Spin Glasses. *Euro-physics Letters*, 32 :13, 1995.
-

- [PS82] C. H. Papadimitriou and K. Steiglitz. *Combinatorial Optimization : Algorithms and Complexity*. Prentice Hall, INC., Englewood Cliffs, New Jersey, 1982.
- [RAAdD89] R. Rammal, J. C. Angles d'Auriac, and B. Doucot. On the degree of ultrametricity. *Le Journal de Physique – Lettres*, 46(20) :L945 – L952, October 1989.
- [RBY90] J. D. Reger, R. N. Bhatt, and A. P. Young. Monte Carlo Study of the Order-Parameter Distribution in the Four-Dimensional Ising Spin Glass. *Phys. Rev. Lett.*, 64(16) :1859 – 1862, 1990.
- [Ree93] C. R. Reeves. *Modern Heuristic Techniques for Combinatorial Problems*. Halsted Press, New York, 1993.
- [Rie95] F. Rieger. Monte Carlo simulations of Ising spin glasses and random field systems. In *Annual Reviews of Computational Physics II*, pages 295 – 341. World Scientific, Singapore, 1995.
- [RK67] M. Rudermann and Kittel. *Phys. Rev.*, 96 :99, 1967.
- [Ruj88] P. Rujan. Searching for optimal configurations by simulated tunneling. *Zeitschrift für Physik*, B 73 :391, 1988.
- [SCCB93] M. R. Swift, E. Cheng, M. W. Cole, and J. R. Banavar. Phase transitions in a model porous medium. *Physical Review B*, 48(5) :3124 – 3129, August 1993.
- [SK75] D. Sherrington and S. Kirkpatrick. Solvable model of a spin glass. *Phys. Rev. Lett.*, 35(26) :1792 – 1796, 1975.
- [SM91] K. Shahookar and P. Mazumder. VLSI cell placement techniques. *ACM Computing Surveys*, 23(2) :143–220, June 1991.
- [SM94] D. P. Snowman and S. R. McKay. The effects of frustrated biquadratic interactions on the phase diagrams and criticality of the Blume-Emery-Griffiths model. *J. Appl. Phys.*, 76(10) :7117, November 1994.
- [SM97] G. R. Schreiber and O. C. Martin. Cut size statistics of Graph Bisection Heuristics. *preprint*, 1997. submitted to *SIAM Journal on Optimization*.
- [SMCB94] M. R. Swift, A. Maritan, M. Cieplak, and J. R. Banavar. Phase diagrams of random-field Ising systems. *J. Phys. A : Math. Gen.*, 27 :1525 – 1532, 1994.
- [SNA97] M. Sellitto, M. Nicodemi, and J. J. Arenzon. The Blume-Emery-Griffiths Spin Glass Model. *Journal de Physique I*, 1997. submitted to.
- [Som83a] H. J. Sommer. *Z. Phys. A*, 16 :447, 1983.
- [Som83b] H. J. Sommer. *Z. Phys. B*, 50 :97, 1983.
- [Sou84] N. Sourlas. Three dimensional Ising spin-glasses and mean-field theory. *Le Journal de Physique – Lettres*, 45(20) :L969 – L975, October 1984.
- [SP76] T. Schneider and E. Pytte. Random-field instability of the ferromagnetic state. *Phys. Rev. B*, 15(3) :1519 – 1522, 1976.
- [Ste97] J. Michael Steele. *Probability Theory and Combinatorial Optimization*. CBMS-NSF regional conference series in applied mathematics ; 69. SIAM, Philadelphia, USA, First edition, 1997.
- [SZ82] H. Sompolinsky and A. Zippelius. Relaxational Dynamics of the Edwards-Anderson Model and the Mean-Field Theory of Spin Glasses. *Phys. Rev. B*, 25(11) :6860 – 6875, 1982.

- [SZ83] H. Sompolinsky and A. Zippelius. Fluctuations in Short-Range Spin-Glasses. *Phys. Rev. Lett.*, 17(50) :1297 – 1300, 1983.
- [SZ87] H. Sompolinsky and A. Zippelius. Dynamic theory of the Ising Spin-Glass phase. *Phys. Rev. Lett.*, 5(47) :359 – 362, 1987.
- [TAP77] D. J. Thouless, P. W. Anderson, and R. G. Palmer. Solution of 'Solvable Model of a Spin Glass'. *Phil. Mag.*, 35 :593–601, 1977.
- [TF80] F. Tanaka and Edwards S. F. Analytic Theory of the Ground State Properties of a Spin Glass : I. Ising Spin Glass. *J. Physics F : Metal Phys.*, 10 :2769–2778, 1980.
- [Thi95a] M. J. Thill. *ABACUS - A Branch And CUt System*. PhD thesis, Universität Köln, Köln, FRG, 1995.
- [Thi95b] M. J. Thill. *Des verres de spin en basse dimension*. PhD thesis, Université Paris XI, Paris, France, 1995.
- [Tou77] G. Toulouse. Theory of the Frustration Effect in Spin Glasses : I. *Commun. Phys.*, 2 :115–119, 1977.
- [Tre97] J. Treiner. communication privée. 1997.
- [TvROW96] M. C. Tesi, E. J. J. van Rensburg, E. Orlandini, and S. G. Whittington. Monte Carlo Study of the Interaction Self-Avoiding Walk Model in Three Dimensions. *Journal of Stat. Phys.*, 82(1/2) :155 – 181, 1996.
- [VB85] L. Viana and A. J. Bray. Phase diagrams for dilute spin glasses. *J. Phys. C*, 18 :3037 – 3051, 1985.
- [vHP79] J. L. van Hemmen and R. G. Palmer. *J. Phys. A*, 12 :563, 1979.
- [VL66] V. G. Vaks and A. I. Larkin. On phase transition of second order. *Soviet Physics JETP*, 22(3) :678 – 687, 1966.
- [vLA85] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. Statistical cooling : A general approach to combinatorial optimization problems. *Philips J. Res.*, 40(4) :193 – 226, 1985.
- [vLA87] P. J. M. van Laarhoven and E. H. L. Aarts. *Simulated Annealing : Theory and Applications*, chapter 4 – 6, pages 39 – 98. Mathematics and Its Applications. D. Reidel Publishing Company, Dordrecht, 1987.
- [Wil67] J. Wilks. *The properties of liquid and solid helium*. Clarendon Press, Oxford, 1967.
- [WK75] L. E. Wenger and P. H. Keesom. *Phys. Rev. B*, 11 :3497, 1975.
- [WK76] L. E. Wenger and P. H. Keesom. *Phys. Rev. B*, 13 :4053, 1976.
- [WR73] Franz J. Wegner and Eberhard K. Riedel. Logarithmic corrections to the molecular-field behavior of critical and tricritical systems. *Physical Review B*, 7(1) :248 – 256, 1973.
- [YBM84] A. Young, J. A. Bray, and M. A. Moore. *Journal of Physics C*, 17 :L149, 1984.
- [Yos57] K. Yosida. *Phys. Rev.*, 106 :893, 1957.
- [YS79] J. M. Yeomans and R. B. Stinchcombe. Critical properties of site- and bond-diluted Ising ferromagnets. *J. Phys. C : Solid State Phys.*, 12 :347 – 360, 1979.
- [ZH60] Zimmermann and Hoare. 1960.

Remerciements

Tout d'abord je tiens à remercier mes parents pour l'infailible soutien qu'ils m'ont témoigné au cours des longues années de mes études. J'aimerai ensuite exprimer ma gratitude, ressentie profondément, à mon directeur de thèse Olivier Martin, qui mérite parfaitement d'être appelé *Doktorvater*(^{*}). Il est un homme avec une forte intuition et sensibilité, qualités essentielles pour le suivi d'un travail de thèse. Il m'a guidé et conseillé pendant une phase importante de ma vie.

Je suis ravi de pouvoir remercier mes amis pour leur soutien. Ils sont trop nombreux pour que je puisse les citer tous ici, mais je veux remercier tout particulièrement Bruno car il a toujours été à mes côtés pendant la guerre linguistique([†]).

Je tiens à remercier le CEA qui m'a permis de travailler dans d'excellentes conditions matérielles et pour le soutien financier associé. En effet, j'ai eu la chance de bénéficier d'une bourse CEE catégorie 20 pour 2 ans (de novembre 1994 à octobre 1996) ainsi que d'une bourse CFR du CEA (de novembre 1996 à octobre 1997). Merci à ceux qui ont obtenu ces financements, et en particulier à Jean-Michel Drouffe.

Je suis aussi reconnaissant auprès des membres de mon jury, V.D. Cung, T.H. Diep, H. Orland et K.A. Penson d'avoir accepté de participer à cette soutenance.

Je ne vais pas remplir des pages avec des remerciements en disant telle personne a fait telle ou telle chose([‡]). C'est sûr que je vais oublier des personnes qui méritent d'être remerciées parmi toutes les bonnes volontés à la Division de Physique Théorique, IPN-Orsay, aussi bien qu'au Service de Physique Théorique, C.E.-Saclay. Permettez-moi donc que je dise simplement à toutes et à tous :

MERCI

(^{*})Expression affectueuse pour *Directeur de thèse*

([†])Chacun est étranger presque partout

([‡])Non tutto il male viene per nuocere...

Summary

In the present Ph.D. dissertation I present results concerning disordered and frustrated models of relevance in statistical mechanics and in combinatorial optimization.

As an application of spin glass theory I study the disordered and frustrated Blume-Emery-Griffiths model. The model is treated in its mean-field approximation using replicas. Within the Ansatz of replica-symmetry, I present a complete numerical solution; I also discuss effects of replica symmetry breaking. The stability of the RS solution is studied and the regions of instability inferred. The phase diagram exhibits first and second order transitions. The tricritical point is still present in the frustrated model, in agreement with former work. A version of the BEG model with disordered chemical potential is also studied. The calculations confirm that the disorder decreases the tricritical temperature.

Next, I consider the graph partitioning problem, a combinatorial optimization problem, which, from the point of view of statistical mechanics is a spin glass model with the constraint of zero magnetisation. I focus on the statistical properties of low energy solutions generated by “heuristic” algorithms designed to solve such hard combinatorial optimization problems. Several heuristics proposed to solve this problem were implemented. Scaling laws are obtained; in particular, the average cost and its variance grow linearly with the number of vertices of the graphs. As a consequence the cost found by the heuristics is self-averaging. I suggest that this property is quite general, valid for random solutions, quasi-optimal solutions, and probably for the optimum solutions, too. Furthermore a ranking method is proposed and illustrated on an ensemble of graph partitioning problems. This ranking procedure takes into account the quality of the solution as well as the time necessary to find that solution.

In the third part of this dissertation I study in detail the zero-temperatures properties of spin glasses on sparse random graphs with fixed connectivity. Spin glasses on these graphs may be considered as a more realistic approximation to real spin glasses as represented by the model of Sherrington and Kirkpatrick. I have designed a new algorithm for finding low energy states. Second, I present a method for deriving the ground state energy from heuristic algorithms, even though they are not guaranteed to find the optimum. Third, I present a numerical test of a conjecture due to Banavar, Sherrington and Surlas, giving the large volume energy density of the ground states as function of the connectivity. The distribution of the order parameter is found to be non-trivial, and I give evidence for the presence of ultrametricity for all values of the connectivity. These results confirm the expectation that the remarkable properties of the infinite range Sherrington-Kirkpatrick model carry over to more realistic models, as for example the spin glass model on random graphs with finite connectivity studied in the present work.

keywords: spin glasses, BEG model, frustration, complex systems, combinatorial optimization, graph partitioning, heuristic algorithms, self-averaging, scaling laws

Résumé

Dans la présente thèse de doctorat je présente des résultats concernant des modèles désordonnés et frustrés venant de la physique statistique et de l'optimisation combinatoire.

Comme application de la théorie des verres de spins, j'étudie le modèle de Blume, Emery et Griffiths désordonné et frustré. Ce modèle est traité dans l'approximation de champ moyen dans le cadre de la méthode des répliques. À l'aide de l'Ansatz symétrique dans les répliques, je présente une solution numérique complète, puis je discute des effets de brisure de cette symétrie. La stabilité de la solution symétrique a été étudiée et les régions instables identifiées. Le diagramme de phase exhibe des transitions de premier et de second ordre. Le point tricritique persiste dans le modèle frustré, ce qui est en accord avec des travaux antérieurs. Une version du modèle BEG avec un potentiel chimique désordonné a également été étudiée. Les calculs confirment que le point tricritique apparaît à plus basse température quand il y a du désordre.

Ensuite je considère le problème de la bipartition d'un graphe. Ce problème correspond du point de vue de la physique statistique à un verre de spins soumis à une contrainte d'aimantation totale nulle. Je considère les propriétés statistiques des solutions de faible énergie engendrées par des algorithmes heuristiques. De tels algorithmes sont en général conçus pour résoudre des problèmes d'optimisation combinatoire qui sont $\mathcal{NP}$ -difficiles. Plusieurs heuristiques ont été implémentées pour le problème de la bipartition de graphe. Des lois d'échelle ont été obtenues : en particulier la moyenne et la variance du coût obéissent à une loi linéaire en N . Par conséquent le coût obtenu par des heuristiques est une quantité auto-moyennante. Je suggère que cette propriété est générale, valable aussi pour les solutions aléatoires, pour les solutions quasi-optimales et pour les solutions optimales. En outre je propose une procédure pour comparer des algorithmes heuristiques. Cette procédure tient compte de la qualité de la solution aussi bien que du temps de calcul utilisé.

Dans la troisième partie de ma thèse j'ai étudié en détail les propriétés à température nulle des verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires avec une coordination fixe. Les verres de spins sur de tels graphes peuvent être considérés comme une approximation aux vrais verres de spins qui est plus réaliste que le modèle de Sherrington et Kirkpatrick. J'ai conçu un nouvel algorithme pour trouver les états fondamentaux. Aussi je teste numériquement une conjecture de Banavar, Sherrington et Soursas qui donne la densité d'énergie du fondamental dans la limite de grande taille en fonction de la coordination. La distribution du paramètre d'ordre se révèle être non triviale et les données présentent une forte indication de la présence d'ultramétrie pour toutes les valeurs de la coordination. Ces résultats confirment que les propriétés particulières des verres de spin, déduites au niveau de l'approximation de champ moyen dans le cadre du modèle de Sherrington et Kirkpatrick, sont aussi présentes pour des modèles plus réalistes comme les verres de spins sur des graphes aléatoires lacunaires avec une coordination fixe.

mots clefs : verre de spins, modèle BEG, frustration, systèmes complexes, optimisation combinatoire, partition de graphe, algorithme heuristique, auto-moyennage, lois d'échelle

