



HAL
open science

Application de l'optimisation combinatoire à certains modèles de verres de spins : complexité et simulations

Fancisco Barahona

► **To cite this version:**

Fancisco Barahona. Application de l'optimisation combinatoire à certains modèles de verres de spins : complexité et simulations. Modélisation et simulation. Université Joseph-Fourier - Grenoble I; Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG, 1980. Français. NNT: . tel-00292679

HAL Id: tel-00292679

<https://theses.hal.science/tel-00292679>

Submitted on 2 Jul 2008

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

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

THESE

présentée à

l' Université Scientifique et Médicale de Grenoble

et à

l' Institut National Polytechnique de Grenoble

pour obtenir le grade de

DOCTEUR INGENIEUR

Recherche opérationnelle

par

Francisco BARAHONA



**APPLICATION DE L'OPTIMISATION COMBINATOIRE
A CERTAINS MODELES DE VERRES DE SPINS :
COMPLEXITE ET SIMULATIONS.**



Thèse soutenue le 7 novembre 1980 devant la commission d'examen

M. SAKAROVITCH **Président**

J. FONLUPT

R. MAYNARD

F. ROBERT

J.P. UHRY

Examineurs

UNIVERSITE SCIENTIFIQUE ET MEDICALE DE GRENOBLE

Monsieur Gabriel CAU : Président

Monsieur Joseph KLEIN : Vice-Président

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

PROFESSEURS TITULAIRES

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

.../...

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

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

PROFESSEURS ASSOCIES

MM. CRABBE Pierre
SUNIER Jules

CERMO
Physique

PROFESSEURS SANS CHAIRE

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

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

MAITRES DE CONFERENCES ET MAITRES DE CONFERENCES AGREGES

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

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

MM. SCHAERER René	Cancérologie
Mme SEIGLE-MURANDI Françoise	Crytogamie
MM. STOEGBNER Pierre	Anatomie pathologie
STUTZ Pierre	Mécanique
VROUSOS Constantin	Radiologie

MAITRES DE CONFERENCES ASSOCIES

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

MAITRE DE CONFERENCES DELEGUE

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

Fait à Saint Martin d'Hères, novembre 1977

INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

Année universitaire 1979-1980

Président : M. Philippe TRAYNARD

Vice-Présidents : M. Georges LESPINARD

M. René PAUTHENET

PROFESSEURS DES UNIVERSITES

MM.	ANCEAU François	Informatique fondamentale et appliquée
	BENOIT Jean	Radioélectricité
	BESSON Jean	Chimie Minérale
	BLIMAN Samuel	Electronique
	BLOCH Daniel	Physique du Solide - Cristallographie
	BOIS Philippe	Mécanique
	BONNETAIN Lucien	Génie Chimique
	BONNIER Etienne	Métallurgie
	BOUVARD Maurice	Génie Mécanique
	BRISSONNEAU Pierre	Physique des Matériaux
	BUYLE-BODIN Maurice	Electronique
	CHARTIER Gernain	Electronique
	CHERADAME Hervé	Chimie Physique Macromoléculaires
Mme	CHERUY Arlette	Automatique
MM.	CHIAVERINA Jean	Biologie, Biochimie, Agronomie
	COHEN Joseph	Electronique
	COUMES André	Electronique
	DURAND Francis	Métallurgie
	DURAND Jean-Louis	Physique Nucléaire et Corpusculaire
	FELICI Noël	Electrotechnique
	FOULARD Claude	Automatique
	GUYOT Pierre	Métallurgie Physique
	IVANES Marcel	Electrotechnique
	JOUBERT Jean-Claude	Physique du Solide - Cristallographie
	LACOUME Jean-Louis	Géographie - Traitement du Signal
	LANCIA Roland	Electronique - Automatique
	LESIEUR Marcel	Mécanique
	LESPINARD Georges	Mécanique
	LONGEQUEUE Jean-Pierre	Physique Nucléaire Corpusculaire
	MOREAU René	Mécanique
	MORET Roger	Physique Nucléaire Corpusculaire
	PARIAUD Jean-Charles	Chimie - Physique
	PAUTHENET René	Physique du Solide - Cristallographie
	PERRET René	Automatique

.../...

MM.	PERRET Robert	Electrotechnique
	PIAU Jean-Michel	Mécanique
	PIERRARD Jean-Marie	Mécanique
	POLOUJADOFF Michel	Electrotechnique
	POUPOT Christian	Electronique - Automatique
	RAMEAU Jean-Jacques	Chimie
	ROBERT André	Chimie Appliquée et des matériaux
	ROBERT François	Analyse numérique
	SABONNADIÈRE Jean-Claude	Electrotechnique
Mme	SAUCIER Gabrielle	Informatique fondamentale et appliquée
M.	SOHM Jean-Claude	Chimie - Physique
Mme	SCHLENKER Claire	Physique du Solide - Cristallographie
MM.	TRAYNARD Philippe	Chimie - Physique
	VEILLON Gérard	Informatique fondamentale et appliquée
	ZADWORNY François	Electronique

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

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

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

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

MM.	ALLIBERT Michel
	BERNARD Claude
	CAILLET Marcel
Mme	CHATILLON Catherine
MM.	COULON Michel
	HAMMOU Abdelkader
	JOUD Jean-Charles
	RAVAINE Denis
	SAINFORT

C.E.N.G.

.../...

MM. SARRAZIN Pierre
SOUQUET Jean-Louis
TOUZAIN Philippe
URBAIN Georges

Laboratoire des Ultra-Réfractaires ODEILLO

E.N.S.M.E.E.

MM. BISCONDI Michel
BOOS Jean-Yves
GUILHOT Bernard
KOBILANSKI André
LALAUZE René
LANCELOT François
LE COZE Jean
LESBATS Pierre
SOUSTELLE Michel
THEVENOT François
THOMAS Gérard
TRAN MINH Canh
DRIVER Julian
RIEU Jean

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

MM. BOREL Joseph
CHEHIKIAN Alain
VIKTOROVITCH Pierre

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

MM. BORNARD Guy
DESCHIZEAUX Pierre
GLANGEAUD François
JAUSSAUD Pierre
Mme JOURDAIN Geneviève
MM. LEJEUNE Gérard
PERARD Jacques

E.N.S.H.G.

M. DELHAYE Jean-Marc

E.N.S.I.M.A.G.

MM. COURTIN Jacques
LATOMBE Jean-Claude
LUCAS Michel
VERDILLON André

Je remercie vivement M. Jean-Pierre UHRY pour son permanent soutien et pour la compétence et la patience avec lesquelles il a dirigé mon travail.

Je tiens à remercier aussi MM. Roger MAYNARD et Rannal RAMMAL du Centre de Recherches en Très Basses Températures de Grenoble. Leur intérêt et disponibilité ont fait possible cette collaboration entre physiciens et mathématiciens.

Je remercie M. Michel SAKAROVITCH qui m'a fait l'honneur de présider mon Jury.

Que MM. Jean FONLUPT et François ROBERT trouvent ici l'expression de ma gratitude pour leur participation à ce Jury.

M. Christophe LACOTE m'a apporté un soutien informatique précieux dont je lui suis très reconnaissant.

Je remercie Isabel pour sa patience dans la correction des manuscrits et son encouragement pendant ce travail.

L'Equipe de Recherche Opérationnelle m'a permis de vivre une expérience très riche pendant mon séjour auprès d'elle.

Je tiens à remercier le Département de Mathématiques de l'Université du Chili au sein duquel je me suis initié aux Mathématiques Appliquées.

Je veux exprimer ma gratitude envers Mme. NEUMANN et Mme. PUECH qui ont assuré la frappe des manuscrits.

Je remercie le service de reprographie dirigé par M. IGLESIAS pour l'efficacité avec laquelle ils ont effectué le tirage de cette thèse.

TABLE DES MATIERES

	Pages
<u>INTRODUCTION</u>	1
<u>CHAPITRE I : NP-COMPLETITUDE</u>	6
1 - Préliminaires	6
2 - Le problème des verres de spins tridimensionnel est NP-complet	9
3 - Le problème des verres de spins bidimensionnel avec champ magnétique est NP-complet	12
<u>CHAPITRE II : LE PROBLEME BIDIMENSIONNEL</u>	14
1 - La recherche d'un état fondamental	14
2 - Interprétation physique	17
3 - La rigidité des états fondamentaux	20
<u>CHAPITRE III : UN ALGORITHME PRIMAL POUR LE PROBLEME DU POSTIER CHINOTS</u>	22
1 - Préliminaires	22
2 - L'algorithme	26
3 - Discussion de l'algorithme	31
4 - Une solution de départ	33
5 - Changement de la parité de deux sommets	33
6 - Recherche des arêtes rigides	34
<u>CHAPITRE IV : CALCUL DE L'ENTROPIE DU FONDAMENTAL ET DE LA LA FONCTION DE PARTITION DANS LE CAS BIDIMENSIONNEL</u>	36
1 - Dénombrement des couplages parfaits	36
2 - Configurations de spins et couplages parfaits	38
3 - Calcul de l'entropie des états fondamentaux	43
4 - Sur le calcul de la fonction de partition	46
<u>CHAPITRE V : SIMULATIONS D'ECHANTILLONS PLANAIRES</u>	47
1 - Les échantillons	47
2 - Rigidité des états fondamentaux	51
<u>REFERENCES</u>	71

NOTATION

Nous utiliserons la terminologie usuelle de la Théorie des Graphes. En particulier, étant donné un graphe $G = (V, E)$, et $S \subseteq V$, $\delta(S)$ sera l'ensemble d'arêtes avec une seule extrémité dans S , (le cocycle de S), pour $i \in V$ nous allons abréger $\delta(\{i\})$ par $\delta(i)$. $\gamma(S)$ sera l'ensemble d'arêtes avec ses deux extrémités dans S .

Pour un ensemble fini E , $|E|$ dénotera sa cardinalité.

INTRODUCTION

Le problème des verres de spins naît des propriétés observées dans certains alliages magnétiques. Les verres de spins sont des systèmes que l'on obtient en diluant dans un métal non magnétique des impuretés magnétiques. La concentration doit être suffisamment faible, 1 % par exemple, pour qu'on puisse supposer que la disposition de ces impuretés est aléatoire.

La caractéristique principale de ces systèmes est constituée par la chute brutale de la susceptibilité magnétique à une certaine température, ce qui est l'indice d'une transition de phase. Malgré de nombreuses études, l'occurrence d'une deuxième transition de phase à basse température est loin d'être élucidée.

Entre deux impuretés il existe une énergie d'interaction

$$H_{12} = -J(R) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2,$$

où \vec{S}_i est le moment magnétique (spin) de l'impureté i , et l'interaction $J(R)$ est

$$J(R) = A \cos(2BR) / (BR)^3$$

R étant la distance entre les impuretés, A et B étant des constantes.

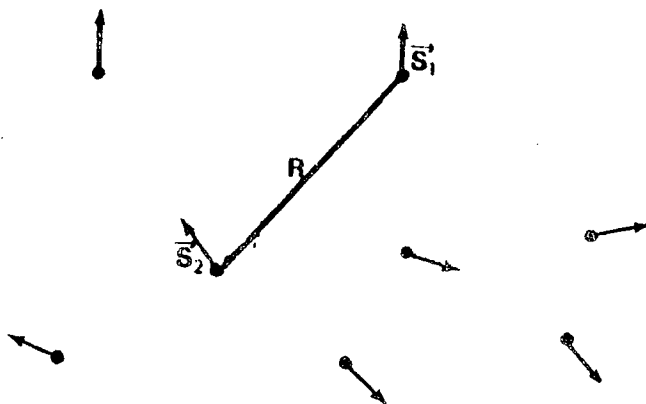


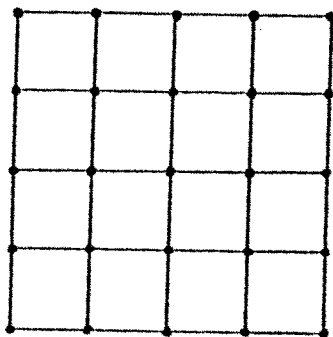
Figure 1

L'énergie du système est donnée par l'Hamiltonien

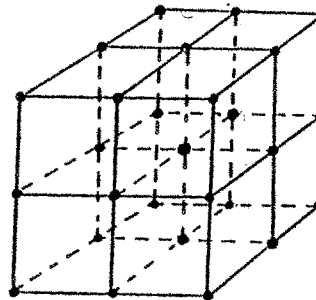
$$H = - \sum_{i,j} J(r_{ij}) \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum \vec{F} \cdot \vec{S}_i$$

où r_{ij} est la distance entre les impuretés i et j , et \vec{F} un champ magnétique extérieur.

Une première approche pour modéliser ces systèmes est de substituer à la distribution aléatoire des impuretés une disposition régulière sur une grille et de supposer une distribution aléatoire des interactions. Les grilles étudiées sont généralement du type de celles de la Figure 2, où les sommets représentent les impuretés et les arêtes, les interactions non nulles.



Pb. bidimensionnel



Pb. tridimensionnel

Figure 2

La deuxième simplification est de remplacer les vecteurs tridimensionnels $\{\vec{S}_i\}$, par des vecteurs unidimensionnels prenant les valeurs +1 et -1, (Spins d'Ising).

Pour une configuration ω des spins (une affectation des valeurs +1 et -1 aux variables $\{S_i\}$), l'énergie est donnée par

$$H(\omega) = \sum J_{ij} S_i S_j + F \sum S_i$$

où J_{ij} est l'interaction entre les spins i et j , et F représente le champ magnétique.

Un premier problème qu'on peut se poser est l'étude des caractéristiques des états d'énergie minimum (états fondamentaux dans la terminologie physique). Un autre, bien plus difficile, est le calcul de la fonction de partition

$$f(T) = \sum_{\omega \in \Omega} \exp(-H(\omega)/KT)$$

où Ω est l'ensemble des configurations de spins, $H(\omega)$ est l'énergie de la configuration ω , K la constante de Boltzmann et T la température.

L'énergie libre du système est alors donnée par
 $-KT \log f(T)$

et la magnétisation, l'énergie magnétique, la chaleur spécifique et la susceptibilité peuvent être obtenues par différenciation de cette fonction par rapport au champ magnétique et à la température.

Ces propriétés sont intéressantes à la limite thermodynamique (quand le nombre des impuretés tend vers l'infini), cas où une singularité de ces fonctions peut indiquer un changement qualitatif de l'état du système.

La fonction de partition a été obtenue par Onsager en 1944 [26], pour la grille carrée bidimensionnelle, dans le cas où toutes les interactions ont la même valeur (cas ferromagnétique), et avec champ magnétique nul. Mais une généralisation de ces résultats au cas tridimensionnel, ou au cas bidimensionnel dans un champ magnétique, ou au cas d'une distribution aléatoire des interactions, a été longuement recherchée.

La difficulté mathématique de ces problèmes a conduit à l'utilisation de la simulation d'échantillons finis comme en témoigne de très nombreux articles de ces dernières années ([7], [8], [22]).

Quand on fait une approche du problème sur une grille finie de n spins, le problème devient combinatoire. Trouver l'état d'énergie minimum revient alors à trouver une configuration parmi les 2^n qui minimise H , et le calcul de la fonction de partition revient à une somme de 2^n termes.

Le problème combinatoire qu'on se pose est d'approcher la limite thermodynamique ($n \rightarrow \infty$), dans des temps de calcul "raisonnables", alors que le nombre de configurations à étudier croît exponentiellement en n .

Pour ce type de problème, il est largement accepté qu'un algorithme est "bon" si le nombre de calculs croît d'une façon polynomiale en n [13].

Comme il a été montré dans [6], la recherche d'un des états d'énergie minimum pour le cas bidimensionnel sans champ magnétique peut être accomplie en faisant un nombre polynomial de calculs. Nous allons montrer que pour, ce même cas, l'étude de la rigidité des fondamentaux, le calcul de son entropie (dénombrement de ces états) et le calcul de la fonction partition sont des problèmes qui peuvent être résolus en temps polynomial par la théorie de couplage.

Pour les autres cas, nous n'avons pas trouvé d'algorithmes polynomiaux, mais devant l'impossibilité de trouver un tel algorithme, on pourrait envisager de démontrer qu'il ne peut pas en exister. Malheureusement, toutes les tentatives d'établir de telles preuves, pour beaucoup de problèmes présumés être non-polynomiaux, se sont avérées vaines.

Ce que nous allons montrer vaut presque une telle preuve. Nous démontrons : que certains problèmes des verres de spins sont au moins aussi difficiles qu'un grand nombre d'autres problèmes combinatoires, largement reconnus comme difficiles, et que si on pouvait trouver un algorithme polynomial pour résoudre ces problèmes sur les verres de spins, cet algorithme permettrait de résoudre en temps polynomial tous ces autres problèmes. Tous ces problèmes sont appelés NP-Complets.

Dans le chapitre I, on montre que le problème de la recherche d'un état d'énergie minimum est NP-Complet pour le cas tridimensionnel et pour le cas bidimensionnel avec champ magnétique. Le fait que la dimensionnalité joue un rôle fondamental dans l'existence d'une transition de phase est bien connu des physiciens. Nos résultats montrent que la dimensionnalité joue aussi un rôle important dans la complexité algorithmique et la structure combinatoire du problème. Ce fait suggère que des solutions exactes ne peuvent être trouvées que pour des tailles très petites.

Dans le chapitre II, on étudie le cas bidimensionnel sans champ magnétique, on utilise la théorie de couplage pour montrer que le problème de la recherche d'un état fondamental est équivalent à un problème de programmation linéaire ; on utilise la dualité pour chercher les paquets de spins qui auront la même orientation relative dans tous les états fondamentaux.

Dans le chapitre III, on donne des algorithmes polynomiaux pour résoudre les problèmes étudiés dans le chapitre II.

Le chapitre IV est consacré au calcul de l'entropie des états fondamentaux et au calcul de la fonction de partition. On démontre que ces deux problèmes peuvent être résolus en dénombrant des couplages parfaits dans un graphe planaire.

Dans le chapitre V, on étudie la rigidité des états fondamentaux en faisant des simulations sur des échantillons finis. Grâce à ces simulations on peut connaître l'évolution de cette rigidité en fonction de la concentration des interactions négatives .

CHAPITRE I - NP-COMPLÉTUDE

1 - PRELIMINAIRES

Toutes les méthodes connues pour calculer le nombre chromatique d'un graphe, pour décider si un graphe a un circuit hamiltonien ou pour résoudre un système d'équations linéaires en variables booléennes exigent un nombre de calculs qui croît d'une façon exponentielle par rapport à la taille des données. D'autre part, certains problèmes de la théorie des graphes comme celui de la recherche d'un plus court chemin, la recherche d'un arbre de poids maximum, la recherche d'un couplage de poids maximum et la programmation linéaire peuvent être résolus par des algorithmes dont le temps de calcul croît d'une façon polynomiale par rapport à la taille des données du problème. Jack Edmonds [11] en 1966, apparaît comme le premier à avoir noté cette différence, quand il a découvert l'algorithme du couplage.

Le sentiment qu'il existe une forte différence de complexité entre ces deux types de problèmes a été renforcé par les résultats de Cook et Karp [9,18]. Ils ont montré que les problèmes mentionnés dans le premier paragraphe, outre une large variété d'autres problèmes combinatoires, forment une classe : celle des problèmes NP-Complets, dont on ne connaît, pour aucun membre, un algorithme polynomial, et si l'un d'eux admettait un tel algorithme tous les autres devraient aussi l'admettre.

Ces résultats ont stimulé beaucoup de chercheurs dans l'examen d'autres problèmes combinatoires pour lesquels on ne connaît pas d'algorithme polynomial, pour déterminer s'ils sont NP-Complets, et de ces efforts il a résulté une liste importante de membres de cette classe qu'on peut consulter dans l'ouvrage de Garey et Johnson [13].

Ces résultats ont une signification pratique considérable. Si pour un problème, on ne peut pas trouver un algorithme polynomial, on peut essayer de démontrer qu'il est NP-Complet. Le fait qu'un problème soit NP-Complet suggère qu'on ne doit pas chercher un algorithme polynomial pour le résoudre dans toute sa généralité.

On peut se concentrer sur l'étude des cas particuliers ou sur l'utilisation de méthodes qui, même si elles sont exponentielles, peuvent résoudre le problème dans certaines limites pratiques. Une approche alternative est d'utiliser des algorithmes polynomiaux donnant des solutions approchées [17,23].

Nous allons présenter les définitions de base, et nous renvoyons à [1,13] pour des explications plus complètes. Soit $B = \{0,1\}$ et B^* l'ensemble de tous les mots finis d'éléments de B .

Tout sous-ensemble L de B^* est appelé un langage. Soit Π la classe de fonctions $F : B^* \rightarrow B^*$ qui sont calculables en temps polynomial par une machine de Turing déterministe à une bande.

Si L et M sont des langages, on dit que L est réductible à M , ($L \leq M$), s'il existe $f \in \Pi$ telle que $f(x) \in M$ si et seulement si $x \in L$. Soit NP la classe des langages reconnaissables par une machine de Turing non déterministe à une bande, M est NP-Complet si $M \in NP$ et si tout langage dans NP est réductible à M . On peut voir que si L est NP-Complet et $L \leq M$ alors $M \in NP$ implique que M est NP-Complet.

Les problèmes d'optimisation combinatoire que nous allons considérer sont présentés comme des problèmes de reconnaissance des langages. Par exemple au problème de la recherche d'un cocycle de cardinalité maximum dans un graphe, on va associer le langage suivant :

L :

Entrée : un graphe $G = (V,E)$, un entier k .

Propriété : Il existe $C \subseteq V$ tel que :

$$|\delta(C)| \geq k$$

Il est évident que si on pouvait résoudre en temps polynomial le problème d'optimisation, on pourrait reconnaître en temps polynomial le langage associé.

La méthode générale de démonstration que nous avons utilisée pour démontrer qu'un problème est NP-Complet consiste à partir d'un problème NP-Complet connu et à montrer qu'il est réductible à notre problème. Nous ne démontrerons pas que ce problème appartient à NP et que la transformation décrite est polynomiale, propriétés évidentes dans les cas étudiés.

2 - LE PROBLÈME DES VERRES DE SPINS TRIDIMENSIONNEL EST NP-COMPLET

Dans [32], il a été démontré que le problème suivant est NP-Complet.

P1 : Cocycle de Cardinalité Maximum dans un Graphe Cubique.

Entrée : Un graphe $G = (V, E)$ avec chaque sommet de degré égal à 3, un entier k .

Propriété : Il existe $C \subseteq V$ tel que

$$|\delta(C)| \geq k$$

Nous allons travailler sur la formulation suivante de ce problème :

P2 : Cocycle de Poids Minimum.

Entrée : Un graphe $G = (V, E)$, une fonction de poids $J : E \rightarrow \mathbb{Z}$, un entier k .

Propriété : Il existe $C \subseteq V$ tel que

$$\sum_{e \in \delta(C)} J_e \leq k$$

Avant de décrire la transformation qui ramène P1 au problème des Verres de Spins nous allons démontrer deux Lemmes.

Lemme I.1 - Si chaque arête du graphe d'entrée de P1 est remplacée par une chaîne d'arêtes, toutes de poids 1 sauf une de poids -1, il existe un cocycle de poids inférieur ou égal à $-k$ dans le nouveau graphe si et seulement si il existe un cocycle de cardinalité supérieur ou égal à k dans le graphe de départ.

Démonstration : Evidente.

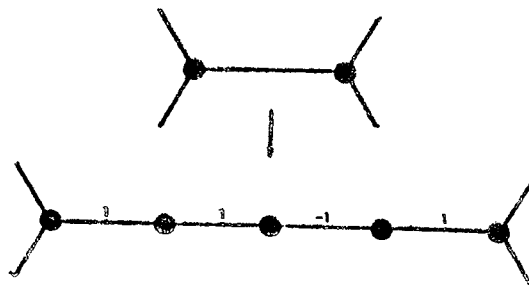


Figure 3

Nous allons définir un graphe bicouche comme un graphe formé par deux grilles carrées reliées comme sur la Figure 4.

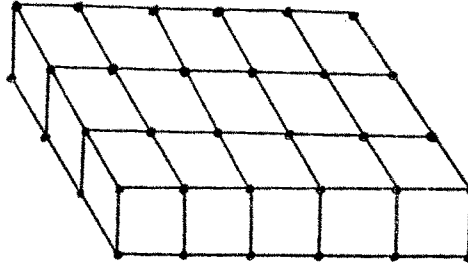


Figure 4

On peut considérer maintenant la restriction suivante du problème

P2 :

P2' :

Entrée : Un graphe bicouche $G = (V, E)$, une fonction de poids $J : E \rightarrow \{-1, 0, 1\}$, un entier k .

Propriété : Il existe $C \subseteq V$ tel que

$$\sum_{e \in \delta(C)} J_e \leq k$$

Lemme I.2 - P2' est NP-Complet.

Démonstration : Nous allons montrer que $P1 \alpha P2'$.

Soit $G = (V, E)$, $V = \{v_1, \dots, v_n\}$, $E = \{e_1, \dots, e_m\}$ l'entrée pour P1.

La première couche du nouveau graphe G' est constituée des sommets $\{(v_i, e_j, 1) \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$ disposées comme dans la Figure 5.

$$\begin{array}{cccc} (v_1, e_1, 1) & (v_1, e_2, 1) & \dots & (v_1, e_m, 1) \\ (v_2, e_1, 1) & (v_2, e_2, 1) & \dots & (v_2, e_m, 1) \\ \vdots & & & \\ (v_n, e_1, 1) & (v_n, e_2, 1) & \dots & (v_n, e_m, 1) \end{array}$$

Figure 5

Pour chaque arête $e_j = (v_i, v_{i+p})$ de G on construit dans G' une chaîne d'arêtes :

$$\langle (v_i, e_j, 1), (v_{i+1}, e_j, 1) \rangle, \langle (v_{i+1}, e_j, 1), (v_{i+2}, e_j, 1) \rangle, \dots, \langle (v_{i+p-1}, e_j, 1), (v_{i+p}, e_j, 1) \rangle$$

toutes de poids +1, sauf une de poids -1.

La deuxième couche de G' est constituée des sommets $\{(v_i, e_j, 2) \mid 1 \leq i \leq n, 1 \leq j \leq m\}$ disposés d'une manière similaire.

Pour chaque sommet v_i de G , soient e_j, e_{j+p}, e_{j+p+q} les arêtes adjacentes. On construit dans G' une chaîne

$$\langle (v_i, e_j, 2), (v_i, e_{j+1}, 2) \rangle, \langle (v_i, e_{j+2}, 2), (v_i, e_{j+3}, 2) \rangle, \dots, \langle (v_i, e_{j+p+q-1}, 2), (v_i, e_{j+p+q}, 2) \rangle$$

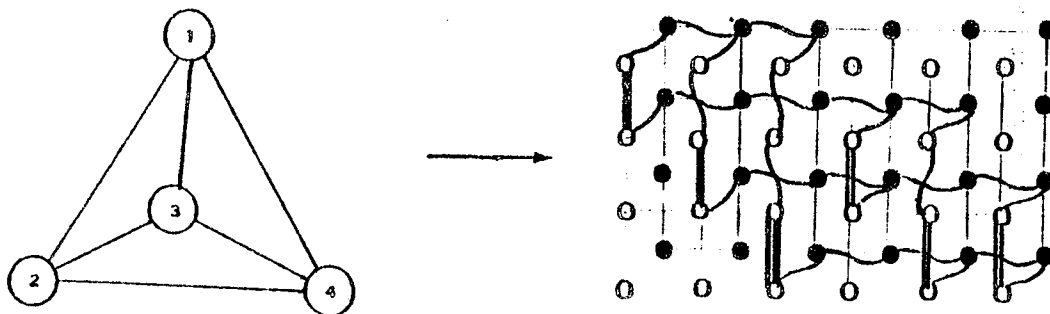
et les trois arêtes $\langle (v_i, e_j, 1), (v_i, e_j, 2) \rangle, \langle (v_i, e_{j+p}, 1), (v_i, e_{j+p}, 2) \rangle,$

$\langle (v_i, e_{j+p+q}, 1), (v_i, e_{j+p+q}, 2) \rangle$ toutes avec le poids +1.

On donne le poids 0 à toutes les autres arêtes de G' .

D'après le Lemme I.1, il existe un cocycle de cardinalité $\geq k$ dans le graphe G si et seulement si il existe un cocycle de poids $\leq -k$ dans G' .

La Figure 6 illustre sur un exemple la transformation qui permet de ramener P_1 à P_2' .



- o sommet de la 1^{ere} couche
- sommet de la 2^{eme} couche
- ≡ arête de poids -1
- arête de poids 1

Figure 6

Soit

P3 : Problème des Verres de Spins tridimensionnel.

Entrée : Une grille carrée tridimensionnelle $G=(V,E)$, une fonction de poids $J : E \rightarrow \mathbb{Z}$, un entier k .

Propriété : Il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1,1\}$, $\forall i \in V$, telle que

$$H = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j \leq k$$

Théorème I.3 - P3 est NP-Complet.

Démonstration : On va montrer que $P2' \leq P3$.

Soit $G = (V,E)$ l'entrée de P2' et J la fonction de poids. Soit $C \subseteq V$ tel que

$$\sum_{(ij) \in \delta(C)} J_{ij} \leq k$$

si on fixe $S_i = -1 \quad \forall i \in C$, $S_i = 1 \quad \forall i \in V-C$, on a :

$$H = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} + 2 \sum_{(ij) \in \delta(C)} J_{ij} \leq 2k - \sum_{(ij) \in E} J_{ij}$$

D'autre part, s'il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1,1\}$ $i \in V$ telle que

$$H = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j \leq r$$

et si on appelle $C = \{i \in V | S_i = -1\}$

$$\sum_{(ij) \in \delta(C)} J_{ij} \leq \frac{r + \sum_{(ij) \in E} J_{ij}}{2}$$

Donc, il existe un cocycle de poids $\leq k$ si et seulement si il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1,1\}$ $i \in V$, telle que :

$$H = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j \leq 2k - \sum_{(ij) \in E} J_{ij}$$

Remarque : Cette construction montre que le problème des Verres de Spins tridimensionnel est NP-Complet même si le graphe est astreint à n'avoir que deux couches, et les arêtes à avoir des poids dans $\{-1,0,1\}$.

3 - LE PROBLÈME DE VERRES DE SI'INS BIDIMENSIONNEL AVEC CHAMP MAGNETIQUE EST NP-COMPLET

On part du problème NP-Complet suivant [25] :

P4 : Stable maximum dans un graphe planaire cubique.

Entrée : Un graphe planaire cubique $G = (V, E)$, un entier k .

Propriété : Il existe un ensemble stable $S \subseteq V$ tel que
 $|S| \geq k$

Soit P5 le problème suivant :

P5 :

Entrée : Un graphe planaire $G = (V, E)$ avec tous ses sommets de degré 3, un entier k .

Propriété : Il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1, 1\}$, $i \in V$, telle que

$$H = \sum_{(ij) \in E} S_i S_j + \sum_{i \in V} S_i \leq k$$

Théorème I.4 - P5 est NP-Complet.

Démonstration : On montrera que $P4 \alpha P5$.

On va associer à chaque sommet $i \in V$ une variable $X_i \in \{0, 1\}$. Il est facile de voir qu'il existe un ensemble stable de cardinalité $\geq k$ dans G si et seulement si il existe une affectation des valeurs aux variables X_i , $i \in V$ telle que

$$L = \sum_{i \in V} X_i - \sum_{(ij) \in E} X_i X_j \geq k$$

Par le changement des variables

$$S_i = 2X_i - 1$$

on obtient

$$L = -\frac{1}{4} \sum_{i \in V} S_i - \frac{1}{4} \sum_{(ij) \in E} S_i S_j + \frac{7}{8}|V|$$

Il existe donc un stable de cardinalité $\geq k$ si et seulement si il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1, 1\}$, $i \in V$ tel que :

$$\sum_{(ij) \in E} S_i S_j + \sum_{i \in V} S_i \leq \frac{7}{2}|V| - 4k$$

ce qui démontre le théorème.

P5 peut être interprété comme un problème de verres de spins où les interactions sont toutes égales à -1 , et seul le graphe est arbitraire. Si on veut formuler le même résultat, mais en imposant que le graphe soit une grille carrée, on doit accepter des interactions arbitraires comme nous l'avons fait ci-dessus.

Suivant les idées du Lemme I.2 et la procédure décrite dans [14], un graphe planaire de degré maximum 3, peut être immergé dans une maille carrée, où les arêtes sont remplacées par des chaînes. Un exemple de cette transformation est illustré dans la Figure 7.

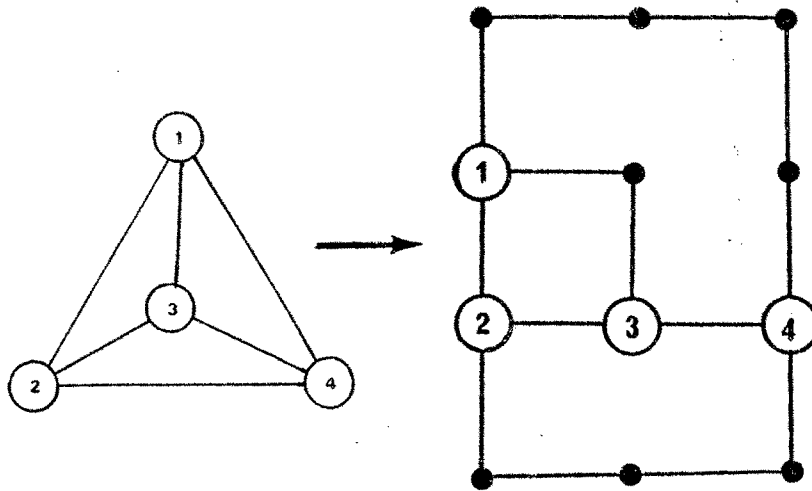


Figure 7

Cette transformation permet d'obtenir le corollaire suivant :

Soit

P7 : Verres de Spins bidimensionnels avec champ magnétique.

Entrée : Une grille carrée planaire $G = (V,E)$, des entiers W, F, k , une fonction de poids

$$J : E \rightarrow \{-W, 0, W\}$$

Propriété : Il existe une affectation des variables $S_i \in \{-1, 1\}$, $i \in V$ telle que

$$H = -\sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j + F \sum_{i \in V} S_i \leq k.$$

Corollaire I.5 : P7 est NP-Complet.

CHAPITRE II

LE PROBLEME BIDIMENSIONNEL

1 - LA RECHERCHE D'UN ETAT FONDAMENTAL

Nous allons étudier le problème :

PO : Etant donné un graphe planaire $G = (V, E)$ et une fonction de poids $J : E \rightarrow \mathbb{Z}$, chercher une affectation des valeurs aux variables $S_i \in \{-1, 1\}$ $i \in V$, qui minimise

$$H = - \sum_{(ij) \in E} J_{ij} S_i S_j$$

Nous allons reprendre quelques uns des résultats de [6], pour analyser certaines caractéristiques des différents états fondamentaux.

Nous avons montré dans le Chapitre I, que ce problème revient à trouver un cocycle de poids minimum dans G et c'est dans cette optique que nous allons étudier notre problème.

Un graphe est dit séparable s'il n'est pas connexe ou s'il possède un point d'articulation. Un bloc d'un graphe est un sous-graphe maximal non-séparable. Il est évident que pour chercher un cocycle de poids minimum, il suffit de le faire dans chaque bloc du graphe.

D'après [27], il existe une correspondance biunivoque entre les cocycles d'un graphe planaire non séparable et les graphes partiels de degré pair en chaque sommet, (Quasi-cycles), du graphe dual.

Par exemple, la Figure 8 illustre un graphe planaire et son dual. Le cocycle de $\{1, 6, 7, 8\}$ et le quasi-cycle associé sont marqués en pointillé

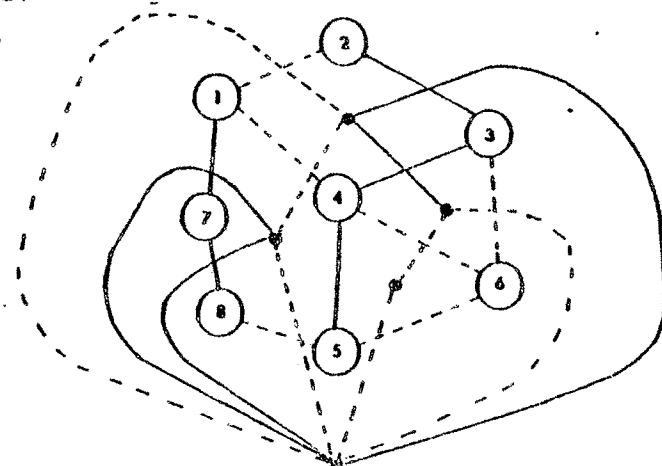


Figure 8

Notre problème revient à chercher le quasi-cycle de poids minimum dans le graphe dual.

Dans [12], le Problème du Postier Chinois est résolu en cherchant le quasi-cycle de poids maximum, avec des poids non-négatifs.

Nous allons modifier légèrement cette technique pour chercher le quasi-cycle de poids minimum avec des poids non astreints.

Soit $H = (V, F)$ un graphe et $W : F \rightarrow \mathbb{R}$ une fonction de poids.

$$\text{Soient } F^+ = \{e \in F \mid W_e > 0\}$$

$$F^- = \{e \in F \mid W_e < 0\}$$

Pour un quasi-cycle $Q \subseteq F$ on définit

$$v(Q) = (Q \cap F^+) \cup (F^- - Q)$$

l'ensemble des arêtes violées.

On appellera impairs (resp. pairs) les sommets v tels que $|\delta(v) \cap F^-|$ est impair (resp. pair).

Lemme II.1 : Q est un quasi-cycle si et seulement si

$$|v(Q) \cap \delta(v)| \equiv \begin{cases} 1 \pmod{2} & \text{si } v \text{ est impair} \\ 0 \pmod{2} & \text{si } v \text{ est pair} \end{cases}$$

Démonstration : Pour $v \in V$, soient

$$d^+ = |\delta(v) \cap F^+|$$

$$d^- = |\delta(v) \cap F^-|$$

$$q^+ = |\delta(v) \cap Q \cap F^+|$$

$$q^- = |\delta(v) \cap Q \cap F^-|$$

$$p = |\delta(v) \cap v(Q)|$$

$$p = d^- - q^- + q^+$$

$$q^- + q^+ \equiv 0 \pmod{2} \iff q^+ - q^- \equiv 0 \pmod{2} \iff p \equiv d^- \pmod{2}$$

Lemme II.2 : Pour tout quasi-cycle Q

$$\sum_{e \in Q} W_e = \sum_{e \in v(Q)} |W_e| + \sum_{e \in F^-} W_e$$

Démonstration :

$$\begin{aligned} \sum_{e \in Q} W_e &= \sum_{F^- \nu(Q)} W_e + \sum_{F^+ \nu(Q)} W_e \\ &= \sum_{F^-} W_e - \sum_{F^- \nu(Q)} W_e + \sum_{F^+ \nu(Q)} W_e \\ &= \sum_{F^-} W_e + \sum_{\nu(Q)} W_e \end{aligned}$$

Ce dernier lemme montre que pour minimiser le poids du quasi-cycle, il suffit de minimiser

$$\sum_{e \in \nu(Q)} |W_e|$$

Donc, en introduisant les variables

$$x_e = \begin{cases} 1 & \text{si } e \in \nu(Q) \\ 0 & \text{si } e \notin \nu(Q) \end{cases}$$

notre problème peut être formulé de la manière suivante :

$$(P1) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Min } \sum |W_e| x_e \\ \sum_{e \in \delta(i)} x_e \equiv 1 \pmod{2} \text{ si } i \text{ est impair} \\ \sum_{e \in \delta(i)} x_e \equiv 0 \pmod{2} \text{ si } i \text{ est pair} \\ x_e \in \{0,1\} \end{array} \right.$$

Si on appelle impairs les ensembles $S \subseteq V$ qui ont un nombre impair des sommets impairs, et n'importe quel nombre des sommets pairs, il est évident que toute solution réalisable de (P1) doit satisfaire les inégalités :

$$\begin{aligned} \sum_{e \in \delta(S)} x_e &\geq 1 \quad \forall S \text{ impair} \\ x_e &\geq 0 \quad \forall e \in E \end{aligned}$$

Edmonds et Johnson [12], ont démontré que ces inégalités suffisent pour définir un polyèdre dont tous les sommets sont des solutions de P1.

Donc, dans ce qui suit, on va travailler sur la formulation suivante de P1 :

$$(P2) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Min } \sum |W_e| X_e \\ \sum_{e \in \delta(S)} X_e \geq 1 \quad \forall S \text{ impair} \\ X_e \geq 0 \quad e \in E \end{array} \right.$$

Le fait de connaître les inégalités définissant le polyèdre associé à un problème d'optimisation combinatoire est considéré comme un pas très important vers la résolution du problème, [15], [19]. On peut remarquer que ces caractérisations ne sont connues pour aucun problème d'optimisation combinatoire NP-Complet.

D'autre part, si on dispose d'une procédure polynomiale, qui donne pour un vecteur X une inégalité violée, la méthode des ellipsoïdes permet de résoudre le programme linéaire associé en temps polynomial, même si le nombre des inégalités est exponentiel par rapport à la taille du problème [15].

Comme nous allons le voir, ces contraintes jouent un rôle fondamental dans les algorithmes que nous allons utiliser.

2 - INTERPRETATION PHYSIQUE

Pour un verre de spins planaire, les sommets impairs du graphe dual correspondent aux faces ayant un nombre impair d'arêtes de poids négatif sur leur contour (faces frustrées), les ensembles $\delta(S)$, S étant un ensemble impair correspondent à des cycles ayant un nombre impair d'arêtes de poids négatif (cycles frustrés).

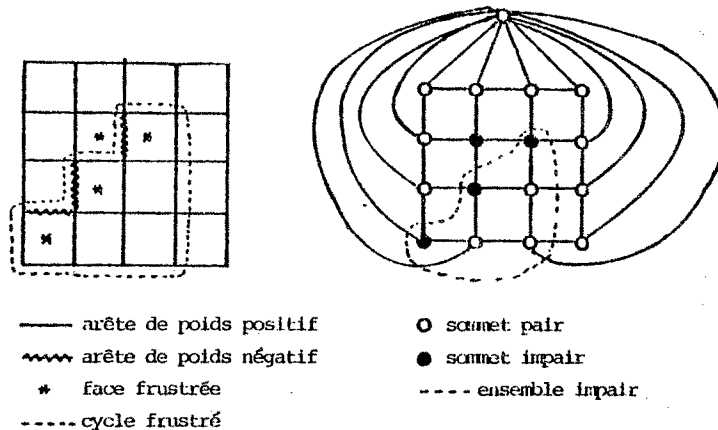


Figure 9

Pour une configuration des spins (une affectation des valeurs +1 et -1 aux variables $S_i \quad i \in V$), une arête (ij) est dite violée si :

$$J_{ij} > 0 \text{ et } S_i \cdot S_j = -1,$$

ou

$$J_{ij} < 0 \text{ et } S_i \cdot S_j = 1$$

Dans un cycle il y aura toujours un nombre pair de changements de signes, donc dans un cycle frustré il doit y avoir au moins une arête violée.

Si à chaque arête (ij) on associe une variable X_{ij} telle que :

$$X_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si (ij) est violée} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Le théorème d'Edmonds et Johnson montre que les inégalités

$$\sum_{(ij) \in C} X_{ij} \geq 1 \quad \forall C \text{ cycle frustré}$$

$$X_{ij} \geq 0 \quad (ij) \in E$$

suffisent pour définir le polyèdre des liaisons violées.

(P2) revient donc à

$$(P3) \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Min } \sum_{(ij) \in E} |J_{ij}| X_{ij} \\ \sum_{(ij) \in C} X_{ij} \geq 1 \quad \forall C \text{ cycle frustré} \\ X_{ij} \geq 0 \quad (ij) \in E \end{array} \right.$$

Le problème dual

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{Max } \sum Y_C \\ \sum_{C | (ij) \in C \text{ cycle frustrée}} Y_C \leq |J_{ij}| \\ Y_C \geq 0 \end{array} \right.$$

représente une répartition de l'énergie entre les cycles frustrés. Toute répartition Y vérifiant les contraintes du dual donne une borne inférieure de l'énergie des arêtes violées :

$$\sum Y_C \leq \sum |J_{ij}| X_{ij}$$

La meilleure parmi ces bornes :

$$\text{Max } \sum Y_C$$

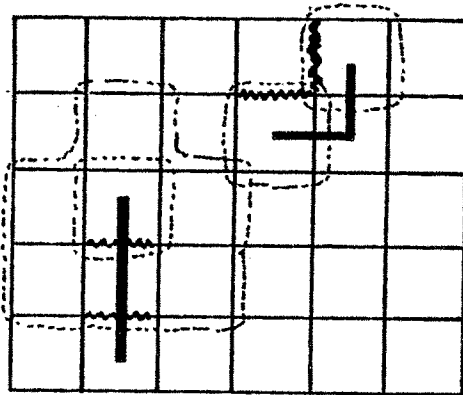
est exactement l'énergie minimum des arêtes violées :

$$\text{Min } \sum |J_{ij}| X_{ij}$$

C'est à dire, pour démontrer, qu'un vecteur caractéristique \bar{X} d'un ensemble d'arêtes violées représente un état fondamental, il suffit d'exhiber une répartition d'énergie \bar{Y} sur les cycles frustrés qui vérifient les contraintes du dual et telle que :

$$\sum \bar{Y}_C = \sum |J_{ij}| \bar{X}_{ij}$$

Voir Figure 10



- arête de poids 1
- ~~~~ arête de poids -1
- + arête violée
- cycle frustré de poids 1

Figure 10

D'après le théorème faible des écarts complémentaires, une condition nécessaire et suffisante pour que la paire (X, Y) de solutions réalisables du problème primal et dual, soient optimales est que :

$$X_{ij} > 0 \Rightarrow \sum_{(C|(ij) \in C} Y_C = |J_{ij}|$$

et

$$Y_C > 0 \Rightarrow \sum_{(ij) \in C} X_{ij} = 1$$

Ce qui veut dire que si $\sum Y_C < |J_{ij}|$, l'arête (ij) ne sera violée dans aucune solution optimale, et que si $Y_C > 0$, le cycle frustré C aura une seule arête violée dans toute solution optimale.

3 - LA RIGIDITE DES ETATS FONDAMENTAUX

Pour étudier la dégénérescence des états fondamentaux, un premier pas consiste à déterminer les paquets des spins dont l'orientation relative est la même dans tous les états fondamentaux (paquets de spins solidaires).

Cela revient à trouver les arêtes rigides, c'est à dire, les arêtes qui sont soit violées dans tous les états fondamentaux, soit dans aucun.

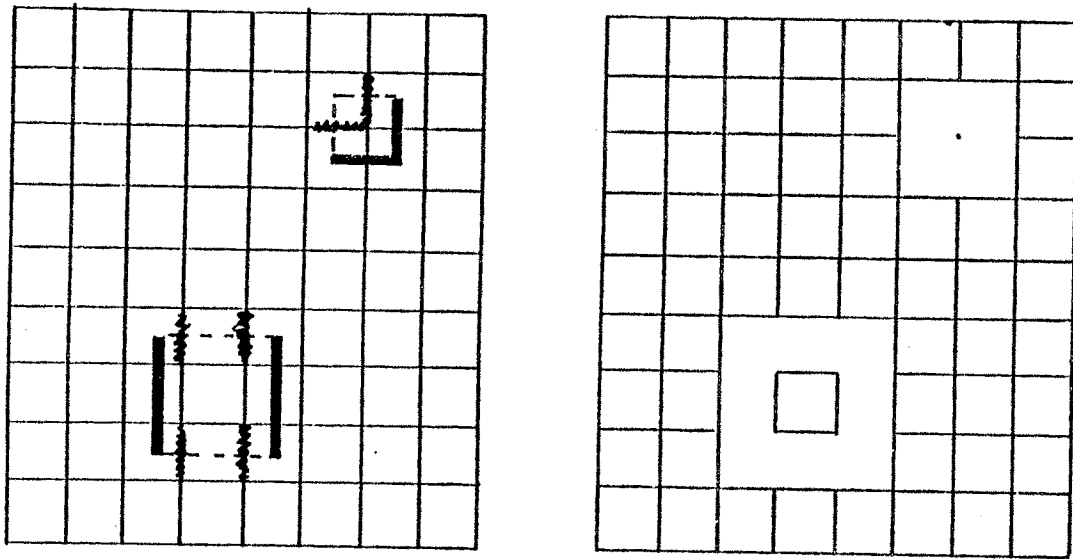
Pour déterminer les arêtes rigides, on peut procéder de la manière suivante :

On part d'une solution optimale X_0 , une arête violée (resp. non violée) est non rigide si et seulement si pour tout $\epsilon > 0$ qu'on ajoute (resp. qu'on retranche) à son poids, on détruit l'optimalité de X_0 .

Cette analyse post-optimale peut être accomplie en un nombre de calculs proportionnels à n^2 (n étant le nombre de spins), grâce à l'algorithme primal du Problème du Postier Chinois que nous présenterons dans le chapitre suivant.

Cette analyse est intéressante pour des fonctions de poids $J : E \rightarrow \{-1, 1\}$, cas où il y a une forte dégénérescence du fondamental.

Dans le cas où $J : E \rightarrow \mathbb{R}$, on doit chercher pour chaque liaison quel est le plus petit ϵ tel que en le rajoutant ou en le retranchant à son poids on perd l'optimalité (ϵ -rigidité).



- arête de poids 1
- ~~~~ arête de poids -1
- arêtes violées dans une sol. optimale.
- † arêtes violées dans une autre sol. optimale.

arêtes rigides

Figure 11

CHAPITRE III

UN ALGORITHME PRIMAL POUR LE PROBLEME DU POSTIER CHINOIS

1 - PRELIMINAIRES

Le problème du Postier Chinois correspond à la recherche d'un parcours à travers une ville tel que chaque rue soit traversée au moins une fois, et que la longueur du parcours soit minimum.

Ce problème peut être formulé ainsi :

Etant donné un graphe $G = (V, E)$ et une fonction de poids $W: E \rightarrow \mathbb{R}_+$, trouver un cycle qui contienne chaque arête au moins une fois, et tel que la somme des poids des arêtes dans le cycle soit minimum. Dans cette somme on compte le poids de chaque arête le nombre de fois que l'arête apparaît dans le cycle.

Il est bien connu que pour un graphe connexe, il existe un cycle qui contient exactement une fois chaque arête si et seulement si le degré de chaque sommet est pair (le graphe est alors dit Eulerien).

Par ailleurs, étant donné un cycle qui contient chaque arête e , $(1+X_e)$ fois, le graphe G' formé à partir de G en ajoutant X_e copies de l'arête e est eulerien.

Ce qui peut s'écrire :

$$\sum_{e \in \delta(i)} (1+X_e) \equiv 0 \pmod{2} \quad \forall i \in V$$

ou encore :

$$\sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2} \quad \text{si } |\delta(i)| \text{ est impair}$$

$$\text{et : } \sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 0 \pmod{2} \quad \text{si } |\delta(i)| \text{ est pair}$$

En notant $I = \{i \in V : |\delta(i)| \text{ est impair}\}$, l'ensemble des sommets impairs, et $V-I$ celui des sommets pairs, le problème peut donc se formuler de la façon suivante :

$$(P1) \left\{ \begin{array}{l} \min \sum_{e \in E} W_e X_e \\ \sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2} \quad i \in I \\ \sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 0 \pmod{2} \quad i \in V-I \\ X_e \in \{0, 1\} \quad e \in E \end{array} \right.$$

Imposer que $X_e \in \{0,1\}$ pour $e \in E$ ne change pas le problème.

En effet, si pour une solution \bar{X} , il existe k tel que $\bar{X}_k \geq 2$, la solution donnée par :

$$\bar{\bar{X}}_e = \begin{cases} \bar{X}_e & \text{si } e \neq k \\ \bar{X}_k - 2 & \text{si } e = k \end{cases}$$

vérifie les contraintes de parité et de plus :

$$\sum_{e \in E} W_e \bar{\bar{X}}_e \leq \sum_{e \in E} W_e \bar{X}_e$$

On trouve une formulation analogue à celle de la recherche d'un quasi-cycle de poids minimum. Ici, les sommets impairs sont les sommets de degré impair, et pour une solution optimale \bar{X} , les arêtes e telles que $\bar{X}_e = 0$ forment un quasi-cycle de poids maximum.

Il est aisé de voir que toute solution de (P1) peut se décomposer en un ensemble de chaînes couplant les sommets impairs, et un ensemble des cycles.

Le fait d'enlever un cycle ne viole pas les contraintes de parité ; donc une solution optimale sera constituée uniquement de chaînes couplant les sommets impairs.

Par exemple, dans le graphe de la Figure 12, doubler les arêtes représentées par des lignes courbes permet d'obtenir un graphe eulérien, les autres arêtes forment un quasi-cycle.

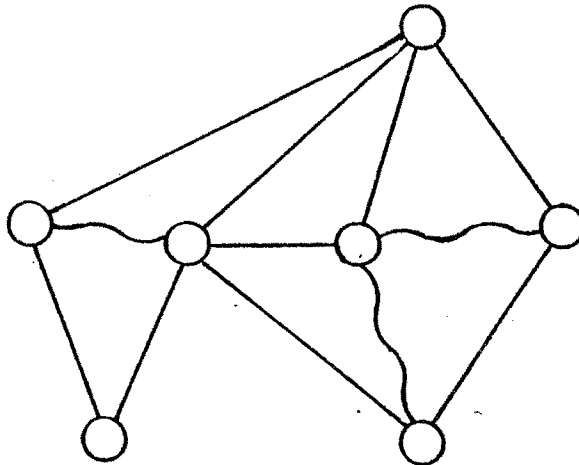


Figure 12

Une manière de résoudre ce problème est de construire, sur les sommets impairs, un graphe complet K_I et d'affecter à chaque arête (ij) un poids égal à la longueur du plus court chemin entre i et j .

Il est facile de montrer qu'un couplage parfait de poids minimum dans K_I correspond à un ensemble de chaînes disjointes de G reliant deux à deux les sommets impairs, et qui constitue une solution optimale de (P1).

Cette approche utilisée par Bieche [6], présente cependant deux inconvénients importants quand elle est appliquée aux verres de spin :

- Le graphe K_I peut avoir beaucoup plus d'arêtes que G .
- L'étude de la multiplicité des solutions de (P1) (dégénérescence du fondamental) n'est pas possible, parce qu'il n'y a pas de correspondance biunivoque entre les couplages parfaits de K_I et les solutions de (P1). Ceci dû au fait que le plus court chemin entre deux sommets n'est pas forcément unique.

C'est la raison pour laquelle nous avons préféré travailler sur un algorithme de résolution directe du problème du postier chinois. Edmonds et Johnson [12] ont utilisé la théorie du couplage pour résoudre ce problème. Ils donnent une description du polyèdre des solutions et un algorithme dual.

Le désavantage d'utiliser un algorithme dual est que l'on n'obtient qu'à la fin une configuration de spins. Nous allons modifier légèrement cet algorithme pour obtenir un algorithme primal. Dans ce cas chaque solution intermédiaire correspond à une configuration de spins, et chaque itération donne un paquet de spins à retourner pour diminuer l'énergie. Cet algorithme peut aussi être utilisé comme procédure de post-optimisation pour étudier la rigidité, et les changements de la solution quand le poids d'une arête change de signe.

Soit $Q = \{S \subset V : |S \cap I| \text{ est impair}\}$.

Comme nous avons vu dans le Chapitre II, (P1) revient à résoudre :

$$(P2) \left\{ \begin{array}{ll} \min \sum_{e \in E} W_e X_e & \\ \sum_{e \in \delta(S)} X_e \geq 1 & S \in Q \\ X_e \geq 0 & e \in E \end{array} \right.$$

dont le dual est :

$$(D2) \left\{ \begin{array}{l} \max \sum_{S \in Q} Y_S \\ \sum_{\{S: e \in \delta(S)\}} Y_S \leq W_e \\ (1) \quad Y_S \geq 0 \quad S \in Q \end{array} \right.$$

Si X est solution réalisable de (P2) et Y est solution réalisable de (D2), X et Y sont des solutions optimales si et seulement si les conditions d'écart complémentaires suivantes sont vérifiées :

$$(2) \quad X_e > 0 \implies \sum_{\{S: e \in \delta(S)\}} Y_S = W_e$$

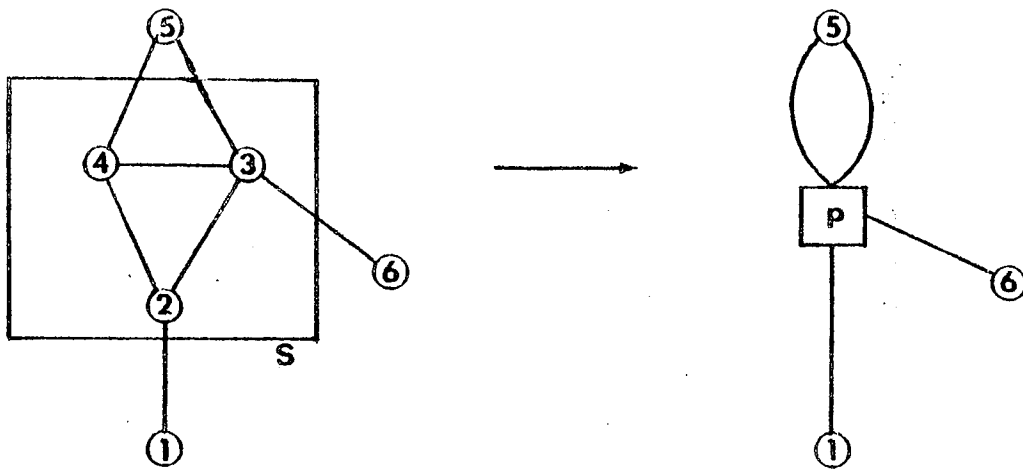
$$(3) \quad Y_S > 0 \implies \sum_{e \in \delta(S)} X_e = 1$$

L'algorithme que nous allons présenter maintient une solution réalisable X de (P2), et une solution Y satisfaisant (1), (2), (3), mais initialement la réalisabilité de (D2) n'est pas demandée. L'algorithme modifie X et Y, jusqu'à ce que Y devienne réalisable.

2 - L'ALGORITHME

Nous allons définir l'opération de contraction d'un ensemble impair $S \in \Omega$, comme le remplacement de S par un pseudo sommet p avec $\delta(p) = \delta(S)$, (on connecte tous les sommets adjacents à un sommet de S au pseudo-sommet p). Dilater p sera l'opération inverse.

A chaque étape de l'algorithme, on aura un graphe contracté G_c obtenu par contraction de certains ensembles impairs dans G .



Contraction de S

Figure 13

La solution initiale doit être une paire (X, Y) , où X est le vecteur caractéristique d'un ensemble de chaînes simples couplant les sommets impairs, Y doit satisfaire (1), (2), (3) et $F = \{S | Y_S > 0\}$ est une famille emboîtée, ce qui veut dire :

$$\forall A, B \in F \quad A \cap B \neq \emptyset \implies A \subset B \text{ ou } B \subset A.$$

Le graphe G_c est obtenu par contraction des ensembles dans F .

On notera :

$$\bar{w}_e = w_e - \sum_{\{S | e \in \delta(S)\}} Y_S, \text{ le coût réduit de l'arête } e.$$

Dans les figures, les pseudo-sommets sont représentés par un carré les sommets par un rond, les arêtes e dont $X_e = 1$ par des lignes courbes, et les arêtes e dont $\bar{w}_e = 0$ et $X_e = 0$ par des lignes droites.

Algorithme

Pas 1 : Si $\bar{W}_e \geq 0 \quad \forall e \in E$ stop. Sinon, soit $a = (k, l)$ une arête telle que $\bar{W}_a < 0$.

Pas 2 : Donner la marque "-" au pseudo-sommet de poids positif contenant une extrémité de a , disons k . Appliquer la procédure de marquage.

Pas 3 : Si l'extrémité l est marquée "+", faire un changement primal (Pas 5). Si non, faire un changement dual (Pas 4).

Pas 4 : Soit :

$$\xi_1 = \min \{ \bar{W}_e : e = (ij), i \text{ est marqué "+" et } j \text{ non marqué, et } \bar{W}_e \geq 0 \}.$$

$$\xi_2 = \min \{ \bar{W}_e / 2 : e = (ij), i \text{ et } j \text{ sont dans des pseudo-sommetts différents marqués "+", et } \bar{W}_e \geq 0 \}.$$

$$\xi_3 = \min \{ Y_S \mid S \text{ est marqué "-" } \}.$$

$$\text{Soit } \delta = \min \{ \xi_1, \xi_2, \xi_3 \}.$$

Changer Y de la manière suivante :

$$Y_S \leftarrow \begin{cases} Y_S - \delta & \text{si } S \text{ est marqué "-"} \\ Y_S + \delta & \text{si } S \text{ est marqué "+"} \end{cases}$$

Si $\delta = \xi_3$ dilater les pseudo-sommetts p marqués "-" tels que $Y_p = 0$.

Enlever toutes les marques et aller en Pas 2.

Pas 5 : Le marquage a permis de détecter un chemin de k à l qui permet de changer la solution primale. Le changement doit être tel que pour chaque pseudo-sommett p on garde la condition.

$$\sum_{e \in \delta(p)} X_e = 1$$

On doit faire :

$$X_a \leftarrow 1$$

$$X_e \leftarrow 1 - X_e \quad \text{pour chaque arête dans ce chemin.}$$

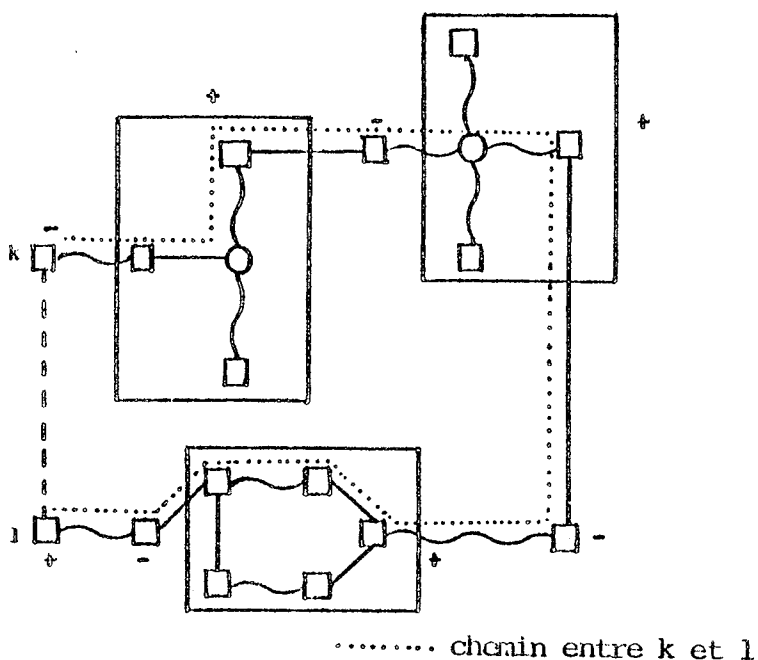


Figure 14

Pour que le coût réduit de a devienne nul, on applique la procédure suivante :

<p>Tant que $\bar{W}_a < 0$ faire :</p> <p>Soit p un pseudo-sommet tel que $a \in \delta(p)$</p> <p>Soit $\delta = \min \{Y_p, -\bar{W}_a\}$</p> <p>on fait $Y_p \leftarrow Y_p - \delta$</p> <p>si $Y_p = 0$ on dilate p.</p>
--

Et on va au Pas 1.

Nous allons maintenant décrire la procédure de marquage, cette procédure est usuelle dans les algorithmes de couplage. Nous recommandons [24], pour des détails sur les structures de données nécessaires à son implémentation.

Marquage

M1) Si le pseudo-sommet i a la marque "-", faire une liste de tous les sommets (et pseudo-sommets) connectés à i par des arêtes e dont $X_e = 1$.

Faire un ensemble impair avec cette liste. On le contracte et on lui donne la marque "+".

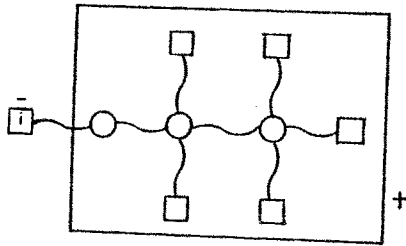


Figure 15

M2) Si le pseudo-sommet i est marqué "+", traiter les arêtes de :

$$\bar{\delta}(i) = \{e=(ij) \in \delta(i) : X_e = 0 \text{ et } \bar{W}_e = 0\}$$

- i) Si j est marqué "+", faire un bouton (M3).
- ii) Si j est un pseudo-sommet non marqué donner la marque "-" à j , appliquer M1) à j et continuer à traiter les arêtes de $\bar{\delta}(i)$.
- iii) Sinon, faire une liste de tous les sommets (et pseudo-sommets) connectés à j avec des arêtes e dont $X_e = 1$, mettre i dans cette liste, enlever la marque de i , faire un ensemble impair de cette liste, le contracter, et lui donner la marque "+".

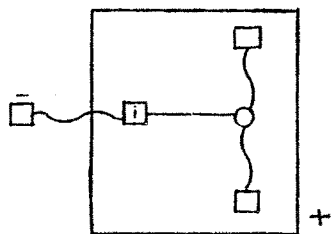


Figure 16

M3) On a parcouru deux chemins à partir de k pour marquer j .

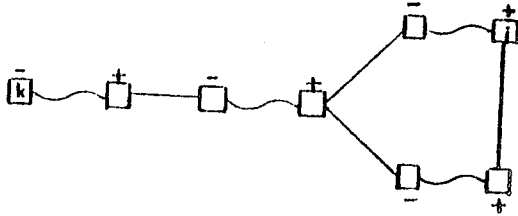


Figure 17

Soient $k, v_1, \dots, v_r, n_1, \dots, n_p, j$ et $k, v_1, \dots, v_r, m_1, \dots, m_q, j$ ces deux chemins.

Constituer un ensemble impair :

$$S = \{n_1, \dots, n_p, m_1, \dots, m_q, v_r, j\}.$$

Enlever les marques des éléments de S , on contracte S et on lui donne la marque "+".

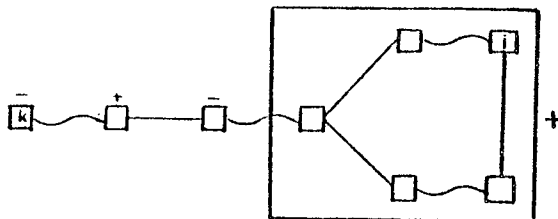


Figure 18

3 - DISCUSSION DE L'ALGORITHME

Dans la description de la procédure de marquage on voit aisément que les ensembles impairs utilisés sont emboîtés les uns dans les autres. Cette propriété permet de borner par $O(|V|)$ le nombre des ensembles impairs de poids positif.

Les changements de la solution du dual maintiennent la nonnégativité des coûts réduits (une fois qu'ils deviennent supérieurs ou égaux à zéro).

Les changements primaux sont faits de telle sorte que pour tout pseudo-sommet p :

$$\sum_{e \in \delta(p)} X_e = 1$$

Le marquage est fait de telle sorte que les changements primaux et duaux préservent les conditions :

$$X_e > 0 \implies \bar{w}_e = 0.$$

Pour une arête $a = (k, l)$ de coût réduit négatif on doit faire une série de marquages à partir d'une des extrémités, par exemple k .

Chaque changement dual conduit à une de ces trois possibilités :

- i) Dilater un pseudo-sommet.
- ii) Créer un pseudo-sommet au prochain marquage.
- iii) Atteindre un nouveau sommet au prochain marquage.

Tant que cette arête a son coût réduit négatif, les pseudo-sommets créés par les marquages à partir de k ne sont pas dilatés. Comme à chaque instant on a $O(|V|)$ ensembles impairs de poids positif, il faut faire au plus $O(|V|)$ marquages pour chaque arête e dont $\bar{w}_e < 0$.

Le nombre de calculs de l'algorithme dépend donc du nombre d'arêtes de coût réduit négatif, et du nombre de calculs nécessaire pour faire un marquage.

Dans le cas d'un graphe planaire chaque marquage prend au plus $O(|V|)$ calculs, et il y a au plus $O(|V|)$ arêtes de coût réduit négatif, ce qui donne une borne de $O(|V|^3)$ pour le nombre de calculs de l'algorithme.

Dans le cas d'une maille planaire carrée, on peut diminuer cette borne en décomposant le graphe en deux sous-graphes comme le montre la Figure 19.

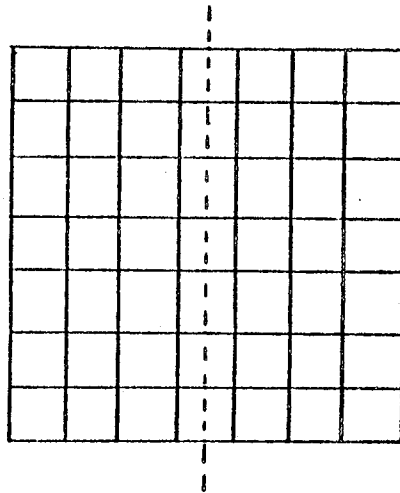


Figure 19

On optimise d'abord sur chaque sous-graphe, en optimisant sur tout le graphe, les seules arêtes de coût réduit négatif étant les arêtes connectant les deux sous-graphes (le nombre de ces arêtes est borné par $|V|^{1/2}$)

Si on appelle $T(|V|)$ une borne pour le nombre d'opérations de cette procédure, T doit vérifier :

$$T(|V|) = 2 T(|V|/2) + \beta |V|^{5/2}$$

$$\text{Donc : } T(|V|) = O(|V|^{5/2}).$$

Signalons que, dans le cas d'un graphe quelconque, la complexité du problème du postier chinois est de $O(|V|^3)$ mais qu'il est nécessaire pour atteindre cette borne d'utiliser des structures de données complexes, inutiles dans le cas d'un graphe planaire.

4 - UNE SOLUTION DE DEPART

On obtient une solution de départ par la procédure suivante :

Soit $I = \{v_1, \dots, v_{2k}\}$, l'ensemble des sommets impairs, soit l_i , la longueur d'une chaîne C_i , entre v_{2i-1} et v_{2i} , pour $i=1, \dots, k$.

Pour $i=1, \dots, k$, on ajoute une arête entre v_{2i-1} et v_{2i} de poids l_i , on fixe à 1 la variable du primal associée à ces arêtes artificielles et zéro tout le reste. On obtient une solution du dual en donnant aux ensembles impairs $\{v_{2i}\}$ $i=1, \dots, k$, le poids l_i .

Cette affectation de valeurs représente la solution formée par l'ensemble des chaînes $\{C_i\}$, $i=1, \dots, k$, et même si le graphe n'est plus planaire, le nombre d'arêtes continue à être borné par $O(|V|)$.

5 - CHANGEMENT DE LA PARITE DE DEUX SOMMETS

Dans le Chapitre V, nous allons étudier les changements des états fondamentaux en fonction de l'accroissement du nombre d'arêtes de poids négatif.

Dans un verre de spins, changer le signe du poids d'une arête revient dans le graphe dual à changer la parité des sommets adjacents.

Si on dispose d'un état fondamental, pour changer la parité de v_1 et v_2 , il suffit d'ajouter les sommets impairs f_1 et f_2 , les arêtes (f_1, v_1) , (f_2, v_2) de poids nul, et (f_1, f_2) de poids $M = 2 \max\{|J_{ij}| : (ij) \in E\}$, on fixe à 1 la variable primale de cette dernière arête, à zéro celles de (v_1, f_1) et (v_2, f_2) , et on crée l'ensemble impair $\{f_1\}$ de poids M . A partir de cette solution un seul changement primal sera nécessaire pour retrouver l'optimalité.

6 - RECHERCHE DES ARETES RIGIDES

Une arête e est dite non rigide s'il existe une solution optimale \bar{X} telle que $\bar{X}_e = 1$, et une autre solution optimale $\bar{\bar{X}}$ telle que $\bar{\bar{X}}_e = 0$. Autrement elle est dite rigide.

Comme l'algorithme fournit une solution optimale du dual \bar{Y} , et une solution réalisable du problème primal est optimale si et seulement si elle vérifie avec \bar{Y} les conditions (2) et (3), nous allons chercher pour chaque arête e les solutions \bar{X} et $\bar{\bar{X}}$ vérifiant :

- i) $\bar{X}_e = 1, \bar{\bar{X}}_e = 0$
- ii) $\bar{W}_f > 0 \Rightarrow \bar{X}_f = \bar{\bar{X}}_f = 0 \quad \forall f \in E$
- iii) $\bar{Y}_S > 0 \Rightarrow \sum_{f \in \delta(S)} \bar{X}_f = \sum_{f \in \delta(S)} \bar{\bar{X}}_f = 1$

Nous allons décrire une procédure qui doit être appliquée d'abord au graphe contracté donné par l'algorithme, et ensuite à l'intérieur de chaque ensemble impair de poids positif.

Procédure Rigidité

Pas 1. Pour chaque arête du graphe contracté, telle que $X_e = 0, \bar{W}_e = 0$, non marquée :

- a) Donner la marque "-" à une extrémité de e étant un pseudo-sommet de poids positif.
- b) Faire un marquage.
- c) Si l'autre extrémité est marquée "+", marquer comme "non rigides", toutes les arêtes appartenant au chemin qui a permis de marquer cette extrémité, ainsi que l'arête e . Si non, marquer e comme "rigide".

Pas 2. A toutes les arêtes du graphe contracté non encore marquées, donner la marque "rigide".

Ensuite, pour chaque pseudo-sommet p de poids positif on enlève les arêtes rigides appartenant à $\delta(p)$, on garde l'arête $e \in \delta(p)$ tel que $X_e = 1$ et les arêtes non rigides de $\delta(p)$ si il en existe.

On joint toutes ces arêtes à un sommet impair artificiel, u , comme schématisé dans la Figure 20.

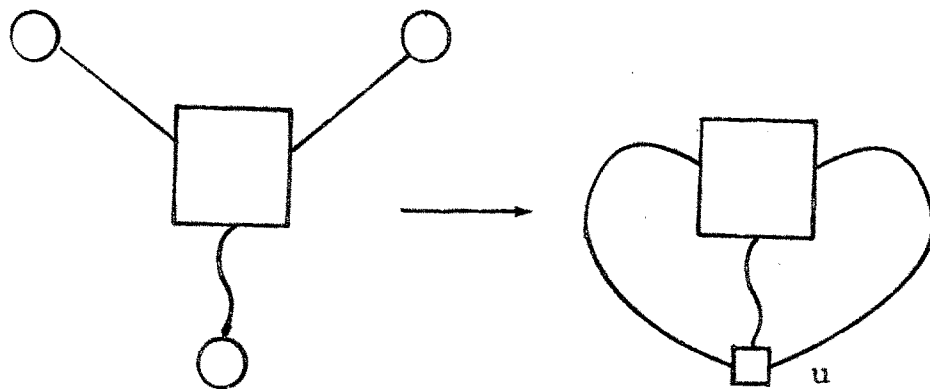


Figure 20

On donne le poids Y_p à l'ensemble $\{u\}$, on fixe à zéro Y_p et les coûts réduits des arêtes $e \in \delta(p)$, on dilate le pseudo-sommet p , et on applique la Procédure Rigidité à ce nouveau graphe contracté.

Comme à chaque arête correspond au plus un marquage, cette procédure nécessite au plus $O(|V|^2)$ opérations pour un graphe planaire.

CHAPITRE IV

CALCUL DE L'ENTROPIE DU FONDAMENTAL ET DE LA FONCTION DE PARTITION DANS LE CAS
BIDIMENSIONNEL

1 - DENOMBREMENT DES COUPLAGES PARFAITS

Le problème du dénombrement des couplages parfaits d'un graphe planaire a été résolu par Kasteleyn [20]. Il a montré que cela revient au calcul d'un déterminant, ce qui lui a permis de retrouver les résultats d'Onsager [26].

Nous allons rappeler cette méthode, (pour une démonstration de ces résultats voir [5]).

A un graphe orienté antisymétrique $G = (V, E)$ on peut associer une matrice $B = [b_{ij}]$, en posant :

$$b_{ij} = \begin{cases} + w_{ij} & \text{si } (v_i, v_j) \in E \\ - w_{ij} & \text{si } (v_j, v_i) \in E \\ 0 & \text{si non} \end{cases}$$

Dans cette section les coefficients $\{w_{ij}\}$ prennent la valeur 1, mais dans les sections suivantes il pourront prendre d'autres valeurs, pour dénombrer les couplages parfaits de poids donné.

La matrice B sera appelée la matrice adjointe de G .

Si B est d'ordre $n = 2k$, on appelle pfaffien de B l'expression :

$$Pf(B) = \sum_{\sigma} \epsilon(\sigma) b_{i_1 i_2} b_{i_3 i_4} \dots b_{i_{2k-1} i_{2k}}$$

avec :

$$i_1 < i_3 < \dots < i_{2k-1}$$

$$i_1 < i_2, i_3 < i_4, \dots, i_{2k-1} < i_{2k}$$

où σ est la permutation

$$\sigma = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ i_1 & i_2 & \dots & i_n \end{pmatrix}$$

et $\epsilon(\sigma)$ est la signature de la permutation.

Chaque terme non nul du développement du pfaffien correspond à un couplage parfait, et on peut démontrer que :

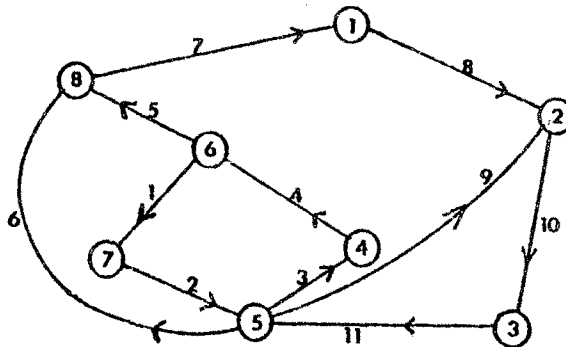
$$(\text{Pf}(B))^2 = \det(B)$$

Etant donné un graphe $G = (V,E)$, une orientation des arêtes de G est dite "bonne" si tous les termes non nuls du développement de $\text{Pf}(B)$ ont le même signe.

Kasteleyn [20] a démontré que pour un graphe planaire, une telle orientation existe toujours, et elle peut être construite par la procédure suivante :

On oriente les arêtes de G de proche en proche, en imposant chaque fois, au domaine formé par les faces du graphe partiel des arêtes orientées, d'être simplement connexe dans G ; chaque fois qu'on placera une arête, on ne ferme pas plus d'une face finie de G . Si le contours de cette face est pair, on donne à l'arête une orientation telle que quand on parcourt ce contours on rencontre un nombre impair d'arêtes orientées dans le sens du parcours.

Par exemple, dans le graphe de la Figure 21, les numéros associés à chaque arête donnent l'ordre où elles ont été orientées.



Matrice B

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\det(B) = 4$$

Figure 21

2 - CONFIGURATIONS DE SPINS ET COUPLAGES PARFAITS

Dans le chapitre II, nous avons vu que chaque configuration de spins correspond à une solution du système.

$$(1) \begin{cases} \sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2} & \text{si } i \text{ est impair} \\ \sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 0 \pmod{2} & \text{si } i \text{ est pair} \\ X_e \in \{0,1\} \quad \forall e \end{cases}$$

où les variables X_e sont associées aux arêtes e du graphe G^* , dual du graphe G représentant le verre des spins.

Nous allons transformer G^* en un graphe \tilde{G} de manière à mettre en correspondance biunivoque les solutions de (1) et les couplages parfaits de \tilde{G} .

Les transformations seront décrites par des figures. Les arêtes dont la variable associée vaut 1 seront marquées par des lignes doubles, de même que les arêtes appartenant au couplage dans \tilde{G} .

Pour un sommet impair i de degré 3, on utilise la transformation de la Figure 22

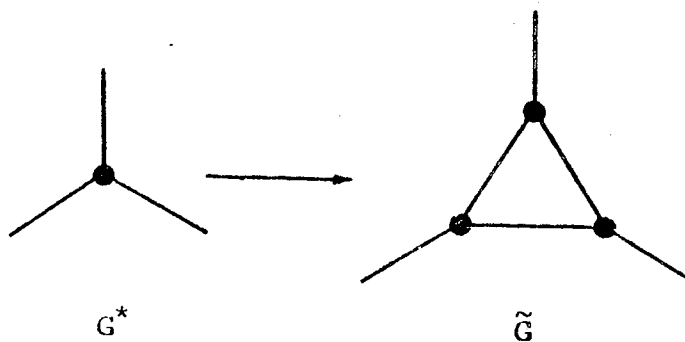


Figure 22

Les solutions de :

$$\sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2}$$

sont en correspondance avec les couplages parfaits du nouveau graphe comme c'est indiqué ci-dessous :

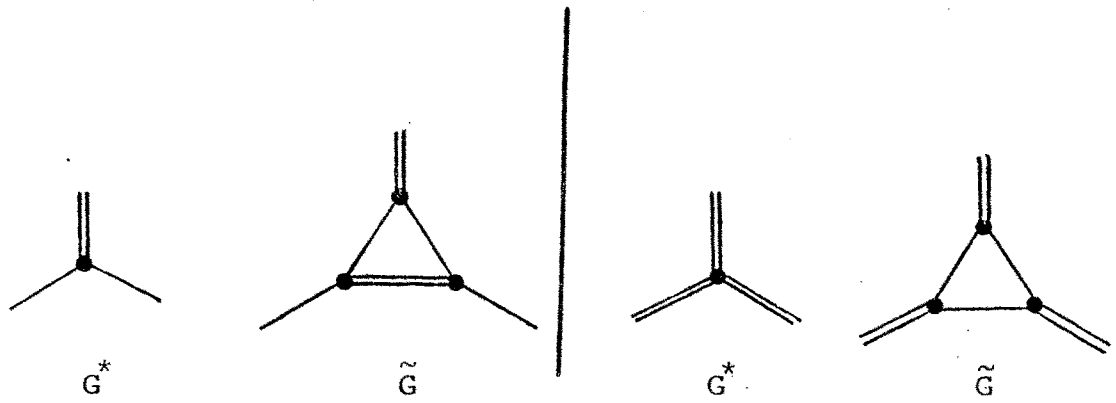


Figure 23

Pour un sommet pair i de degré 3 on transforme G^* de la façon suivante :

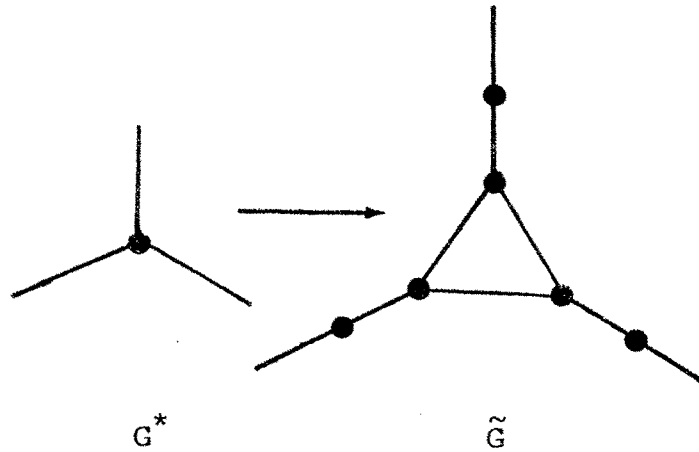


Figure 24

Les solutions de :

$$\sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 0 \pmod{2}$$

correspondent aux couplages parfaits de G comme l'indique la Figure.

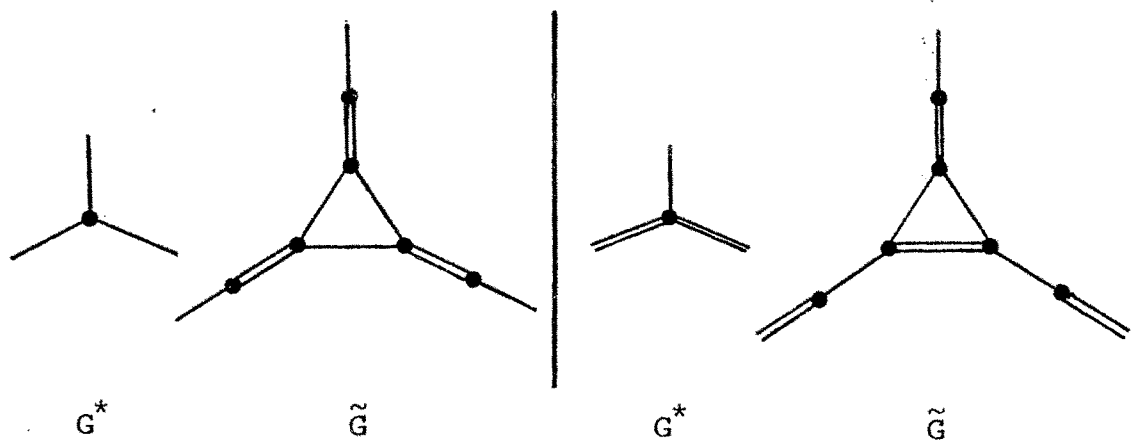


Figure 25

Pour un sommet impair i , de degré 4, on fait la transformation schématisée dans la Figure 26

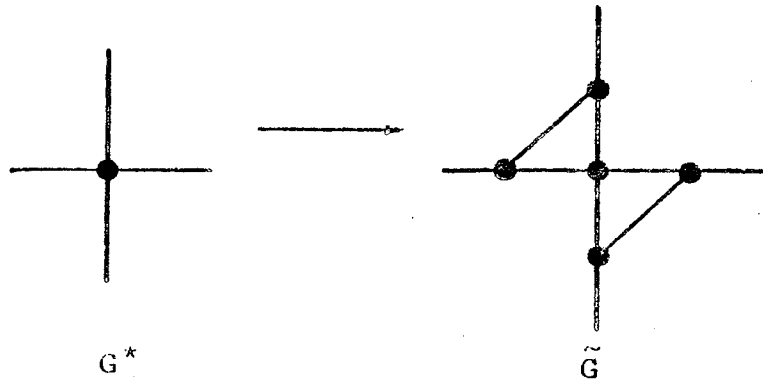


Figure 26

Chaque solution de :

$$\sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2}$$

correspond à un couplage parfait unique dans \tilde{G} comme l'indique la Figure 27

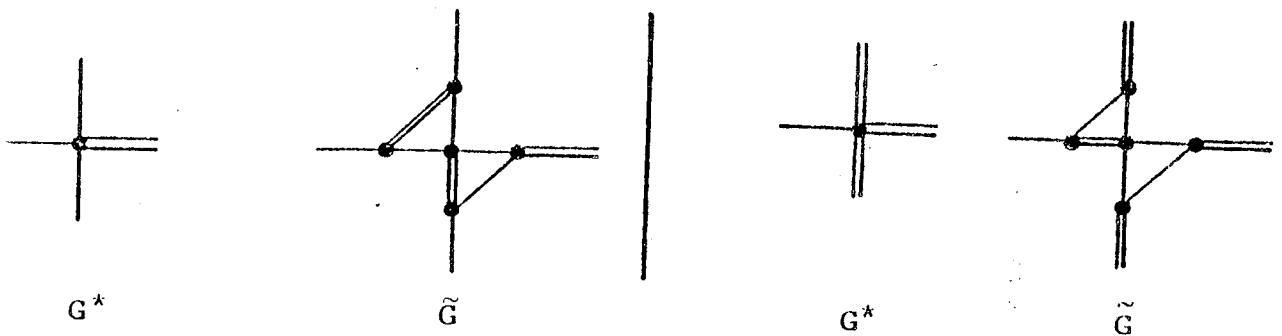


Figure 27

Pour les sommets i pairs, de degré 4, la transformation est celle de la Figure 28

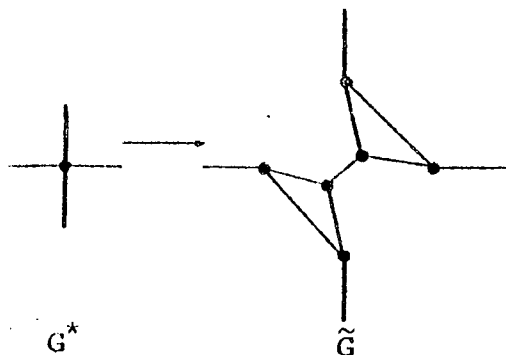


Figure 28

Les solutions de :

$$\sum_{e \in \delta(i)} X_e \equiv 1 \pmod{2}$$

sont mises en correspondance avec les couplages parfaits du nouveau graphe, comme indiqué à la Figure 29

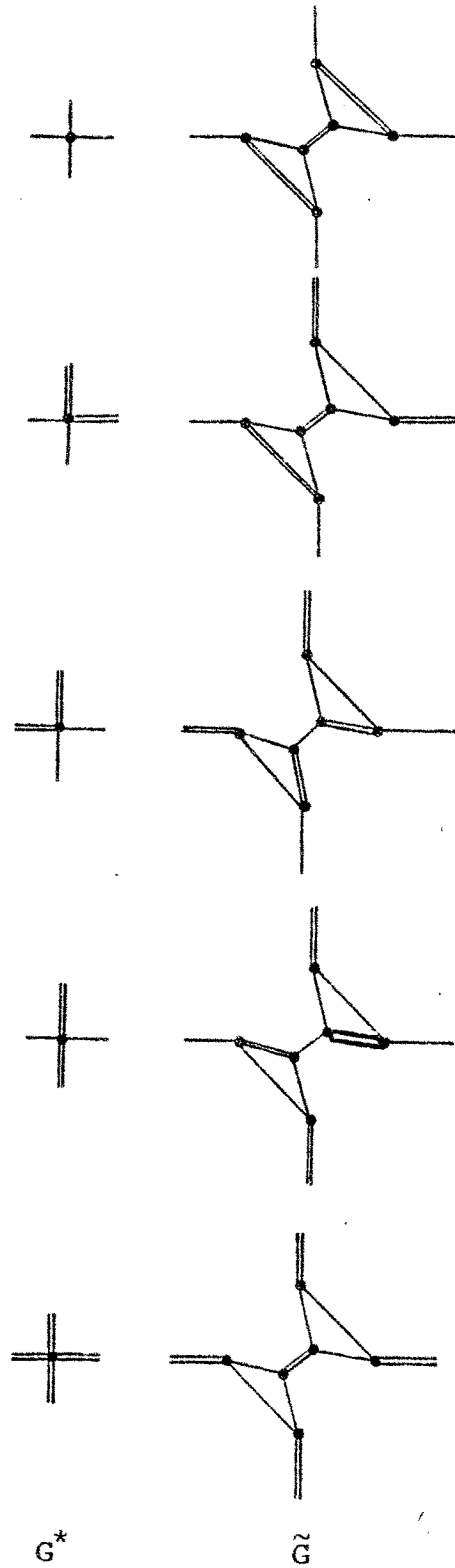
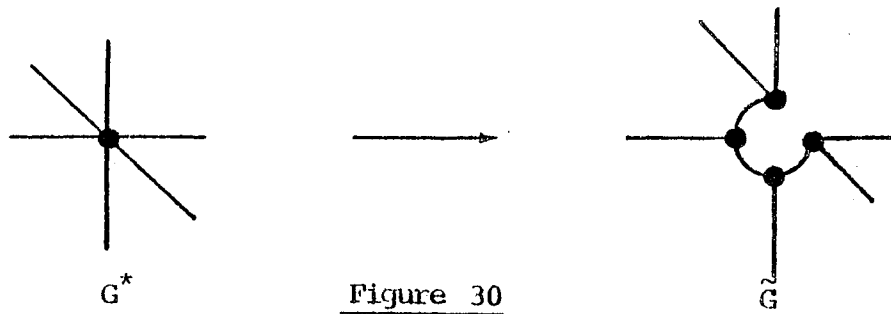


Figure 29

Pour un sommet i de degré plus grand que 4 on fait la transformation suivante, Figure 30, ce qui ramène ce sommet à un ensemble de sommets de degré 3.



Si i est pair tous les sommets de \tilde{G} correspondants seront déclarés pairs, et si i est impair tous seront déclarés pairs, sauf l'un quelconque d'entre eux qui sera déclaré impair.

$$(2) \quad X_{ij} > 0 \implies U_i + U_j - \sum_{(S: (ij) \in \gamma(S))} Y_S = C_{ij}$$

$$(3) \quad Y_S > 0 \implies \sum_{(ij) \in \gamma(S)} X_{ij} = \frac{|S|-1}{2}$$

Donc, une solution optimale (\bar{U}, \bar{Y}) de (D2) étant connue, il suffit de dénombrer les couplages parfaits dont les vecteurs représentatifs vérifient (2) et (3) avec (\bar{U}, \bar{Y}) .

Pour les conditions (2) il suffit d'enlever du graphe les arêtes telles que $U_i + U_j + \sum Y_S < C_{ij}$.

Pour les conditions (3) nous allons utiliser le fait que la famille $F = \{S \mid Y_S > 0\}$ donnée par l'algorithme, est une famille emboîtée.

On notera $P(N, A, w)$ le pfaffien de la matrice adjointe du graphe $G' = (N, A)$, après avoir donné une bonne orientation aux arêtes de G' .

Algorithme

Pas 0) Enlever les arêtes telles que :

$$U_i + U_j + \sum Y_S < C_{ij}.$$

Initialiser w_{ij} à 1 pour toutes les arêtes qui restent.

Pas 1) Si $F = \emptyset$ aller au Pas 3, si non, prendre un membre minimal S de F .

Pas 2) Pour chaque arête $(k, l) \in \delta(S)$, (où $k \in S$), faire :

$$w_{kl} \leftarrow |P(S - \{k\}, \gamma(S - \{k\}), w)|$$

(w_{kl} est le nombre des couplages parfaits dans $S - \{k\}$ qui vérifient les conditions (2) et (3)).

Contracter l'ensemble S en un pseudo-sommet p , avec $\delta(p) = \delta(S)$,

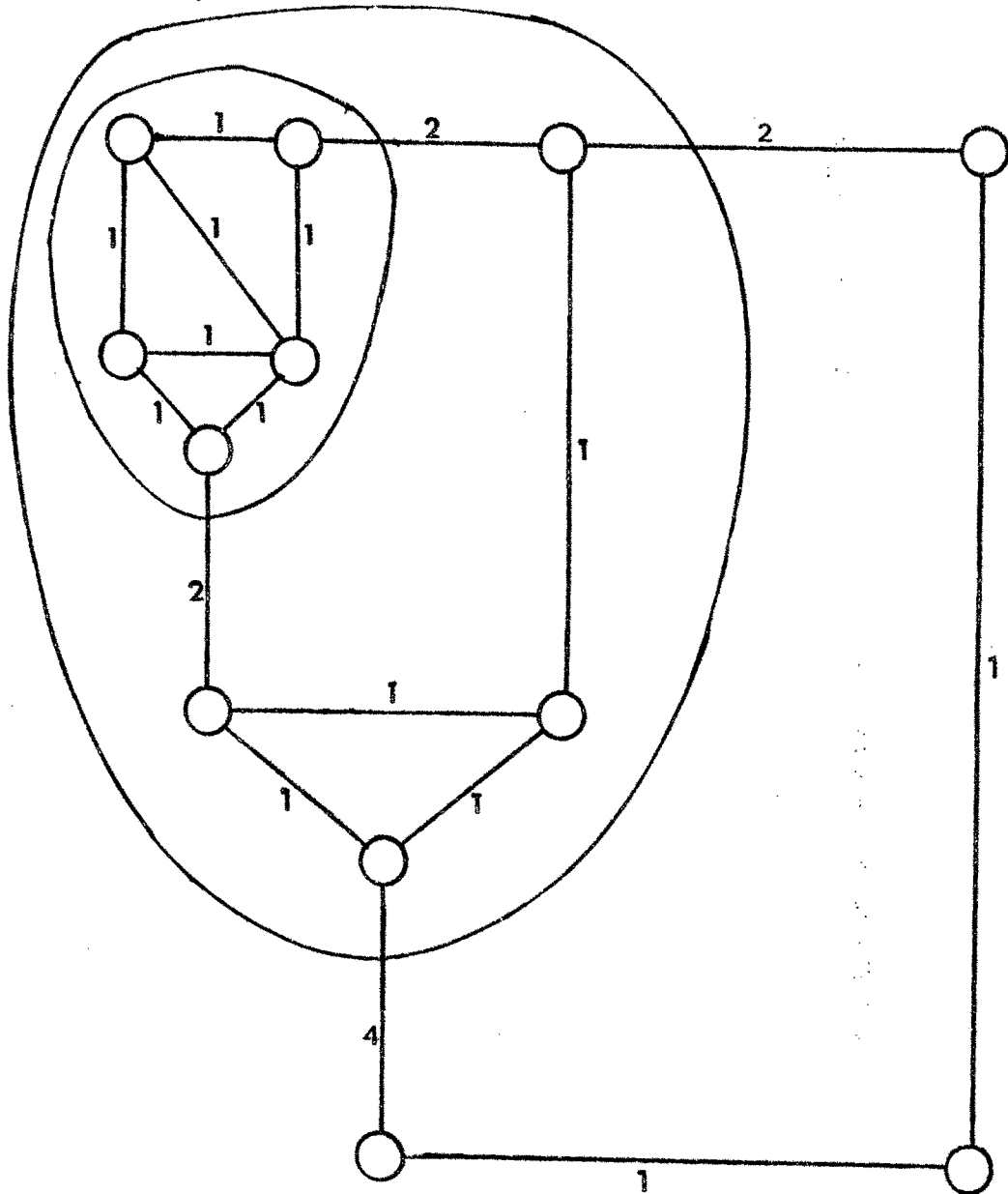
faire : $F \leftarrow F - \{S\}$, aller au Pas 1.

Pas 3) Il reste un graphe avec des pseudo-sommets et des sommets originaux.

Donner une bonne orientation à ce dernier graphe, et calculer le pfaffien de la matrice adjointe, qui donnera le nombre des couplages optimaux.

Remarque : La cardinalité de la famille F étant bornée par $O(|V|)$, et le calcul d'un pfaffien étant polynomial, l'algorithme est polynomial.

Dans la Figure 31, on illustre une application de l'algorithme, les arêtes dessinées sont les arêtes (ij) dont $U_i + U_j + \sum_S Y_S = C_{ij}$, les nombres associés aux arêtes sont les nombres $\{w_{ij}\}$ calculés par l'algorithme, et les ensembles des sommets marqués sont les ensembles S dont $Y_S > 0$.



Il existe 6 couplages parfaits optimaux.

Figure 31

4 - SUR LE CALCUL DE LA FONCTION DE PARTITION

La fonction de partition est :

$$f(T) = \sum_{\omega \in \Omega} \exp(-H(\omega)/KT)$$

où Ω est l'ensemble des configurations de spins et $H(\omega)$ l'énergie de la configuration ω .

En posant :

$$y = \exp(-1/KT)$$

la fonction de partition peut s'écrire :

$$f(T(y)) = \sum b_H y^H$$

où b_H est le nombre de configurations de spins d'énergie H .

Nous allons décrire comment obtenir les coefficients b_H en temps polynomial quand les poids sur les arêtes prennent les valeurs $+1$ et -1 .

Si dans le graphe \tilde{G} on pose $w_{ij} = X$, une inconnue, pour les arêtes de G^* , et $w_{ij} = 1$ pour les autres, le pfaffien est donné par le polynôme suivant :

$$\text{Pf}(B) = a_0 + a_1 X + \dots + a_r X^r$$

où a_k est le nombre de couplages parfaits de \tilde{G} ayant k arêtes correspondant aux arêtes de G^* .

En évaluant ce polynôme pour $X = 0, 1, \dots, r$ et en faisant une interpolation on obtient les coefficients a_k en temps polynomial, qui donnent le nombre des configurations de spins ayant k arêtes violées.

Les coefficients $\{b_H\}$ peuvent être obtenus facilement à partir des coefficients $\{a_k\}$.

CHAPITRE V

SIMULATIONS D'ECHANTILLONS PLANAIRES

1 - LES ECHANTILLONS

Nous avons simulé des pavages infinis du plan obtenus par répétition d'un même motif de dimension $P \times P$. La Fig.32 illustre un tel pavage par une grille de dimension 3×3 .

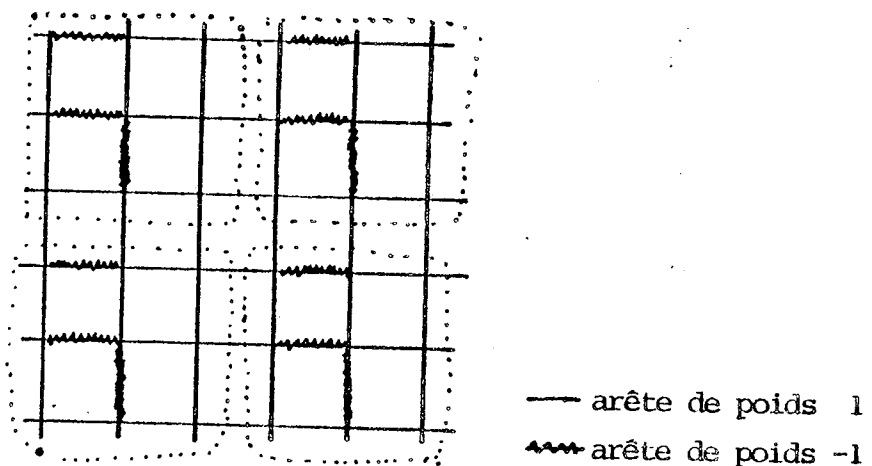
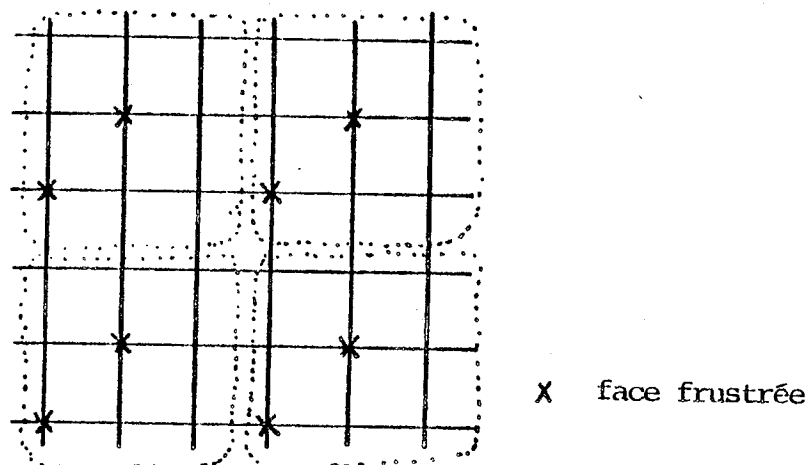


Figure 32

L'avantage de cette approche par rapport à la simple simulation d'une grille carrée $P \times P$, est le fait que tous les spins ont 4 voisins. Ce qui n'est pas le cas pour une grille finie, où les spins du bord ont la particularité de ne subir que trois interactions.

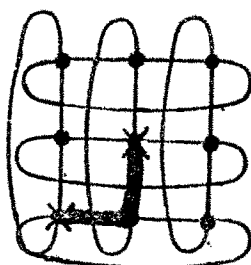
Dans le graphe dual associé à ce pavage, les sommets pairs et impairs se répètent d'une manière régulière (dans la Figure 33 on montre le graphe dual associé au pavage de la Figure 32).



Nous faisons l'approximation de fermer un de ces motifs pour former un tore et résoudre le problème du postier chinois dans ce graphe.

On doit remarquer que la configuration de spins ainsi obtenue n'est pas toujours représentable sur un tore mais peut se représenter sur le maillage infini. De même la solution optimale sur le tore peut être sub-optimale sur le maillage infini, [6].

La Figure 34 montre le tore associé au maillage de la Figure 33 .



 arête violée

Figure 34

Dans notre exemple, la solution de la Figure 34 , représente la configuration de spins suivante :

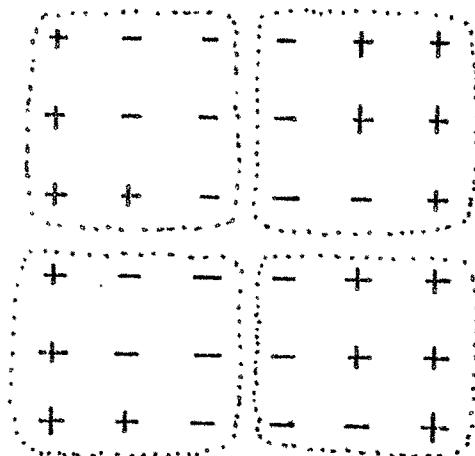


Figure 35

Dans nos échantillons les liaisons prennent les valeurs +1 et -1, et notre étude est basée sur l'évolution des fondamentaux en fonction de la concentration des liaisons négatives.

Pour ce faire, on tire un nombre aléatoire pour chaque liaison et on les ordonne. Pour avoir un échantillon avec k liaisons négatives, on prend celles associées aux k plus petits nombres. En augmentant k, on a une famille d'échantillons où chacun est obtenu par adjonction des liaisons négatives au précédent.

Ces familles sont traitées par la procédure de changement des signes des liaisons décrite dans le Chapitre III. On peut remarquer que le nombre de calculs nécessaire pour traiter une famille complète est de $O(n^3)$, (n étant le nombre de spins). Pour chacun des membres de la famille on obtient un fondamental et l'ensemble des liaisons rigides.

Nous avons choisi d'étudier 3 tailles (10 x 10, 15 x 15, 20 x 20), et les concentrations de faces frustrées suivantes :

	taille		
	10 x 10	15 x 15	20 x 20
	34	78	140
nombre de	36	84	148
faces	38	90	156
frustrées	40	112	200
	50		
nombre	32	14	8
d'échantillons			

Dans un échantillon infini la concentration théorique C_T de faces frustrées en fonction de la concentration X de liaisons négatives est donnée par la formule suivante :

$$C_T(X) = 4[X(1-X)^3 + X^3(1-X)]$$

Quand il s'agit d'un échantillon fini, la concentration C_F de faces frustrées peut décrire une courbe comme celle de la Figure 36

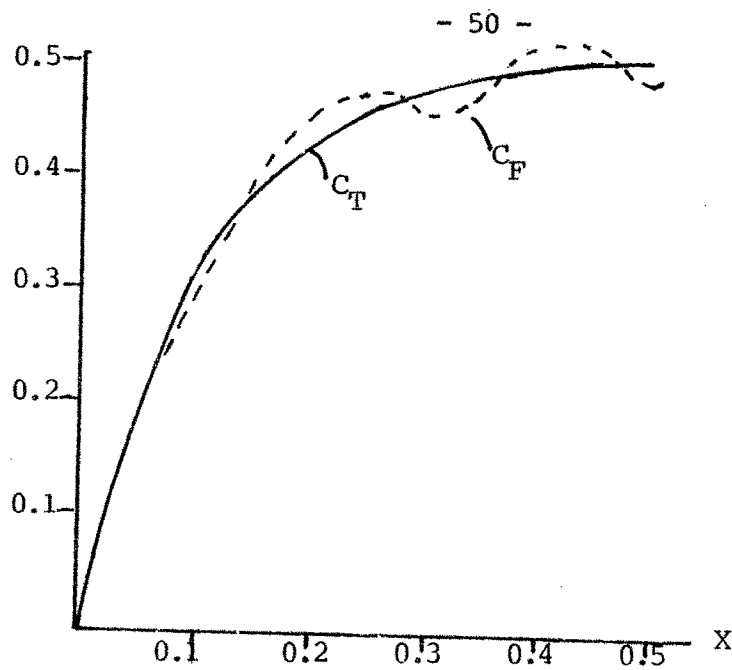


Figure 36

Les concentrations des faces frustrées au voisinage de 50 %, (situées dans la partie la plus plate de la courbe C_T) peuvent être atteintes dans un échantillon fini à des concentrations des liaisons négatives voisines de 30 %. C'est pour cette raison que dans nos échantillons nous cherchons la concentration X la plus proche de 0.5 qui donne $C_F(X) = 0.5$.

Ce problème est moins important pour des concentrations de faces frustrées au voisinage de 30 %. On augmente donc dans ce cas la concentration des liaisons négatives jusqu'à ce que la valeur requise pour C_T soit atteinte.

2 - RIGIDITE DES ETATS FONDAMENTAUX

Les figures qui suivent illustrent une des familles d'échantillons décrites dans la section 1.

On peut rencontrer trois types des situations :

- Le cas rigide (Figure 38 C), ce type d'échantillons représente un ordre à longue distance dans toutes les directions du maillage infini.
- Le cas fracturé par une ligne, (Figure 40C). Où une ligne de fracture qui traverse l'échantillon représente une famille des lignes infinies parallèles traversant le pavage du plan.

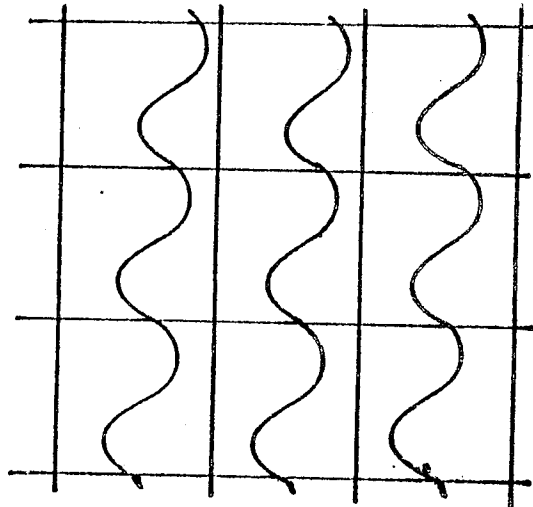


Figure 37

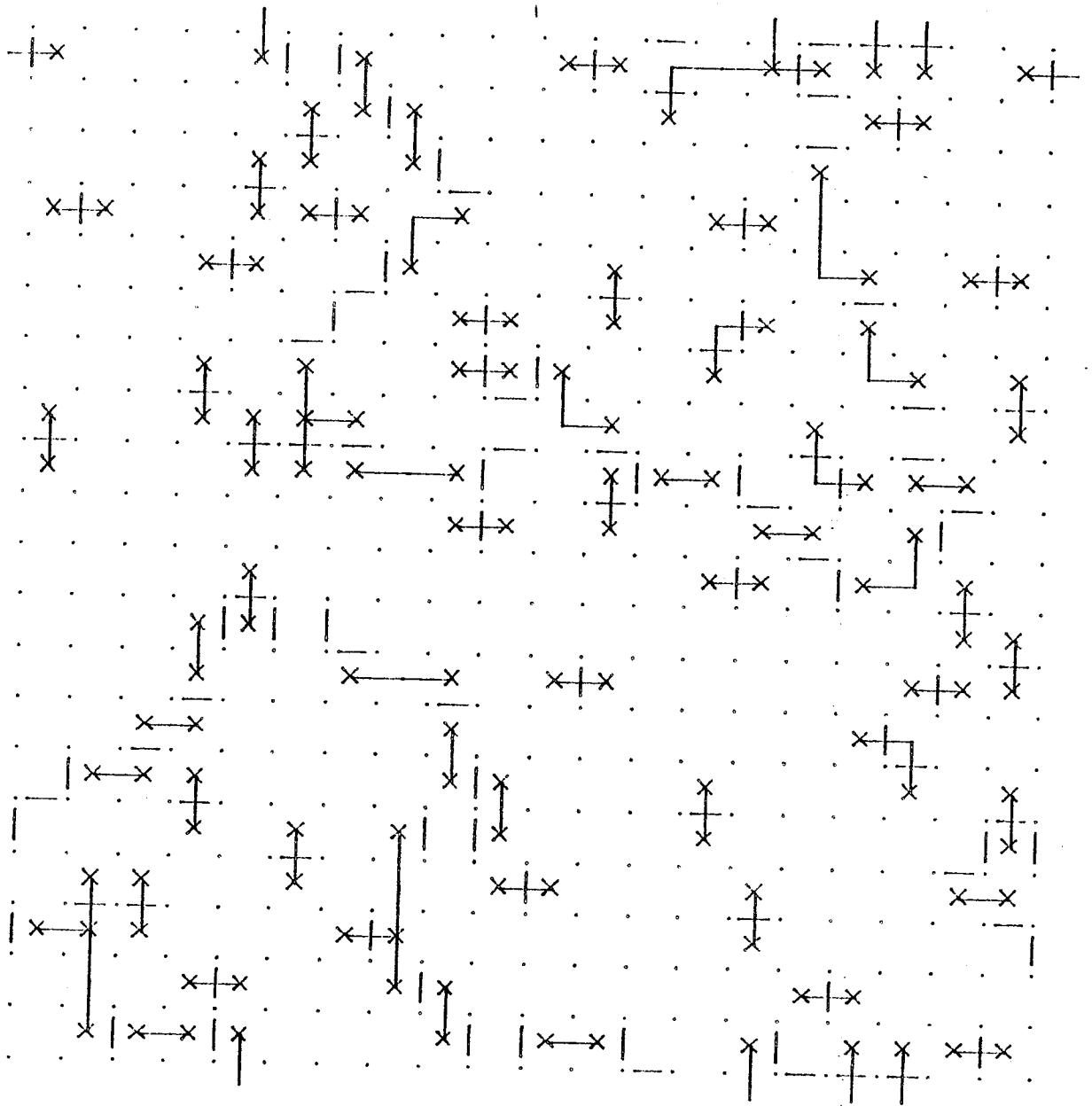
- Le cas complètement fracturé, (Figure 41C).

Ce cas représente un maillage infini fragmenté en morceaux rigides finis.

Dans les Figures 38-41 on présente une famille d'échantillons de taille 20×20 . Pour chaque échantillon apparaissent: d'abord le schéma des liaisons violées (a), ensuite l'état fondamental associé (b), et finalement les amas rigides (c).

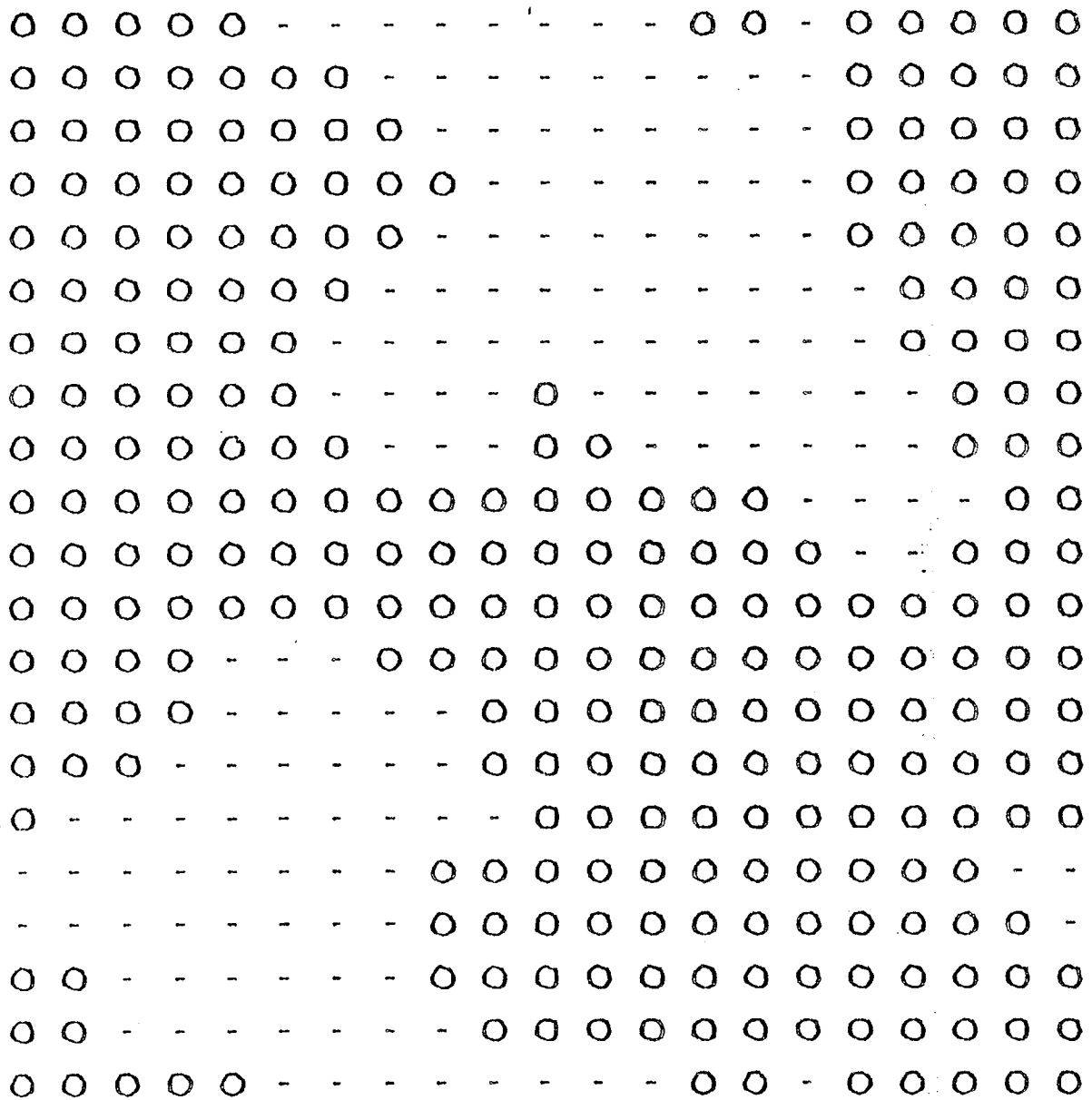
Dans les Figures (a) les liaisons négatives sont représentées par un trait, les faces frustrées par une x et les liaisons violées par un trait perpendiculaire aux liaisons.

Dans les Figures (b) les spins i tels que $S_i = 1$ sont représentés par un rond et les spins i tels que $S_i = -1$ par un signe -.



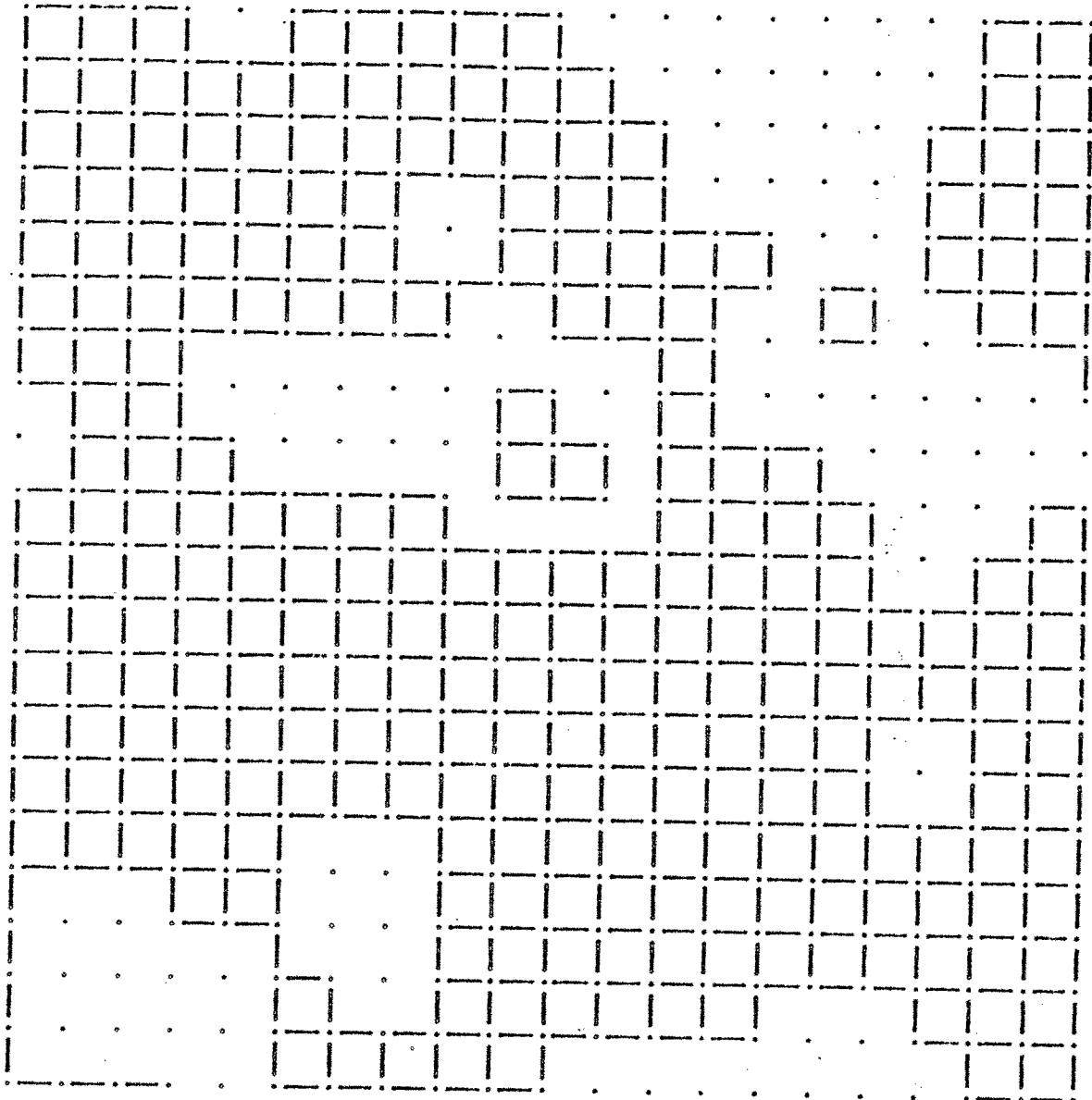
101 liaisons négatives (12.6%), 140 faces frustrées, 89 liaisons violées, Energie par spin = -1.56.

Figure 38 (a)



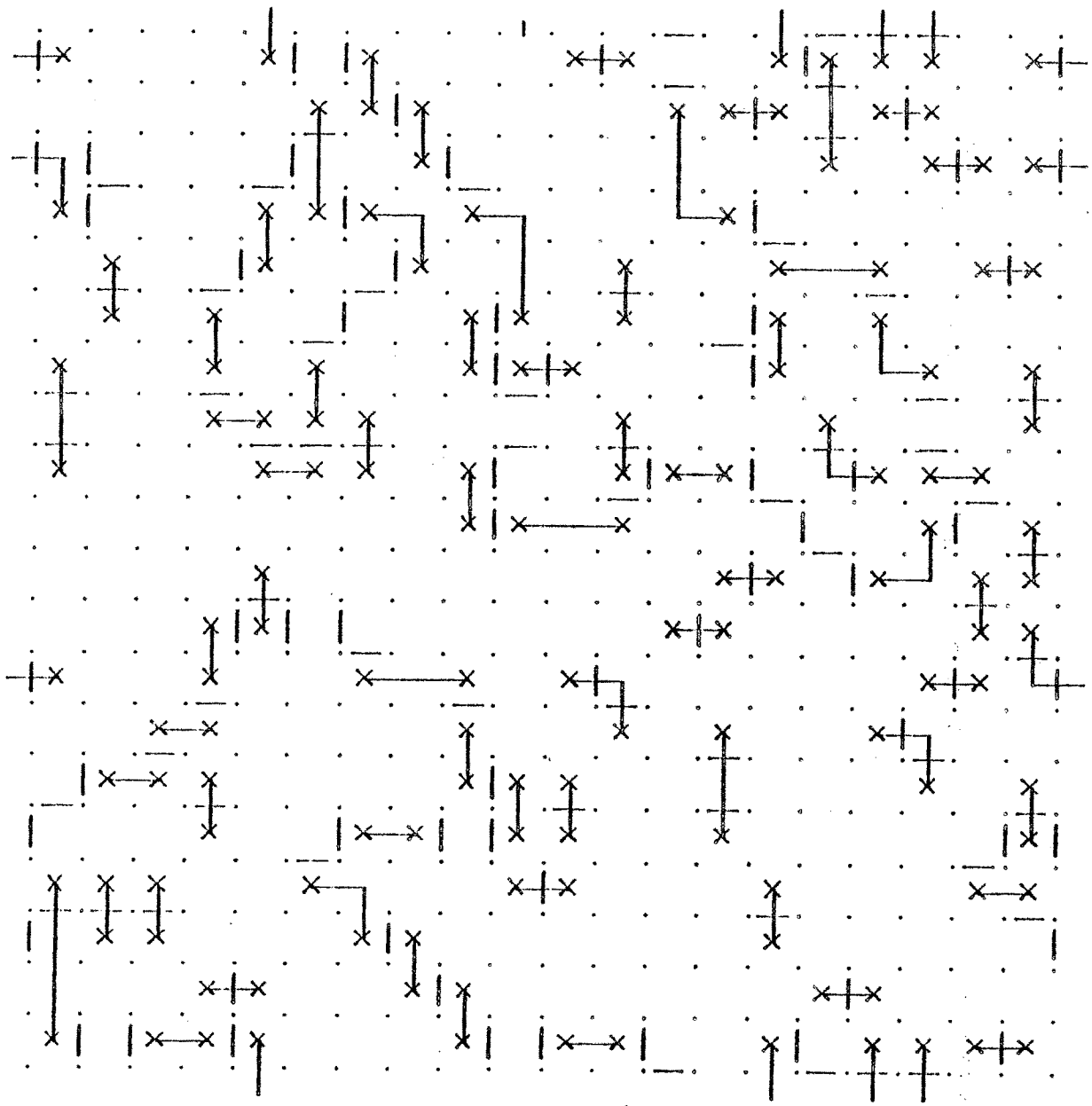
Un état fondamental

Figure 38 (b)



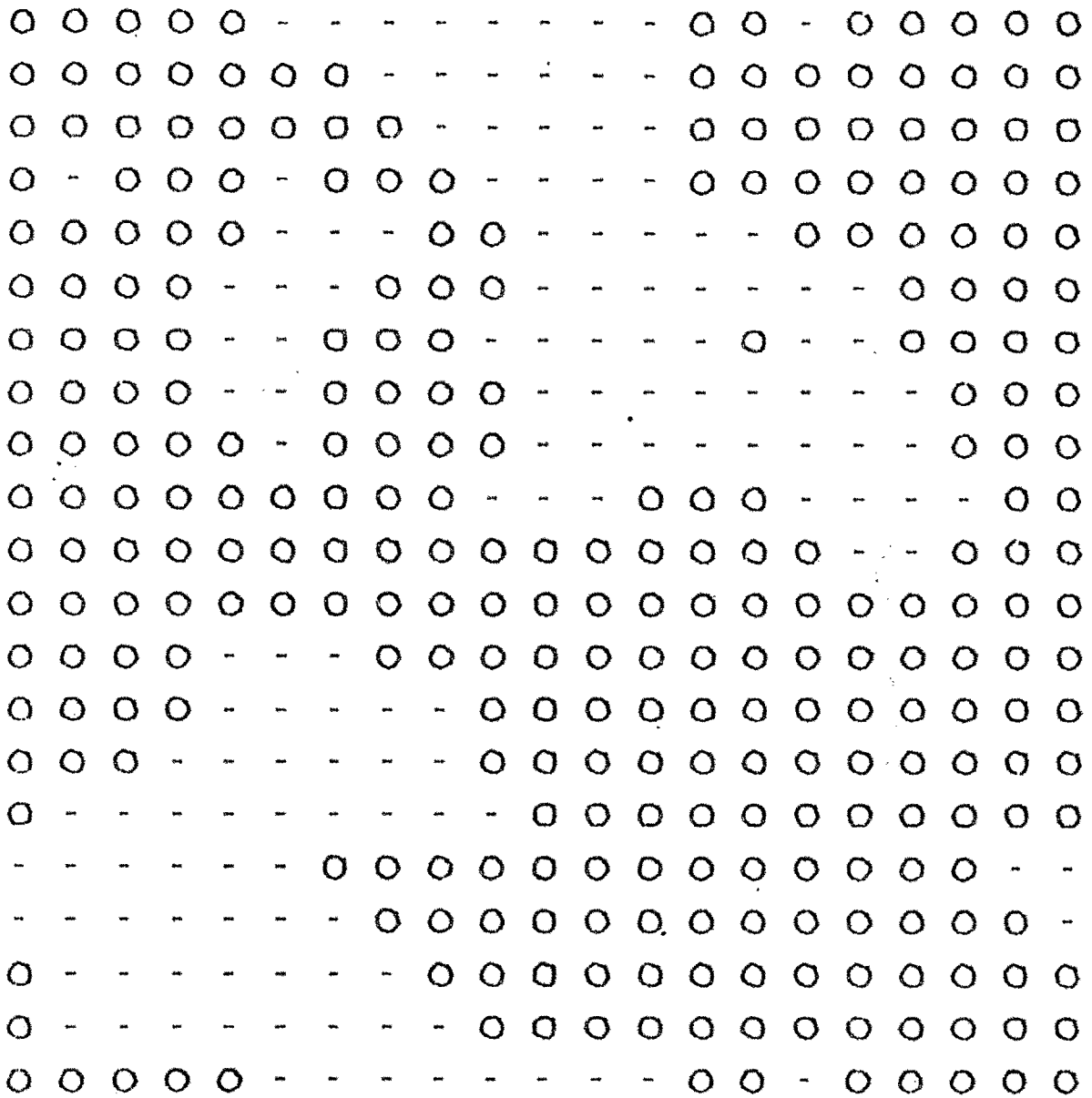
597 liaisons rigides, 583 liaisons dans le plus grand amas rigide.

Figure 38 (c)



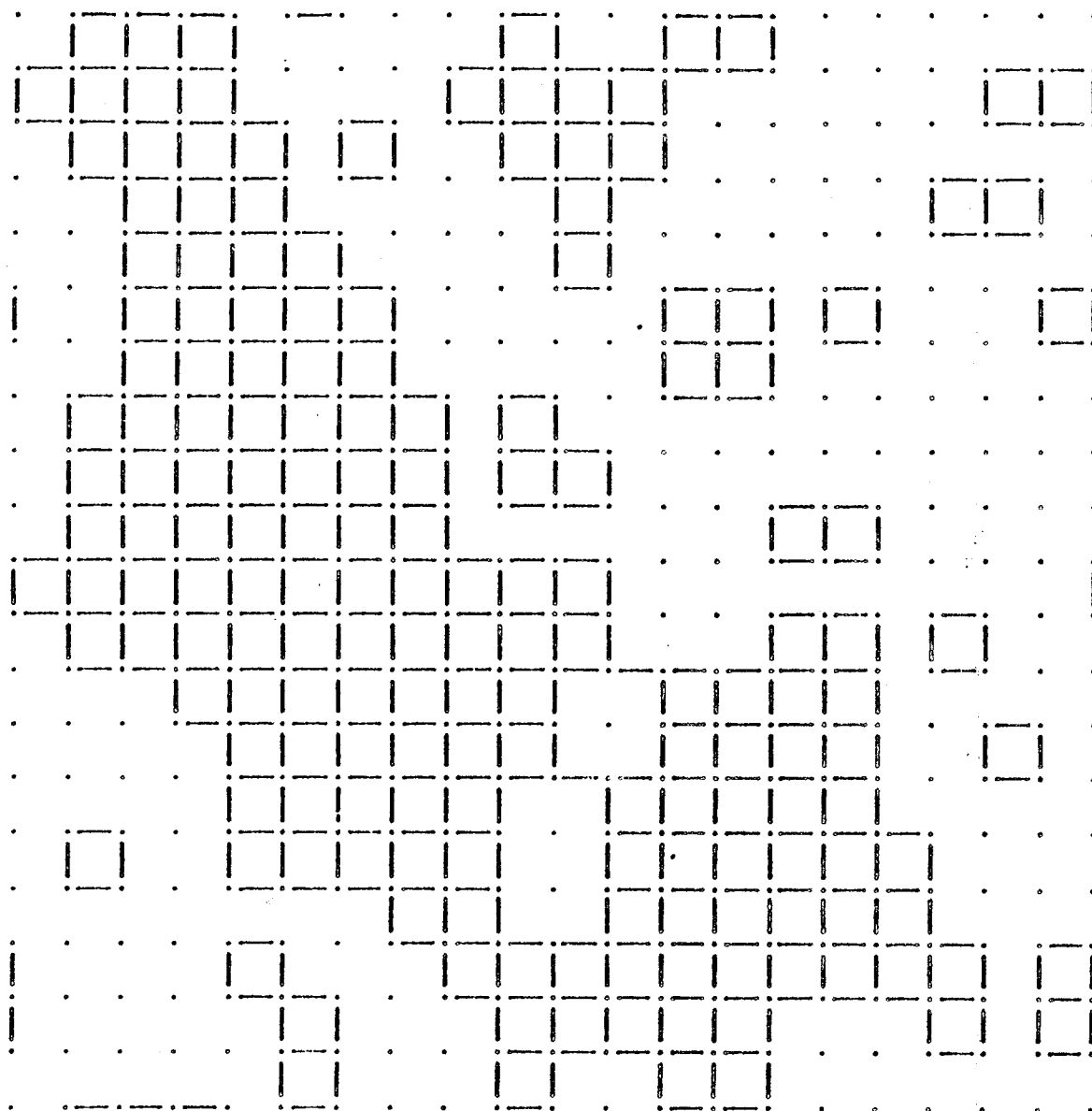
142 liaisons négatives (15.2 %), 148 faces frustrées, 96 liaisons violées, Energie par spin = -1.52.

Figure 39 (a)



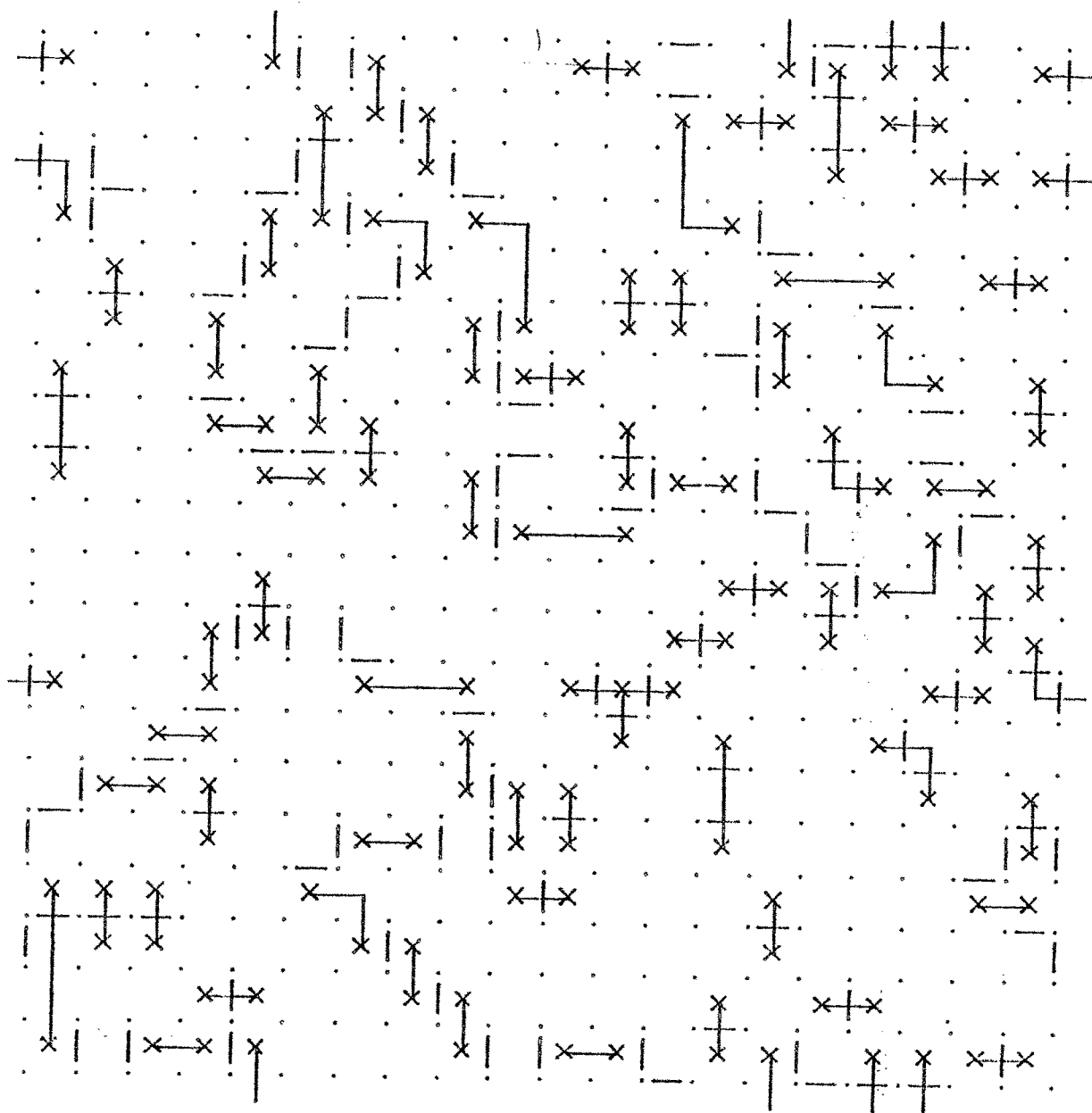
Un état fondamental

Figure 39 (b)



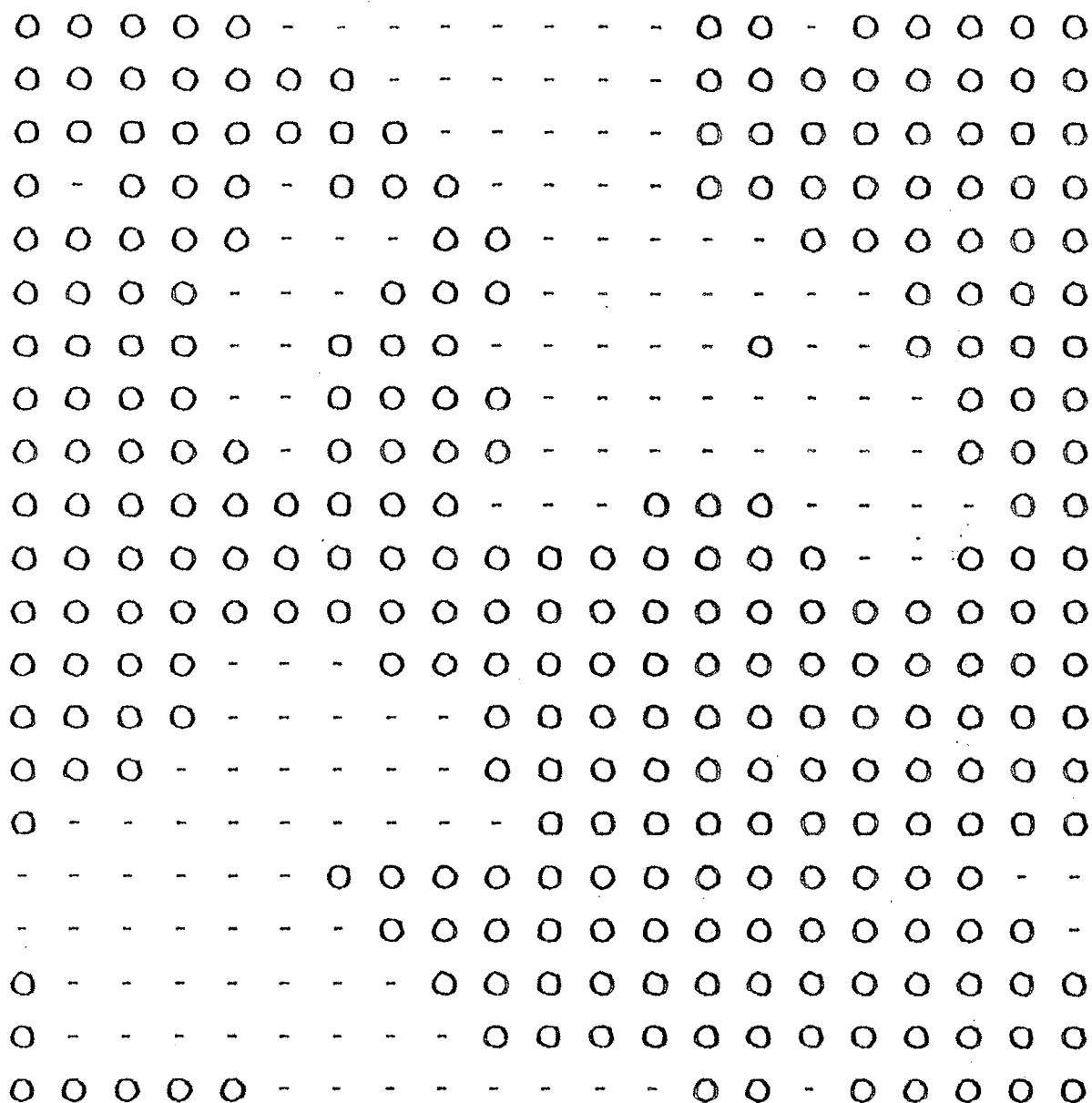
451 liaisons rigides, 373 liaisons dans le plus grand amas rigide

Figure 39 (c)



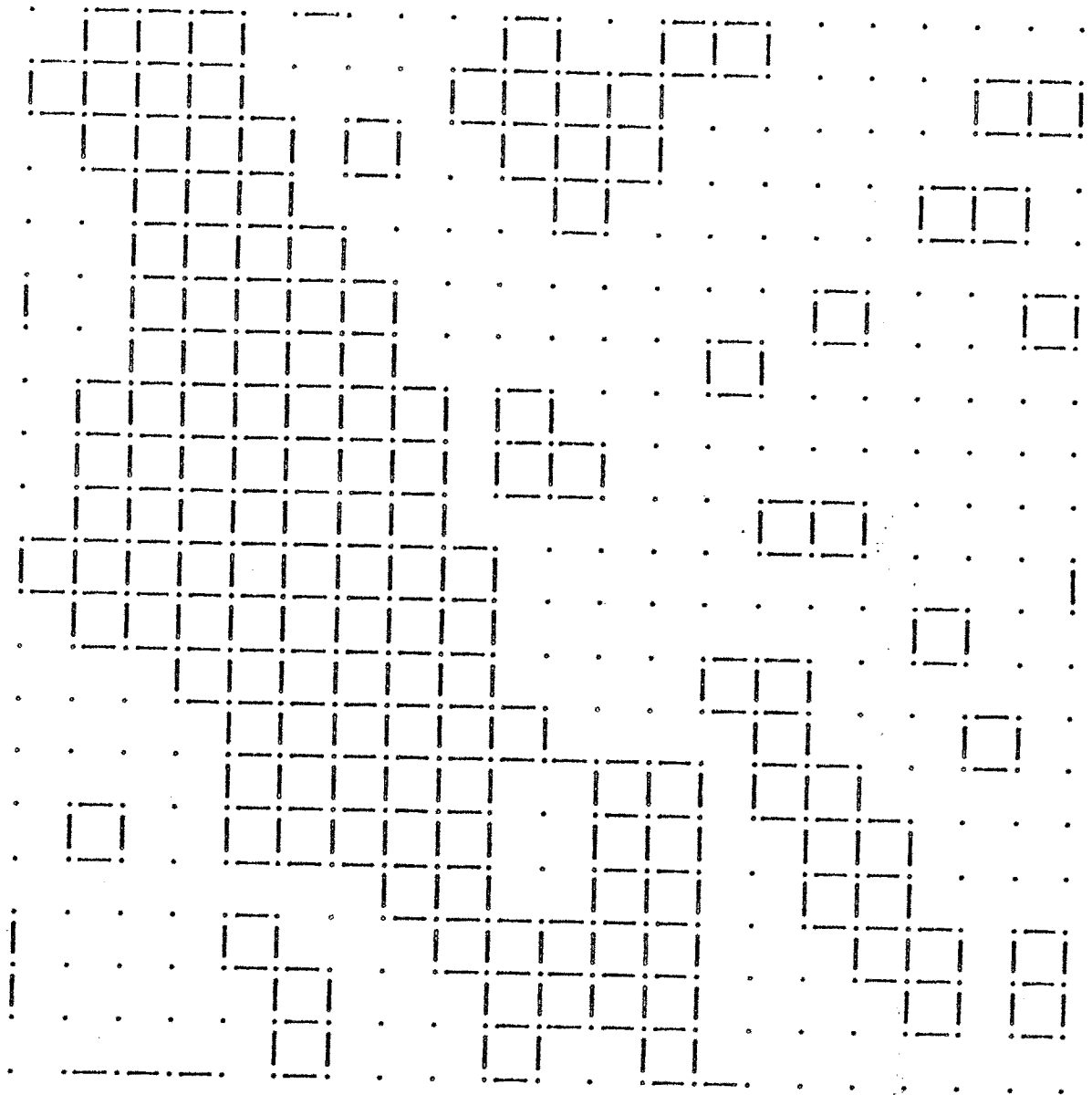
126 liaisons négatives (15.7%), 156 faces frustrées, 100 liaisons violées,
Energie par spin ≈ -1.5

Figure 40 (a)



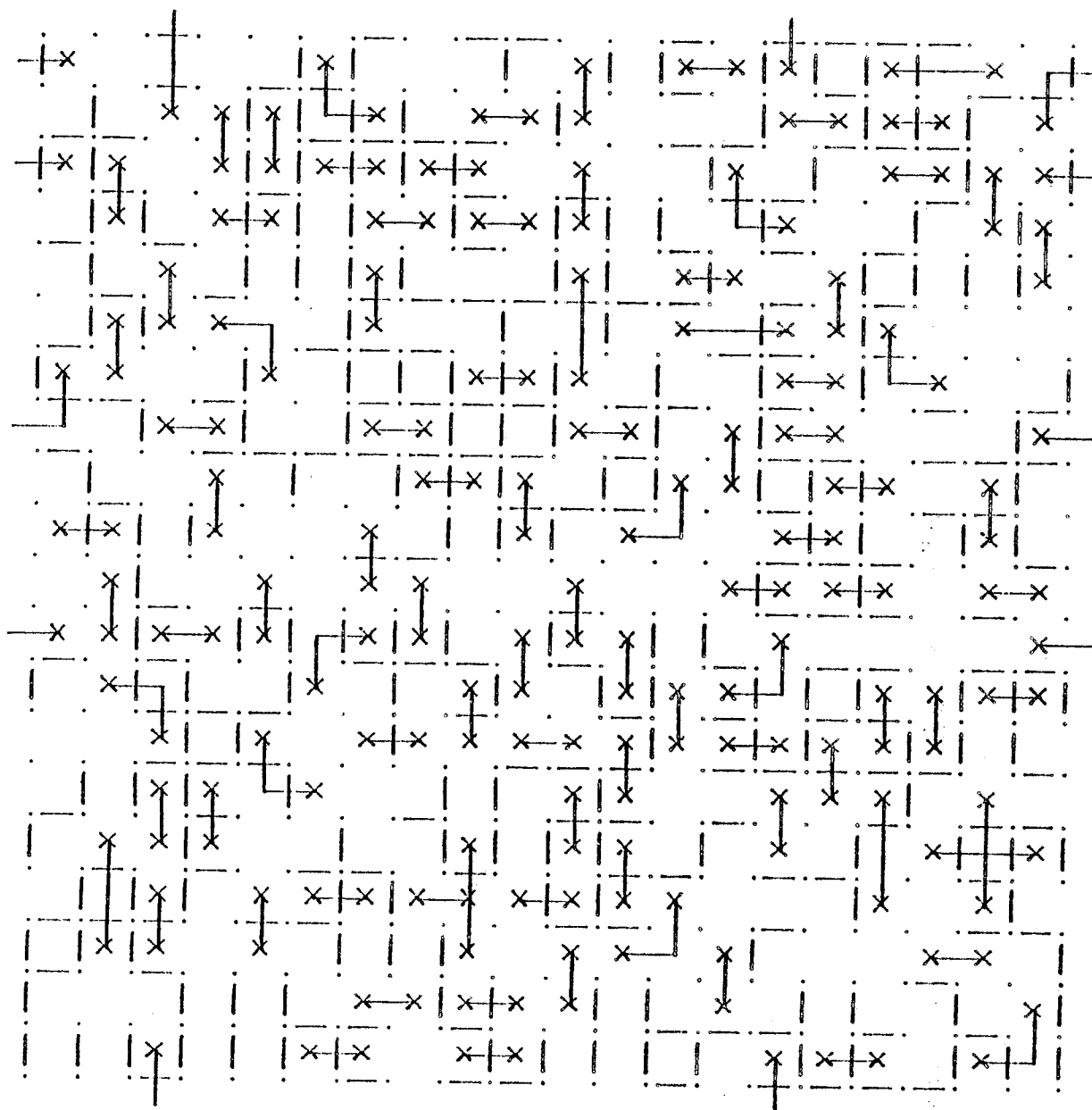
Un état fondamental

Figure 40 (b)



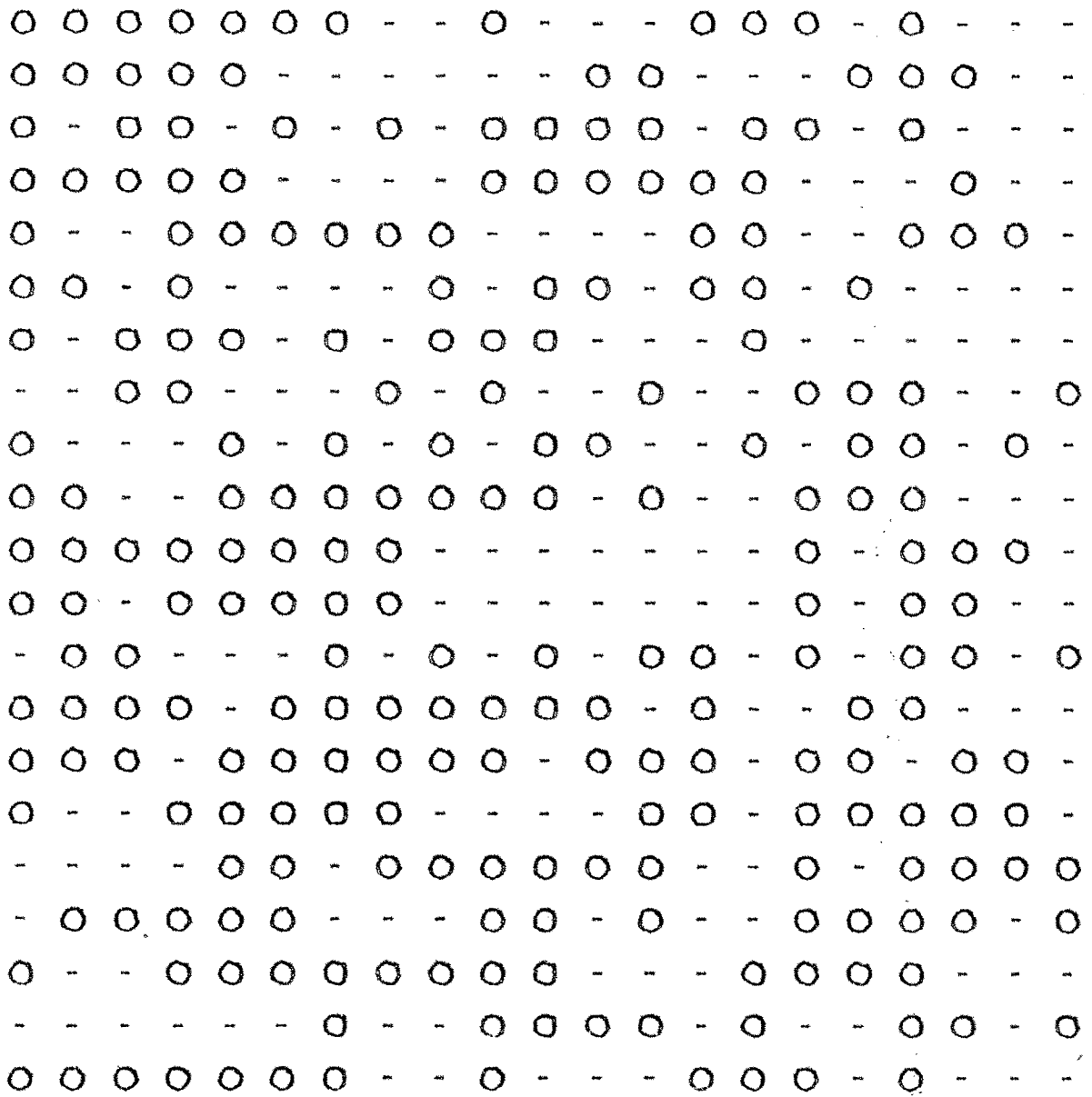
398 liaisons rigides, 292 liaisons dans le plus grand amas rigide

Figure 40 (c)



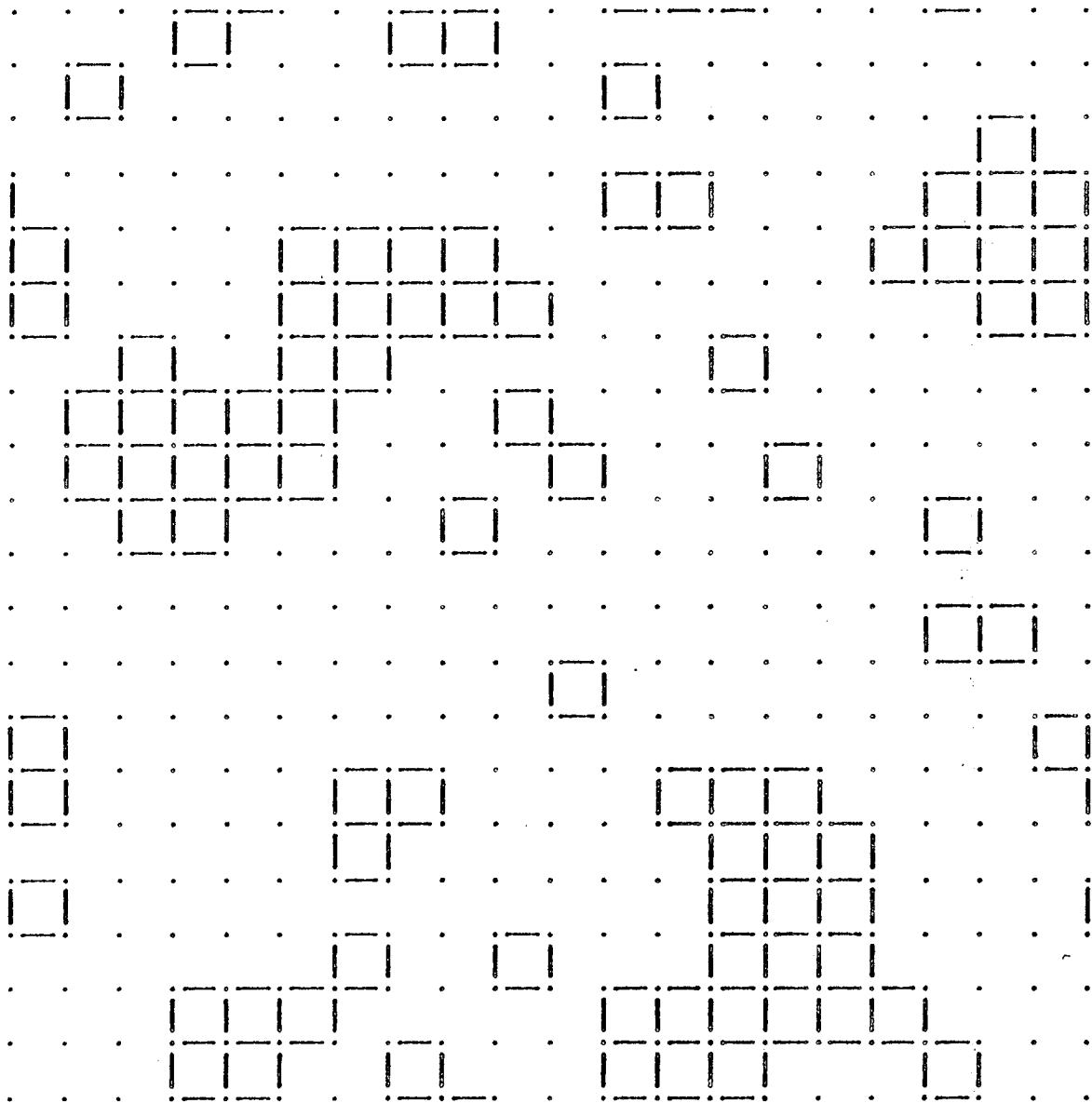
372 liaisons négatives (46.5%), 200 faces frustrées, 122 liaisons violées, Energie par spin = -1.39

Figure 41 (a)



Un état fondamental

Figure 41 (b)



266 liaisons rigides, 64 liaisons dans le plus grand amas rigide

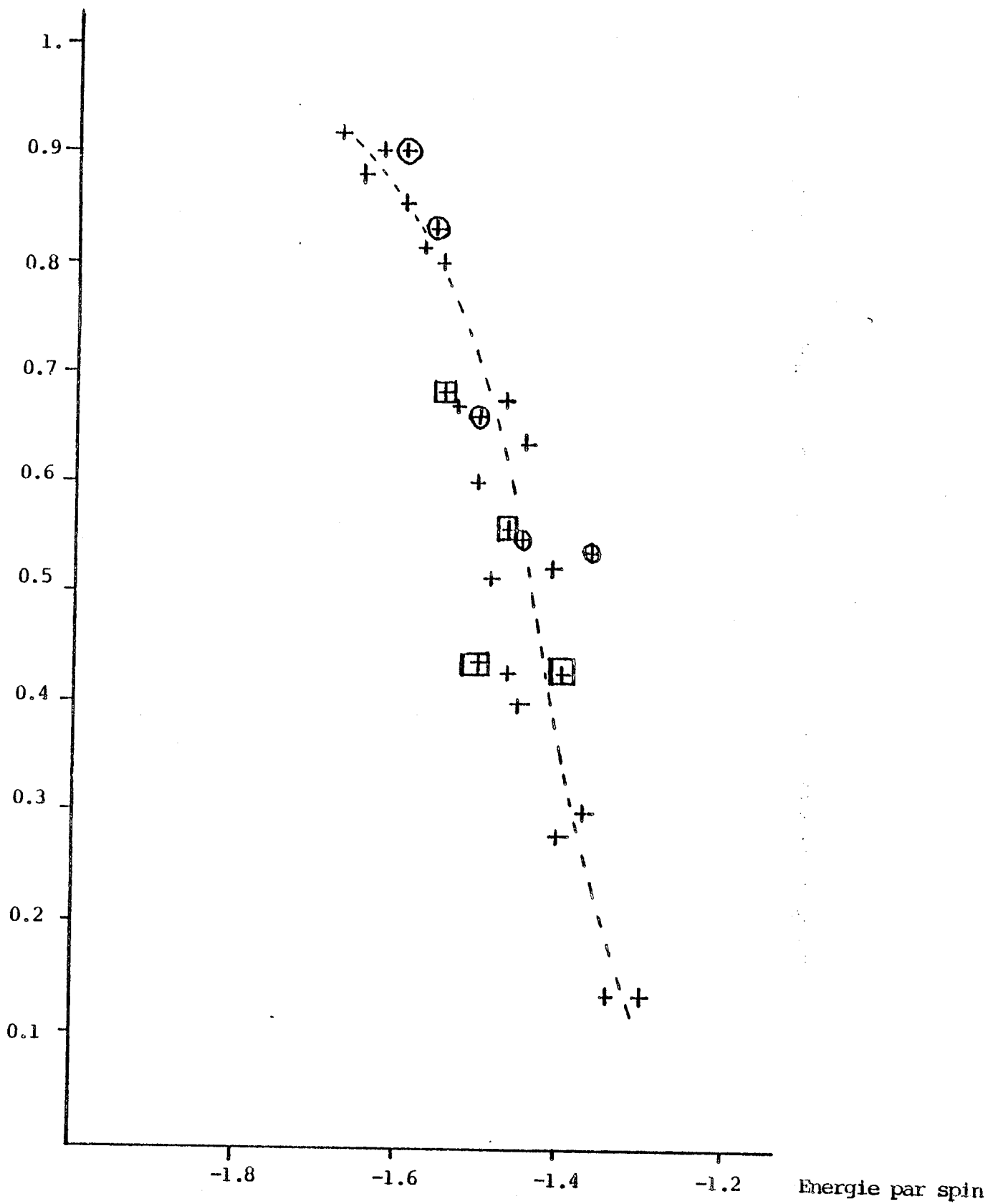
Figure 41 (c)

Nous avons observé que des échantillons ayant la même énergie par spin ont des caractéristiques de rigidité très semblables. C'est pour cette raison que nous avons choisi de classer les échantillons par rapport à l'énergie par spin.

Dans la Figure 42 , on analyse la fraction des liaisons dans le plus grand amas rigide en fonction de l'énergie par spin. Les points sont obtenus par des moyennes entre des échantillons de la même taille et énergie.

Les points montrent que la courbe est décroissante ce qui indique la fracturation progressive des échantillons.

Fraction de liaisons dans le plus grand amas rigide



+ 155 échantillons 10 x 10

⊕ 56 échantillons 15 x 15

⊞ 32 échantillons 20 x 20

Figure 42

De la même manière dans la Figure 43 , on étudie la fréquence d'apparition d'une ligne de fracture. Les points sont obtenus par des moyennes parmi les échantillons de la même énergie par spin.

En utilisant la courbe de l'énergie par spin en fonction de la concentration des liaisons négatives, obtenue par Bieche et al [7], (Figure 44), et à partir des deux courbes précédentes on peut conclure qu'il existe un seuil critique au voisinage de 15 % au-dessus duquel on perd l'ordre à longue distance. Ce qui infirme les résultats de Vanimetus et al [30], sur des échantillons à 50 % de liaisons négatives.

Fréquence d'apparition d'une ligne de fracture

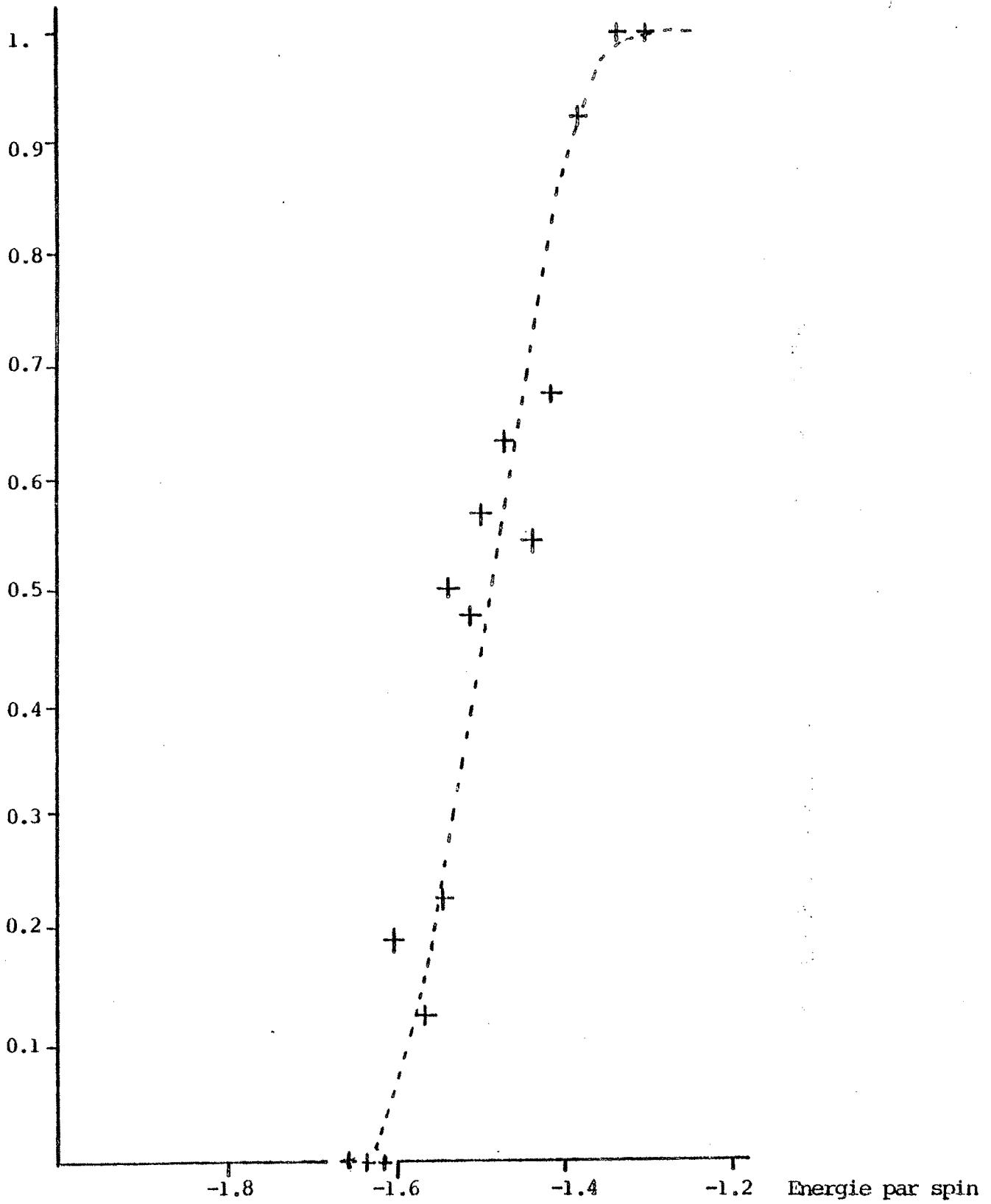


Figure 43

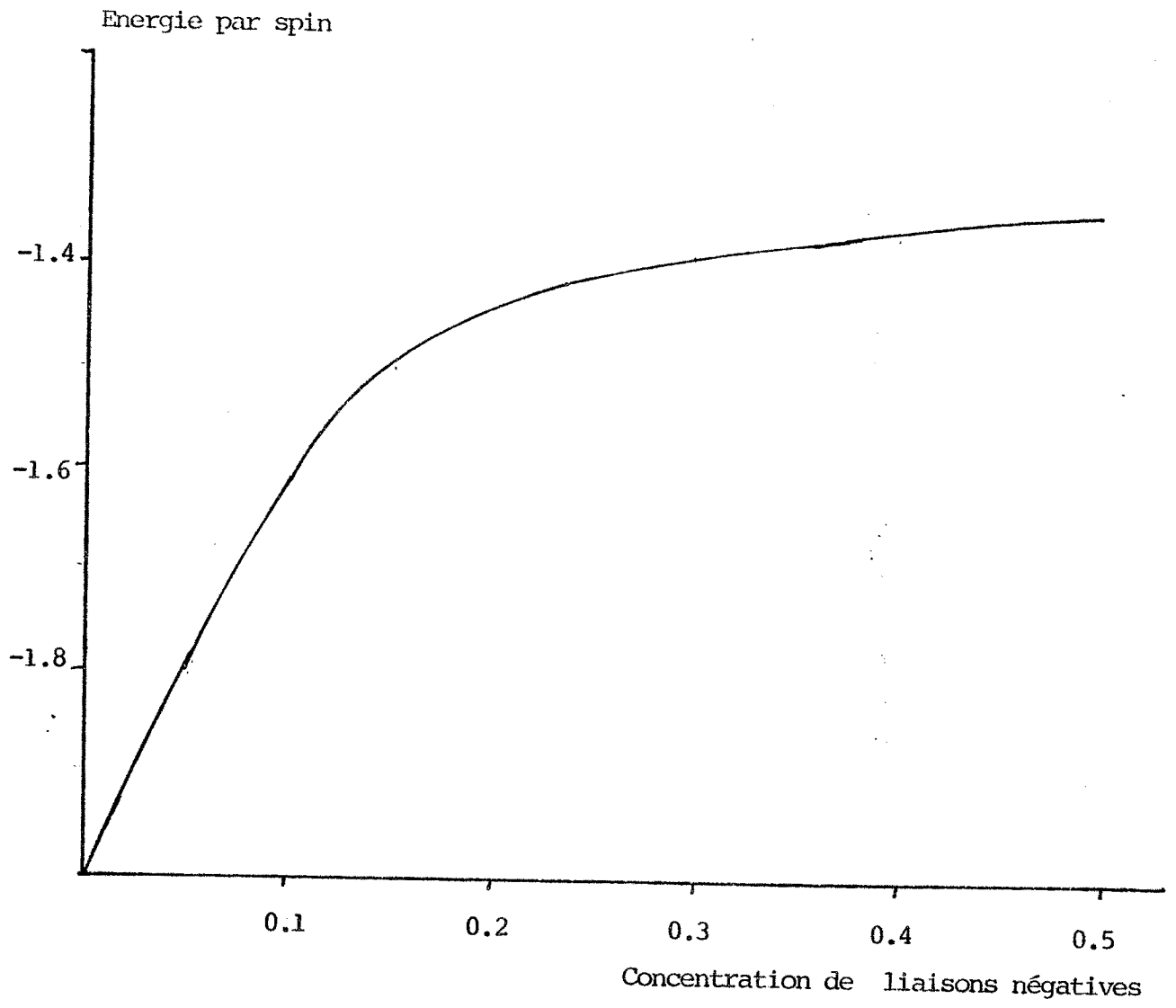


Figure 44

En traçant la fréquence d'apparition des échantillons rigides en fonction du pourcentage des liaisons rigides on trouve la courbe de la Figure 45 , on peut voir qu'il existe une concentration critique au voisinage de 70 % au-dessus de laquelle les échantillons sont rigides. Ce seuil est différent du seuil de 50 % pour la percolation par des liaisons non corrélées.

Fréquence d'apparition des échantillons rigides

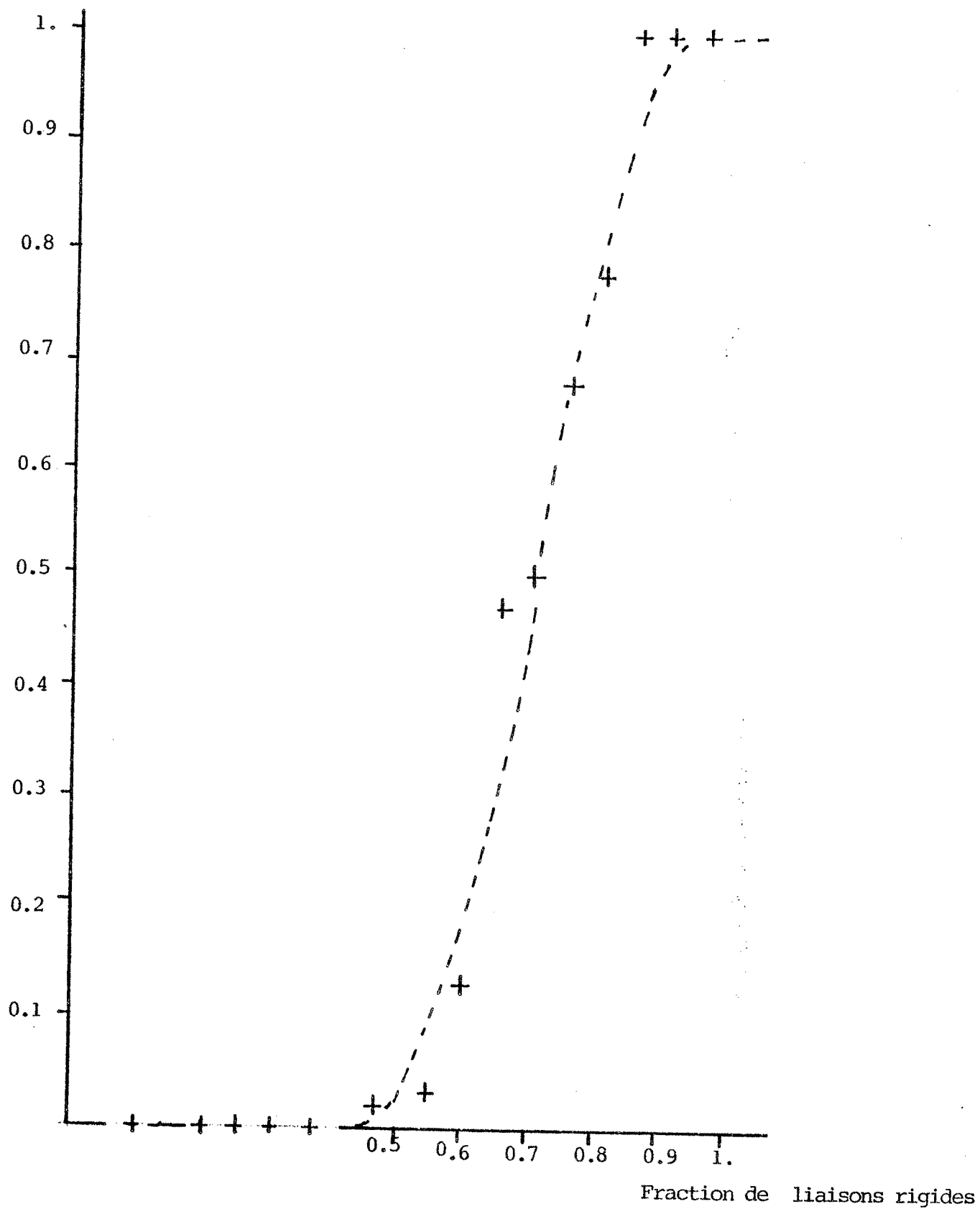


Figure 45

R E F E R E N C E S

- [1] A.V. AHO, J.E. HOPCROFT and J.D. ULLMAN, "The Design and Analysis of Computer Algorithms", (Addison-Wesley, Reading, MA, 1974).
- [2] F. BARAHONA, "Sur la complexité du problème des verres de spins", R.R. n° 171, IMAG.
- [3] F. BARAHONA, J.P. UHRY, "Complexité et Simplicité de certains problèmes de Physique Statistique", Actes du Colloque de Cerisy, "Regards sur la théorie des graphes", P. Hansen et D. de Werra eds. , June 1980, Presses Polytechniques Romandes.
- [4] F. BARAHONA, J.P. UHRY, "An Application of Combinatorial Optimization to Physics", V Symposium on Operations Research, Köln, 1980, à paraître dans Methods of Operations Research.
- [5] C. BERGE, "Graphes et Hypergraphes", Dunod; Paris, 1970.
- [6] I. BIECHE, Thèse de 3ème cycle, Université de Grenoble.
- [7] I. BIECHE, R. MAYNARD, R. RAMMAL, J.P. UHRY, "On the ground states of the frustration model of spin glass by a matching method of graph theory" à paraître dans J. Phys. A (1980).
- [8] K. BINDER, "Montecarlo Investigations of Phase Transitions and Critical Phenomena", Phase Transition and Critical Phenomena, Vol. 5 B, Academic Press, London 1975, 2-107.
- [9] S.A. COOK, "The Complexity of theorem proving procedures", Proc.3rd ACM Symp. on Theory of Computing (1971) 151-158.
- [10] G.B. DANZIG, "Linear Programming and Extensions", Princeton Univ. Press, Princeton, New Jersey, 1962.
- [11] J. EDMONDS, "Maximum matching and a polyhedron of 0-1 vertices, Journal of Research of the National Bureau of Standards B69 (1965), 125-130.

- [12] J. EDMONDS and E. JOHNSON, "Matching, Euler tours and the Chinese Post Math. Prog. 5 (1973), 88-124.
- [13] M.R. GAREY and D.S. JOHNSON, "Computers and Intractability : A guide to the Theory of NP-Completeness", H. Freeman & Sons, San Francisco
- [14] M.R. GAREY and D.S. JOHNSON, "The Rectilinear Steiner Tree Problem is NP Complete", SIAM J. Appl. Math., 32 (1977) 826-834.
- [15] M. GROTSCHEL, L. LOVASZ, S. SCHIRIVJER, "The ellipsoid method and its consequences in combinatorial optimization", Bonn, 1980.
- [16] F. HADLOCK, "Finding a Maximum Cut of a Planar Graph in Polynomial Time SIAM J. Comput., 4 (1975), 221-225.
- [17] D.S. JOHNSON, "Approximation algorithms for combinatorial Problems", J.Compt. System Sci., 9 (1974) 256-178.
- [18] R.M. KARP, "Reducibility Among Combinatorial Problems", in R.E. Miller and J.W. Thatcher eds, Complexity of Computer Computations, (Plenum Press, New York), (1972), 85-104.
- [19] R.M. KARP, C.H. PAPANITRIOU, "On Linear Characterizations of Combinatorial Optimization Problems", Research Report, Computer Science Division, University of California, Berkeley, 1980.
- [20] P.W. KASTELEYN, "The statistics of dimers on a lattice.I The number of dimer arrangements on a quadratic lattice. Physica, 27, 1961, 1209-1225.
- [21] L.G. KHACIAN, "A polynomial Algorithm for Linear Programming", Doklady Akademik Nauk SSSR 244:5 (1979) 1093-1096.
- [22] S. KIRPATRICK, "Frustration and ground-state degeneracy in spin glasses Phys.Rev.B 16, 4630-4641, (1977).
- [23] B. KORTE, "Approximative Algorithms for Discrete Optimization Problems Report N° 7762-OR, University of Bonn, 1977.
- [24] E. LAWLER, "Combinatorial Optimization: Networks and Matroids", Holt, Rinehart and Winston, New York, 1976.

- [25] D. MAIER and J.A. STORER, "A Note on the Complexity of the Superstring Problem", Technical Report 233, Dpt. of Electrical Engineering and Computer Science, Princeton University, Princeton, N.J. 1977.
- [26] L. ONSAGER, "Crystal Statistics, I, A two-dimensional model with an order-disorder transition", Phys. Rev (2) 65 (1944), 117-149; MR 5-280.
- [27] G.I. ORLOVA and Y.G. DORMAN, "Finding the maximal cut in a graph", Engrg. Cybernetics 10 (1972) 502-506.
- [28] H.N.V. TEMPERLEY, "Two-dimensional Ising models", Phase transitions and critical phenomena, Vol. 1, (éd. C. Domb and M.S. Green), Academic Press, London (1972), 227-267.
- [29] G. TOULOUSE, "Theory of the Frustration Effect in Spin Glasses: I", Commun. on Physics 2 (1977), 115-119.
- [30] J. VANNIMENUS, J.M. MAILLARD, L. de SEZE, "Ground-States Correlations in the two-dimensional Ising frustration model".
- [31] WILSON BEINEKE, "Applications of graph theory", Academic Press.
- [32] M. YANNAKAKIS, "Node- and Edge-Deletion NP-Complete Problems", Proc. 10th Annual ACM Symp. on Theory of Computing, 1978.

Dernière page d'une thèse

VU

Grenoble, le 14 Octobre 1980

Le Président de la thèse

A. Sakman

Vu, et permis d'imprimer,

Grenoble, le 14.10.80

Le Président de l'Université Scientifique et Médicale

G. Cau

G. CAU

