HAL
open science

Dynamique sur les structures fractales et diagramme de phase du modèle d'Ising sous champ aléatoire

Jean Christian Angles d'Auriac

To cite this version:

Jean Christian Angles d'Auriac. Dynamique sur les structures fractales et diagramme de phase du modèle d'Ising sous champ aléatoire. Physique [physics]. Université scientifique et médicale et institut polytechnique de Grenoble, 1986. Français. NNT : . tel-03361809

HAL Id: tel-03361809

https://theses.hal.science/tel-03361809v1

Submitted on 1 Oct 2021

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.

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ SCIENTIFIQUE ET MÉDICALE ET L'INSTITUT NATIONAL POLYTECHNIQUE DE GRENOBLE

pour obtenir le grade

DOCTEUR ÈS-SCIENCES PHYSIQUES

par

Jean-Christian ANGLES d'AURIAC

SUJET

DYNAMIQUE SUR LES STRUCTURES FRACTALES ET DIAGRAMME DE PHASE DU MODELE D'ISING SOUS CHAMP ALEATOIRE

Soutenue le 4 mars 1986 devant la commission d'Examen

Président	G. TOULOUSE
Examinateurs	J. FONLUPT J. LAJZEROWICZ R. MAYNARD R. RAMMAL N. SOURLAS

R E M E R C I E M E N T S

Je remercie G. TOULOUSE, Directeur de Recherche au C.N.R.S., de présider ce jury, J. FONLUPT, Professeur à l'I.N.P.G., d'en être examinateur, ainsi que J. LAJZEROWICZ, Professeur à l'U.S.M.G., et N. SOURLAS, Directeur de Recherche au C.N.R.S.,d'avoir accepté d'en être les rapporteurs.

R. MAYNARD, Professeur à l'U.S.M.G., a été l'initiateur de ce travail, je le remercie pour l'aide et les conseils qu'il m'a apportés tout au long.

Je suis très reconnaissant à R. RAMMAL, Directeur de Recherche au C.N.R.S.,de m'avoir dirigé avec exigence et amitié, en m'orientant toujours sur de bonnes voies.

Enfin, je remercie F. MAHIEUX d'avoir dactylographié ce mémoire avec diligence.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I : DYNAMIQUE SUR LES STRUCTURES FRACTALES 9

I - Structures fractales 13

II - Diffusion classique sur les structures fractales 37

II.1. Résultats analytiques 37

A. Expression de $R^2(t)$, $P(0,t)$, $S(t)$ sur une structure fractale 39

B. Forme du noyau de diffusion 40

II.2. Etude numérique 44

A. Diffusion sans mémoire 44

B. Effets de mémoire 68

III - Dynamique de spins sur un réseau fractal 81

Appendice - Procédure de codage des sites du Tamis de Sierpinski 101

Références 105

CHAPITRE II : OPTIMISATION COMBINATOIRE DANS LES MODELES DE LA MECANIQUE STATISTIQUE 107

I - Introduction 110

II - Le problème des verres de spins et le problème du couplage 113

II.1. Le problème des verres de spins 113

II.2. Formulation du problème d'optimisation associé 114

II.2.a. Cas général 114

II.2.b. Cas d'un graphe planaire 115

II.3. Résolution du problème P 119

II.4. Ligne T = 0 du diagramme de phase : anti-phases aléatoires 122

III - Le modèle du champ aléatoire 126

III.1. Le modèle 126

III.2. La recherche du fondamental 127
III.2.a. Rappel de notions de théorie des graphes 127
III.2.b. Transformation du problème de la recherche du fondamental 128
III.3. Recherche d'une coupe minimum 130
III.4. Etude de la rigidité 133
III.4.a. Etude en terme de théorie des graphes 134
III.4.b. Application au champ aléatoire 137
III.5. Extension au modèle de Potts 139
III.6. Antiferromagnétique sous champ aléatoire 140
III.6.a. q = 2 modèle d'Ising 141
III.6.b. q > 2 modèle de Potts 141
IV - Conclusion 142
Appendice A : Algorithme pour le fondamental d'un verre de spins 173
Appendice B : Algorithme pour le fondamental d'un modèle de champ aléatoire 189
Références 192

CHAPITRE III - DIAGRAMME DE PHASE DU MODELE D'ISING SOUS CHAMP ALEATOIRE 195

Introduction 198
I - Présentation générale 199
II - Résultats exacts 206
II.1. Limite du champ moyen (d = ∞) 206
II.1.a. Cas d'une distribution continue de champ aléatoire 208
II.1.b. Cas d'une distribution discrète
II.1.c. Etude à température nulle 214
II.2. Chaîne linéaire (d = 1) 220
III - Etude numérique en dimension 2 221
III.1. Aimantation et aimantation projetée 221
III.2. Energie 230
III.3. Etude de la tension de ligne 233
III.4. Conclusion 244
IV - Etude en dimension 3 245
IV.1. Etude à température nulle 245

IV.1.a. Aimantation 245
IV.1.b. Fluctuations de l'aimantation 250
IV.1.c. Energie interne 252
IV.1.d. Energie d'interface 254
IV.1.e. Discussion 254
IV.2. Etude à température finie
IV.2.a. Méthode de Métropolis et algorithme de Monte Carlo 260
IV.2.b. Lois d'échelle en taille finie et ordre de la transition 265
IV.2.c. Résultats numériques 282
i) Diagramme de phase 290
ii) Etude de la ligne de transition 293
Conclusions 305
Complément : Zéros de la fonction de partition pour le modèle du champ aléatoire à 3D 307
Appendice : Exemple détaillé d'un algorithme de Monte Carlo écrit en assembleur 315
Références

Articles supplémentaires : 323
- On the degree of ultrametricity 325
- Superconducting diamagnetism near the percolation threshold : numerical study. 333

CONCLUSION GENERALE 347

INTRODUCTION

Les physiciens de la matière condensée s'intéressent depuis des années aux problèmes du désordre. La raison essentielle est que les systèmes réels ne sont jamais purs, et pour les décrire correctement il faut tenir compte de la présence du désordre. Dans certains cas, le désordre est introduit de manière délibérée. C'est par exemple le cas du magnétisme des alliages dilués type CuMn, AuFe (verres de spins)ou des microstructures (localisation). Outre cet intérêt de réalisme, l'introduction du désordre dans les modèles physiques conduit à des problèmes de mécanique statistique intéressants en eux-mêmes. Par exemple les systèmes magnétiques désordonnés suggèrent de modifier le modèle d'Ising en y introduisant du désordre. Lorsque le désordre porte sur les constantes de couplages on obtient le modèle des verres de spins (modèle de frustration).

Dans le cas d'un désordre de dilution, le modèle obtenu est plus simple et assez bien compris grâce aux concepts de la percolation. Une troisième voie pour introduire le désordre consiste à coupler le paramètre d'ordre (l'aimantation) à un champ extérieur aléatoire (Modèle du champ aléatoire). Le travail présenté ici aborde entre autres des problèmes de dynamique dans des milieux désordonnés, ainsi que le modèle d'Ising sous champ aléatoire. Les techniques utilisées sont principalement des techniques de simulation numérique.

L'accroissement des performances des ordinateurs a permis le développement des techniques de type simulation numérique, qui complètent les approches théoriques traditionnelles. L'utilisation des calculateurs en physique peut être considérée seulement comme un moyen pour résoudre numériquement des équations compliquées. Mais on peut aussi utiliser un ordinateur comme un moyen pour réaliser une expérience sur un modèle : c'est l'expérimentation numérique. L'un des intérêts de l'expérimentation numérique est que, d'une part, on contrôle bien les paramètres et d'autre part on peut plus facilement atteindre des limites extrêmes (température nulle par exemple), ainsi que d'avoir accès à des observables difficiles à obtenir sur les expériences réelles. Les inconvénients principaux sont la taille finie des "échantillons" que l'on étudie ainsi

que les "temps" courts que l'on peut envisager. Dans le cadre de l'expérimentation numérique, de nombreux algorithmes ont été mis au point. Une connection inattendue s'est alors fait jour entre deux domaines a priori différents : l'optimisation combinatoire et la mécanique statistique. Les techniques du type Monte-Carlo, issues de la mécanique statistique, sont maintenant couramment utilisées pour résoudre des problèmes d'optimisation (placement, découpe,...). Ici la démarche est inverse et ce sont les méthodes exactes d'optimisation (principalement des méthodes de couplage) qui ont été utilisées pour déterminer les propriétés à température nulle de certains modèles. Le couplage entre ces deux domaines, optimisation combinatoire et physique statistique, ne se résume pas à un échange de techniques. Il y a une correspondance plus profonde qu'il est utile de chercher. Un travail dans ce sens est présenté ici. Plus spécifiquement ce mémoire de thèse est organisé en trois chapitres.

Le premier chapitre traite de la dynamique dans les milieux désordonnés (fractals et amas de percolation). Ce chapitre est constitué d'une présentation générale et d'articles publiés. La notion d'une structure fractale est rappelée d'abord. Une étude des propriétés de transport, et en particulier la diffusion, est effectuée par la suite. Les principales dimensions (dimension fractale, dimension spectrale, dimension d'étalement,...) sont déterminées numériquement dans de nombreux cas, et comparées aux conjectures correspondantes. En particulier, la dimension spectrale $\tilde{d}$ des amas de percolation en toutes dimensions a été calculée. Les résultats relatifs à un modèle de diffusion avec mémoire (True Self Awoiding Walk) interpolant entre la diffusion classique et le modèle de polymères sont aussi présentés et discutés. Ce chapitre se termine par une étude de la dynamique de spins (modèle de Glauber) sur un fractal régulier, où sont illustrées quelques techniques d'analyse en taille, qui seront développées dans le troisième chapitre.

Le deuxième chapitre présente et commente deux méthodes d'optimisation combinatoire utilisées en mécanique statistique. En particulier on montre que le problème de la recherche du fondamental d'un modèle d'Ising ferromagnétique sous champ aléatoire est équivalent au

problème de la recherche d'un flot maximum dans un graphe. Une méthode post-optimale développée ici permet d'avoir accès à la rigidité des états de base. Les démonstrations correspondantes sont développées en détail. La mise en oeuvre de cette méthode dans le cas du modèle de champ aléatoire est décrite brièvement en appendice B.

Il est bien connu que le problème du modèle de frustration à température nulle se ramène au problème du "Postier chinois". La transformation est rappelée ici et la méthode correspondante a été employée pour étudier les anti-phases aléatoires. L'algorithme d'Edmonds est présente de façon compréhensible en appendice A, en vue de faciliter sa mise en oeuvre par des non-spécialistes de l'optimisation combinatoire.

L'étude d'une correspondance éventuelle entre l'existence d'une transition de phase pour un modèle de mécanique statistique et la complexité algorithmique du problème d'optimisation associé est discutée. Quelques exemples sont utilisés pour illustrer ce point, comme le modèle de Potts. La complexité de certains de ces problèmes d'optimisation n'a pas pu être trouvée.

Le troisième chapitre est consacré à l'étude numérique du modèle d'Ising sous champ aléatoire à 2 et 3 dimensions. Le problème est d'abord replacé dans un contexte général. La situation expérimentale et les résultats exacts connus sont rappelés. Une étude en deux dimensions à température nulle est présentée à l'aide de la méthode exposée au deuxième chapitre. Le diagramme de phase Champ aléatoire-Température à trois dimensions est ensuite déterminé. La méthode du chapitre II est utilisée conjointement aux simulations du type Monte-Carlo. Les principales méthodes numériques utilisées (Monte-Carlo, loi d'échelles en taille finie, constante de couplage renormalisée,...) sont présentées en détail. Un complément est consacré aux zéros de la fonction de partition de ce modèle. La mise en oeuvre très détaillée de la méthode de Monte-Carlo en assembleur 68 000 est aussi présentée en Appendice.

Chacun de ces trois chapitres présentés se termine par une conclusion relative aux résultats obtenus.

Deux autres articles joints à la fin de ce mémoire traitent de sujets voisins. L'un est relatif au diamagnétisme des réseaux de percolation supraconducteurs.L'autre est consacré à la notion du degré d'ultramétricité. Le premier trouvera probablement sa place à la fin du premier chapitre. Par contre le deuxième présente des concepts et des techniques qui sont à mi-chemin entre l'optimisation combinatoire et les modèles de mécanique statistique.

LISTE DES PUBLICATIONS

CHAPITRE I

- Spreading dimension of percolation clusters : a new universal exponent.
- Metric properties of fractal lattices.
- Universality of the spectral dimension of percolation clusters.
- Random walk on fractals : numerical studies in two dimensions.
- Scaling analysis for random walk properties on percolation clusters.
- "True" self-avoiding walk on fractals.
- Statistics of the true self-avoiding walk in one dimension.
- Critical behavior of the kinetic Ising model on a fractal lattice.

CHAPITRE II

- On the random antiphase state in the ± J spin glass model in two dimensions.
- The random field Ising model : algorithmic complexity and phase transition.
- Max-cuts in nearly bipartite graphs - connection with statistical mechanics.

HORS CHAPITRE

- Superconducting diamagnetism near the percolation threshold : numerical study.
- On the degree of ultrametricity.

C H A P I T R E I

DYNAMIQUE SUR LES STRUCTURES FRACTALES

I - STRUCTURES FRACTALES

II - DIFFUSION CLASSIQUE SUR LES STRUCTURES FRACTALES

II.1. Résultats analytiques

A. Expressions de $R^2(t)$, $P(0,t)$, $S(t)$ sur une structure fractale

B. Forme du noyau de diffusion

II.2. Etude numérique

A. Diffusion sans mémoire

B. Effets de mémoire

III - DYNAMIQUE DE SPINS SUR UN RESEAU FRACTAL

APPENDICE - Procédure de codage des sites du tamis de Sierpenski

Ce chapitre, consacré à la dynamique sur les fractals , est principalement composé d'articles. Ceux-ci sont insérés successivement dans le texte.

Un premier paragraphe présente un aperçu sur les structures fractales. Différentes dimensions pour les caractériser $(d,\bar{d},\tilde{d},\hat{d})$ sont introduites. Le deuxième paragraphe porte plus spécifiquement sur la diffusion dans les structures fractales. Une attention particulière est portée à la dimension spectrale $\tilde{d}$. Le dernier paragraphe est consacré à l'étude de la dynamique de spin (Gla) sur un fractal particulier.

I - STRUCTURES FRACTALES

La notion d'espace de dimension non entière existe depuis longtemps. Cette notion s'introduit très naturellement aussi bien dans un contexte expérimental que dans un contexte plus théorique. L'observation du mouvement brownien d'une particule montre une trajectoire si tortueuse qu'on imagine qu'elle "remplit" plus l'espace qu'une droite. De même l'examen du profil d'une crête de montagne ou d'un littoral semble aussi trop accidenté et compliqué pour être de même dimensionalité qu'un arc de cercle par exemple. Ces observations expérimentales ont été faites depuis déjà longtemps (J. Perrin, L.F. Richardson,...). D'un autre côté les mathématiciens aussi ont été amenés à considérer ce qu' aujourd'hui on nomme des fractals .Weierstrass,par exemple,en exhibant des fonctions partout continues et nulle part dérivables a construit un des premiers exemples de fractals .Cantor, Julia,Peano, Levy, dans d'autres domaines ont aussi contribué à l'étude de ces structures, qui apparaissaient à l'époque plutôt comme des curiosités mathématiques. C'est B. Mandelbrot qui a souligné l'importance générale de tels espaces et qui en a inauguré l'étude systématique.

Les fractals peuvent se classer en deux catégories : les fractals réguliers (déterministes) et les fractals aléatoires (statistiques).Les fractals réguliers sont des objets qui possèdent la propriété de self-similarité. C'est-à-dire que ce sont des objets dont le "tout" se déduit d'une "partie". Plus précisément supposons qu'une figure soit décomposable en N parties dont chacune se déduit de la figure initiale par une homothétie de rapport r_N $(1 \leqslant n \leqslant N)$ suivie d'une isométrie (rotation, translation) ou d'un déplacement, on peut alors définir la fonction

$$g(d) = \sum_{n=1}^{N} r_n^d$$

Cette fonction est décroissante de N à 0 lorsque le réel d varie de zéro à l'infini, l'unique valeur $\bar{d}$ telle que $g(\bar{d}) = 1$ est appelée dimension d'homothétie généralisée ou dimension fractale. Différents

fractals réguliers sont envisagés dans ce chapitre. Parmi ceux-ci, le plus utilisé est certainement le tamis de Sierpinski (fig. 1) car les calculs analytiques y sont possibles. Sa construction s'effectue de manière itérative. Au pas $n = 0$, la figure se réduit à un triangle équilatéral (fig. 1.a). Au pas $n = 1$ chacun des triangles numérotés 1, 2 et 3 est remplacé par un motif homothétique au motif de base dans un rapport 1/2, et la figure intermédiaire obtenue est dupliquée deux fois comme sur la figure 1.b. Ensuite cette opération est itérée indéfiniment. A chaque pas les dimensions de la figure croissent, et en même temps des détails plus fins apparaissent. Il est clair qu'il n'y a pas d'échelle de longueur, car il n'y a ni plus petite longueur, ni plus grande longueur. La dimension fractale, définie comme ci-dessus, peut être calculée facilement. La figure se compose de $N = 3$ parties toutes homothétiques de la figure elle-même dans le même rapport $r_n = 1/2$ $(1 \leqslant n \leqslant 3)$. Donc $g(d) = 3 \times (\frac{1}{2})^d$ et $\bar{d}$ vérifie $3 \times (\frac{1}{2})^{\bar{d}} = 1$ soit $\bar{d} = \frac{\ell n3}{\ell n2}$. Cette dimension $\bar{d}$ peut s'interpréter intuitivement ainsi : supposons que les triangles du type 1, 2 et 3 de la figure 1a soit fait de matière, tandis que le quatrième soit vide, et procédons à une itération consistant uniquement en la duplication du motif de base. L'échelle de longueur deviendra double, tandis que l'échelle de masse deviendra triple d'où l'on déduit la relation entre l'échelle de longueur L_n au pas n et la masse M_n au pas n: $M_n = L_n^{\ell n3/\ell n2}$. On reconnaît en l'exposant $\ell n3/\ell n2$ la dimension fractale $M_n \sim L_n^{\bar{d}}$. Cette remarque sera à la base de la définition de la dimension fractale dans le cas des fractales aléatoires.

Dans l'appendice I, un codage des sites du tamis est décrit. Ce codage remplace avantageusement la notion de coordonnées cartésiennes usuelle.

Parmi les autres fractals réguliers, citons "l'île de Von Koch" (Von), le tapis (Carpet) de Sierpenski, les courbes de Weierstrass, les "escaliers du diable". Pour d'autres constructions, voir (Man).

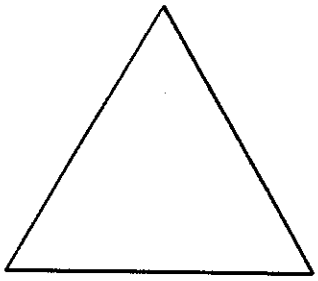


Figure 1.a

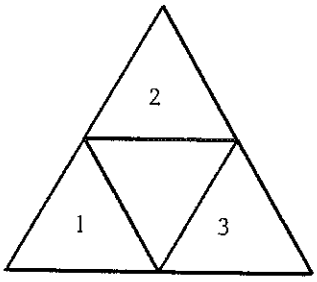


Figure intermédiaire

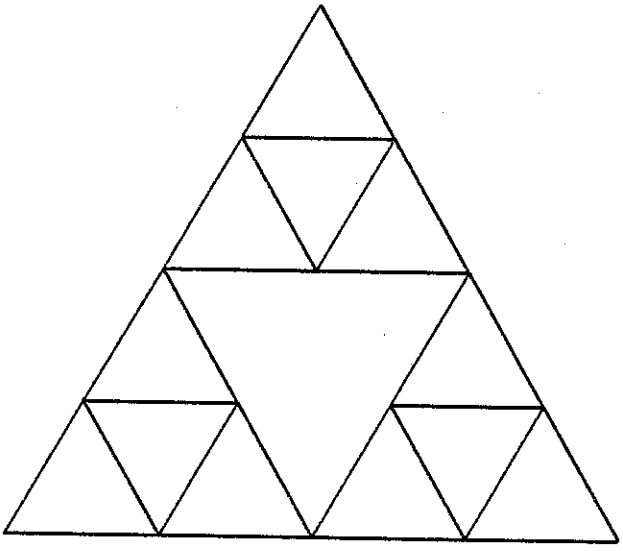


Figure 1.b

En plus des fractals réguliers, il existe des fractals aléatoires. Ce sont des objets qui ne possèdent pas, stricto sensu, d'homothétie interne, mais qui sont statistiquement self-similaires. Un amas de percolation, vu à des échelles inférieures à ξ_p (où ξ_p est la longueur de corrélation), ou la trajectoire d'un mouvement brownien en sont des exemples. Dans ces cas, la définition de la dimension fractale $\overline{d}$ peut se faire de la manière suivante. L'objet fractal étant plongé dans un espace Euclidien de dimension (entière) d, on considère une boule de rayon r et de centre O où O est un point quelconque de cet objet. On mesure la "masse" M(r)(ou le nombre de points) à l'intérieur de cette boule. En moyennant M(r) sur tous les centres possibles, on obtient une fonction $\overline{M}(r)$. Cette fonction est supposée croître pour r grand comme une puissance de r, l'exposant étant par définition, la dimension fractale $\overline{d}$

$$\overline{M}(r) \sim r^{\overline{d}}, \quad r \gg 1 .$$

Cette définition fournit aussi un moyen pratique simple pour mesurer $\overline{d}$ (quand elle existe). La mesure de la longueur d'un littoral en est un exemple : en mesurant avec différentes unités de longueur (de 1

à 10^3 km) la largeur d'une côte, on trouve la valeur de la dimension fractale $\bar{d}$ de cette côte (Richardson). Cette définition est à rapprocher de la définition de la mesure de Haussdorff-Besicowitch (1919), ou à celle introduite par Pontraygin (1932). Remarquons que l'on peut mesurer la dimension fractale $\bar{d}$ d'un fractal régulier avec la méthode exposée plus haut. Par exemple, on peut calculer numériquement $\bar{d}$ pour un tamis de Sierpinski de cette façon. Pour cela il suffit de choisir une métrique sur R^2, mesurer le nombre $N(r)$ de points à l'intérieur d'une boule de rayon r centrée sur un site aux tamis. $\bar{d}$ est alors donné par

$$\bar{d} = \lim_{r\to\infty} \frac{\ell n < N(r) >}{\ell n\ r}$$

Lorsque r est petit ($r \lesssim 3$) le comportement sera du type Euclidien $N(r) \sim r^2$. Par contre lorsque r est plus grand que la taille totale du tamis considéré, $N(r)$ sature : $N(r) \sim r^0$. Le régime fractal $N(r) \sim r^{\bar{d}}$ prend donc place entre ces deux régimes extrêmes.

Cependant la valeur de $\bar{d}$ calculée de la sorte est la même que la valeur calculée avec la définition donnée au début de ce paragraphe, ce qui rend les deux définitions de $\bar{d}$ compatibles.

La limitation ci-dessus, indiquant que le régime fractal ne peut s'étendre qu'entre deux bornes, s'appliquent bien sûr aussi aux situations expérimentales. Aucun objet réel n'est fractal à l'échelle atomique. De plus, puisque $\bar{d} \leqslant d$ la densité $\rho(r) = \frac{M(r)}{r^d} \sim r^{\bar{d}-d}$ tend vers 0 lorsque r augmente. Donc pour un objet réel de densité non nulle, il y a une échelle au-dessus de laquelle il cesse d'être fractal.

Les situations expérimentales où ces concepts s'appliquent sont nombreuses. Dans le domaine de la matière condensée, on peut citer par exemple :

- les polymères (linéaires ou branchés),
- le mouvement Brownien,
- la trajectoire d'une particule quantique,
- les amas de percolation dans les mélanges binaires,
- les milieux poreux (roches),

- les adsorbants et les gels,
- les agrégats,
- les protéines.

Il est naturel de se demander ce que deviennent les lois de la physique (Euclidienne) sur ses structures self-similaires. Peut-on remplacer naïvement la dimension Euclidienne dans les formules connues de la physique par $\overline{d}$ (dimension fractale) ?

La réponse à cette question est négative et l'on va voir la nécessité d'introduire d'autres dimensions. L'étude de la supraconductivité d'un mélange isolant-supraconducteur (Ram(a)), (Ale(a)) a entraîné l'étude de la diffusion, et de l'équation de Schrödinger, sur une structure fractale. A cette occasion la notion de dimension spectrale $\tilde{d}$ a été introduite (Ram(b))(Ale(b)). Son étude sera l'objet du paragraphe suivant. Ensuite la dimension d'étalement $\hat{d}$ a été reconnue nécessaire. Enfin (Ram(c)) a montré l'existence d'une famille infinie d'exposants nécessaire à la description du bruit de résistance sur un fractal. Nous nous intéresserons dans la suite aux quatre dimensions d = dimension Euclidienne de l'espace dans lequel est plongé l'objet fractal, $\overline{d}$ = dimension fractale, $\tilde{d}$ = dimension spectrale et $\hat{d}$ = dimension d'étalement. Le contenu de ces différentes dimensions peut être résumé ainsi :

- dimension fractale $\overline{d}$:information nue sur la structure,
- dimension spectrale $\tilde{d}$:information sur le spectre des excitations harmoniques,
- dimension d'étalement $\hat{d}$:information métrique (ou graphique).

Contrairement à $\hat{d}$, $\tilde{d}$ et $\hat{d}$, $\overline{d}$ n'a pas un caractère intrinsèque, comme on pourrait le croire. On a vu que la dimension fractale $\overline{d}$ est très facile, en général, à calculer sur un fractal régulier. De plus on a donné une méthode pour la calculer dans le cas d'un fractal aléatoire. Dans ce dernier cas, $\overline{d}$ est relié à d'autres quantités. Par exemple la trajectoire d'une promenade aléatoire est un fractal de dimension $\overline{d} = 1/\nu_{RW}$ où ν_{RW} est l'exposant associé à la diffusion. Un polymère linéaire ou branché est aussi un fractal de dimension fractale $\overline{d} = 1/\nu$ où ν est l'exposant associé au rayon de gyration. Le cas de la percolation sera discuté ici brièvement.

Un modèle de percolation est obtenu en "allumant" les sites d'un réseau avec une probabilité p. Un site non allumé sera dit "éteint" (probabilité $q = 1-p$). Un ensemble de sites allumés voisins est un amas. En fonction de p, un tel système présente une transition de phase. En effet si l'on note p_n = probabilité qu'un site donné appartienne à un amas de n sites et

$$P(p) = 1 - \sum_{n=0}^{\infty} p_n(p) \quad ,$$

on constate que $P(p)$ se comporte comme un paramètre d'ordre nul pour $p \leqslant p_c$, est non nul pour $p > p_c$. On peut définir un exposant critique β_p par $P(p) \sim (p-p_c)^{\beta_p}$, $p \gtrsim p_c$. Lorsque $p \geqslant p_c$ il existe dans l'échantillon un amas dit percolant. Cet amas est infini, c'est-à-dire que sur une grille finie il s' étendra d'un bord à l'autre. On peut définir une longueur de corrélation $\xi(p)$ qui diverge à p_c avec l'exposant ν_p : $\xi(p) \sim (p-p_c)^{-\nu_p}$. L'amas percolant est un fractal jusqu'à l'échelle ξ_p, c'est-à-dire qu'à p_c il est fractal à toutes les échelles. On peut relier sa dimension fractale $\overline{d}$ à β_p et ν_p de la manière suivante. Pour $p \gtrsim p_c$, le nombre $N(p)$ de sites allumés dans une "boîte" de taille ξ_p est, par définition de $\overline{d}$, $N(p) = \xi(p)^{\overline{d}}$. D'autre part, par définition de $P(p)$, $N(p) = P(p)\xi(p)^d$, d'où l'on tire $\xi(p)^{\overline{d}} = P(p)\xi(p)^d$ et

$$\overline{d} = d - \beta_p/\nu_p \tag{I.1}$$

En reportant dans (I.1) les valeurs connues pour β_p et ν_p aux différentes dimensions d, on trouve :

d	$\overline{d}$
2	1.896
3	2.52
4	3.21
5	3.61
$\geqslant$ 6	4

Comme il se doit, $\overline{d} \leqslant d$ pour tout d.

Remarquons que la dimension fractale d'un espace peut dépendre du choix de la dimension Euclidienne d de l'espace où il est plongé. Mais si l'on décide de mesurer le rayon de ses boules avec une distance définie sur la structure fractale elle-même, on définit une dimension intrinsèque notée $\hat{d}$ et appelée dimension d'étalement (Van) (Ram(d)), (Ang.1). Ainsi, si l'on note $A(\ell)$ le nombre moyen de sites accessibles en ℓ pas (la moyenne porte sur le choix de l'origine), $A(\ell) \sim \ell^{\hat{d}}$ $(\ell \gg 1)$. Il est évident que pour un fractal linéaire comme une courbe de Von Koch ou un polymère linéaire $A(\ell) = 2\ell$, donc $\hat{d} = 1$ En général, $\hat{d} \leqslant \bar{d} \leqslant d$, l'égalité ayant lieu sur un espace Euclidien.

Le premier article ci-joint(Ang(a)) étudie particulièrement le cas du tamis de Sierpinski comme fractal régulier, et le cas d'un amas de percolation en deux dimensions comme fractal aléatoire. On y montre que la métrique intrinsèque du tamis de Sierpinski considérée comme un graphe est équivalente à la métrique Euclidienne et par conséquent $\hat{d} = \bar{d}$ dans le cas du tamis de Sierpinski. Le cas de l'amas de percolation à deux dimensions est aussi envisagé. L'article suivant (Ram(a)) complète (Ang(a))en étudiant toutes les dimensions d = 2,3,4,5 et 6. La dimension d = 6 est la dimension critique supérieure du modèle de la percolation, et la valeur numérique $\hat{d} = 2$ obtenue pour d = 6 est montrée être exacte sur l'arbre de Bethe en accord avec (Van). L'universalité de $\hat{d}$ pour le modèle de la percolation dans une approche de type noeuds et liens ($\hat{d} = \bar{d}\nu/\underline{\gamma}$). L'utilisation de $\hat{d}$ s'introduit naturellement dans le paragraphe suivant sur la diffusion.

SPREADING DIMENSION OF PERCOLATION CLUSTERS: A NEW UNIVERSAL EXPONENT

J. C. Angles d'Auriac, A. Benoit

Centre de Recherches sur les Tres Basses Temperatures, C. N. R. S., B. P. 166X, 38042, Grenoble, France

A. B. Harris and R. Rammal[a]

Department of Physics
University of Pennsylvania
Philadelphia, PA 19104-3859

ABSTRACT

We introduce the notion of the spreading dimension $\tilde{d}$ of a fractal lattice from the asymptotic behavior of the average number, $A(l)$, of sites that are accessible in up to l steps. We calculate $\tilde{d}$ numerically for percolation clusters in Euclidean dimensions from 2 to 6 and analytically on the Cayley tree. We show that $\tilde{d}$ is a universal exponent, reaching its "mean-field" value $\tilde{d}=2$ at the upper critical dimension $d_c=6$. The possible relation of $\tilde{d}$ to critical exponents of percolation is obtained by a scaling analysis of $A(l, p)$.

(a) Permanent address: CRTBT, CNRS, BP 166X, 38042, Grenoble, France.

Classification Physics Abstracts 02.10, 05.50, 05.70

DIMENSION d'ETALEMENT DES AMAS DE PERCOLATION: UN NOUVEL EXPOSENT UNIVERSEL

Résumé

On introduit la notion de dimension d'étalement $\tilde{d}$ d'un fractal à partir du comportement asymptotique du nombre moyen, $A(l)$, de sites accessibles en moins que l pas sur le reseau. On calcule $\tilde{d}$ numeriquement pour les amas de percolation en dimension Euclidienne d entre 2 et 6 et analytiquement sur l'arbre de Cayley. On montre que $\tilde{d}$ est un exposent universel, prenant sa valeur de "champ moyen" $\tilde{d} = 2$ à la dimension critique supérieure $d_c = 6$. La relation entre $\tilde{d}$ et les exposents critiques de la percolation sont obtenus par une analyse d'échelle de $A(l, p)$.

The spreading dimension, $\hat{d}$, of an infinite lattice is defined as follows. The lattice is specified by its graph consisting of points, (nodes), and undirected lines (bonds) joining the nearest neighbors. We consider only connected graphs with bonds of constant length. We consider the average number, $A(l)$, of distinct sites that are accessible from a given origin in at most l steps along contiguous bonds of the lattice. Under very general regularity conditions it can be shown[7] that

$$\hat{d} = \lim_{l \to \infty} \ln A(l) / \ln l \ , \quad \to A(l) \sim l^{\hat{d}} \tag{1}$$

exists and is a global (and not a local) property of the graph. From the definition $A(l)$ represents the "volume" of a ball of radius l. Such a ball is defined with the natural metric of the lattice, included by its graph structure, instead of that of the Euclidean space in which the structure is embedded. Using the usual Euclidean metric we recover the usual definition of the fractal dimension $\bar{d}$. Moreover, as defined by Eq. (1), $\hat{d}$ does not depend on the choice of origin of the lattice.

It is clear that $\hat{d} = d$ on Euclidean lattices of dimension d. In general $\hat{d}$ can be calculated on various fractal lattices. For instance, $\hat{d} = 1$ on a linear structure like the random walk trajectory on Euclidean lattices, polymer chains, the vonKoch curve, etc.. In general, it was suggested[7] that $\hat{d}$ lies between the fractal dimension $\bar{d}$ and the spectral dimension $\tilde{d}$ of the structure in question:

$$\tilde{d} \leq \hat{d} \leq \bar{d} \ . \tag{2}$$

This inequality holds on all known fractal lattices. In particular, the lower bound can be reached on linear lattices, like the vonKoch curve where $\tilde{d} = \hat{d} = 1$ and $\bar{d} = \ln 4 / \ln 3$. The upper bound is reached[7] on lattices like the Sierpinski gaskets: $\hat{d} = \ln(d+1)/\ln 2$ and $\tilde{d} = 2\ln(d+1)/\ln(d+3)$.

Up to now, the percolation clusters and their backbones at criticality provide less trivial examples of fractal lattices of practical interest. In addition, both $\bar{d}$ and $\tilde{d}$ are known (in terms of percolation exponents) for percolation clusters at the percolation

Recently, considerable attention has been focused on the utility of fractals as models of random media. For instance, the percolation clusters as well as their backbones are examples of fractal lattices in physical sciences. The physics of such structures, possessing a scale invariance is now attracting increasing interest. Recent works[1-6] have shown in particular that various physical problems on such structures are controlled by the spectral dimension $\tilde{d}$ which governs the density of states of low-energy excitations. More generally, it is now recognized that self-similar spaces require the definition of at least three dimensions: d, the dimension of the space in which the structure is embedded, $\bar{d}$, the fractal dimension and $\tilde{d}$, the spectral dimension, of the structure. For Euclidean spaces, these three dimensions are equal. In order to clarify the various notions of dimensions, the importance of intrinsic properties has been stressed very recently.[6] For instance, the fractal dimension $\bar{d}$ of a lattice is defined generally with reference to the embeddibility of the lattice in a Euclidean d-dimensional space. In contrast, the spectral dimension $\tilde{d}$ is independent of any relation to Euclidean space, and can be considered as an intrinsic parameter. Following this classification, $\bar{d}$ appears as an extrinsic parameter, and it was suggested that $\tilde{d}$ is just the first of a hierarchy of intrinsic dimensions controlling more and more specific properties. As evidence that this is true, we analyze a new intrinsic dimension, called the spreading (or connectivity) dimension,[7,8] which is defined on a fractal lattice when viewed as an infinite lattice graph.

In this Letter, we shall first recall the definition for a general lattice graph of the spreading dimension, denoted hereafter by $\hat{d}$. Its value for known fractal structures will be given. The case of the critical percolation cluster is investigated in detail. In particular we 1) present a numerical study of $\hat{d}$ on critical percolation clusters for $d=2, 3, 4, 5$ and 6 dimensions; 2) give an exact solution for the Cayley tree and for its backbone, from which $\hat{d}$ is obtained; 3) show the universality of $\hat{d}$ on percolation clusters; and 4) present a scaling analysis based on the node-link picture[9,10] using which we relate $\hat{d}$ to the usual exponents of the percolation threshold.

threshold[1,2]:

$$\bar{d} = d - \beta/\nu \ ; \qquad \tilde{d} = 2\,\frac{d\nu - \beta}{t - \beta + 2\nu} \qquad d \le 6 \tag{3a}$$

and

$$\bar{d} = 4 \ ; \qquad \tilde{d} = 4/3 \qquad d \ge 6 \, . \tag{3b}$$

where β, ν, and t are the usual exponents for the percolation threshold. For the backbone at criticality[11] $\bar{d} = 2$ for $d \ge 6$ and $\bar{d} = d - \beta_B/\nu$ for $d < 6$, where β_B is the exponent[12,13] for the probability of being in the backbone. See Ref. 13 for a review of values of these exponents. Accordingly, we have investigated the spreading dimension $\tilde{d}$ of percolation clusters both numerically and analytically and for the backbone of such clusters in the mean-field limit.

In Table I are summarized the results of Monte Carlo calculations for $\tilde{d}$ at different Euclidean dimensions. Site percolation clusters at the threshold concentration, p_c, were generated using a standard cluster-growth method, and the most accurate values of p_c on cubic lattices. Averages of $A(l)$ over some $10^3 - 10^4$ clusters were performed for each value of d. Only clusters spreading very far from the origin were taken into account. Typical spreading lengths, l, were $l \gtrsim 300$ for $d = 2$, $l \gtrsim 150$ for $d = 3$, etc.. All calculations were performed (in assembly language) on processors M68000. $\tilde{d}$ was obtained by extrapolating the results to large l.

As can be seen from Table I, $\tilde{d}$ increases monotonically with d, reaching the value $\tilde{d} = 2$ at $d = 6$, which represents the upper critical dimension for the percolation transition. We have repeated the same calculations at $d = 2$ for the triangular lattices ($p_c = 0.5$). The value of $\tilde{d}$ obtained was $\tilde{d} = 1.72 \pm 0.02$, i. e. the same as for the square lattice. These results suggest strongly that $\tilde{d}$ is a universal exponent, independent of the lattice details such as, coordination number, local topology, etc.. Moreover, the double inequality of Eq. (2) is obeyed for all d, because Eq. (3) gives $\tilde{d} \approx 4/3$ for all d, $\bar{d} \approx 1.896$ for $d = 2$ and $\bar{d} > 2$ for $d \ge 3$, using values of the percolation exponents from Ref. 13. Except for the trivial case, $d = 1$, the

spreading dimension $\tilde{d}$ is different from both $\bar{d}$ and $\tilde{d}$. A natural question therefore arises, is $\tilde{d}=2$ the mean-field value of $\tilde{d}$? In what follows we shall answer this question by an exact calculation on the Cayley tree. In particular we will show within mean-field theory that $\tilde{d}=2$ on percolation clusters and $\tilde{d}=1$ on the backbone of the critical cluster.

We define a Cayley tree of coordination number $\sigma+1$ to consist of shells of neighbors about a central or "root" node. The mth shell, for $m \geq 1$ consists of $(\sigma+1)\sigma^{m-1}$ sites (nodes) each of which is connected to one site in the $m-1$th shell and to σ nodes in the $m+1$st shell, with the root being shell 0. Percolation statistics are obtained by assigning a proability p for connecting one site to its neighbors. (On the Cayley tree the site and bond versions of percolation are essentially identical.) Thus the probability that a particular site in the mth shell is connected to the root is p^m. Let us denote by $A(l, p)$ the average number of sites accessible in up to l steps from the origin.[7] To calculate $A(l)$ for the critical percolation cluster we define the indicator function $G_1(x, \vartheta)$ to be unity if, in the configuration ϑ, site x is connected to the root and the root is in an infinitely large cluster. Otherwise $G_1(x, \vartheta)$ is defined to be zero. By restricting the sites to be in an infinitely large cluster, we guarantee that our calculation only includes critically large clusters, as desired. Then we have

$$A(l, p) = \sum_{x:\, d_x \leq l} [G_1(x, \vartheta)]/[G_1(0, \vartheta)] , \tag{4}$$

where [ ] denotes an average over all configurations ϑ, and d_x is the distance from the root to site x. (If x is in the mth shell, $d_x = m$.) The denominator in Eq. (4), which is included to normalize $A(l, p)$ properly, is simply the percolation probability, $P(p)$.

To evaluate $G_1(x, \vartheta)$ it is convenient to introduce the probability, f, that a given branch is finite.[15] f is the solution to the well-known equation:

$$f = (1-p) + pf^{\sigma} , \tag{5}$$

which gives $f=1$ for $p < p_c = 1/\sigma$ and for $\sigma=2$, $f=(1-p)/p$ for

$p > p_c$. Just above the percolation threshold one has

$$f \approx 1 - \frac{2\varepsilon}{\sigma - 1}, \tag{6}$$

where we set $p = p_c(1+\varepsilon)$. Two sites a distance d apart are connected only if all d bonds in the chain connecting them are present and this occurs with probability p^d. To obtain the probability that the sites are in an infinitely large cluster, we note that the probability that they are in a finite cluster is f^{n_p} where n_p denotes the number of perimeter bonds adjacent to the chain connecting site x to the root. If $d = 0$, $n_p = \sigma + 1$, and if $d = 1$, $n_p = 2\sigma$, etc.. In general, $n_p = (d+1)(\sigma - 1) + 2$, so that

$$[G_1(x, v)] = p^{d_x}\left[1 - f^{n_p}\right], \tag{7}$$

and for the special case $x = 0$ one has $P(p) = 1 - f^{\sigma+1}$. Converting the sum over x in Eq. (4) into a sum over shells, we write it as

$$A(l, p) = P(p)^{-1}\Big[(1 - f^{\sigma+1}) + (\sigma+1)p(1 - f^{2\sigma})$$

$$+ (\sigma+1)\sigma p^2(1 - f^{3\sigma-1}) + \cdots\Big] \tag{8}$$

$$= 1 + \frac{(\sigma+1)p}{1 - f^{\sigma+1}}\left\{\frac{1 - (\sigma p)^l}{1 - \sigma p} - f^{2\sigma}\left[\frac{1 - (f^{\sigma-1}\sigma p)^l}{1 - f^{\sigma-1}\sigma p}\right]\right\}. \tag{9}$$

For p just above p_c we have, in the notation of Eq. (6),

$$A(l, p) = \frac{\sigma - 1}{2\sigma} l^2 \left[\left(\frac{2}{l\varepsilon}\right)^2 \sinh^2\left(\frac{l\varepsilon}{2}\right)\right]. \tag{10}$$

Here we kept the dominant terms for $\varepsilon \ll 1$ and $l \gg 1$ to evaluate Eq. (1) at the percolation threshold. At criticality (i. e. $\varepsilon = 0$) $A(l, p_c) \sim l^2$ so that $\tilde{d} = 2$. This result was also checked by a Monte Carlo calculation. Note that for percolation on the Cayley tree, $\tilde{d} = 2$ lies between $\tilde{d} = 4/3$ and $\bar{d} = 4$ as expected from Eq. (2).

The same type of calculation can be performed for the backbone. In this case we introduce an indicator function G_2, similar to G_1, above, but which here requires the root and the site x both to be in the backbone. For the Cayley tree points are in the backbone

ii[13] from them are are two independent paths to "infinity." To fulfill this condition one of the σ branches attached to the root and one attached to x must be infinite. The analog of Eq. (8) is then

$$A(l,\ p) = P_2(p)^{-1}\Big[P_2(p) + (\sigma+1)p\,[1-f^{\sigma}]^2 + (\sigma+1)\sigma p^2[1-f^{\sigma}]^2 \ldots\Big], \tag{11}$$

where $P_2(p) = [G_2(0,\ \vartheta)]$ is the probability that a site is in the backbone: $P_2(p) = 1 - f^{\sigma+1} - (\sigma+1)f^{\sigma}(1-f)$. From Eq. (11) we obtain

$$A(l,\ p) = 1 + \frac{(\sigma+1)p\,[1-f^{\sigma}]^2}{(1-\sigma p)\,P_2(p)}[1-(\sigma p)^l], \tag{12}$$

which for p just above p_c becomes

$$A(l,\ p) \approx 2l\left(\frac{e^{\varepsilon l}-1}{\varepsilon l}\right), \tag{13}$$

leading to $\bar{d} = 1$ for the backbone. Note that for the backbone $\bar{d}$ coincides with the spectral dimension $\tilde{d} = 1$ of the backbone[6] and is less than $\bar{d} = 2$.

We turn to the question of the possible relation of $\bar{d}$ for critical percolation clusters to known critical exponents of the percolation transition. For this purpose we use the node link picture,[9,10] where in addition to the correlation length, $\xi \sim \varepsilon^{-\nu}$, there is another length $L \sim \varepsilon^{-\zeta}$ giving the distance along the structure between two nodes, as will be discussed below. Note that $P(p)\,A(l,\ p)$ is the volume integral of a type of correlation function, except that it is expressed in terms of l rather than a Euclidean distance r. We therefore write

$$P(p)\,A(l,\ p) \sim r^{\gamma/\nu}\,g(r/\xi), \tag{14}$$

where $g(x)$ is a scaling function, and replace r by $l\xi/L$ as befits the node-link picture. Thereby we obtain

$$A(l,\ p) \sim \varepsilon^{-\beta}\,(l\xi/L)^{\gamma/\nu}\,g(l/L). \tag{15}$$

Note that this form is consistent with Eq. (10) in view of the mean-

field values of the exponents: $\beta = \gamma = \zeta = 2\nu = 1$. The assumption that $g(x)$ behaves like a power law at small x [i. e. $g(l/L) \sim (l/L)^y$] leads to the result

$$A(l, p) \sim l^{(\beta+\gamma)/\zeta}, \tag{16}$$

on percolation clusters, which can be written (using $2\beta = d\nu - \gamma$) as

$$\tilde{d} = \bar{d}\nu/\zeta. \tag{17}$$

This simple expression for $\tilde{d}$ reproduces correctly the exact result given above for the percolation cluster on the Cayley tree, for which $\zeta = 1$. Moreover, $\zeta \geq \nu$ also reproduces the inequality $\tilde{d} \leq \bar{d}$ as it should. A simple way to understand the meaning of Eq. (17) is to observe that $\xi^{\bar{d}} = L^{\tilde{d}}$, which expresses the relation between the Euclidean metric ξ and that induced by the graph structure L. The crossover between the fractal behavior for $l \ll L$ and the Euclidean one for $l \gg L$ is easy to deduce from Eq. (15) but will not be discussed further here. The argument leading to Eq. (17) can be made for the backbone if β and γ are interpreted as the backbone exponents.[12,13] Equation (17) holds for the backbone in high dimension where $\bar{d} = 2$[11] and we found $\tilde{d} = 1$.

The expression Eq. (17) obtained for $\tilde{d}$ holds in general, but involves the unknown exponent ζ, which we call $\zeta_{\min}$ since we identify it as the exponent controlling the mean number of bonds, $L_{\min}$ in the shortest path along the cluster between two sites separated by a distance ξ. We can relate $\zeta_{\min}$ to similar exponents for other length scales at the percolation threshold [13] For instance, consider the random resistor network formed by associating a unit resistance with each occupied bond and we denote by L_R the resistance between nodes. Parallel connections obviously cause L_R to be less than or equal to the minimum number of steps, $L_{\min}$ between nodes. For the randomly diluted spin model in which we attribute an Ising interaction, $J_0\sigma_i\sigma_j$ to each occupied bond, we consider the effective coupling, J_{eff} between nodes. At zero temperature the effective interaction J' for two parallel interactions J_1 and J_2 is $J' = J_1 + J_2$, whereas for a series connection $J' = \min\{J_1, J_2\}$. Thus to estimate J_{eff} we need only consider "weak

links," i.e. those bonds whose removal would cause adjacent nodes to become disconnected. In a strand of length L there are, say, $n(L)$ weak links. Then for $kT \ll J_0$ we have (assuming series connection for the strand) $J_{\rm eff} = J_0 - kT \ln n(L)$, or $\exp(J_{\rm eff}/kT) = \exp(J_0/kT)/n(L)$. Clearly, $n(L) \leq L_R$, because the resistance is not less than just that due to the weak links. Thus $n(L) < L_R < L_{\rm min}$ and if we set $n(L) \sim (p-p_c)^{-\zeta_I}$, and $L_R \sim (p-p_c)^{-\zeta_R}$, then we have

$$\zeta_I \leq \zeta_R \leq \zeta_{\rm min} . \tag{18}$$

In two dimensions $\zeta_I = 1$[17] is less than $\zeta_R \approx 1.28$[18] is less than our value of $\zeta_{\rm min}$ obtained using Eq. (17): $\zeta_{\rm min} \approx 1.6$. An exponent similar to $\zeta_{\rm min}$ has been studied in the literature[19] but only for the backbone. Unfortunately, the numerical values of this exponent are not accurately enough known to permit a serious comparison or reliable evaluation of $\tilde{d}$. Therefore, we have used Eq. (17) as a new method for estimating $\zeta_{\rm min}$, which appears now as an intrinsic exponent of the percolation problem. The idea that there is an infinite hierarchy of such exponents finds support from the recent analysis[20] of the random resistor network in $6-\epsilon$ dimensions where an infinite number of crossover exponents ζ_k were found with $\zeta_k = 1 + O(\epsilon^k)$.

We thank G. Toulouse for stimulating discussions. One of us, R. R., acknowledges the hospitality of the Physics Department of the University of Pennsylvania, and partial support by the National Science Foundation under Grant #DMR83-16611. Partial support for one of us, A. B. H., by the Office of Naval Research under grant #ONR0166 is gratefully acknowledged. After this work was completed, we received a preprint by J. Vannimenus et al (Ref. 6) who obtain the same value $\tilde{d} = 2$ for percolation clusters on the Cayley tree, using a different method.

Table I. - Various intrinsic dimensions for percolation clusters at the critical percolation threshold, p_c. Here d is the Euclidean dimension, $\bar{d}$ is the fractal dimension, $\hat{d}$ the spreading dimension, and $\tilde{d}$ the spectral dimension.

d	p_c ([a])	$\bar{d}$ ([b])	$\hat{d}$ ([c])	$\tilde{d}$ ([d])
2	0.592	1.896	1.72 ± 0.02	$4/3 \pm 0.005$
3	0.312	2.52 ± 0.02	1.83 ± 0.02	$4/3 \pm 0.005$
4	0.197	3.21 ± 0.07	1.91 ± 0.04	$4/3 \pm 0.005$
5	0.141	3.61 ± 0.1	1.93 ± 0.04	$4/3 \pm 0.005$
6	0.108	4	1.96 ± 0.06	$4/3 \pm 0.005$
∞ ([e])	σ^{-1}	4	2	4/3

([a]) Reference 14.

([b]) Reference 6.

([c]) This work.

([d]) Compiled from preprints: i) Zabolitzky, ii) Heermann et al. iii) Hong et al., iv) Rammal et al., v) Lobb and Frank.

([e]) Values for the Cayley tree or mean-field theory, as explained in the text.

REFERENCES

1. Alexander, S., Orbach, R., J. Physique Lett. 43, (1982) L625.

2. Rammal, R., Toulouse, G., J. Physique Lett. 44, (1983) L13.

3. Angles d'Auriac, J. C., Benoit, A., Rammal, R., J. Phys. A 16, (1983) 4039.

4. Puech L., Rammal, R., J. Phys. C 16, (1983) L1197.

5. Angles d'Auriac. J. C., Rammal, R., J. Phys. C 16, (1983) L825.

6. Rammal, R., Toulouse, G., Vannimenus, J., J. de Physique, (Paris) 45, (1984) 389.

7. Rammal, R., Angles d'Auriac, J. C., Benoit, A., CRTBT preprint (1984). The term spreading dimension was proposed by G. Toulouse and used in Ref. 8. For reasons of economy and simplicity we adopt this terminology.

8. Vannimenus, J., Nadal, J. P., Martin, H., ENS preprint (1984).

9. Skal, A. S., Shklovskii, B. I., Fiz. Tekh. Poluprovod. 8, (1974) 1582. [Sov. Phys. - Semicond. 8, (1975) 1024].

10. deGennes, P. G., J. Physique Lett. 37, (1976) L1.

11. Gefen, Y., Aharony. A., Mandelbrot, B. B., Kirkpatrick, S., Phys. Rev. Lett. 47, (1981) 1771.

12. Harris, A. B., Lubensky, T. C., J. Phys. A 16, (1983) L365.

13. Harris, A. B., Phys. Rev. B 28, (1983) 2614.

14. Heermann, D. W., Stauffer, D., Z. Phys. B 44,

15. Fisher, M. E., Essam, J. W., J. Math. Phys. 2, (1961) 609.

16. Lubensky, T. C., in *Ill- Condensed Matter*, edited by R. Balian, R. Maynard, and G. Toulouse (North-Holland, New York, 1979).

17. Stephen, M. J., Grest, G. S., Phys. Rev. Lett. 38, (1977) 567.

18. Li, P. S., Strieder, W., J. Phys. C 15, (1982) L1235.

19. Hong, D. C., Stanley, H. E., J. Phys. A 16, (1983) L475, L525.

20. Harris, A. B., Kim, S., Lubensky, T. C., to be published.

J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984) L491–L494. Printed in Great Britain

LETTER TO THE EDITOR

Metric properties of fractal lattices

R Rammal†‡, J C Angles d'Auriac† and A Benoit†

† Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, BP 166 X, 38042 Grenoble Cédex, France

‡Department of Physics E1, University of Pennsylvania, Philadelphia 19104, USA

Received 29 March 1984

Abstract. We study the connectivity dimension $\hat{d}$ of fractal lattices viewed as networks (graphs) of sites and (constant length) bonds. Two examples are investigated in detail: the 2D Sierpinski gasket and 2D infinite percolation clusters on square and triangular lattices. In the first case $\hat{d}$ is shown to coincide with the fractal dimension, whereas $\hat{d} = 1.72 \pm 0.02$ appears as a universal exponent for percolation clusters in two dimensions. Considered as an intrinsic parameter, the connectively dimenion $\hat{d}$ is compared with other intrinsic and extrinsic characteristic parameters of fractal lattices. In particular we argue that $\tilde{d} \leq \hat{d} \leq \bar{d}$ holds on fractal lattices in general ($\bar{d}$ = fractal dimension, $\tilde{d}$ = spectral dimension).

It is now recognised that there are many self-similar structures (fractals) in nature and many ways to model them (Mandelbrot 1982). Most of the attention so far has been focused on characterising the geometrical properties of fractals. The fractal dimension $\bar{d}$ hence emerges as a first operative measure of the fractal geometry. Recently, it has been shown (Alexander and Orbach 1982, Rammal and Toulouse 1983) that simple physical problems on fractal lattices (spectrum of low energy excitations, classical diffusion, ...) are governed by another dimension: the spectral dimension $\tilde{d}$. For instance, $\tilde{d} \simeq \frac{4}{3}$ and $1 < \tilde{d} \leq 4$ for percolation clusters at all Euclidean dimensions $d \geq 2$. In contrast, for the Sierpinski gaskets, $\tilde{d}$ and $\bar{d}$ both depend on d: $\bar{d} = \ln(d+1)/\ln(2)$ and $\tilde{d} = 2\ln(d+1)/\ln(d+3)$ (see e.g. Angles d'Auriac *et al* 1983). Very recently, it was realised that $\tilde{d}$ is an intrinsic parameter, independent of the space in which the fractal is embedded, whereas $\bar{d}$ depends on this embedding (Rammal *et al* 1984). One reason for this distinction is that $\tilde{d}$ provides the proper counting of closed paths, whereas $\bar{d}$ is appropriate for the counting of points (or masses) at a given length scale. For instance, it has been shown that the self-avoiding walk (SAW) statistics on a fractal lattice is governed by another intrinsic exponent, independent of the embedding space, which depends on $\tilde{d}$, and possibly on other parameters, as soon as $\tilde{d} \leq 4$ (Rammal *et al* 1984). Moreover, it was shown that the spectral and fractal dimensions of the backbone are not sufficient to determine the properties of SAWs in general. Therefore, it is tempting to speculate that $\tilde{d}$ is just the first of a hierarchy of intrinsic indices, controlling more and more specific properties of fractal lattices. In this Letter, we investigate another intrinsic property of fractal structures, viewed as infinite lattice graphs: the connectivity dimension.

Basically, the connectivity dimension deal with the notion of distance between nodes implied by the lattice graph structure of the fractal. In general, the distance $d(x, y)$ between two nodes x and y is defined as the length of the shortest path between

x and y. For simple graphs, this provides a natural metric space structure, and therefore all topological concepts of metric spaces take a precise signification: sphere, ball, etc. In this respect, two characteristic numbers can be considered. The first d_1 is defined by the asymptotic law behaviour (if any) of the volume $A(l)$, of a *ball* of radius l (l = integer):

$$d_1 = \lim_{l\to\infty} \ln A(l)/\ln l. \tag{1}$$

The second is defined similarly from the asymptotic behaviour of the 'surface' $C(l)$ of a *sphere* of radius l:

$$d_2 = 1 + \lim_{l\to\infty} (\ln C(l)/\ln l). \tag{2}$$

For infinite lattice graphs, the average over all possible origins is to be taken in (1), (2). As defined above, $A(l)$ (resp. $C(l)$) is the number of lattice sites whose shortest path to a fixed origin consists of n bonds, with $n \leqslant l$ (resp. $n = l$). As was pointed out by several authors (Kasteleyn 1963, McKenzie 1981, Suzuki 1983), d_1 and d_2 as defined by (1), (2) are expected to be different in general, and also be distinct from the fractal dimension $\bar{d}$ of a fractal lattice (Suzuki 1983)).

In the case of standard Euclidean lattices (simple cubic for instance), it is easy to show that $d_1 = d_2 = d$. This double equality is a simple consequence of the known equivalence between different metrics on Euclidean spaces. On a fractal lattice, d_1 and d_2 may be different from $\bar{d}$. For instance, for the von Koch curve we have $d_1 = d_2 = 1$ and $\bar{d} = \ln 4/\ln 3$. The same hold also for a linear polymer and for a random walk trajectory. In both these particular cases, we have $d_1 = d_2 = \bar{d} = 1$. Moreover, it is clear that both d_1, d_2 and $\bar{d}$ are intrinsic parameters dealing with graph theory concepts (paths, loops, ...). A natural question arises: is c_1 (or d_2) equal to $\bar{d}$ on a general fractal lattice? In the following, we shall give a negative answer to this question, by studying carefully two examples of fractal lattices: the 2D Sierpenski gasket ($\bar{d} = \ln 3/\ln 2$, $\bar{d} = 2\ln 3/\ln 5$) and the infinite percolation clusters in two dimensions.

In figure 1 are shown the results obtained for $C(l)$ as a function of the radius l for the 2D Sierpenski gasket. $C(l)$ represents the average over all possible origins on the gasket (exact enumeration) for $1 \leqslant l \leqslant 96$. As can be seen, this plot exhibits a self-similar behaviour and $C(l)$ does not behave as a simple power law as a function of l. Monte Carlo calculations for $l \geqslant 96$ show similar results and d_2 (equation (2)) cannot be defined simply. Of course $C(l)$ may be smoothed or bounded by power laws of l. Such a procedure will provide a possible determination of the value of d_2, but will not be discussed further here. Figure 2 gives the corresponding results for $A(l)$ in the same range of l: $1 \leqslant l \leqslant 96$. $A(l)$ behaves like a proper power law of l, and the value d_1 of the corresponding exponent was obtained as $d_1 = 1.58 + 0.02$. These results answer our above questions and provide a non-trivial example where $d_1 > \bar{d}$. More precisely it can be shown that $d_1 = \bar{d}$ on the Sierpinski gaskets. This statement is a direct consequence of the equivalence between the used metric on the gasket (induced by its graph structure) and that of the triangular (at $d = 2$) lattice. This result is easy to obtain and holds at $d = 3, 4, \ldots$. In general, the fractal dimension $\bar{d}$ provides an obvious upper bound for d_1: $d_1 \leqslant \bar{d}$. The Sierpinski gaskets give therefore an example where this upper bound is reached. On the contrary, the example of the von Koch curve shows that $d_1 = \bar{d}(-1)$. Therefore, it is tempting to conjecture the following inequality:

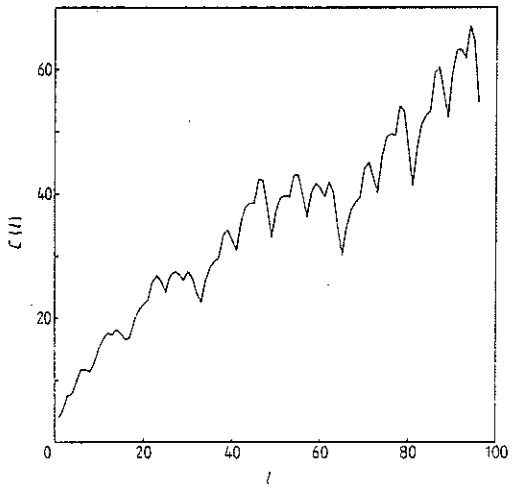


Figure 1. The graph of the average 'surface' $C(l)$ of a sphere of radius l on a 2D Sierpinski gasket (SG) $1 \leqslant l \leqslant 96$. The self similarity of this curve is clearly shown.

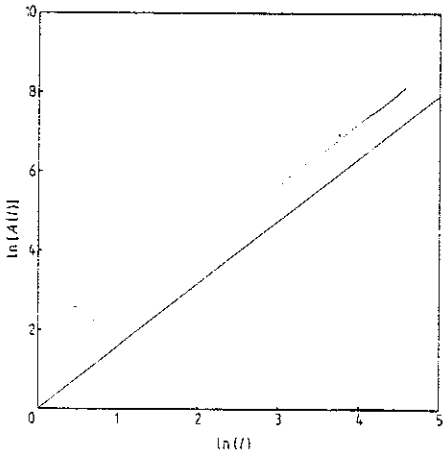


Figure 2. Log–log plot of the average volume $A(l)$ of a ball of radius l for a 2D SG. The full straight line has the slope $\bar{d} = \ln 3/\ln 2$ (fractal dimension).

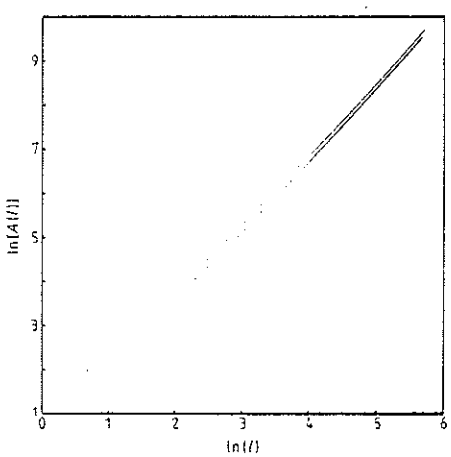


Figure 3. Log–log plot of the average volume $A(l)$ of a ball of radius l, for an infinite site percolation cluster, at threshold p_c. Upper curve: triangular lattice ($p_c = 0.5$). Lower curve: square lattice ($p_c = 0.5927$). The asymptotic slope $\hat{d} = 1.72 \pm 0.02$ is the same in these two cases.

$\tilde{d} \leqslant d_l \leqslant \bar{d}$ on a general fractal lattice. Besides the above examples, this conjecture is supported by the results obtained for the percolation clusters.

We have performed the calculations of both $A(l)$ and $C(l)$ on the infinite site percolation clusters at threshold p_c. A standard Monte Carlo procedure was used to generate clusters for the square lattice ($p_c = 0.5927$) and the triangular lattice ($p_c = 0.5$). Statistics over some 1500 clusters, of lateral extension $L \geqslant 600$, were performed in each

case. The asymptotic behaviour is reached at $l \geqslant 10^2$ for both $A(l)$ and $C(l)$. In figure 3, we show the results obtained for $A(l)$. The exponent d_1 governing the power law of $A(l)$ was found to be $d_1 = 1.72 \pm 0.02$. This value is the same on the square lattice and the triangular lattice. The same number (up to our accuracy) was obtained for d_2, from the data relative to $C(l)$.

These results suggest that $d_1 = d_2$ on the percolation clusters. The numerical value of this exponent is therefore universal and does not depend on the detailed structure of the lattice (square or triangular). In the following this exponent will be denoted $\hat{d}$. Moreover the numerical estimate of $\hat{d}$ supports fully our conjecture: $\tilde{d} \leqslant \hat{d} \leqslant \bar{d}$ on the 2D percolation clusters where $\bar{d} = 1.896$ and $\tilde{d} \simeq 4/3$. The double equality is obviously reached at $d = 1$ where $p_c = 1$ and $\tilde{d} = \hat{d} = \bar{d} = 1$. However, it is not clear for us if $\hat{d}$ is related to the usual critical exponents (β_p, ν_p, ...) of the percolation transition, in a simple way like $\bar{d}$ and $\tilde{d}$.

To conclude, we have presented in this letter a summary of some results relative to the connectivity dimension of fractal lattices. Our results suggest that in general this new intrinsic parameter $\hat{d}$ lies between the fractal $\bar{d}$ and spectral $\tilde{d}$ dimensions of the considered structure: $\tilde{d} \leqslant \hat{d} \leqslant \bar{d}$. The upper and lower bounds can be reached in particular situations. We have shown that $\hat{d}$ is a universal exponent on percolation clusters in two dimensions ($d = 2$). Results pertaining to the percolation clusters at $d = 3, 4, 5, 6$ will be presented elsewhere (Angles d'Auriac *et al* 1984). The relevance of this new intrinsic exponent $\hat{d}$ for various statistical problems deserves a careful investgation in the furture. Potential examples are the SAWs, dimer problems, etc.

References

Alexander S and Orbach R 1982 *J. Physique Lett.* **43** L625

Angles d'Auriac K C, Benoit A and Rammal R 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** 4039

Angles d'Auriac J C, Harris A B and Rammal R 1984 *Preprint*

Kasteleyn P W 1963, *J. Math. Phys.* **4** 287

Mandelbrot B B 1982 *The fractal Geometry of Nature* (San Francisco: Freeman)

McKenzie D S 1981 *J. Phys. A: Math. Gen.* **14** 3267

Rammal R and Toulouse G 1983 *J. Physique Lett.* **44** L13

Rammal R, Toulouse G and Vannimenus J 1984 *J. Physique* **45** 389

Suzuki M 1983 *Prog. Theor. Phys.* **69** 65

II - DIFFUSION CLASSIQUE SUR LES STRUCTURES FRACTALES (PROPRIETES SPECTRALES)

II.1. Résultats analytiques

L'étude de la diffusion sur des espaces Euclidiens est un domaine bien établi de la physique, mais qui a aussi beaucoup de répercussions dans d'autres disciplines (biologie, sciences sociales, ...). La formulation discrète comme la formulation continue des modèles de diffusion fait toujours appel à des milieux invariants par translation. L'analyse de Fourier y est donc un outil essentiel. Cependant sur les structures fractales, cette invariance par translation est perdue. Il ne peut donc plus y avoir d'analyse de Fourier. Cependant l'invariance par dilatation la remplace. L'objet de ce paragraphe est d'étudier les conséquences de ce changement de symétrie.

La diffusion classique est fondée sur deux concepts physiques

i) "la quantité de matière" diffusant à travers une unité de surface est proportionnelle au gradient de densité de matière dans la direction perpendiculaire à cette surface (loi de Fick) :

$$\vec{j} = - D \vec{\nabla} \eta \qquad \text{(II.1)}$$

où $\eta \equiv \eta(r,t)$ est la densité de particules en r à l'instant t, $\vec{j} = \vec{j}(r,t)$ étant le courant et D la constante de diffusion.

ii) il y a conservation de la matière

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + \vec{\nabla} . \vec{j} = 0 \qquad \text{(II.2)}$$

De II.1 et II.2, on déduit $\frac{\partial \eta}{\partial t} = \vec{\nabla}(D(\vec{\nabla}\eta))$ et en supposant D indépendant de r et de t, on aura l'équation de la diffusion

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = D \, . \, \nabla^2 \eta \qquad \text{(II.3)}$$

Une formulation discrète est très utile et l'on aboutit alors au problème des promenades aléatoires.

La principale quantité d'intérêt pour le problème des promenades aléatoires est le noyau de diffusion $P(R\ ;\ t)$ = probabilité que le promeneur soit au site R à la date t. De la connaissance du noyau de diffusion on déduit $\sqrt{< R^2(t) >}$ qui est la distance moyenne du promeneur à l'origine, à la date t.

Une autre quantité d'importance est le nombre moyen $S(t)$ de sites visités à la date t.

La forme du noyau de diffusion est bien connue pour un réseau Euclidien (Mon).

$$P(\vec{R},t) = \frac{1}{R_o^d} \exp(-(R/R_o)^2) \qquad 1 \ll R \ll t \tag{II.6}$$

où $R = |\vec{R}|$ est la distance à l'origine et $R_o \sim t^{\nu_{RW}} = t^{1/2}$ est l'extension radiale. De II.6 on déduit l'expression de $< R^2(t) > \sim t^{2\nu_{RW}}$ où $\nu_{RW} = 1/2$ à toutes dimensions. De plus $S(t)$ a la forme suivante (Mon) :

$$S(t) \sim \begin{cases} \left(\frac{8t}{\pi}\right)^{1/2} & \text{à } d = 1 \\ \frac{\pi t}{\ell n t} & \text{à } d = 2 \\ Ct + C'\sqrt{t} & \text{à } d = 3 \\ Ct + C''\ell n t & \text{à } d = 4 \end{cases}$$

C et C' sont des constantes.

Les questions à résoudre s'énoncent alors simplement :

i) quelles sont les expressions de $< R^2(t)>$, $P(0,t)$ et $S(t)$ sur une structure fractale ?

ii) plus généralement quelle forme prend (II.6) sur un espace fractal ?

A. Expressions de $R^2(t)$, $P(0,t)$, $S(t)$ sur une structure fractale :

Il est clair que $S(t) \leqslant t$ pour une diffusion quelconque. D'un autre côté (Ram(b)) (Ale(b)), en reliant le calcul de ν_{RW} au problème des vibrations élastiques sur une structure fractale, on introduit une nouvelle dimension $\tilde{d}$ pour caractériser $R^2(t)$. L'idée consiste à comparer formellement l'équation de la diffusion $\frac{\partial \eta}{\partial t} = - D\nabla^2\eta$, et celle des vibrations $\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} = \kappa \nabla^2 \eta$(Ale(c)). Ceci amène à introduire l'exposant $\tilde{d}$ appelé la dimension spectrale et décrivant le comportement de la densité d'états $\rho(\omega)$ à $\omega \sim 0$ (limite élastique) : $\rho(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1}$. Une façon simple d'introduire $\tilde{d}$ est probablement l'argument suivant (Ram(b)) :

Soit un objet fractal composé de sites portant des masses interagissant entre elles par des forces harmoniques (on peut imaginer par exemple un cristal parfait où l'on a enlevé une fraction $1-p_c$ d'atomes). Lors d'une transformation d'échelle $L \to bL$, le nombre de modes $N(bL)$ devient $N(bL) = b^{\bar{d}}N(L)$ (le nombre de mode est ici le nombre de degré de liberté, donc d'atomes). La densité d'états $\rho_{bL}(\omega)$ devient $\rho_{bL}(\omega) = b^{\bar{d}}\rho_L(\omega)$. Mais au cours de la transformation d'échelle les modes subissent eux-mêmes une transformation que l'on suppose du type $\omega(bL) = b^{-a}\,\omega(L)$. Cette relation définit a et l'on en déduit

$$\rho(\omega) \sim \omega^{\bar{d}/a-1} \quad (\omega \sim 0) \tag{II.7}$$

On définit alors $\tilde{d} = \bar{d}/a$ (Ram(b)).

Notons tout de suite que lorsque l'espace considéré est Euclidien la relation $\rho(\omega) \sim \omega^{d-1}$ conduit à $\tilde{d} = d$. Comme $\bar{d}$ et d, $\tilde{d}$ est une nouvelle dimension décrivant une structure fractale, qui est "accidentellement" égale à $d = \bar{d} = \hat{d}$ sur un espace Euclidien. L'inégalité entre dimensions est la suivante :

$$\tilde{d} \leqslant \hat{d} \leqslant \bar{d} \leqslant d$$

$\tilde{d}$, défini à partir de $\rho(\omega)$, décrit les aspects temporels et il est alors clair que $\tilde{d}$ doit intervenir dans les problèmes de diffusion. En exploitant l'analogie entre les équations des ondes et l'équation de diffusion (Ram(b)), on déduit que $\nu_{RW} = \frac{1}{2a} = \frac{\tilde{d}}{2\bar{d}}$ où a et $\tilde{d}$ ont été définis plus haut.

Il vient

$$P(0,t) \sim t^{-\tilde{d}/2} \qquad t \gg 1 \tag{II.8.a}$$

et

$$S(t) \leqslant t^{\tilde{d}/2}$$

De plus il a été montré

$$S(t) \underset{t \gg 1}{\sim} \begin{cases} t^{\tilde{d}/2} & \tilde{d} \leqslant 2 \\ t & \tilde{d} < 2 \end{cases} \tag{II.8.b}$$

La formule II.8 est un moyen numérique excellent pour calculer $\tilde{d}$ que l'on a utilisé largement dans la suite. La formule II.8 donne une compréhension intuitive de $\tilde{d}$. $\tilde{d}$ reflète la fraction des boucles fermées de longueur t comme $\bar{d}$ reflète le nombre de points présents dans une boîte de taille donnée.

La valeur de $\tilde{d}$ peut être calculée ou reliée à d'autres exposants dans certains cas. Sur le tamis de Sierpenski,(Ram(c)) a calculé le spectre complet des excitations et, en particulier, la densité d'états $\rho(\omega)$ pour $\omega \sim 0$: $\rho(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1}$, avec $\tilde{d} = \frac{2\ell n3}{\ell n5}$. Sur les amas de percolation, $\tilde{d}$ peut être relié aux exposants de la transition de percolation

$$\tilde{d} = 2\,\frac{d\nu_p - \beta_p}{t - \beta_p + 2\nu_p}$$

où $P(p) \sim \Delta p^{\beta_p}$, $\xi(p) \sim \Delta p^{-\nu_p}$ et $\sigma(p) \sim \Delta p^{t}$, $\Delta p \equiv |p-p_c|$ ($\sigma(p)$ est la conductivité). En reportant les valeurs admises communément de ν_p, β_p et t on trouve des valeurs de $\tilde{d}$ de l'ordre de 4/3 pour toute dimension d. De plus un argument (Ram(b)) portant sur les fluctuations de la "frontière ouverte" (nombre de sites non encore visités mais accessibles à partir des sites déjà visités) indique que $\tilde{d} = 4/3$. La question est alors de savoir si vraiment $\tilde{d}$ sur un amas de percolation vaut exactement 4/3 pour toutes dimensions, comme il l'a été conjecturé (Ale(b)).

B. <u>Forme du noyau de diffusion</u> :

Que devient l'expression (II.6) dans le cas d'une structure fractale ? L'expression suivante a été proposée :

$$P(\vec{R}\ ;\ t) = \frac{1}{R_o^{\bar{d}}}\, f(R/R_o)$$

où $\bar{d}$ est la dimension fractale de l'espace, et f désigne une fonction universelle et $R_o(t) \sim t^{\nu_{RW}}$ où $\nu_{RW} = \frac{\tilde{d}}{2\bar{d}}$. Pour $u \ll 1$, on doit avoir $f(u) \sim 1$ pour retrouver

$$P(0,t) \sim \frac{1}{(t^{\tilde{d}/2\bar{d}})^{\bar{d}}} = t^{-\tilde{d}/2} .$$

La forme précise de f(u) pour $u \gg 1$ n'est pas connue mais la forme suivante a été proposée $f(u \gg 1) \sim \exp(-u^{\delta})$. Différentes valeurs de δ sont possibles. Notons d'abord que dans le cas Euclidien (II.6) indique $f(u) = \exp(-u^2)$ qui a bien la forme proposée avec $\delta = 2$. Une première valeur proposée dans (Ang(b)) est la suivante $\delta = \frac{1}{1-\nu}$. (Guy) dans une étude numérique sur le tamis de Sierpenski à d = 2 arrive à la conclusion que $\delta = \frac{1}{1-\nu}$ pour $R \gg R_o$, tandis que $\delta = \frac{1}{\nu}$ pour $R \sim R_o$ (voir cas ii). Cette expression $\delta = \frac{1}{1-\nu}$ est supportée aussi par une étude numérique sur les amas de percolation (Hav). Cependant (Ram(g)) a pu montrer l'inégalité suivante entre les différentes dimensions

$$\delta \geqslant \frac{\bar{d}}{\hat{d} - \nu\bar{d}} \qquad \text{(II.9)}$$

ce qui impliquerait $\hat{d} \geqslant \bar{d}$ si $\delta = 1/(1-\nu)$. Or en général $\bar{d} \geqslant \hat{d}$. Ceci disqualifie la forme $\delta = \frac{1}{1-\nu}$ sauf pour les fractales où $\bar{d} = \hat{d}$ (par exemple le tamis de Sierpenski).

Une autre forme proposée par (Ram(e)), lors de l'étude d'une chaîne de polymère sur une structure fractale, est $\delta = 1/\nu$. Cette forme est bien sûr aussi compatible avec le cas Euclidien, mais elle est aussi compatible avec (II.9). Différents auteurs confirment cette hypothèse : (Ban) (amas de percolation), (Osh) (tamis de Sierpenski).

<u>Remarque</u> : Il faut noter qu'il est difficile de trancher numériquement entre ces deux formes pour différentes raisons :

i) il faut $R \gg R_o \sim N^{\nu_{RW}}$, ce qui implique de longues simulations ;

ii) il faut effectuer des moyennes sur l'origine ;

iii) en général ν_{RW} n'est pas très différent de 1/2 et donc $\frac{1}{\nu_{RW}}$ est voisin de $1/1-\nu_{RW}$.

Pour conclure, notons que la forme suivante (Hav) a été proposée pour la distribution $P(\ell)$ des points accessibles en N pas

$$P(\ell) = N^{-\nu\hat{d}}\ell^{\hat{d}-1}\varphi(\ell/N^{\nu})$$

avec $\nu = 1/\hat{d}$, $\varphi(u \gg 1) \sim \exp(-u^{\delta})$, $\delta = 1/(1-\nu)$. Cette proposition a été testée favorablement sur les amas de percolation. Cette expression est à comparer avec celle trouvée plus haut

$$P(R) = N^{-\nu_{RW}\bar{d}} R^{\bar{d}-1} f(R/N^{\nu_{RW}})$$

où $\nu_{RW} = \tilde{d}/2\bar{d}$ et $f(u \gg 1) \sim \exp(-u^{\delta})$, $\delta = 1/\nu_{RW}$. La comparaison de ces deux formes montrent l'analogie et la différence entre ces deux quantités.

<u>Exemple</u> : Promenade aléatoire sur une promenade aléatoire.

Il est clair que la forme asymptotique trouvée plus haut suppose l'isotropie de l'espace. En effet, on a supposé explicitement que $f(u)$ ne dépend que du rapport R/R_o. Ceci est le cas si l'on moyenne sur tous les points origines possibles. Dans la suite on va illustrer ce point sur l'exemple simple de la diffusion d'une particule sur un fractal obtenu lui-même comme trajectoire d'une marche au hasard. Pour construire le support de la marche on partira de $x = 0$ à l'instant origine $t = 0$ et on va à droite ou à gauche avec probabilité 1/2 ($x \to x \pm 1$). En fonction du nombre de pas on obtient un graphe (fig. 2) qui donne une réalisation du fractal sur lequel se déroule la marche au hasard. Pour $t < 0$, on réalise la même construction avec $t' = -t$ pas. La probabilité de se trouver en x après t pas est donc

$$P_t(x) = \begin{cases} (1/2)^t \; C_t^{\frac{t-x}{2}} & |x| \leqslant t, \text{ t et x de même parité} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

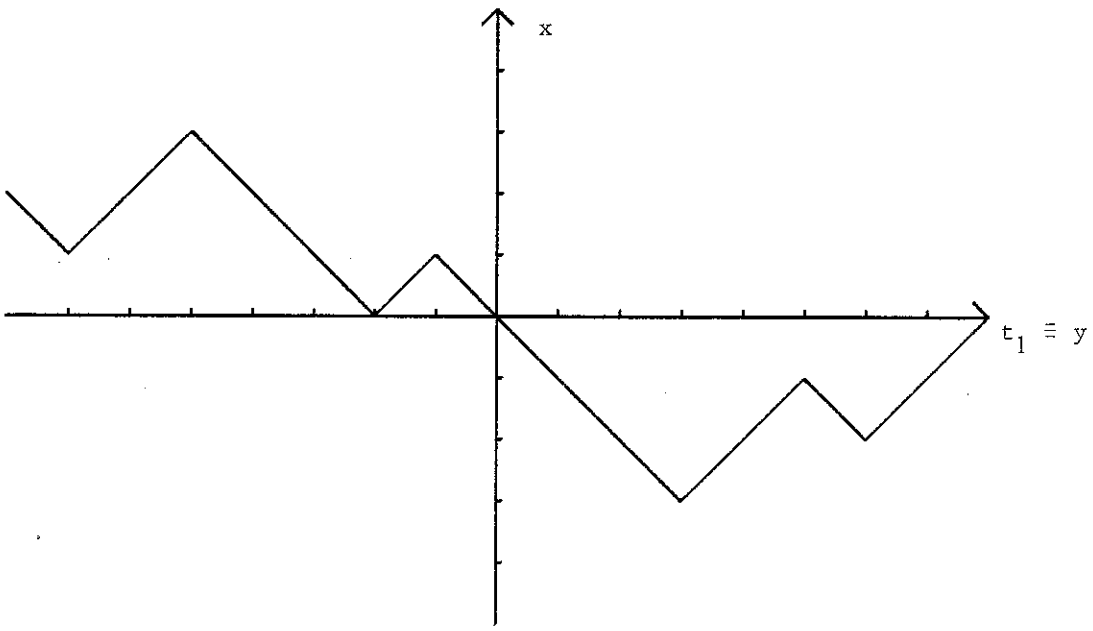


Figure 2

Considérons une particule qui diffuse sur ce fractal ($d = 2$, $\bar{d} = 2$, $\hat{d} = 1$, $\tilde{d} = 1$). La probabilité $P(t\ ;\ x,y)$ que la particule soit en $\binom{x}{y}$ à la date t vaut le produit de la probabilité que la première particule soit à la date t en $\binom{x}{y}$ avec la probabilité que la deuxième particule ait une projection sur l'axe t_1 qui vaut t :
$P(x,y\ ;\ t) = P_x(y)\ P_t(x)$. En particulier, la loi de probabilité $W(t,x)$ de la projection sur l'axe x est obtenue en sommet y depuis $-\infty$ jusqu'à $+\infty$; ce qui donne compte tenu de la forme de $P_t(x)$:

$$W(t,x) = 2 \sum_{y=x}^{t} P_t(y)\ P_y(x) + P_t(0)\ P_o(y)$$

Dans la limite $t \gg 1$ on peut utiliser l'approximation gaussienne et il vient $P(y,t) \simeq (2\pi t)^{-1/2}\ e^{-y^2/2t}$ et

$$P(x,y;t) = \frac{1}{\pi\sqrt{t}}\ \frac{1}{\sqrt{y}}\ \exp\left(-\frac{y^2}{2t} - \frac{x^2}{2y}\right) \qquad \text{(II.10)}$$

Les différents moments de la projection x de la particule peuvent être calculés avec l'aide $W(t,x)$. Par exemple

$$<x^2>_t = \sum_{x=-t}^{+t} x^2 \, W(t,x)$$

et il vient

$$<x^2>_t \sim \left(\frac{2t}{\pi}\right)^{1/2} \quad \text{pour } t \gg 1.$$

D'où l'on déduit $\nu_{RW} = 1/4$ qui est bien la valeur prédite par $\nu_{RW} = \tilde{d}/2\bar{d}$.

La forme (II.10) n'est pas la forme attendue. Ceci est dû au fait que la marche n'est pas du tout isotrope. La projection sur l'axe t_1 est une marche habituelle à la différence de la projection sur l'axe x.

P(t;x,y) vérifie cependant la loi d'échelle suivante :

$$P(\lambda^4 t \; ; \; \lambda x, \lambda^3 y) = \frac{1}{\lambda^3} P(t;x,y)$$

Notons finalement que si P(t;x,y) ne vérifie pas la loi d'échelle attendue, ses projections sur l'axe t_1 et sur l'axe x la vérifient. Pour voir cela, il suffit d'utiliser l'approximation gaussienne sur W(t,x)

$$W(t,x) \sim \frac{1}{\pi\sqrt{t}} \int_0^\infty \frac{dy}{y^2} \exp\left(-\frac{y^2}{2n} - \frac{x^2}{2y}\right) .$$

Ce qui donne $W(t\lambda^{1/\nu}, \lambda x) = \lambda^{1-\bar{d}} W(t,x)$ comme attendu.

II.2. Etude numérique

A. Diffusion sans mémoire

L'article ci-joint (Ang(b)) porte sur l'étude de la diffusion sur le tamis de Sierpinski et sur les amas de la percolation à deux dimensions. Les résultats du paragraphe II.1 y sont confirmés. L'article ci-joint (Ang(c)) est consacré à l'étude des promenades aléatoires sur les amas de percolation de l'arbre de Bethe. L'article (Ram(h)) représente une étude extensive de $\tilde{d}$ à tout d. La valeur de $\tilde{d}$ sur les amas percolation en dimension 2,3,4,5 et 6 y est calculée en déterminant $S(t) = at^{\tilde{d}/2}(1+bt^{-\omega})$. On trouve $1{,}322 \leqslant \tilde{d} \leqslant 1{,}332$ et $\omega \sim 1/6$. On en conclut que $\tilde{d} = 4/3$ n'est pas une valeur exacte mais une bonne approximation.

J. Phys. A: Math. Gen. 16 (1983) 4039–4051. Printed in Great Britain

Random walk on fractals: numerical studies in two dimensions

J C Angles d'Auriac, A Benoit and R Rammal

Centre de Recherches sur Les Très Basses Températures, CNRS, BP 166X, 38042 Grenoble Cedex, France

Received 25 January 1983, in final form 21 July 1983

Abstract. Monte Carlo calculations are used to investigate some statistical properties of random walks on fractal structures. Two kinds of lattices are used: the Sierpinski gasket and the infinite percolation cluster, in two dimensions. Among other problems, we study: (i) the range R_N of the walker (number of distinct visited sites during N steps): average value S_N, variance σ_N and asymptotic distribution; (ii) renewal theory (return to the original site): probability of return $P_0(N)$, mean number of returns ν_N.

The probability distribution of the walker position $P(N, \mathbf{R})$ after N steps is discussed. The asymptotic behaviour ($N \gg 1$) of these quantities exhibits power laws, with associated exponents. The numerical values of these exponents are in good agreement with recent theoretical predictions (Alexander/Orbach and Rammal/Toulouse).

1. Introduction

Recently, there has been a good deal of interest in fractal structures (Mandelbrot 1977), mainly due to their dilation symmetry (scaling invariance) in contrast to translationally invariant systems. A random walk in free space, linear polymers and percolation clusters at threshold are just a few examples of fractals. In the latter case, recent observations by several authors (Voss *et al* 1982, Kapitulnik and Deutscher 1982) show the importance of fractals in representing these disordered structures. From this viewpoint, fractals are expected to bridge the gap between crystalline materials and disordered systems. In general, two kinds of fractals can be distinguished: deterministic fractals (self-similar) such as the family of the Sierpinski gaskets (Gefen *et al* 1981, Rammal and Toulouse 1982) and random fractals (statistically self-similar) such as the percolation clusters (Stauffer 1979, 1981, Deutscher 1981).

Whereas Euclidean space is well characterised by one space dimension d, fractals require the definition of (at least) three dimensions: d, the dimension of the embedding Euclidean space, $\bar{d}$, the fractal dimension (Mandelbrot 1977), $\tilde{d}$, the spectral dimension (Alexander and Orbach 1982). In general, $\tilde{d}$ describes the power law $\rho(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1}$ of harmonic excitations (elastic vibrations for instance) close to $\omega \sim 0$. In a recent publication (Rammal and Toulouse 1983, referred to hereafter as I) the importance of the spectral dimensionality $\tilde{d}$ in many physical problems was investigated: classical diffusion, quantum localisation, self avoidance etc. In particular, a number of interesting predictions relative to the diffusion on fractal spaces were stated in I: range of a random walk, renewal theory, etc. One of the objects of the present work is to check numerically some of the predictions given in I. New results relative to random walk statistics (RW)

© 1983 The Institute of Physics

on fractals, such as the spatial distribution, mean first-passage time, zero-crossing set, etc are also stated, as an extension of those of I.

This paper is organised as follows. In § 2, numerical results obtained for RWS on the Sierpinski gasket in two dimensions are reported. We focus our attention on three statistical properties of RWS. The first is the range R_N of the walk (number of distinct visited sites during N steps). In particular, we investigate the average $S_N = \langle R_N \rangle$, the variance σ_N^2 of R_N and the asymptotic distribution of R_N, at $N \gg 1$. For instance, we find that S_N and σ_N are given at $N \gg 1$ by the same power of N with the exponent $\tilde{d}/2$. It is argued that this particular behaviour of R_N is common to all fractals with $\tilde{d} < 2$. The second property of the RWS is relative to the renewal theory: probability $P_0(N)$ and number ν_N of returns to the original site of the walk, after N steps. The result stated in paper I, $P_0(N) \sim N^{-\tilde{d}/2}$, is verified with a good numerical accuracy (less than 1%). The third property investigated in § 2 concerns the spatial distribution of the walk. We show in particular the consistency of the scaling behaviour of this distribution (Rammal and Vannimenus 1983) with the obtained numerical results. New results, relative to the mean first-passage time, zero-crossing set, etc, are deduced from the spatial distribution of the RW.

In § 3, we investigate the same properties as in § 2 for RWS on the percolation clusters (at threshold) on a square lattice. The scaling behaviour for S_N, $P_0(N)$, etc, stated in I, is recovered, from which we deduce the value of the exponent $\tilde{d}$. Within numerical accuracy, a relatively good agreement with the conjecture (Alexander and Orbach 1982) $\tilde{d} = \frac{4}{3}$ is observed. In addition to the above statistics, we investigate also the behaviour of the 'open frontier' defined in I, in the asymptotic regime $N \gg 1$. Section 4 is mainly devoted to discussion of open problems, and the possible extension of this work. In particular, we argue that RW statistics provide an alternative method for the calculation of dynamical exponents, such as the conductivity exponent t, in percolation problems.

2. Random walk statistics on the Sierpinski gasket

The Sierpinski gaskets form a family of self-similar structures, which can be built in any Euclidean dimension d (see figure 1 for $d = 2$) and which have been applied to studies (Gefen *et al* 1981, Rammal and Toulouse 1982, Alexander 1983), because it lends itself particularly conveniently to scaling computations. At stage n, the total

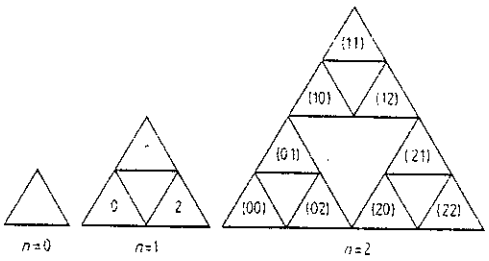


Figure 1. The Sierpinski gasket ($d = 2$) at successive stages: $n = 0$, 1 and 2. Stage $n + 1$ is obtained by the juxtaposition of three n-stage structures. For $n = 1$ and $n = 2$, we have shown the labelling of the plaquettes (up triangles) used in the site coding.

number of sites in the gasket is given by $N_n = (d+1)(1+(d+1)^n)/2$. The scaling factor of the gasket is $b=2$ and the fractal dimensionality is (Gefen *et al* 1981) $\bar{d} = \ln(d+1)/\ln 2$. The spectral dimensionality $\tilde{d}$ was found in I: $\tilde{d} = 2\ln(d+1)/\ln(d+3)$. In the following, we shall study the RWs on the gasket at $d=2$, in order to check some statistical properties of RWs on this non-trivial fractal structure.

2.1. Labelling procedure

Starting from the lowest left corner of the gasket, a natural coding of sites is easily obtained, using p-adic numbers (Bachman 1964, Mahler 1973). We shall illustrate briefly this coding at $d=2$. Each up triangle (plaquette) is labelled on the gasket at stage n by a word of n elements: $(x_1x_2x_3\ldots x_n)$ where $x_i = 0, 1$ or 2 $(1 \leq i \leq n)$ are defined recursively from stage n to stage $n+1$. Beside the corners, every plaquette has three neighbouring ones, which labels are trivially found using the above coding. In this way, the sites of the gasket are labelled with the two plaquette labels sharing the considered site. These labels are the 'normal' coordinates on the gasket, in opposition to Cartesian coordinates usually used in Euclidean lattices.

Starting from an arbitrary site on the lattice, a RW trajectory is generated by a standard Monte Carlo procedure. The lattice size (i.e. n) was chosen to be much larger than the span of the walks ($n > 10$), so as to avoid end effects. A large number of steps N for each trajectory was needed to reach the asymptotic regime, and sampling over a very large number of trajectories was used to obtain accurate results.

2.2. Range of the random walk

The range of a RW R_N is defined as the number of distinct sites visited up to step N. The behaviour of the expectation value $S_N = \langle R_N \rangle$ is well known on Euclidean lattices of dimension d (Montroll and West 1979). For instance,

$$S_N \simeq (8/\pi)^{1/2} N^{1/2} \quad \text{at } d=1, \qquad S_N \simeq N/\ln N \quad \text{at } d=2$$
$$S_N \simeq N \quad \text{at } d \geq 3. \tag{1}$$

The numerical results obtained for the gasket at $d=2$ are shown in figure 2. Averages are taken over 4×10^3 walks of $N \leq 500$ steps. The asymptotic region is reached for

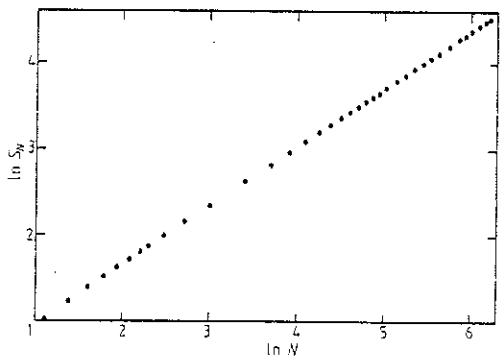


Figure 2. Plot of $\ln S_N$ against $\ln N$ for a set of 4×10^4 walks of $N \leq 500$ steps each, for the Sierpinski gasket (SG).

$N \geqslant 50$, where a power law is observed. The deduced value of the exponent is 0.682 ± 0.005, in very good agreement with the predicted value ($S_N \sim N^{\tilde{d}/2}$) given in I: $\tilde{d}/2 = 0.682\,60$.

The same results were used to extract the behaviour of the variance of the random variable R_N:

$$\sigma_N^2 \equiv \mathrm{Var}\, R_N = \langle R_N^2 \rangle - \langle R_N \rangle^2. \tag{2}$$

The variance of R_N increases with N, showing a power law as a function of N. More precisely, we have used the ratio ρ defined by

$$\rho(N) = (\mathrm{Var}\, R_N)^{1/2}/S_N \tag{3}$$

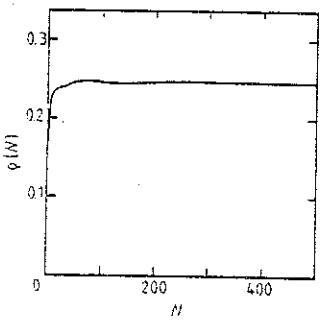


Figure 3. Plot of the ratio $\rho(N) = (\mathrm{Var}\, R_N)^{1/2}/S_N$ as a function of N, for the SG.

to study the asymptotic behaviour of Var R_N. The obtained results are shown in figure 3. After a transient regime, ρ as a function of N converges towards a limiting value given by $\rho = 0.244 \pm 0.002$. This special behaviour

$$\mathrm{Var}\, R_N \sim N^{\tilde{d}} \qquad N \gg 1 \tag{4}$$

is known to occur at $d = 1$ at long times (Feller 1951). The obtained numerical value of the ratio ρ at $d = 1$ is $\rho_1 = 0.298 \pm 0.002$. Such behaviour of the RW on fractals with $\tilde{d} < 2$ is to be contrasted with that on Euclidean space of dimension $d \geqslant 2$. In fact, the asymptotic behaviour of Var R_N in these cases is well known (Jain and Pruitt 1971):

$$\mathrm{Var}\, R_N \simeq N^2/\ln^4(N) \qquad \text{and } \rho_2(N) \simeq 1/\ln N \qquad \text{at } d = 2 \tag{5}$$

$$\mathrm{Var}\, R_N \simeq N \ln N \qquad \text{and } \rho_3(N) \simeq (\ln N/N)^{1/2} \qquad \text{at } d = 3. \tag{6}$$

The common behaviour at $d = 1$ and $d = 2$ of the family of the Sierpinski gaskets is expected to occur for every value of d. The constant value of the ratio ρ is expected to be a decreasing function of d, reaching the value $\rho = 0$ only at $d = \infty$ where $\tilde{d} = 2$. We conjecture that $\lim_{N\to\infty} \rho(N)$ exists and remains finite, for every fractal structure with a spectral dimensionality $\tilde{d} < 2$. For structures with $\tilde{d} \geqslant 2$, this limiting value of $\rho(N)$ is expected to be zero. It will be interesting to check this conjecture numerically on fractals with different values of $\tilde{d}$.

The conjectured behaviour of $\rho(N)$ suggests that the limiting law of R_N is not normal at $\tilde{d} < 2$. Such behaviour is known in the case of a linear chain ($\tilde{d} = \bar{d} = d = 1$). The reduced variable $x = R_N/S_N$ is known (Feller 1951, Jain and Pruitt 1972) to

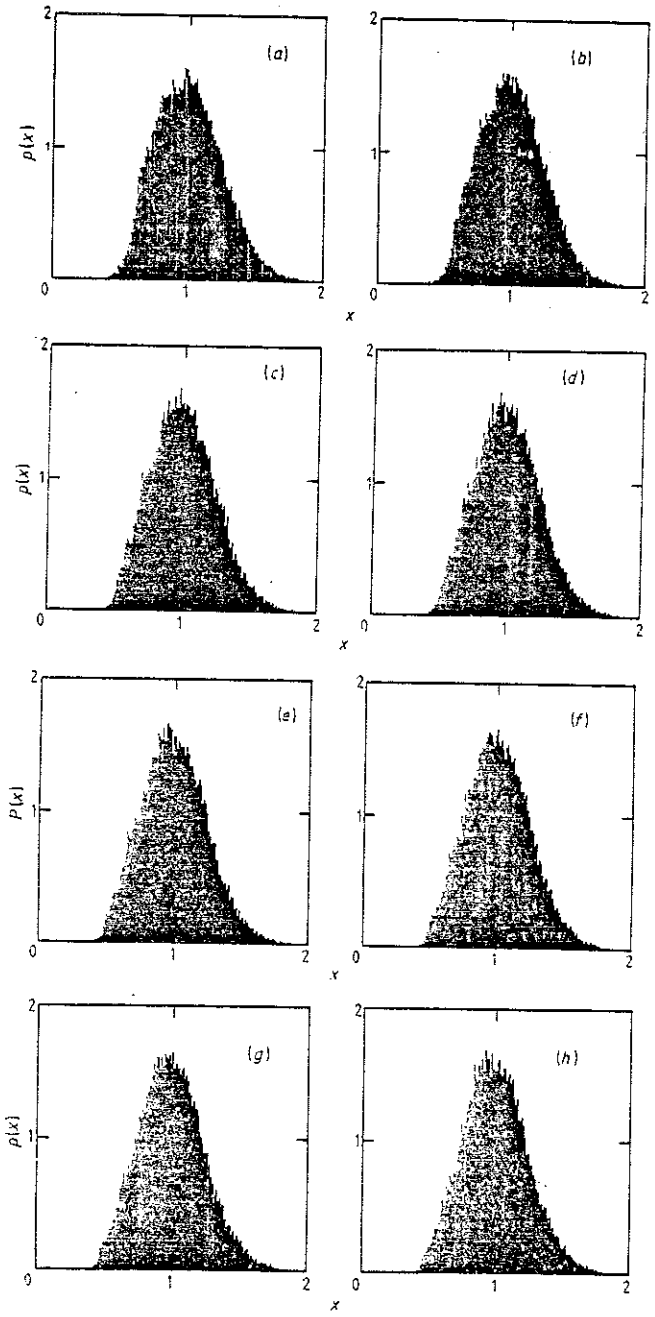


Figure 4. Successive distributions $P(x)$ of the ratio $x = R_N/S_N$ for increasing values of N. (*a*), $N = 300$, $S_N = 65.16$; (*b*), $N = 350$, $S_N = 72.38$; (*c*), $N = 400$, $S_N = 79.44$; (*d*), $N = 420$, $S_N = 81.85$; (*e*), $N = 440$, $S_N = 84.44$; (*f*), $N = 460$, $S_N = 87.02$; (*g*) $N = 480$, $S_N = 89.46$; (*h*), $N = 500$, $S_N = 92.06$; for the SG.

converge in distribution to a proper law. The limiting law is that of

$$(\tfrac{1}{8}\pi)^{1/2}\left\{\max_{0\leq t\leq 1} Y(t)-\min_{0\leq t\leq 1} Y(t)\right\} \tag{7}$$

where $Y(t)$ is standard one-dimensional Brownian motion.

According to the above conjecture relative to Var R_N at $\tilde{d}<2$, we expect that a similar behaviour of the distribution of x must occur on fractals with $\tilde{d}<2$. More precisely, for these structures, the reduced variable x is expected to converge in distribution to a proper law. In figure 4, we show the obtained distribution $P(x)$ of the variable x on the gasket for different values of N. This figure exhibits the limiting distribution of the ratio x (as for $d=1$), in contrast with the Euclidean lattice case, where R_N/S_N converges to 1 with a probability of unity at $d\geq 2$. The presence of a distribution for the ratio x reveals the strong fluctuations of the random variable R_N at $N\gg 1$. Such a behaviour of the RW range is then also expected to occur on any fractal structure where $\tilde{d}<2$. A qualitative change must occur at $\tilde{d}\geq 2$ as for Euclidean lattices.

To summarise, the value $\tilde{d}=2$ is not only associated with a modification in the asymptotic behaviour ($N\gg 1$) of the expected value $S_N=\langle R_N\rangle$ as was argued in I:

$$S_N\sim N^{\tilde{d}/2} \qquad \text{at } \tilde{d}<2, \qquad S_N\sim N \qquad \text{at } \tilde{d}>2. \tag{8}$$

A profound modification of the distribution of the variable R_N seems also to occur at this 'critical' value of $\tilde{d}$. For $\tilde{d}=2$, logarithmic corrections to simple power laws are expected in the expression of S_N, Var R_N, ..., as for Euclidean lattices.

2.3. Renewal theory

As was shown above, the study of the range of the RW provides a direct measurement of the spectral dimensionality $\tilde{d}$. Another measurement of $\tilde{d}$ is given by the renewal theory (Prohorov and Rozanov 1969), which is related to the spatial distribution of the position of the walk. Let τ_k be the time of the kth return to the origin (i.e. starting point of the walk), and let $\tau_0=0$ and $\Delta_k=\tau_k-\tau_{k-1}$ be the time between the $(k-1)$th and kth return; thus

$$\tau_n=\sum_{k=1}^{n}\Delta_k. \tag{9}$$

For a simple RW, the time intervals between two successive returns are independent identically distributed random variables. Then, the time until the nth return is the sum of n of these variables. When properly normalised, we then expect an asymptotically stable distribution $p(x;\alpha,\beta)$ for this variable τ_n (Levy 1937, Gnedenko and Kolmogorov 1968). This stable law is closely related to the value of the spectral dimensionality $\tilde{d}$ of the space. A direct connection is provided by the number ν_t of returns to the original site ω within the time $t\equiv N$. The obvious relation

$$\Pr\{\nu_t\geq n\}=\Pr\{\tau_n\leq t\} \tag{10}$$

allows us to obtain the asymptotic distribution of ν_t for $t\to\infty$. The left-hand side of equation (10) is related to the cumulative time spent at the origin between time 0 and t. The last is expected (see equation (19) below) to scale like $\nu_t\sim t^{\alpha}$ ($t\to\infty$) with

$$\alpha=1-\tilde{d}/2 \qquad \text{at } \tilde{d}<2, \qquad \alpha=0 \qquad \text{at } \tilde{d}>2. \tag{11}$$

From these considerations, we expect the following asymptotic behaviour of τ_n:

$$\tau_n \sim n^{1/\alpha}. \tag{12}$$

This means that the time until the nth return increases approximately as $n^{1/\alpha}$; more precisely,

$$\Pr\{\tau_n/n^{1/\alpha} \geqslant x\} \simeq x^{-\alpha} \qquad \text{at } x \gg 1 \text{ and } n \gg 1 \tag{13a}$$

$$\Pr\{\nu_N/N^{\alpha} \leqslant x\} \simeq \mathrm{O}(1) \qquad \text{at } x \gg 1 \text{ and } N \gg 1. \tag{13b}$$

Equations (11)–(13) are simply the generalisation of the corresponding laws at $d=1$ (Prohorov and Rozanov 1969) to fractals with $\tilde{d}<2$. The known results for ν_n are recovered on the Euclidean lattices. Only the parameter α of the stable law is expected to be different. $\tau_n/n^{1/\alpha}$ is then expected to converge to the stable law with density $p(x;\alpha,1)$. For $d=1$, we recover the known results for the renewal theory, where $\alpha=\frac{1}{2}$ and $p(x;\frac{1}{2},1)$ is given by

$$\begin{aligned} p(x;\tfrac{1}{2},1) &= (2\pi)^{-1/2}x^{-3/2}\,\mathrm{e}^{-1/2x} && x>0 \\ &= 0 && x<0. \end{aligned} \tag{14}$$

According to (12) we deduce

$$\lim_{n\to\infty}(\tau_n/n) = \lim n^{-1}\sum_{k=1}\Delta_k = \infty \qquad \text{at } \tilde{d}<2. \tag{15}$$

If τ is the time of the first return to the original site, then τ is finite with probability one, whereas its mean value given by (15) is infinite. This particular situation is common to all fractal structures with $\tilde{d}<2$.

In the same way, according to (13b), it appears that for $N\to\infty$, the number of returns to the origin in N steps increases proportionally to N^{α} and not N, as might be expected from the recurrence property of the walk. Finally, the probability of return to the origin after N steps, i.e. the probability of closed walks of length N, is given by (Alexander and Orbach 1982, see also I)

$$P_0(N) \sim 1/N^{\tilde{d}/2}. \tag{16}$$

In order to check the above renewal theory, we have calculated separately the average number of returns ν_N given by $\nu_N \sim N^{\alpha}$ ($N \gg 1$) and the probability of return after N steps $P_0(N)$ given by (16). The results obtained for ν_N (average over 4×10^3 walks with different origins ω) are shown in figure 5. As can be seen, the asymptotic power law is reached at $N \geqslant 50$, and the deduced value of the corresponding exponent is 0.3229 ± 0.0003, in good agreement with the predicted value $\alpha=1-\tilde{d}/2$.

In figure 6, we have shown the results obtained for $P_0(N)$, in the same range of N values. The power law (16) is well reproduced, and the extracted exponent is 0.681 ± 0.003, which is in agreement with (16). In addition to the known results for $d=1$, the good agreement between the predictions of the above renewal theory and the obtained numerical results on the gasket support the validity of this theory on fractals. Therefore, the renewal theory provides a new method for the measurement of the spectral dimensionality $\tilde{d}$. The consistency of the results obtained from the renewal theory and those from the range theory, support fully the predictions of I and those given here.

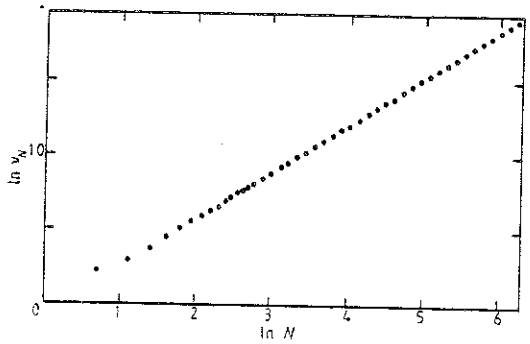


Figure 5. Plot of ln ν_N against ln N for a set of 4×10^4 walks of $N\leqslant500$ steps. Here, ν_N denotes the mean number of returns to the origin in N steps for the SG.

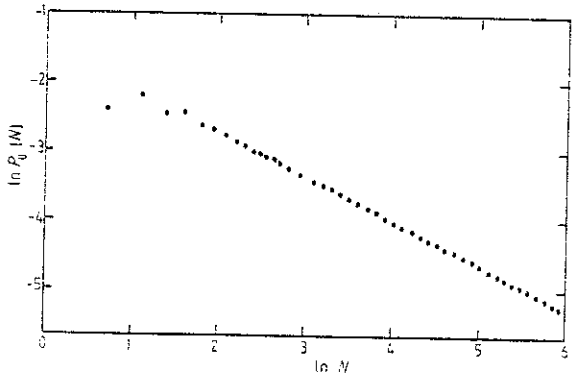


Figure 6. Plot of ln $P_0(N)$ against ln N as in figure 5. $P_0(N)$ is the probability of return to the origin at step N.

2.4. *Spatial distribution $P(N, \boldsymbol{R})$ and mean first-passage time*

In addition to the range and renewal theories discussed in §§ 2.2 and 2.3, the spatial distribution of the walk is another statistical property of the RW. A lot of relatively interesting quantities are extracted from this distribution. In the following, the distances on fractals are measured with the Euclidean metric of the d-dimensional embedding Euclidean space. Using this measure, the normalised spatial distribution of the RW position $\boldsymbol{r}$, starting from a chosen site $\boldsymbol{r}=0$, is given by (Rammal and Vannimenus 1983)

$$P(N, \boldsymbol{r}) = (1/R_0^{\tilde{d}})f(r/R_0) \tag{17}$$

where $r=|\boldsymbol{r}|$ denotes the distance from the origin at step N. In (17), R_0 is the 'radial' extension of the walk (Alexander and Orbach 1982) $R_0\sim N^{\nu_{\mathrm{RW}}}$ where $\nu_{\mathrm{RW}}=\tilde{d}/2\tilde{d}$ is the exponent of the RW. The universal function $f(u)$ of the reduced variable in (17) is expected to scale like

$$f(u)\sim\exp(-u^{\delta}) \qquad \text{at } u\gg1 \tag{18}$$

where δ is given (des Cloizeaux 1982) by $\delta=1/(1-\nu_{\mathrm{RW}})$. In particular, $\Pr(r>\xi)\sim\xi^{-1/\nu_{\mathrm{RW}}}$ at $\xi\to\infty$.

From (17), we recover easily the expression $P_0(N) \sim N^{-\bar{d}/2}$ given by (16). The cumulative time spent at the origin between step 0 and N is also given by

$$\int_0^N P(N, r=0)\, \mathrm{d}N \sim N^{-\bar{d}/2+1} \equiv N^{\alpha}. \tag{19}$$

Accordingly, the fractal dimensionality D of the zero-crossing set is given by

$$D = 1 - \bar{d}/2 \qquad \text{if } \bar{d} < 2, \qquad D = 0 \qquad \text{if } \bar{d} > 2. \tag{20}$$

An interesting quantity which can be extracted from the spatial distribution $P(N, r)$ is given by the mean first-passage time $T_1(\xi)$ at a distance ξ from the origin (Seshardi and West 1982). Let $\pi(N, r)$ be the probability that the walker has not crossed the boundaries $|r| = \xi$, given that he starts at the origin at time $N = 0$: $\pi(N = 0, N) = \delta(r)$ and $\pi(N, r = \xi) = 0$. The expression of $T_1(\xi)$ is given by

$$T_1(\xi) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}N \int_0^{\xi} r^{\bar{d}-1} \pi(N, r)\, \mathrm{d}r. \tag{21}$$

The scaling behaviour of $T_1(\xi)$ is also given by the approximation ($\xi \to \infty$): $\pi(N, r) \simeq P(N, r)$. Therefore,

$$T_1(\xi) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}N \int_0^{\xi} r^{\bar{d}-1} P(N, r)\, \mathrm{d}r$$

$$T_1(\xi) \sim \xi^{1/\nu_{\mathrm{RW}}} \qquad \text{at } \xi \to \infty. \tag{22}$$

The result (22) which generalises the known results for Euclidean spaces (Barber and Ninham 1970, Feller 1971) provides a useful method for the measurement of the exponent ν_{RW}. No numerical results for $T_1(\xi)$ are given here. It will be interesting to check (22) for various values of ξ, because it provides an indirect verification of the result given by (17).

To summarise, we have investigated in this section some statistical properties relative to RWs on the $d = 2$ Sierpinski gasket. All the numerical results obtained are in very good agreement with theoretical predictions. This preliminary 'exercise' is to be considered as a first step in the study of dynamical behaviour of more complicated fractals, such as the percolation clusters studied in § 3.

3. Application: random walks on 2D percolation clusters

In the following, we present the results of Monte Carlo calculations of RW statistics on percolation clusters in two dimensions at the critical point p_c. For convenience, we have used the bond percolation clusters, where $p_c = \frac{1}{2}$ is known exactly (Sykes and Essam 1963). The clusters were generated by a cluster-growth method (Leath 1976). A RW was generated on these clusters. The clusters were chosen to be much larger than the span of the walks so as to avoid end effects. The diffusion was restricted to clusters larger than the span of each walk. In order to take into account this restriction, the notion of 'open frontier' (see below) was used in our simulation.

As mentioned in the introduction, the infinite cluster (at a percolation threshold) is a fractal object, of fractal dimensionality (Stauffer 1981)

$$\bar{d} = d - \beta_{\mathrm{p}}/\nu_{\mathrm{p}}$$

and spectral dimensionality (Alexander and Orbach 1982)

$$\tilde{d} = 2(d\nu_p - \beta_p)/(t - \beta_p + 2\nu_p) \tag{23}$$

where d is the Euclidean dimension of the lattice, ν_p, β_p are the critical exponents of the percolation transition, and t is the conductivity exponent. As stated in I, $\bar{d}$ and $\tilde{d}$ are the only ingredients needed to characterise the RW statistics.

Averages over unrestricted RWs traced on a distribution of finite clusters imply a modification of the above results (Ben-Avraham and Havlin 1982, Gefen *et al* 1983). In order to check the conjecture $\tilde{d} = \frac{4}{3}$ (Alexander and Orbach 1982), we limit ourselves here to the restricted RW only.

3.1. Range of the random walk

The average value S_N of the RW range R_N after N steps is shown in figure 7. The statistics were taken over 35×10^3 walks, with different starting points, on bond percolation clusters restricted to be larger than the span of each walk. The power law, predicted in I, is reached after $N \geqslant 100$. The extracted value of the slope of this curve, given by the best fit, yields the value 0.65 ± 0.01 for the exponent of S_N against N.

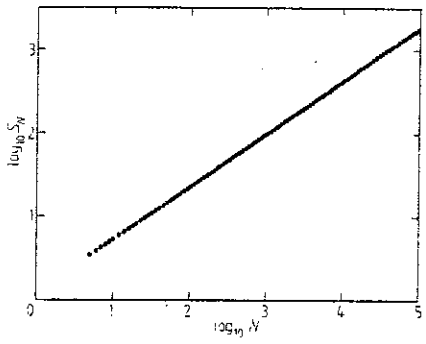


Figure 7. Plot of $\log_{10} S_N$ against $\log_{10} N$ for a set of 35×10^3 walks of N steps traced on bond percolation clusters restricted to be larger than the span of each walk.

This value is in fair agreement with the conjectured one: $\tilde{d}/2 = \frac{2}{3}$. Using the same data, the dispersion around the mean value S_N is shown in figure 8. $(\mathrm{Var}\, R_N)^{1/2}$ exhibits a power law behaviour at large N, as predicted (equation (4)). The deduced value of the exponent of $(\mathrm{Var}\, R_N)^{1/2}$ is in good agreement with that of S_N. In order to show the accuracy reached in our calculation, we have plotted the ratio

$$\rho(N) = (\mathrm{Var}\, R_N)^{1/2}/S_N$$

as a function of N, in figure 9. The fluctuation of this ratio over the large interval of N values is due mainly to the fluctuations in the percolation cluster shapes at threshold. Such a fluctuation was not present in the case of the gasket studied in § 2. Nevertheless, for large values of N, $\rho(N)$ seems to fluctuate around a fixed value: $\rho(N \gg 1) \simeq 0.1$, in good agreement with the conjecture of § 2.

In I, the concept of 'open frontier' was introduced in the context of the range theory of the RW. This quantity is defined as the product of the probability of access

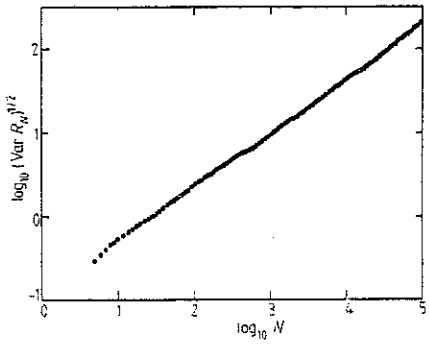


Figure 8. Same plot as in figure 7 for the variance $(\mathrm{Var}\,R_N)^{1/2}$ of the random walk range R_N.

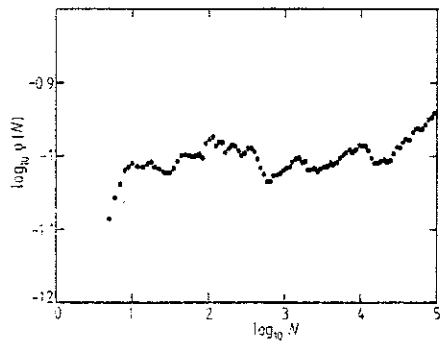


Figure 9. Variation of the ratio $\rho(N)=(\mathrm{Var}\,R_N)^{1/2}/S_N$ as a function of N.

to a fresh site $\mathrm{d}S_N/\mathrm{d}N$, by the number of accessible sites after N steps Σ_N. Given a RW on a fractal with $\tilde{d}<2$, we have $\Sigma_N \sim S_N \sim N^{\tilde{d}/2}$ (at $N \gg 1$) and then the open frontier F_N after N steps is given by

$$F_N \simeq S_N \mathrm{d}S_N/\mathrm{d}N \tag{24}$$

which must scale like

$$F_N \sim N^{\tilde{d}-1}. \tag{25}$$

In figure 10, we have shown the obtained results for F_N in the same interval of N values. As can be seen, the values of F_N are smaller when compared with N. The best fit of the data gives the slope 0.31 ± 0.02 in good agreement with the conjectured value $\tilde{d}-1=\frac{1}{3}$. The deviation due mainly to statistical fluctuation is of the same sign as that obtained in the determination of $\tilde{d}$ from S_N against N.

3.2. *Renewal theory*

As for the Sierpinski gasket, we have used renewal theory to obtain another estimation of the spectral dimensionality of percolation clusters $\tilde{d}$. In figure 11, the probability of return to the origin $P_0(N)$, after N steps, is plotted against N. Averages were taken

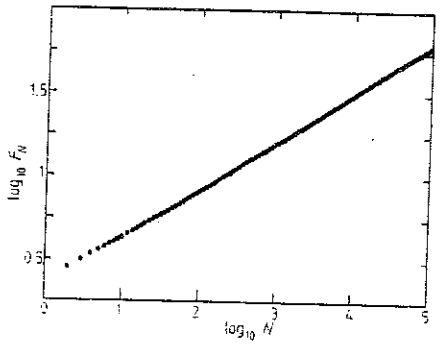


Figure 10. Plot of $\log_{10} F_N$ as a function of $\log_{10} N$ for the same set of walks as in figure 7 (F_N denotes the open frontier at step N).

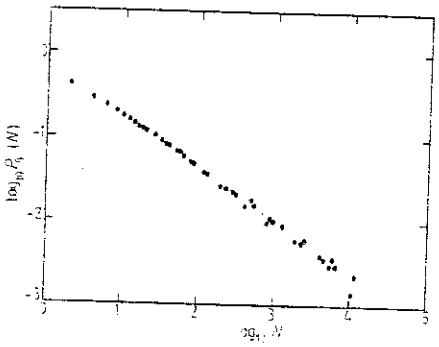


Figure 11. Behaviour of the probability of return to the origin at step N taken from 15×10^3 walks.

over 15×10^3 walks. Clearly $P_0(N)$ exhibits the predicted power law as a function of N. The best fit gives the value 0.65 ± 0.02 of the corresponding exponent. As for S_N, F_N and Var R_N, the calculated value of the associated exponent is smaller than the predicted value, implied by the conjecture $\tilde{d} = \frac{4}{3}$. The differences in all these cases have the same signs, but the relative accuracy reached in our calculations is not sufficient to prove the exactness of the conjecture $\tilde{d} = \frac{4}{3}$. Accuracy better than 1% in the values of this exponent is needed for this task.

4. Conclusion

In this paper, the second in a series, we have investigated some statistical properties of the RW on fractal structures. New analytical results were given for fractals in general: range theory, renewal theory and spatial distribution. Some of these results have been checked numerically on the Sierpinski gasket at $d = 2$. Using the range theory, or the renewal theory, we have proposed a new numerical method, in order to extract directly the spectral dimensionality $\tilde{d}$.

Our method provides a direct measurement of the spectral dimensionality in contrast with previous methods (Ben-Avraham and Havlin 1982) using the spatial extension

R_0 of the RW, which involves together the fractal and spectral dimensionalities. As an application, we have investigated the case of the bond percolation clusters at threshold p_c in two dimensions ($d = 2$). Up to the numerical accuracy of our calculation, the obtained numerical value of the spectral dimensionality $\tilde{d}$ is in relatively good agreement with the conjectured value (Alexander and Orbach 1982) $\tilde{d} = \frac{4}{3}$. The extension of this study (in progress) to other values $d = 3, 4, 5$ and 6 provides a direct check of this conjecture on these spaces. Using the method proposed in this paper, new precise determinations of the conductivity exponent t, given by (23) at $d = 3, 4, \ldots$, are expected from these calculations. At $d = 2$, the direct measurement of the exponent t (Derrida and Vannimenus 1982) is in good agreement with the value $\tilde{d} = \frac{4}{3}$.

Acknowledgments

We are grateful to Professors R Maynard and G Toulouse for most helpful discussions, valuable comments and stimulating conversations.

References

Alexander S 1983 *Phys. Rev.* B **27** 1541
Alexander S and Orbach R 1982 *J. Physique Lett.* **43** L625
Bachman G 1964 *Introduction to p-adic numbers and valuation theory* (New York: Academic)
Barber M N and Ninham B W 1970 *Random and restricted walks: theory and applications* (New York: Gordon and Breach)
Ben-Avraham D and Havlin S 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** L691
des Cloizeaux J 1982 *Phase transition: Cargèse 1980* ed M Levy, J C Le Guillou and J Zinn-Justin (New York: Plenum) pp 371–94
Derrida B and Vannimenus J 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** L557–64
Deutscher G 1981 *Lecture notes in physics* vol 49, p 26 (Berlin: Springer)
Feller W 1951 *Ann. Math. Stat.* **22** 427–32
—— 1971 *An introduction to probability theory and its applications* vol 2, 2nd edn (New York: Wiley)
Gefen Y, Aharony A and Alexander S 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 77
Gefen Y, Aharony A, Mandelbrot B B and Kirkpatrick S 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 1771–4
Gnedenko B V and Kolmogorov 1968 *Limit distribution of sums of independent random variables* revised edn (Reading, MA: Addison-Wesley)
Jain N C and Pruitt W E 1971 *J. Anal. Math.* **24** 369–93
—— 1972 in *Proc. sixth Berkeley Symp. on mathematical statistical and probability* vol III, ed L M Le Cam, J Neyman and E L Scott (University of California Press) pp 31–50
Kapitulnik A and Deutscher G 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 1444–7
Leath P L 1976 *Phys. Rev.* B **14** 5046
Levy P 1937 *Théorie de l'addition des variables aléatoires* (Paris: Gauthiers-Villars)
Mahler K 1973 *p-adic numbers and their functions* (Cambridge: CUP)
Mandelbrot B B 1977 *Fractals: form, chance and dimension* (San Francisco: Freeman)
Montroll E W and West B J 1979 in *Fluctuation phenomena* ed E W Montroll and J L Lebowitz (Amsterdam: North-Holland) ch 2
Prohorov Y V and Rozanov Y A 1969 *Probability theory* (Berlin: Springer) pp 186–90, 51–5
Rammal R and Toulouse G 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 1194
—— 1983 *J. Physique Lett.* **44** L13–22
Rammal R and Vannimenus J 1983 *Preprint*
Seshardi V and West B J 1982 *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **79** 4501–5
Stauffer D 1979 *Phys. Rep.* **54** 1
—— 1981 *Lecture notes in physics* vol 49 (Berlin: Springer) p 9
Sykes M F and Essam J W 1963 *Phys. Rev. Lett.* **10** 3
Voss R F, Laibowitz R B and Allessandrini E I 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 1441–4

J. Phys. C: Solid State Phys., 16 (1983) L825–L830. Printed in Great Britain

LETTER TO THE EDITOR

Scaling analysis for random walk properties on percolation clusters

J C Angles d'Auriac and R Rammal
Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, BP 166 X, 38042 Grenoble Cédex, France

Received 12 May 1983

Abstract. A scaling analysis for some random walk properties (range, renewal theory) on percolation clusters is outlined. Numerical simulations performed in the Bethe lattice case are in good agreement with the predictions of the scaling theory. The values $\bar{d} = \frac{4}{3}$ and $\tilde{d} = 4$ for the spectral and fractal dimensions are also confirmed.

Anomalous diffusion near the percolation threshold of a randomly diluted network has been of considerable interest in recent years. Recently there have been many contributions to the theory of the 'ant in the labyrinth' problem (Alexander and Orbach 1982, Angles d'Auriac *et al* 1983, Gefen *et al* 1983, Havlin *et al* 1983, Rammal and Toulouse 1983). The recent progress results from the basic observation that the infinite percolation cluster at threshold behaves essentially as a fractal (self-similar) structure (Mandelbrot 1982). Scaling analysis (Gefen *et al* 1983) for the average diffusion constant was outlined both above and below the threshold p_c and recent numerical results (Havlin *et al* 1983) are in good agreement with the prediction of the scaling theory. The main ingredient in this scaling theory is given by the anomalous behaviour of the mean square distance travelled by the random walker on a fractal structure (Alexander and Orbach 1982):

$$\langle \mathcal{R}^2(t) \rangle \simeq t^{2\nu_{\mathrm{RW}}} \qquad (\nu_{\mathrm{RW}} = \bar{d}/2\tilde{d}) \tag{1}$$

where $\bar{d}$ and $\tilde{d}$ are respectively the fractal and the spectral dimensionalities of the structure. For instance, for the percolating clusters, $\bar{d}$ and $\tilde{d}$ are given by

$$\bar{d} = d - \beta_p/\nu_p \qquad \tilde{d} = 2(d\nu_p - \beta_p)/(t - \beta_p - 2\nu_p). \tag{2}$$

In addition, it was observed (Alexander and Orbach 1982) that $\tilde{d}$, so determined, with known estimates of t, ν_p and β_p, appears to be numerically close to $\frac{4}{3}$ for all Euclidean dimensions $1 < d \leqslant 6$. However, the previously introduced exponent ν_{RW} appears as a combination of the fractal and spectral dimensions. In order to obtain 'pure' quantities, where the spectral dimension enters alone, one has to consider other random walk properties such as the probability $P_0(t)$ of presence at the origin after t steps:

$$P_0(t) \sim t^{-\tilde{d}/2} \qquad (t \gg 1) \tag{3a}$$

© 1983 The Institute of Physics

or the average number of distinct sites visisted during a t-steps random walk $S(t)$ (Rammal and Toulouse 1983):

$$S(t) \sim t^{\tilde{d}/2} \tag{3b}$$

(provided $\tilde{d} < 2$).

This law has been checked numerically (Angles d'Auriac *et al* 1983) on a Sierpinski gasket in dimension $d = 2$, for which $\tilde{d}$ is easily calculated: $\tilde{d} = 2 \ln 3/\ln 5$. The numerically determined value of the exponent in equations (3*a*, *b*) is 0.682 ± 0.005, to be compared with $\tilde{d}/2 = 0.68260$. In the same spirit, the corresponding behaviour on a percolating cluster in two dimensions has also been checked. The exponent has been determined as 0.65 ± 0.01 to be compared with $\frac{2}{3}$.

In this Letter the scaling theory is extended to quantities like $P_0(t)$ and $S(t)$ which are of interest in some physical problems (diffusion in presence of traps, spectral diffusion etc). The results obtained are also checked numerically for bond percolation in the Bethe lattice case.

Let us consider a simple random walk on a finite cluster of size n. The behaviour of $s_n(t)$, the average number of distinct visited sites, after t steps, is given by the following scaling form:

$$s_n(t) = s_\infty(t)\, \psi(n/s_\infty(t)) \tag{4a}$$

where $\psi(x \ll 1) \simeq x$ and $\psi(x \gg 1) \simeq 1$. This expression for $s_n(t)$ describes the crossover between the free regime (equation (3*b*)) and the saturation regime reached when $s_\infty(t) \sim t^{\tilde{d}/2}$ becomes comparable to the finite size n of the cluster. Similarly, the expression of $P^{(n)}(t)$ giving the probability of return to the original site after t steps can be written as

$$P^{(n)}(t) = n^{-1}\, \varphi(n/t^{\tilde{d}/2}) \tag{4b}$$

where $\varphi(x \gg 1) \simeq x$ and $\varphi(x \ll 1) \simeq 1$.

The above expressions for $s_n(t)$ and $P^{(n)}(t)$ are expected to hold in any fractal structure (provided $\tilde{d} < 2$ for equation (4*a*) and particularly for percolation clusters. Indeed, percolation clusters are well represented as fractal structures. at short distances, up to the percolation correlation length ξ_p. Averaged expressions are then obtained with the help of the Stauffer cluster distribution (Stauffer 1979)

$$\begin{aligned} p_n &= n^{1-\tau} \qquad (n < n^*) \\ &= 0 \qquad (n > n^*) \end{aligned} \tag{5}$$

where $n^* \simeq \xi_p^{\tilde{d}}$ and p_n denotes the probability for a given site to belong to a cluster of size n. At threshold p_c, one obtains simply from equations (4.5) the following results:

$$\langle S(t) \rangle \simeq t^{(3-\tau)\tilde{d}/2} \tag{6a}$$

and

$$\langle P(t) - P(\infty) \rangle \simeq t^{-(\tau-1)\tilde{d}/2} \tag{6b}$$

Below p_c, analogous calculations lead to similar expressions. For instance,

$$\langle S(t) \rangle = t^{(3-\tau)\tilde{d}/2} f(n^*/t^{\tilde{d}/2}) \tag{7}$$

where $f(x)$ denotes a universal function, with the following behaviour: $f(x \ll 1) \simeq x^{3-\tau}$ and $f(x \gg 1) \simeq 1$. A crossover in the behaviour of $\langle S(t) \rangle$ is therefore expected to

occur, for a given value of p, at time $t^* \sim \xi_p^{2\bar{d}/\bar{d}}$ where the mean square distance travelled becomes comparable to the correlation length ξ_p. The equation (7) shows that the average number of visited sites up to time t is described by a single scaling function in which the crossover between two power regimes (in time) near p_c and below it occurs at time t^*. This result is analogous to that predicted for the diffusion constant (Gefen *et al* 1983) and can be extended to $p > p_c$ in a similar fashion. Similar expressions for $P(t)$ at $p < p_c$ and $p > p_c$ can be derived following the same previous analysis.

In the following, we present some numerical simulations of random walks on bond percolation clusters, on a Bethe lattice of coordination number z. The results are studied on the basis of the scaling functions (equations (6), (7)). Both the scaling *ansatz* and the resulting scaling relations are obeyed quite well by the numerical data, thus supporting the physical assumptions about the scaling properties near the percolation threshold ($|p/p_c - 1| \ll 1$). For the sake of simplicity, the diffusion was performed by a standard Monte Carlo method, on a Bethe lattice of coordination number $z = 3$ or 4. Each walk starts from a site (the origin) which is assumed to belong to a cluster. The cluster, of arbitrary size, is constructed at the beginning of the walk, and all measured quantities are obtained by averaging over the cluster distribution thus generated. We have studied $\langle P(t) - P(\infty)\rangle$ and $\langle S(t)\rangle$ in the range $|1 - p/p_c| \leqslant 0.20$ for $z = 3$ and 4. We reached a maximum diffusion time of about 2000 steps. To increase the statistics, we have averaged over 10^6 walks for $\langle P(t) - P(\infty)\rangle$ and 10^5 walks for $\langle S(t)\rangle$.

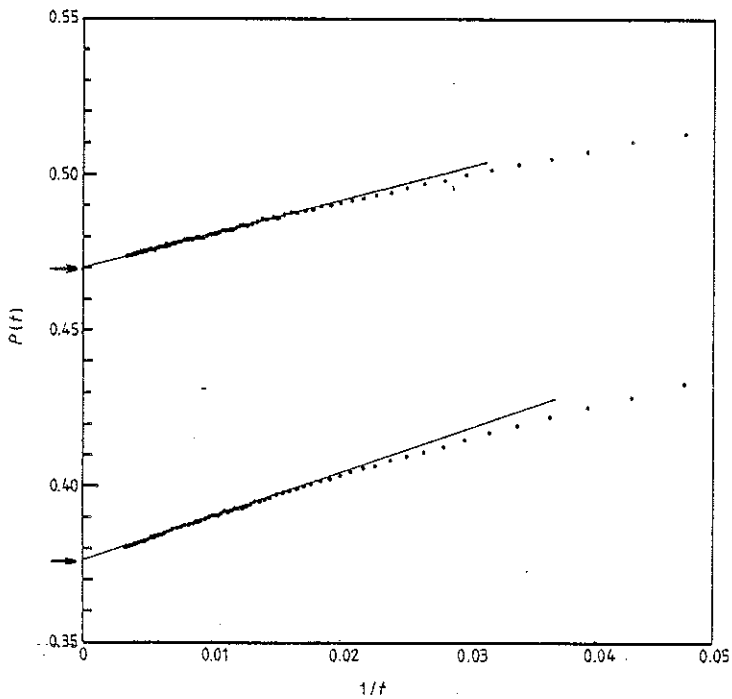


Figure 1. Monte Carlo results of diffusion on percolation clusters, at threshold $p_c = 1/(z-1)$ in a Bethe lattice with $z = 3$ and 4: the probability $P(t)$ of return to the origin at time t, as a function of t^{-1}. The asymptotic value $P(\infty)$ resulting from the configuration average is $\frac{3}{8}$ for $z = 3$ and $\frac{38}{81}$ for $z = 4$.

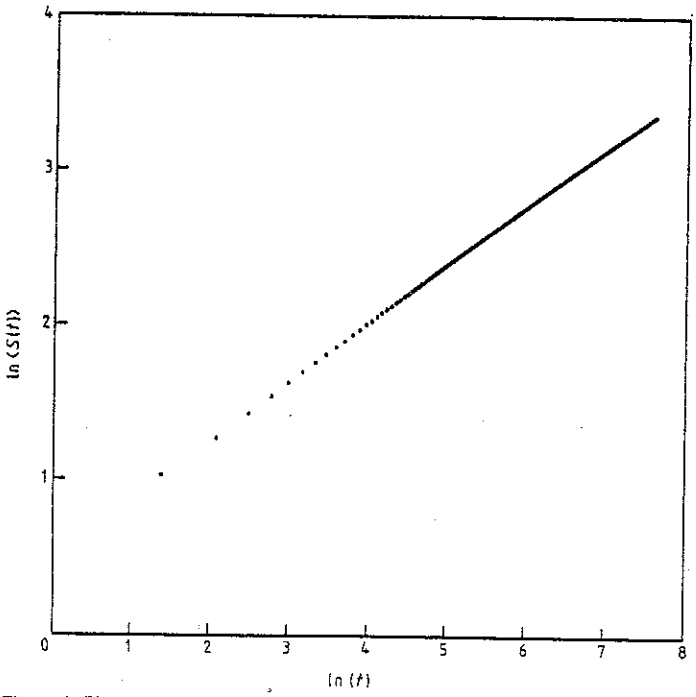


Figure 2. Plot of the average number of distinct visited sites $\langle S(t)\rangle$ during a t-step random walk for $z = 3$. $\langle S(t)\rangle$ exhibits the expected asymptotic behaviour $\langle S(t)\rangle \sim t^{1/3}$ for large t.

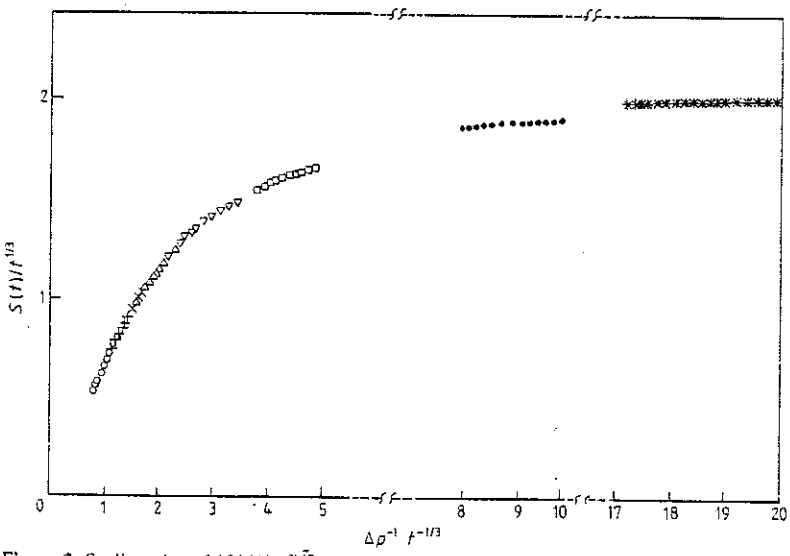


Figure 3. Scaling plot of $\langle S(t)\rangle^{(\tau-3)\bar{d}/2}$ as a function of the scaling varilable $x^{1/2}$, where $x = n^*/t^{\bar{d}/2}$. Different points are taken from Monte Carlo results for $10^3 \leq t \leq 2 \times 10^3$ and p in the range $|1 - p/p_c| \leq 0.20$, $p_c = 0.5$. Values of P are as follows: ○ 0.40; + 0.43; × 0.44; △ 0.45; ▽ 0.47; □ 0.48, ● 0.49; * 0.495.

Taking the value $\tau = \frac{5}{2}$ for the Bethe lattice, the slope of $P(t)$ as function of t in a log–log plot was used (at $p = p_c$) to extract the value of $\bar{d}$. We found: $\bar{d} = 1.33 \pm 0.01$ in good agreement with the prediction $\bar{d} = \frac{4}{3}$ of equation (2), when written as

$$\bar{d} = 2\delta_p\beta_p/(t - \beta_p - 2\nu_p) \tag{2}$$

where $\beta_p = 1$, $\nu_p = \frac{1}{2}$, $\delta_p = 2$ and $t = 3$ (Stauffer 1979).

In figure 1, $\langle P(t)\rangle$ is shown as a function of the variable $t^{-(\tau-1)\bar{d}/2} = t^{-1}$, for $z = 3$ and 4 and $20 \leqslant t \leqslant 300$. The expected asymptotic linear variation is well obeyed, as it should be.

A remarkable feature is that at $p > p_c$ the system has at least one infinite cluster with probability unity and the amplitude $P_0(t)$ on this cluster decays to zero for $t \to \infty$ according to equation (3*a*). However, $\langle P(t)\rangle$ is finite for $p \geqslant p_c$ (as for $p < p_c$) in the limit $t \to \infty$ because of the finite clusters, which are also reflected of course in the configuration average. Taking into account clusters with zero bond, the value of $\langle P(\infty)\rangle$ at $p \leqslant p_c$ can be written as

$$\langle P(\infty)\rangle = (2 - pz) - (1 - p)^z. \tag{8}$$

The last term in equation (8) comes from isolated sites (or zero bond clusters) and similar calculations permit us to obtain $\langle P(\infty)\rangle$ at $p > p_c$, which remains finite at $p < 1$.

Similar results for $\langle S(t)\rangle$ have been used in order to extract the value of $\bar{d}$ (equation (6*a*)). The value obtained is $\bar{d}/4 = 0.335 \pm 0.005$ to be compared with $\frac{1}{3}$. The corresponding data are shown in figure 2, where $\langle S(t)\rangle$ is plotted directly as a function of $t^{1/3}$. It is interesting to note the influence of the averaging process over the cluster distribution on the asymptotic behaviour of the number of distinct visited sites. For restricted walks on the percolating cluster, equation (3*b*) predicts $S(t) \sim t^{2/3}$, in contrast with $\langle S(t)\rangle \sim t^{1/3}$ resulting from the configuration average over the cluster distribution at threshold. However, for a direct determination of $\bar{d}$, equation (3*b*) is more appropriate than equation (6*a*) or equation (6*b*), because the exponent τ is not required in such a determination.

Finally, in order to check the scaling law (equation (7)), we have studied $\langle S(t)\rangle$ for about 10^5 diffusions in the range $p_c/p - 1 \leqslant 0.20$. For each value of p, 10^4 percolations clusters have been used and 10 diffusions of length $t \leqslant 2000$ steps on each cluster are performed. The results for $z = 3$ and different values of p are shown in figure 3 in the scaling form of equation (7). The symbols mark different concentrations below p_c. As a function of the reduced variable $x = n^*/t^{\bar{d}/2} = (\Delta p)^{-2}t^{-2/3}$, the scaling function $f(x) = \langle S(t)\rangle t^{-1/3}$ exhibits clearly the expected behaviour: linear in $x^{1/2}$ at small x and a saturation for large x. The crossover behaviour between these two regimes as well as the scaling behaviour are therefore confirmed. This universal behaviour confirms *a posteriori* the value $\bar{d} = 4$ in the case studied (see equation (2)).

In conclusion, we have shown in this Letter that various properties of random walks on percolation clusters are well described by the scaling theory. The above approach can be extended to study other properties relative to diffusion on percolation clusters both above and below the threshold p_c. Numerical simulations for quantities like $P(t)$ or $\langle S(t)\rangle$ provide a direct determination of the spectral dimension $\bar{d}$, and therefore permit a reliable check of conjectures relative to its precise value.

References

Alexander S and Orbach R 1982 *J. Physique Lett.* **43** L625
Angles d'Auriac J C, Benoit A and Rammal R 1983 *Preprint*
Gefen Y, Aharony A and Alexander S 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 77
Havlin S, Ben-Avraham D and Sompolinsky H 1983 *Phys. Rev.* A **27** 1730
Mandelbrot B B 1982 *The Fractal Geometry of Nature* (San Francisco: Freeman)
Rammal R and Toulouse G 1983 *J. Physique Lett.* **44** L13
Stauffer D 1979 *Phys. Rep.* **54** 3

PHYSICAL REVIEW B

65

VOLUME 30, NUMBER 7

RAPID COMMUNICATIONS

1 OCTOBER 1984

Universality of the spectral dimension of percolation clusters

R. Rammal,* J. C. Angles d'Auriac, and A. Benoit
Centre de Recherches sur les Très Basses Témperatures, Centre National de la Recherche Scientifique, Boîte Postale 166X, F-38042, Grenoble Cedex, France

(Received 13 February 1984; revised manuscript received 11 May 1984)

We have calculated, via an extensive Monte Carlo simulation, the spectral dimension $\tilde{d}$ of infinite percolation clusters, at different Euclidean dimensions $2 \leq d \leq 6$ and $d=\infty$. $\tilde{d}$ is extracted from the asymptotic behavior of the average number S_N of distinct visited sites during an N-step random walk. Correction to scaling is shown to be very important. For all $d \geq 2$, S_N takes the following form: $S_N = aN^s(1+bN^{-\omega}/a)$, where $s=\tilde{d}/2$, $0.661 \leq s \leq 0.666$, and $\omega = \frac{1}{6}$. We compare our results with existing theories or conjectures relative to the value of $\tilde{d}$.

It is now recognized that percolating clusters and their backbones are fractal objects at short length scales up to the connectivity length $\xi \sim (p-p_c)^{-\nu}$. For instance, the fractal dimension D of a percolating cluster at threshold $(p=p_c)$ can be expressed in terms of the Euclidean dimension d and the critical exponents of the percolation transition: $D=d-\beta/\nu$ for $d \leq 6$, and $D=4$ for $d \geq 6$. The fractal dimension D emerges, therefore, as a first operative measure of the fractal geometry. Recently, it has been shown[1-3] that linear physical problems on fractals (classical diffusion, quantum localization, etc.) are governed by another index: the spectral dimension $\tilde{d}$. This new index is naturally associated with the power law of the low-frequency density of states (e.g., for elastic vibration) $\rho(\omega) \sim \omega^{\tilde{d}-1}$. For Euclidean lattices, the three dimensions d, D, and $\tilde{d}$ are equal. For the percolation clusters, the expression of $\tilde{d}$ is given by

$$\tilde{d} = 2(d\nu-\beta)/(t-\beta+2\nu) \tag{1}$$

for $d \leq 6$, and $\tilde{d} = \frac{4}{3}$ for $d \geq 6$. Here t denotes the exponent of the classical conductivity near p_c. This result, as well as its implication for various thermodynamical properties of dilute systems (e.g., ferromagnet), was first given by Shender[4] some years ago. Equation (1) was discussed later in more generality by different authors.[1,2] In particular, it was found empirically[1] that $\tilde{d}/2$, as determined by Eq. (1), with known estimates of t, ν, and β,[5] appeared to be numerically close to $\frac{2}{3}$ for all dimensions $2 \leq d \leq 6$. The meaning of this "universality" has been discussed by different authors,[2] but is not really understood.

Is the $\frac{2}{3}$ law exact or merely an accidentally very good prediction, like the Flory value for the polymer exponents? At stake is the existence of a relation (the existence of which has long been questioned) between dynamic (t) and static (β, ν) percolation exponents.

$$t/\nu = 3(d-\tfrac{4}{3}-\beta/3\nu)/2 \ . \tag{2}$$

The above prediction is clearly in contradiction with various previous proposals for the expression of the exponent t. For instance,[6] $t/\nu = d-1$ and (Ref. 5).

$$t = (d-2)\nu + \zeta, \quad \zeta = 1 \ . \tag{3}$$

Use has been previously made of Monte Carlo methods in order to check the $\frac{2}{3}$ law at two and three dimensions. Different methods have been used: (i) calculation of the ratio t/ν for random-resistor networks,[7] and (ii) diffusion on percolating clusters.[8] However, almost all these methods are limited to lower dimensions and require the knowledge of various exponents (β, ν) with a very high accuracy in order to check the $\frac{2}{3}$ law. Fortunately, a direct measurement of $\tilde{d}$ is provided by the random-walk (RW) statistics on percolating clusters. Recently,[9] various statistical properties of RW's on fractals have been studied in great detail. In particular, it was shown that at threshold $(p=p_c)$, the average number S_N of distinct sites visited during an N-step RW behaves as $(N \gg 1)$:

$$S_N \simeq N^{\tilde{d}/2} \ . \tag{4}$$

This result shows that a practical way to measure $\tilde{d}$ is to look at the asymptotic behavior of S_N. Such a method for the measurement of the spectral dimension of fractals was illustrated previously[9,10] at $d=2$ and $d=\infty$. In this Rapid Communication, we present new numerical results for $\tilde{d}$ for all dimensions $2 \leq d \leq 6$, and on the Bethe lattice $(d=\infty)$, which were obtained with this method of Eq. (4).

In Fig. 1, we show S_N vs N for different Euclidean dimensions d, including the Bethe lattice case of coordination number $z=3$. Let us briefly describe the details of the numerical simulations. The clusters were generated using a standard cluster-growth method and the most accurate values of site percolation threshold p_c on cubic lattices. A set of RW's was then generated on each cluster. The cluster sizes M were chosen to be much larger than S_N, $S_N/M \ll 1$, so as to avoid finite-size effects.[10] All the calculations were performed (in assembly language) on Motorola 68000 and 6502 microprocessors. Each set of points (Figs. 1 and 2) corresponds to an average over 10^4–2×10^4 runs of N-step walks (up to $N \simeq 4\times10^4$–4×10^5) of randomly chosen origins on the cluster. Note that jumps were restricted between the cluster sites only. Attempts to jump toward external sites[8] are expected to dilate [by a factor $\sim(1-p_c)/p_c$] the time scale. At all dimensions, the size of the simulated clusters was much greater than 10^4–10^5. More extensive calculations were also performed at $d=2$ and 3, up to $N \sim 10^6$ on clusters containing much more than 10^6 sites, and inscribed inside boxes of size 1280×1280 at $d=2$, and $300\times300\times300$ at $d=3$.

As can be seen in Fig. 1, S_N is very nearly the same function of N for all dimensions. Fitting to the form $S_N \sim N^s$, without including corrections to scaling, leads to the follow-

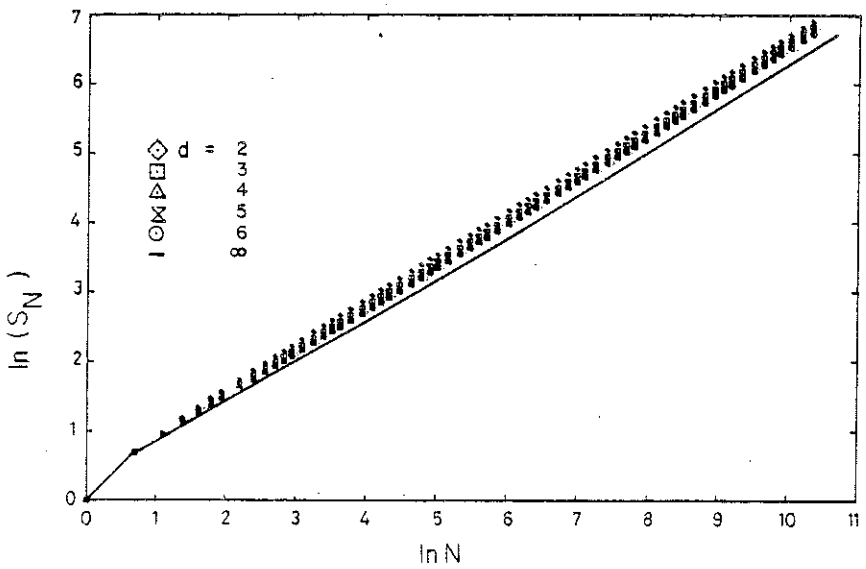


FIG. 1. Double logarithmic plot of the average number S_N of distinct visited sites during an N-step random walk on infinite percolation custers at threshold p_c. Various symbols refer to different Euclidean dimensions (d). The line corresponds to the Bethe lattice of coordination number $z=3$ (i.e., $p_c=0.5$).

ing estimation: $0.65 \leq s \leq 0.66$, for all d. At $d=2$, this result agrees with our previous determination[9] $s=0.65 \pm 0.01$ obtained for bond percolation on square lattice. However, a systematic curvature is clearly observed at all d, before reaching the asymptotic behavior. In Fig. 2, the ratio $S_N/N^{2/3}$ is shown as a function of N. This plot shows that the observed deviations follow the same pattern for all d. In particular, for $d=6$ and $d=\infty$, where $s=\frac{2}{3}$ holds exactly, the deviations to the expected horizontal line are more important. At lower dimensions ($d=2,3$), the long-time behavior up to $N \sim 10^6$ exhibits the same form as in Fig. 2. These deviations cannot be attributed to finite-size effects,[10] nor to the inaccuracy of the values of p_c.[11] We conclude, therefore, that correction to the asymptotic law [Eq. (4)] must be taken into account in order to analyze the data. The appropriate expression for S_N takes the following form:

$$S_N = aN^s(1 + bN^{-\omega}/a + \cdots) \ , \tag{5}$$

where $s=\tilde{d}/2$, and ω denotes the leading correction to scaling exponent. We were able to discard other correction terms such as, for example, logarithmic ones.

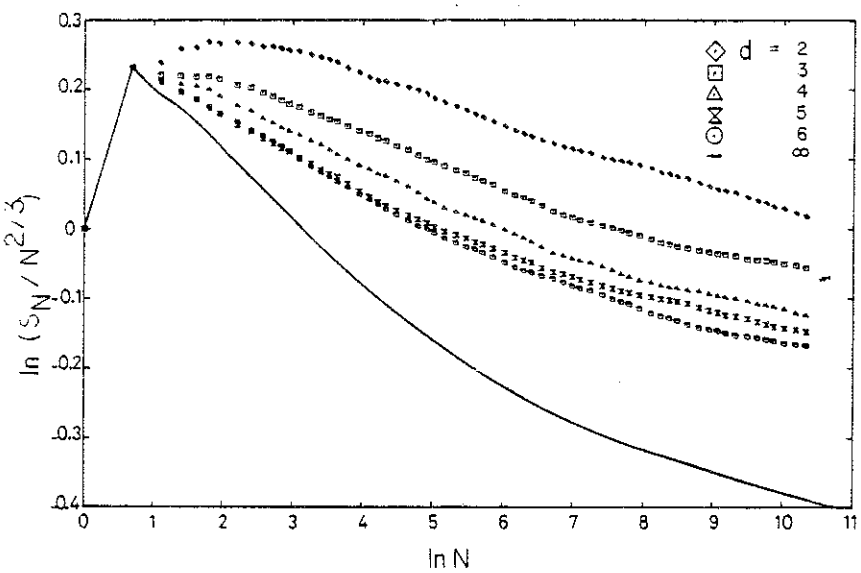


FIG. 2. Log-log plot of $S_N/N^{2/3}$ against N with the same data as in Fig. 1. This plot shows the deviation from the $\frac{2}{3}$ law which is not visible on Fig. 1.

In order to find the exponent ω, trial values for ω were used first at $d=6$ and $d=\infty$. To obtain the most precise estimate of s, a proper least-squares fit with parameters a, b, s, and ω was performed for each d. From the analysis of our data, we deduced the values of these parameters. The numerical results can be summarized as follows. At $d \leq 6$, the difference $s(d=6)-s(d)$ appears to be of order 5×10^{-3}, which is also the accuracy of our fits (χ^2 test). More precisely, we obtained $0.661 \leq s \leq 0.666$ for all d. On the other hand, for $d=6$ and $d=\infty$, one obtains $\omega \simeq \frac{1}{6}$. The values of the exponent ω are very close to $\frac{1}{6}$ in all dimensions. Including error bars, one obtains the following estimation: $\frac{1}{6} \leq \omega < \frac{1}{4}$. Finally, for the amplitude factors a and b, we find that $0.56 \leq b \leq 0.60$ at $d \leq 6$, and $b \simeq 0.74$ at $d=\infty$, whereas a decreases monotonically from 0.93 at $d=2$ to 0.55 at $d=\infty$. Using Eq. (1) at $d=2$, where $\nu=\frac{4}{3}$ and $\beta=\frac{5}{36}$, we get $t/\nu=0.972$.

These numerical results naturally call for some comments. An argument in favor of the $\frac{2}{3}$ law at $d \geq 2$ has already appeared in the literature[2,9,12] and can be summarized as follows. Define, by F_N, the number of fresh sites adjacent to the visited sites, up to step N. It is given by $F_N = S_N dS_N/dN$ and behaves asymptotically as zero for $p < p_c$, and S_N for $p > p_c$. If one assumes that at threshold $p=p_c$, the number of fresh sites so described is marginally equal to the Gaussian fluctuation in the number of accessible sites, due to the random percolation process, then $F_N \sim S_N^{1/2}$ and the $\frac{2}{3}$ law follows. At $d \geq 6$, this argument reproduces the exact result. At $d=1$ ($p_c=1$), $F_N=2$ and the known result $S_N \sim N^{1/2}$ is also reproduced. Our numerical results show, however, that s is definitely below $\frac{2}{3}$, although the difference is very small. This implies that the above argument is only an approximate one and therefore breaks down at $d<6$. On the other hand, the correction term $N^{s-\omega} \sim N^{1/2}$ must be contrasted with the analytical[13] correction, $N^{\bar{d}/2-1}$ to S_N, occurring on a regular fractal structure (e.g., Sierpinski gaskets). This leads to the conclusion that a singular correction to scaling, specific to the percolation problem, occurs in the expression of S_N on percolating clusters. Our study provides the first estimation for the value of the corresponding exponent.

Our second comment is relative to the ϵ-expansion results. Very recently,[14] a reanalysis of the renormalization-group calculation to first order in $\epsilon=6-d$ has been performed. The main result, $\zeta=1+\epsilon/42$ [see Eq. (3)], leads to the following expression for $\bar{d}$: $\bar{d}=4/(3+\epsilon/42)$, instead of $\bar{d}=\frac{4}{3}+k\epsilon^2$, where $k=761/833\,349$, deduced from previous[5] ϵ-expansion calculations. This result (if correct) shows that the $\frac{2}{3}$ law breaks down at order ϵ instead of ϵ^2, contrary to a previous belief. Furthermore, $\bar{d}$ appears as a weak function of d such that $\bar{d}/2=0.6614$ for $d=5$, and 0.6461 for $d=2$. Agreement with the numerical results is better for $\epsilon=1$ than for $\epsilon=4$. Further examination of the ϵ expansion will be welcome in order to clarify the situation at lower dimensions.

In summary, we have shown that the $\frac{2}{3}$ law is a very good prediction which holds up to a very high numerical accuracy. However, our results show that the spectral dimension is slightly below $\frac{4}{3}$ at all dimensions ($d<6$). The recent reanalysis of the ϵ expansion implies that $\frac{2}{3}$ is actually a very good approximation, but not an exact result for all d. Flory-like arguments in polymer physics give us another example of nonexact, but numerically very accurate predictions for exponents.

One of us (R.R.) would like to thank T. C. Lubensky for discussions and a critical reading of this manuscript. This work was supported in part by the National Science Foundation under Grant No. DMR 82-19216.

*Present address: Department of Physics, University of Pennsylvania, Philadelphia, PA 19104-3859.

[1]S. Alexander and R. Orbach, J. Phys. (Paris) Lett. 43, L623 (1982).
[2]R. Rammal and G. Toulouse, J. Phys. (Paris) Lett. 44, L13 (1983).
[3]Y. Gefen, A. Aharony, and S. Alexander, Phys. Rev. Lett. 50, 77 (1983).
[4]E. F. Shender, J. Phys. C 9, L309 (1976).
[5]For a review of exponents, see A. B. Harris, Phys. Rev. B 28, 2614 (1983).
[6]M. E. Levinshtein, M. S. Shur, and E. L. Efros, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 2203 (1975) [Sov. Phys. JETP 42, 1120 (1975)].
[7]B. Derrida, D. Stauffer, H. J. Herrmann, and J. Vannimenus, J. Phys. (Paris) Lett. 44, L701 (1983), and references therein.
[8]R. B. Pandey and D. Stauffer, Phys. Rev. Lett. 51, 527 (1983).
[9]J. C. Angles d'Auriac, A. Benoit, and R. Rammal, J. Phys. A 16, 4039 (1983).
[10]J. C. Angles d'Auriac and R. Rammal, J. Phys. C 16, L825 (1983); L. Puech and R. Rammal, *ibid.* 16, L1197 (1983).
[11]Calculations at $p=p_c+\Delta_p$, with $\Delta p/p_c < 10^{-2}$ gives identical results. The fractal-to-Euclidean crossover is out of the time range explored here.
[12]F. Leyvraz and H. E. Stanley, Phys. Rev. Lett. 51, 2048 (1983).
[13]R. Rammal (unpublished).
[14]A. B. Harris, S. Kim, and T. C. Lubensky (unpublished).

B. Effets de mémoire

Les deux articles joints (Ram(f)) et (Ang(d)) étudient un processus de diffusion avec mémoire : le "True self Avoiding Walk (TSAW)". Le TSAW est un type de diffusion qui interpole continument, via un paramètre réel g, entre la diffusion normale $g = 0$ et le modèle des polymères ($g = \infty$) : "Self Avoiding Walk (SAW). Le premier de ces articles propose une analyse en termes de loi d'échelle pour le TSAW à une dimension, qui est confirmée par les simulations numériques. Le deuxième reprend la même étude sur le tamis de Sierpinski. La valeur trouvée pour ν' et s', exposants associés à $R(t)$ et $S(t)$ sont en accord avec un argument simple du type Flory.

J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984) L9–L14. Printed in Great Britain

LETTER TO THE EDITOR

Statistics of the true self-avoiding walk in one dimension

R Rammal, J C Angles d'Auriac and A Benott

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, BP 166 X, 38042 Grenoble Cedex, France

Received 29 September 1983

Abstract. Numerical results of a Monte Carlo study for the true self-avoiding walk in one dimension are presented. For any positive value of the strength parameter ($0<g<\infty$), the root-mean-square displacement R_N and the range S_N of the walk are characterised by two universal exponents $\nu=\frac{2}{3}\pm0.003$ and $s=\frac{2}{3}\pm0.01$ respectively. For negative g (self-attracting walk) both R_N and S_N exhibit a saturation effect: $\lim_{N\to\infty} R_N = R_\infty(g)$ and $\lim_{N\to\infty} S_N = S_\infty(g)$ with $R_\infty(g)\sim(-g)^{-1}$ and $S_\infty(g)\sim(-g)^{-1}$ at $g\lesssim 0$. A simple scaling analysis in N and g is proposed and found to be consistent with the Monte Carlo results.

Recently Amit *et al* (1983) have introduced a novel class of non-trivial correlated random walks on a lattice: the true self-avoiding walks (TSAW). They have introduced a self-avoidance parameter g and shown that the upper critical dimensionality for this problem is two ($d_c=2$), whereas it is four for the polymer problem (SAW) (see de Gennes 1979). Logarithmic corrections at $d=2$ have been studied both numerically (Amit *et al* 1983) and by $\varepsilon=2-d$ expansions (Obukhov and Peliti 1983, Peliti 1983). Finally, a self-consistent argument (Pietronero 1983) has been formulated to compute d_c and the exponent ν of a TSAW. The result reproduces correctly $d_c=2$ and suggests a non-trivial value for ν: $\nu=2/(2+d)$ at $d<d_c$. Of particular interest is the prediction of a non-diffusive behaviour, $\nu=\frac{2}{3}$ at $d=1$ for any finite value of the parameter g. The purpose of this letter is to present a brief report of a Monte Carlo study for the TSAW in one dimension, which permits us in particular to check this prediction. Two statistical properties are investigated for positive as well as for negative values of g: the root-mean-square (RMS) displacement R_N and the average number of S_N of distinct visited sites during N-step walks range. Illustrations are limited here to R_N only. More detailed results, in particular for S_N, will be reported elsewhere (Rammal *et al* 1983).

The TSAW problem in one dimension can be formulated as follows: a walker may move at each step to one of the two nearest neighbours of its current position. The (normalised) probability for moving from site i to $i\pm1$ is given by

$$W_i^{\mp}=\{1+\exp[\pm g(n_{i+1}-n_{i-1})]\}^{-1} \tag{1}$$

where n_j denotes the total number of previous visits of site j. Three trivial limits of the TSAW in one dimension are respectively identified: $g=0$, ∞ and $-\infty$. In the first case ($g=0$) we recover the standard random walk problem (RW), where $\nu=\frac{1}{2}$. The second case ($g=\infty$) corresponds to the SAW problem in one dimension, with $\nu=1$. In the last case ($g=-\infty$), the walker oscillates indefinitely between the first two visited sites. For other values of g we have a non-trivial stochastic process with infinitely

long memory. For $g > 0$ (resp $g < 0$) the walker is discouraged (resp encouraged) from stepping toward previously visited regions. The particular dependence (equation (1)) of $W_i^{\pm}$ on $\{n_i\}$ is at the origin of non-trivial statistical properties of the TSAW.

In figure 1 are shown the Monte Carlo results for R_N at different values of the repulsion parameter g. R_N denotes here the RMS displacement at step N: $R_N^2 = \langle x_N^2 \rangle$. All calculations were performed (in assembly language) on processors M 6502 and M 68000. Each set of points corresponds to an average over $10^4 - 2\times10^4$ runs of N-step walks, up to $N = 2^{18}$. As can be seen, R_N crosses over from a RW behaviour at small g (resp SAW at $g \gg 1$) for small N to a TSAW behaviour for larger N. The asymptotic slope converges towards a well defined value ν, independent of g and very close to $\frac{2}{3}$. From the best fit of data and using a plot enhancing eventual deviations from this value, we have obtained the following estimation for the exponent ν: $\frac{2}{3} \pm 0.003$. This remarkable result, which differs from $\frac{2}{3}$ only by a very small amount, provides strong support for the corresponding value predicted by the self-consistent argument. A similar behaviour was obtained for the range S_N of the TSAW. A power law $S_N \sim N^s$ is reached asymptotically ($N \gg 1$) in the same range of g values. The crossover observed for R_N is also observed for S_N. The estimated value of the exponent s is $s = \frac{2}{3} \pm 0.01$, which supports an intuitive argument (see below) leading to the prediction $s = \nu$.

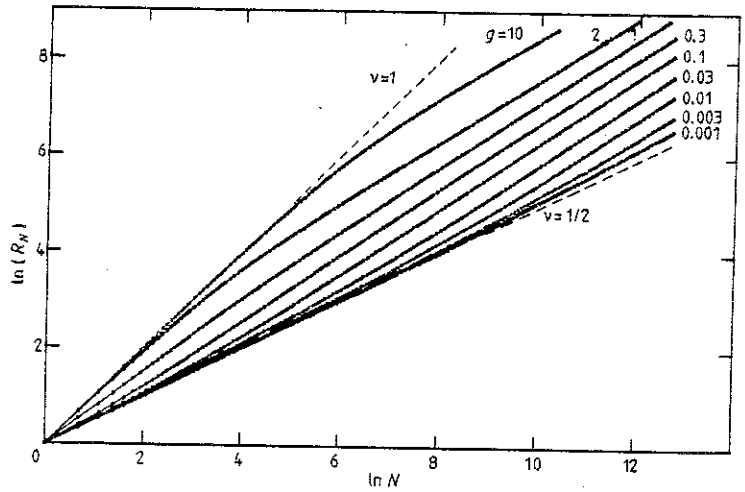


Figure 1. RMS displacement R_N of the TSAW, for different values of the repulsion parameter: $10^{-3} \leq g \leq 10$. For each value of g, an average over $10^4 - 2\times10^4$ runs of up to $N = 2^{18}$ steps was performed. Broken lines correspond to $g = \infty$ (i.e. $\nu = 1$) and $g = 0$ ($\nu = \frac{1}{2}$) respectively. Convergence towards a well defined exponent $\nu \sim \frac{2}{3}$ is clearly shown.

Motivated by the symmetry property $W_i^{\pm}(g) = W_i^{\mp}(-g)$, we have extended the above study to negative values of g. In the extreme limit $g = -\infty$ the TSAW reduces trivially to a simple oscillation between two sites. Such a self-trapping effect was shown to occur also for all other negative values of g. This feature, leading to a saturation of R_N and S_N as functions of N, has been checked by using enumeration methods as well as Monte Carlo calculation. By the former method, we have exactly calculated properties up to a given number of steps ($N \leq 20$) determined by limitations of

computer time, for arbitrary values of g. The results behave sufficiently smoothly with N and g that the definition of $R_\infty(g) = \lim_{N\to\infty} R_N(g)$ and $S_\infty(g) = \lim_{N\to\infty} S_N(g)$ is generally possible. To illustrate the results, we have shown, in figure 2, typical variations of R_N as a function of N for different values of negative g, in the vicinity of $g = 0$. As expected $R_\infty(g)$ increases monotonically when g is increased from $g = -\infty$ to $g = 0$. No special behaviour is associated with $g = -\infty$, in contrast with the case $g = \infty$ corresponding to the SAW. Both $R_\infty(g)$ and $S_\infty(g)$ diverge at $g = 0$, following an appropriate power law: $R_\infty(g) \approx (-g)^{-\nu'}$ and $S_\infty(g) \approx (-g)^{-s'}$. The best fit of data, close to $g = 0$, leads to the following estimation for exponents: $\nu' = 0.98 + 0.02$ and $s' = 0.99 + 0.02$ respectively. These values are to be compared with the predictions of the scaling analysis: $\nu' = s' = 1$ (see below). It should be noted that errors in ν' and s' estimations reflect the range of plateau levels and extrapolation procedure.

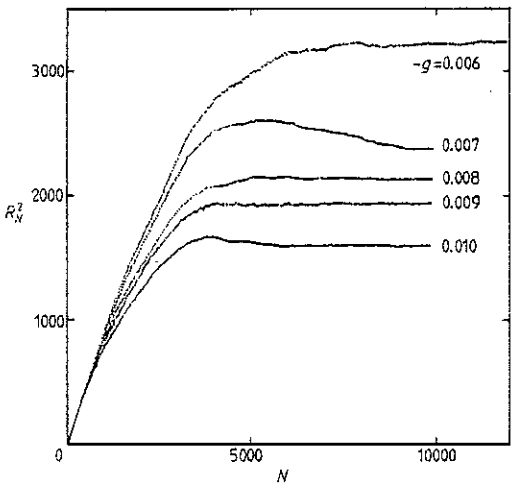


Figure 2. Variation of R_N against N, for different negative values of the strength parameter g in the vicinity of $g = 0$. An average over 4×10^4 runs was performed for each value of g.

The asymptotic properties of the TSAW are therefore very sensitive to the relative sign of the parameter g. In contrast with more simple choices for $W_i^\pm$, the above one (equation (1)) leads to a remarkable phenomenon for $g > 0$ as for $g < 0$. The 'self-attracting' RW has received little study in the past. It is not clear for us to what extent the result obtained here is universal. Other behaviours, corresponding to other choices for $W_i^\pm$, are also possible and cannot be excluded. Our results show the richness of the self-attracting RW and call for further work following similar lines of investigation.

In what follows we will show that the main asymptotical properties of the TSAW can be analysed with the help of a simple scaling argument. From the work of Amit *et al* (1983), it is easy to show that, in a perturbation calculation around $g = 0$, the expansion parameter is $gN^{1-d/2}$ rather than g. For $d = 1$, this leads to a 'virial expansion' in the reduced parameter $z = gN^{1/2}$. The result for R_N can be stated as follows:

$$R_N^2 = N\phi(gN^{1/2}) \tag{2}$$

where $\phi(z) = 1 + a_1 z + a_2 z^2 + \ldots$, and $a_1, a_2 \ldots$ denote numerical factors. The validity

of equation (2) was proved by Amit *et al* (1983) up to second order in z. We assume here its validity at all orders in z.

For $g > 0$, equation (2) shows that a RW-to-TSAW crossover takes place at $N = N^* \sim g^{-2}$. Assume the following behaviour of R_N in the TSAW regime,

$$R_N = a(g)N^{\nu}, \tag{3}$$

where $a(g)$ is a prefactor which depends on the repulsion parameter g. Matching equation (3) with the RW regime at $N \sim N^*$, one obtains finally

$$a(g) \sim g^{2\nu-1}. \tag{4}$$

From (3), (4) we deduce the scaling law for R_N:

$$\text{TSAW: } gR_N = (gN^{1/2})^{2\nu}, \qquad \text{RW: } gR_N = (gN^{1/2}). \tag{5}$$

Stated otherwise, $\phi(z) \equiv R_N^2/N$ is a universal function of the scaling variable $z \equiv gN^{1/2}$, with the following limits:

$$\begin{aligned} \phi(z) &= 1 + a_1 z + a_2 z + \ldots && \text{at } z \ll 1, \\ &= z^{2(2\nu-1)} && \text{at } z \gg 1. \end{aligned} \tag{6}$$

Perturbation calculation at large g involves the reduced variable Ne^{-g}. The SAW-to-TSAW crossover can be analysed following the same line of argument. This point will not be discussed further here. In figure 3, we have shown the universal plot for R_N, which exhibits clearly the RW-to-TSAW crossover, according to (5).

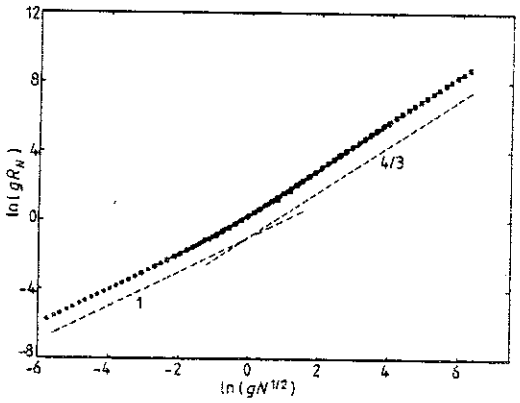


Figure 3. Universal plot of R_N against N, with scaling variables: gR_N against $gN^{1/2}$, showing the RW-to-TSAW crossover. Broken lines, of slopes 1 and $\frac{4}{3}$ respectively, are shown for comparison. ⊡, $g = 1$; ▲, $g = 3$; ⧖, $g = 0.1$; ○, $g = 0.03$; ◆, $g = 0.01, 0.003, 0.001$.

For $g < 0$, the scaling variable $z = gN^{1/2}$ implies, in a saturation regime, the result

$$R_\infty^2(g) \simeq (-g)^{-2\nu'} \tag{7}$$

with $\nu' = 1$. The corresponding plot is shown in figure 4.

The same scaling analysis leads to the prediction $s' = 1$ for the exponent of $S_\infty(g)$, and similar expressions at $g > 0$, with $s = \nu$. In one dimension S_N and R_N have the

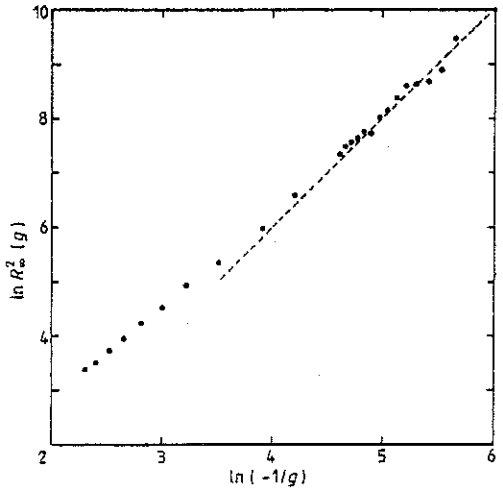


Figure 4. Power law behaviour of the limiting value $R_\infty^2(g) = \lim_{N\to\infty} R_N^2(g)$ as function of g (negative) close to $g=0$. The broken line has the slope 2, predicted by the scaling analysis.

same exponents. The meaning of this is evident from the consideration that the RMS excursion of the walker is proportional to N^ν, and in *one dimension*, while sites inside this distance will almost always have been visited, sites outside it will not. This argument is known to be exact for $g=0$. Our results support its validity for all g.

Using the numerical results, we have checked that the expression of $\phi(z)$ in powers of z gives the correct slope of R_N^2/N at $z=0$; $a_1 = 2\pi^{1/2}/3 = 1.1816\ldots$. The singular behaviour at $g<0$ leads to the following conclusion. The expansion of R_N^2/N in powers of z has a radius of convergence near $|z| \sim N^{-1/2}$, gives the correct slope a_1 at $z=0$, but such a function cannot be generally used for finite z. The perturbation series for R_N^2/N is not convergent except at $z=0$. It is doubtful that the first few terms of this series can provide any insight into the asymptotic behaviour of R_N at finite z. This suggests strongly that the perturbational approach is fruitless.

In summary, we have presented in this letter a brief report on a Monte Carlo study for the TSAW in one dimension. Our results provide strong support for the value $\nu = \frac{2}{3}$ of the RMS displacement exponent $R_N \sim N^\nu$, for all values $(0<g<\infty)$ of the repulsion parameter. A similar behaviour was found also for the range $S_N \sim N^s$ of the TSAW. For negative g (self-attracting walks), we have shown a saturation effect, corresponding to a self-trapping of the walker, with $R_\infty(g) \sim (-g)^{-1}$ and $S_\infty(g) \sim (-g)^{-1}$ at $g<0$. A simple scaling analysis of the TSAW statistics was outlined, providing in particular a simple explanation of the singular behaviour at $g \leqslant 0$. In this respect, it is of interest to extend this study $(g \leqslant 0)$ to $d=2$. Extension to fractal structures is now in progress (Angles d'Auriac and Rammal 1983). Comparison with other models of correlated RW and more detailed results will be reported in a forthcoming paper (Rammal *et al* 1983).

We are grateful to Dr G Toulouse and Professor L Peliti for stimulating discussions. After this work was completed, we learned that J Bernasconi and L Pietronero (1983

preprint) have also performed similar calculations for ν at $g > 0$. Their results are in very good agreement with ours. We thank Professor L Peliti for bringing this work to our attention.

References

Amit D, Parisi G and Peliti L 1983 *Phys. Rev.* B **27** 1635–45
Angles d'Auriac J C and Rammal R 1983 to be published
de Gennes P G 1979 *Scaling concepts in Polymer Physics* (Ithaca: Cornell University)
Obukov S P and Peliti L 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** L147–51
Peliti L 1983 *Preprint CEA-Saclay, DPh-T/83-44*
Pietronero L 1983 *Phys. Rev.* B **27** 5887–9
Rammal R, Angles d'Auriac J C and Benoit A 1983 to be published

J. Phys. A: Math. Gen. 17 (1984) L15–L20. Printed in Great Britain

LETTER TO THE EDITOR

'True' self-avoiding walk on fractals

J C Angles d'Auriac and R Rammal

Centre de Recherches sur Les Très Basses Températures, CNRS, BP 166X, 38042 Grenoble Cedex, France

Received 25 October 1983

Abstract. We investigate the 'true' self-avoiding walk on fractal spaces. The number S_N of sites visited during an N-step walk and the root-mean-square displacement R_N are calculated via extensive Monte Carlo simulations on the 2D Sierpinski gasket. For all positive values of the repulsion parameter g, we found the same exponents: $s' = 0.815 \pm 0.001$ and $\nu' = 0.510 \pm 0.005$ respectively. Both R_N and S_N are shown to exhibit a simple scaling behaviour in N and g. We compare our results with a simple Flory-like prediction for the exponent ν'.

Recently there has been an increasing interest in the problem of random walks on fractal lattices and on percolation clusters. The infinite percolation cluster at percolation threshold is just a simple example of fractal structures in physics. The next step is naturally the study of the self-avoiding walks (SAWs) on fractals. Different types of walks are expected to probe in general different properties of a fractal space. For instance the simple random walks (RWs) have simple properties (Alexander and Orbach 1982, Rammal and Toulouse 1983, Angles d'Auriac *et al* 1983) and provide a powerful probe giving direct access to the spectral dimension $\tilde{d}$ which governs the density of states of low energy excitations. Similarly, it was argued recently (Rammal *et al* 1983) that SAWs will probe the fractal d_B and spectral $\tilde{d}_B$ dimensionalities of the backbone (i.e. doubly connected component) of the fractal structure. Following the same line of ideas, we investigate in this paper the 'true' self-avoiding walk (TSAW) on fractals. Only recently, Amit *et al* (1983) have shown that the problem of a walker who steps randomly, but tries to avoid places he has already visited, is actually different from the SAW problem. They called this problem the TSAW and show that the upper critical dimensionality d_c of such a walk is two while it is known to be four for SAWs (see Peliti 1983, Obukhov and Peliti 1983). The TSAW on a given lattice corresponds to a walker who can move to one of the nearest neighbours of the site he is at. The probability to move to a site j depends on the number of times n_j that the site has already been visited and is given by

$$P_{i\to j} = \exp(-gn_j) \Big/ \sum_j \exp(-gn_j). \tag{1}$$

The normalising sum runs over all nearest neighbours j of i. The parameter g measures the intensity with which the path avoids itself ($g > 0$). The limit $g = 0$ corresponds to the RW problem but, except in the case of the linear chain, the TSAW is not equivalent to the standard SAW at $g = \infty$. The parameter g evidently becomes irrelevant at $d > d_c$ and the TSAW reduces to the RW problem.

We first consider a fractal structure of fractal and spectral dimensionalities $\bar{d}$ and $\tilde{d}$ respectively. The following heuristic argument (see Amit *et al* 1983) can be used for the estimation of the mean-square displacement R_N^2 for large N. For a RW ($g=0$), one would of course have $R_N^2 = N^{2\nu_{RW}}$, where $\nu_{RW} = \tilde{d}/2\bar{d}$. The number of self-intersections of such a walk is of order $N^2/R_N^{\bar{d}} \sim N^{2-\bar{d}/2}$. The self-repulsion has the net effect to increase R_N^2. We obtain, therefore, the following estimation:

$$R_N^2 = N^{2\nu_{RW}} + CN^{2-\bar{d}/2} = N^{2\nu_{RW}}(1 + CN^{2-\bar{d}/2-2\nu_{RW}}) \tag{2}$$

where C denotes a numerical factor. The correction due to the fact that the walk is self-avoiding is asymptotically negligible for: $2-\bar{d}/2-2\nu_{RW}<0$, and may alter the asymptotic behaviour for

$$k \equiv 2-\bar{d}/2-\tilde{d}/\bar{d} > 0. \tag{3}$$

Otherwise, if (3) is fulfilled the self-repulsion parameter g becomes relevant and deviations from RW statistics are expected to occur. The condition (3) is to be compared with the analogous result (Rammal and Toulouse 1983) for the SAW: $4-\tilde{d}>0$, which involves only the spectral dimension $\tilde{d}$ without any reference to the fractal dimension $\bar{d}$. As it should, (3) reduces to the known result: $2-d>0$ on Euclidean spaces ($\tilde{d}=\bar{d}=d$). In the latter case, important corrections due to g are mainly limited to $d=1$. In opposition, (3) is fulfilled for all d, in two important examples of fractal spaces: the family of Sierpinski gaskets and the infinite percolation clusters at threshold. In the first example, $\bar{d}=\ln(d+1)/\ln 2$, $\tilde{d}=2\ln(d+1)/\ln(d+3)$ and $k>0$ for all d. For percolation clusters, (3) reduces to $\bar{d}>1$, which holds for all d, if the value $\tilde{d}=\frac{4}{3}$ (Rammal and Toulouse 1983) is used as an estimation for $\tilde{d}$.

The above result shows that fractal structures provide a rich field for the investigation of the TSAW statistics. In the following, we consider results for TSAWs on the 2D Sierpinski gasket. Using the same methods we presented previously (Angles d'Auriac *et al* 1983, Rammal *et al* 1984) we simulated about 10^4 TSAWs of $N\sim 5000$ steps, for different values of the repulsion parameter $g\geqslant 0$. All the calculations were performed (in assembly language) on processor M 68000. The gaskets were generated iteratively, and chosen to contain some 10^4 sites (being of 8th order of iteration for $d=2$). For each realisation of the TSAW, both starting points and displacements (equation (1)) were randomly chosen according to standard Monte Carlo procedure. Two statistical properties were investigated: the root-mean-square displacement R_N and the average number S_N of distinct visited sites during N-step walks (range). The usual Euclidean metric has been used to measure the displacements of the walker.

In figure 1 are shown the Monte Carlo results for S_N at different values of the repulsion parameter $0<g<\infty$. After a short transient regime, different initial slopes converge towards a well defined value s' independent of $g>0$. For $g=0$, we recover with a very high accuracy the known value $s=\bar{d}/2=0.682$, which corresponds to the RW limit. For all positive values of g, *including* $g=\infty$, we obtain a different value for the corresponding exponent: $S_N \sim N^{s'}$. From the best fit of data at large N, we have obtained the following estimation: $s'=0.815\pm 0.001$. This estimation of s' is also supported by a much more extended analysis at $g=0.5$, where averages over 3×10^4 runs were performed. As expected, the exponent s' is enhanced ($s'>s$) by the self-repulsion. The limiting case $g=\infty$ appears to be controlled by the same exponent, making a net difference with Euclidean spaces where $g=\infty$ plays a special role in the TSAW problem.

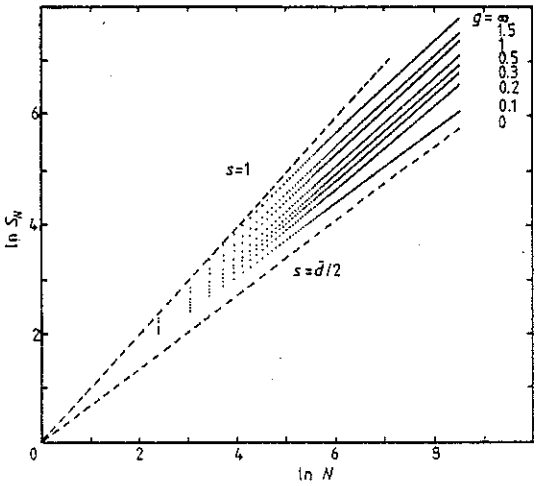


Figure 1. Average range S_N of the TSAW, on a 2D Sierpinski gasket, for different values of the repulsion parameter: $g=\infty$, 1.5, 1, 0.5, 0.3, 0.2, 0.1 and 0. For each value of g, average over 10^4 runs of up to $N=5000$ steps was performed. Broken lines, of slopes $s=1$ and $s=\bar{d}/2$ respectively, are shown for comparison ($\bar{d}=1.365$, $\bar{d}=1.585$). Different initial slopes merge into the asymptotical slope $s'=0.815$ for large N, independent of the value of $g>0$.

Figure 2 gives the results for the root-mean-square displacement R_N. Again, different initial slopes merge into an asymptotical slope ν' at large N, for all values of $g>0$. As it should be, $\nu=\bar{d}/2\bar{d}$ is recovered in the RW limit ($g=0$). However, the estimation of ν' is less accurate than that of s'. Indeed, using the best fit of our data

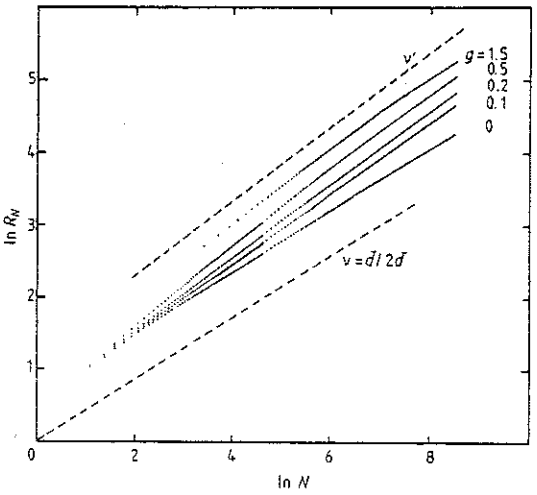


Figure 2. The same plot as figure 1, for the root-mean-square displacement R_N. Broken lines of slopes $\nu=\bar{d}/2\bar{d}$ and $\nu'=0.51$ corresponding to $g=0$ and $g>0$ are shown for comparison.

at large N, we have found $\nu' = 0.510 \pm 0.005$. In trying to extract ν' (or ν) on fractal space, one encounters several difficulties, mainly related to spatial fluctuations of the structure. It should be noticed that such a complication is not present in the calculations of S_N, which provide very accurate results for s' (or s).

Within the accuracy of our estimations, we conclude that on a gasket, the exploration is *compact*, in the following sense: $S_N \sim R_N^{\bar{d}}$, i.e. $s' = \nu' \bar{d}$. This is the case for $g = 0$ and seems to occur also for all positive values of g. Already visited sites have a high probability of revisitation (in spite of the repulsion!), so that, given a compact volume which contains the walker, most points inside this volume are visited before a new site outside the volume is explored. An example of compact exploration is of course the one-dimensional RW or TSAW (Rammal *et al* 1984).

The value of the exponent ν' so obtained lies between (see table 1) the corresponding value for the RW and that recently calculated for the SAW (Rammal *et al* 1983). In particular, this shows that the TSAW statistics at $g = \infty$ is definitely distinct from that of the SAW on the same structure. In table 1, we have summarised the relevant results for different RW problems on the gaskets.

Table 1. Random walks exponents on the Sierpinski gaskets. RW: simple random walk, SAW: self-avoiding walk, TSAW: true self-avoiding walk. ν = exponent of the RMS displacement ($R_N \sim N^\nu$); s = exponent of the average range ($S_N \sim N^s$); d = Euclidean dimension; $\bar{d} = \ln(d+1)/\ln 2$: fractal dimension; $\tilde{d} = 2\ln(d+1)/\ln(d+3)$: spectral dimension.

			RW		SAW		TSAW	
d	$\bar{d}$	$\tilde{d}$	ν	s	ν	s	ν	s
1	1	1	1/2	1/2	1	1	2/3	2/3
2	1.5849	1.3652	0.4306	0.6826	0.798	1	0.510	0.815
3	2	1.5474	0.3868	0.7737	0.729	1		

In what follows we will show that the main asymptotical properties of the TSAW can be analysed with the help of a simple scaling argument. Following previous work on $d = 1$, it is natural to consider $z \equiv gN^k$ as a reduced parameter for the TSAW statistics. For instance, matching together the respective RW and TSAW power laws for S_N: $S_N \sim N^s$ and $S_N \sim N^{s'}$, one obtains the simple scaling function

$$S_N = N^s \phi(gN^k) \tag{4}$$

with the following limits

$$\begin{aligned} \phi(z) &\sim 1 && \text{at } z \ll 1, \\ &\sim z^{(s'-s)/k} && \text{at } z \gg 1. \end{aligned} \tag{5}$$

Stated otherwise, $gS_N^{k/s}$ is a universal function $\psi(z)$ of the scaling variable z, with

$$\begin{aligned} \psi(z) &\sim z && \text{at } z \ll 1, \\ &\sim z^{s'/s} && \text{at } z \gg 1. \end{aligned} \tag{6}$$

In figure 3, we have shown some of our data, according to the scaling suggested by equation (6). All points fall on the same universal curve, which shows in particular the expected RW-to-TSAW crossover at $z \sim 1$. In trying to extract k from this kind of

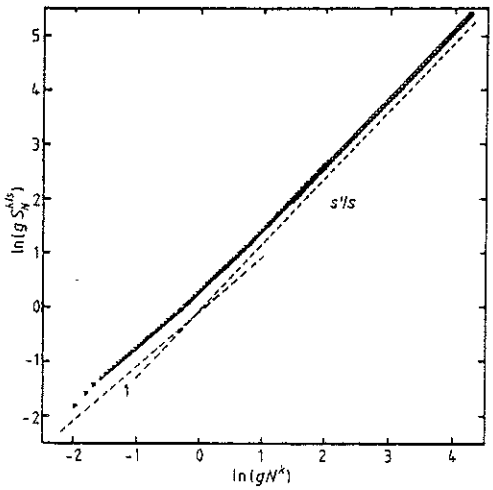


Figure 3. Universal plot of the average range S_N: $gS_N^{k/s}$ against gN^k, where $k = 2-\tilde{d}/2-\tilde{d}/\bar{d}(=0.45604)$. For the sake of clarity, only data for $g=0.1$ and 1.5 were used in this plot. The expected crossover between two distinct regimes is clearly observed, at $gN^k \sim 1$.

plot, we have checked the validity of the heuristic argument leading to the proposed value (equation (3)) of the dimension of g. The universal plot of figure 3 strongly supports this argument as well as the scaling (equation (6)) in N and g.

We now discuss a simple Flory-like argument for the exponent ν'. Following a previous study of SAWS on fractals (Rammal *et al* 1983), a first important guess is that the combination $\nu'\bar{d}$ is an intrinsic property, independent of the space in which the fractal is embedded, whereas $\bar{d}$ and ν' both depend on this embedding. The simplest assumption is that $\nu'\bar{d}$ depends only on $\tilde{d}$. On the other hand, the Flory-like argument (Pietronero 1983, Bernasconi and Pietronero 1983) provides a satisfactory interpolation between the values of ν' for Euclidean lattices:

$$\nu' = 2/(d+2) \tag{7}$$

for $d \leq 2$. It is exact for $d=2$ and probably for $d=1$. This suggests a similar approximation for fractals, under the assumption that only $\tilde{d}$ plays a role

$$\nu' = (\tilde{d}/\bar{d})2/(\tilde{d}+2). \tag{8}$$

This is the simplest approximation that reduces to (7) for Euclidean spaces. However, (8) must be considered only as a working hypothesis. For the 2D Sierpinski gasket, (8) gives $\nu' = 0.5119$ which is surprisingly close to our numerical estimation for ν'. This 'agreement' is probably accidental, because ν' (as given by (8)) becomes lower than $\nu = \tilde{d}/2\bar{d}$ for $\tilde{d} > 2$.

In summary we have presented the first results for the TSAW statistics on fractal spaces. Our Monte Carlo simulation for the 2D Sierpinski gasket exhibits a compact exploration of space and a net deviation due to the self-repulsion parameter. A new type of critical behaviour with universal exponents ν' and s' (independent of the repulsive parameter g) was found. The proposed scaling analysis in N and g is found to be consistent with the Monte Carlo results, and can be used to understand the

self-attracting regime ($g < 0$). In view of the validity of the relation $\nu' = (\tilde{d}/\bar{d})2/(\tilde{d}+2)$, it is of great interest to check this working hypothesis on different fractal structures. A more detailed understanding of the universality classes for SAWs and TSAWs on fractals will be necessary to resolve that question.

It is a pleasure to thank Drs G Toulouse, G Paladin and Professor L Peliti for many valuable discussions and interesting remarks.

References

Alexander S and Orbach R 1982 *J. Physique Lett.* **43** L625
Amit D, Parisi G and Peliti L 1983 *Phys. Rev.* B **27** 1635–45
Angles d'Auriac J C, Benoît A and Rammal R 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** 4037
Bernasconi J and Pietronero L 1983 *Preprint*
Obukhov S P and Peliti L 1983 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** L147–51
Peliti L 1983 *Preprint CEA Saclay, DPh-T 183–44*
Pietronero L 1983 *Phys. Rev.* B **27** 5887–9
Rammal R, Angles d'Auriac J C and Benoît A 1984 *J. Phys. A: Math. Gen.* in press
Rammal R and Toulouse G 1983 *J. Physique Lett.* **44** L13
Rammal R, Toulouse G and Vannimenus J 1983 submitted to *J. Physique*

III - DYNAMIQUE DE SPINS SUR RESEAU FRACTAL

L'article suivant porte sur l'étude du comportement critique d'un système de spins d'Ising sur un réseau fractal. La statique et la dynamique critique ont été étudiées. On détermine les principaux exposants critiques décrivant le système à l'équilibre, la valeur de la température critique T_c et l'exposant dynamique z. Le réseau fractal étudié est le tapis de Sierpinski. Les résultats numériques sont en désaccord avec deux prédictions théoriques différentes pour z. Une de ses prédictions, obtenue pour les fractals quasi-linéaires, relie z à $\bar{d}$ et ν : $z = \bar{d} + 1/\nu$, tandis que l'autre prédiction, utilisant des arguments de paroi, est $z = \bar{d} + 1$.

CRITICAL BEHAVIOR OF THE KINETIC ISING MODEL ON A FRACTAL LATTICE

J.C. ANGLES d'AURIAC and R. RAMMAL

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, B.P. 166 X, 38042 Grenoble Cédex, FRANCE

ABSTRACT

We study the critical behavior (static and dynamics) of the Ising model, defined on a fractal Sierpinski carpet. Using Monte Carlo calculations, estimates for various critical exponents are obtained from a finite size scaling analysis. Our results are compared with the available predictions for the dynamical critical exponent z.

1. INTRODUCTION

Dynamic phenomena associated with fractal geometries have been the object of various studies in recent years (Anomalous diffusion, transport in random media,...). On the other hand, a systematic study of static critical phenomena on fractal lattices has been carried out. More recently, the critical dynamics of the kinetic Ising model on fractal lattices (Achiam 1985, Luscomb and Desai 1985, Rammal 1985) and percolation clusters (Henley 1985, Rammal and Benoît 1985 a,b) has been investigated. Some of the obtained results have received a numerical confirmation (Rammal and Benoît 1985b, Chowdhury and Stauffer 1985, Jain 1985) particularly for the percolation clusters, which are known to be relevant for diluted magnetic systems (Stinchcomb 1983). Furthermore, a lower bound for the dynamic critical exponent z, on finitely ramified fractals has been suggested (Luscomb and Desai, 1985) : $z \geqslant \bar{d}$ where $\bar{d}$ refers to the fractal dimension of the lattice. The value $z = \bar{d} + \frac{1}{\nu}$ has been obtained for quasi-linear fractals (Achiam, 1985). Finally, for infinitely ramified fractals such as the Sierpinski Carpet, a domain wall argument has been used (Rammal 1985) to obtain $z = 1 + \bar{d}$, which is argued to hold at $\bar{d} = 1 + \varepsilon$, where $T_c \sim \varepsilon$, $\nu \sim 1/\varepsilon$ and $\varepsilon \ll 1$.

Our main purpose in this letter is to present the results of a numerical study of the critical behavior (static and dynamics) of the Ising model on a fractal lattice. We used a fractal structure of the Sierpinski carpet type, with parameters $b = 1$, $c = 3$ and $\ell = 1$. The static critical behavior of this type of fractal lattices has been studied previously both numerically (Bhanot et al., 1983) and using Migdal-Kadanoff decimation scheme (Gefen et al., 1983). The fractal dimension of this lattice is given by $\bar{d} = \ln [b^2(c^2 - \ell^2)] / \ln(bc)$. In the case considered here,

$\overline{d} = \ln 8/\ln 3 \simeq 1.89278$. The Carpet has been chosen for two reasons : Firstly because of the finite value of the critical temperature T_c and secondly because of the presence of holes inside the lattice, and this at all length scales. At stage $n \geqslant 1$ of iteration, the linear length scale of the embedding lattice is $L = 1 + 3^n$ and the total number of sites is $N_n = (44 \cdot 8^n + 56 \cdot 3^n + 40)/35$. For large n, the ratio of the number of sites having a coordination number 3 and 4, has a limiting finite value given by $35/352 \simeq 0.09943$.

2. CRITICAL TEMPERATURE T_c

On the sites of the Sierpinski Carpet are located Ising spins, coupled by a nearest-neighbour interaction J : $\mathcal{H} = - J \sum_{<ij>} \sigma_i \sigma_j$, $\sigma_i = \pm 1$. The same coupling constant J has been used for internal and boundary bonds. Critical temperature and critical exponents have been obtained, through a finite size scaling, over three stage iterations. The corresponding lattices have respectively : N = 96 (n = 2), N = 668 (n = 3) and N = 5280 (n = 4) sites. The results presented below have been extracted from a Monte-Carlo simulation, performed up to 10^5 MCS/spin. On figure 1 and 2 are shown the results for the magnetic susceptibility $\chi(T)$ and for the specific heat C(T) corresponding to the three studied sizes. For both $\chi(T)$ and C(T) a sharp peak takes place at $T \sim 2J$. An accurate value for the critical temperature T_c has been determined, using the renormalized coupling constant method (Binder, 1985). For this, we have calculated, during the Monte-Carlo simulations, the first moments of the thermal equilibrium values of the normalized magnetization $m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$. More precisely, $<|m|>$, $<m^2>$ and $<m^4>$ have been recorded, and the renormalized coupling constant U_L has been calculated

$$U_L = 1 - \langle m^4 \rangle_L / 3 \langle m^2 \rangle_L^2$$

The behavior of this reduced cumulant makes it rather suitable for obtaining estimates for T_c which are not biased by any assumption about the critical exponents. On figure 3, are shown the results so obtained for the temperature variation of U_L, and this for the three stage iteration (n = 2, 3 and 4). The common intersection point of these three curves, yields the following value for T_c : $T_c/J = 2.02 \pm 0.02$ ($J/T_c = 0.495$). This value is to be compared with the estimates : $J/T_c = 0.511 \pm 0.03$, 0.500 ± 0.005 and 0.498 ± 0.05 obtained by Bhanot et al. for the carpet b = 2, c = 4 and $\ell = 2$ ($\bar{d} = \ell n48/\ell n8 = 1.8616$). Note that both values of T_c are lower than the critical temperature of the 2D Ising model : $T_c/J = 2.269$. The numerical results agree therefore with the increasing of T_c with $\bar{d}$, from $T_c = 0$ at $\bar{d} = 1$ (linear Ising chain) to the 2D limiting value.

3. STATIC CRITICAL EXPONENTS

The correlation length exponent ν , associated to the transition at $T = T_c$, can be deduced from the behavior of U_L close to the fixed point U^* (= 0.577).

$$1/\nu = \frac{\ell n(\partial U_{bL}/\partial U_L)}{\ell n b} \Big|_{U^*}$$

For the lattices studied here, it is more convenient to use the following equivalent form

$$1/\nu\bar{d} = \frac{\ell n\,[\partial U_{n+1}/\partial U_n]}{\ell n\,[N_{n+1}/N_n]} \Big|_{U^*}$$

giving directly the intrinsic product $\nu\bar{d}$. Here N_n denotes the number of spins at stage n. The extracted values of ν and $\nu\bar{d}$ are respectively : $\nu = 1.0904$ and $\nu\bar{d} = 2.063$. Using the hyperscaling relation $2-\alpha = \bar{d}\nu$, one deduces the following negative value for the specific heat exponent : $\alpha = -0.06$.

It is interesting to notice that the ε-expansion value of ν, at $\bar{d} = 1 + \varepsilon$, gives : $\nu = 1/(\bar{d}-1)$ and then $\nu = 1.1202$ at $\bar{d} = 1.89278$ and $\nu = 1.1606$ at $\bar{d} = 1.8616$ respectively. This value of ν in our case ($\bar{d} = 1.89278$) is slightly higher than the numerical one. This contrast with the finding of Bhanot et al., where $\nu = 1.28$ has been obtained from the decay of the spin-spin correlation function along lines which encountered no holes. We believe that the value of ν so obtained here is the appropriate one and refers actually to the averaged correlation function overall pairs of spins, at a given distance. This distinction would arises in any inhomogeneous structure, such as the Carpet considered here.

On figure 4 the temperature variations of the magnetization m(T) are shown for the three lattice sizes N. The same date ara used in Fig. 5 in a finite size scaling plot, $mN^{\beta/\nu\bar{d}}$ as a function of $(T-T_c)N^{1/\nu\bar{d}}$, in order to extract the ratio $\beta/\nu\bar{d}$. The best fit in the plot leads to : $\beta/\nu\bar{d} = 0.045$ and then a rather small value for the exponent β : $\beta = 0.0928$.

The same procedure has been used for the magnetic susceptibility $\chi(T)$, as shown on figure 6, where $\chi N^{-\gamma/\nu\bar{d}}$ is given as a function of $(T-T_c)N^{1/\nu\bar{d}}$. The best fit in this plot gives : $\gamma/\nu\bar{d} = 0.925$ and then $\gamma = 1.908$. The accuracy of our estimation for different exponents (β,γ,ν) in easily checked on the value of $(2\beta+\gamma)/\bar{d}\nu = 1.015$, instead of 1.000 according to scaling relations. The set of exponents, we

obtained in this work, is summarized in table 1, where the results of Bhanot et al. have also been included. As can be seen, a monotonic variation of the exponents is observed, when $\bar{d}$ increases from $\bar{d} = 1$ to $\bar{d} = 2$. Note that η and α given here where extracted from the scaling relations : $2 - \alpha = \bar{d}\nu$ and $2 - \eta = \gamma/\nu$ respectively.

4. CRITICAL RELAXATION AND DYNAMIC EXPONENTS

Using the single-spin flips dynamics, we have studied the critical relaxation on the Sierpinski Carpet. For this we have calculated the non linear relaxation times of the magnetization m(t) and the energy E(t). Our simulation always starts with all spins up, m(0) = 1. The non linear relaxation time for the magnetization m(t) is defined, as usualy, by

$$\tau_M^{n\ell} = \int_0^\infty m(t)dt/m(0)$$

Similarly, for the energy relaxation, we have used :

$$\tau_E^{n\ell} = \int_0^\infty dt \, \frac{E(t) - E(\infty)}{E(0) - E(\infty)}$$

In order to achieve sufficient accuracy, the present calculations where restricted to $T = T_c$. The dynamics exponents have been extracted using finite size scaling. Indeed, scaling arguments show that at $T \gtrsim T_c$, τ_M and τ_E increase according to : $\tau_M \sim \xi^{z_M}$ and $\tau_E \sim \xi^{z_E}$ respectively. The non linear exponents are related to the linear one z (Racz, 1976) through: $z_M = z - \beta/\nu$ and $z_E = z - \frac{1-\alpha}{\nu}$ respectively. Here z is assumed to be the same for the magnetization and for the energy relaxation. At critical

temperature and for a finite system, this leads to the following expressions for τ_M and τ_E as functions of the size N :

$$\tau_M \sim N^{x_M} \quad , \quad x_M = (z - \beta/\nu)/\bar{d}$$

and

$$\tau_E \sim N^{x_E} \quad , \quad x_E = (z - \frac{1-\alpha}{\nu})/\bar{d}$$

Only the exponents x_M and x_E are measured here. Let us consider first the relaxation of m(t). τ_M as defined above, has been measured for three stage iterations. From the log-log plot of τ_M as function of N (fig. 7), we have deduced the following value for the exponent : $x_M = 1.113$. Using the previously obtained values for β and ν, one obtains $z = 2.20 \pm 0.06$.

The same analysis has been carried out for the energy relaxation. We obtained $x_E = 0.573$, which leads to $z = 2.06 \pm 0.06$.

The value of z (at least that deduced from z_M) is larger than the most accurate one : $z = 2.12 \pm 0.06$ (Jan et al., 1983), for the 2D Ising model. The increasing of the dynamic exponent is in good agreement with the recent predictions summarized in the introduction. However the values for z, obtained here are definitely lower than the predicted ones. Indeed, the first one $z = \bar{d} + 1/\nu$ leads to $z = 2.8098$ whereas the second one gives $z = \bar{d} + 1 = 2.8927$.

5. CONCLUSION

Let us conclude this work with two remarks. Firstly, the static critical exponents on the Sierpinski Carpet appear to follow the expected pattern and this is shown on table 1. Similarly, due to the presence of holes in the lattice (defective structure), the dynamic critical

exponent z is increased, in comparison with the 2D Ising model. This means that, details of the structure, not described by $\overline{d}$ alone, must be involved in the calculation of z. Secondly, the obtained value of z does not fit the predictions made recently for its value, and this call for further investigations.

FIGURE CAPTIONS

Fig. 1 : Magnetic susceptibility per spin $\chi(T)$ as function of temperature T, for three lattice sizes N = 98 (n = 2), N = 688 (n = 3) and N = 5280 (n = 3), corresponding to stage iteration n.

Fig. 2 : Same plot as in figure 1, for the specific heat C(T). We have used the same symbols for the different sizes.

Fig. 3 : Temperature variation of the renormalized coupling constant U_L.

Fig. 4 : Magnetization per spin as function of the temperature T.

Fig. 5 : Finite size scaling plot for the magnetization m(T), at different lattice sizes.

Fig. 6 : The same plot as in figure 5 for the magnetic susceptibility.

Fig. 7 : Log-log plot of the relaxation times (τ_M and τ_E) as function of the lattice size N.

TABLE I

$\bar{d}$	T_c	ν	β	γ	η	α
1	0	(1)	(0)	(1)	(1)	(1)
1.8616	1.957 0.005	1.28 0.05	0.10 0.05	1.90 0.05	0.5156	- 0.10
1.8927	2.03 0.02	1.090	0.0928	1.908	0.3155	- 0.063
2	2.269	1	1/8	7/4	1/4	$O(\ln)$

Table caption : Numerical values of the critical temperature T_c and static critical exponents for two Sierpinski Carpets of fractal dimension $\bar{d}$. For comparison, the corresponding value for 1D Ising model ($\bar{d}$ = 1) and 2D Ising model ($\bar{d}$ = 2) are included.

REFERENCES

1. ACHIAM Y. (1985), Phys. Rev. B31, 4732 and 32, 1796.
2. BHANOT G., NEUBERGER H. and SHAPIRO J.A. (1983), Phys. Rev. Lett.
3. BINDER K. (1985), J. Computational Phys. 59, 1.
4. CHOWDHURY D. and STAUFFER D. (1985), preprint.
5. GEFEN Y., MEIR Y., MANDELBROT B.B. and AHARONY A. (1983), Phys. Rev. Lett. 50, 145.
6. HENLEY C. (1985), Phys. Rev. Lett. 54, 2030.
7. JAIN S. (1985), preprint.
8. JAN N., MOSELEY L.L. and STAUFFER D. (1983), J. Stat. Phys. 33, 1.
9. LUSCOMBE J.H. and DESAI R.C. (1985), Phys. Rev. B32, 488.
10. RACZ Z. (1976), Phys. Rev. B13, 163.
11. RAMMAL R. (1985), J. Physique (Paris), 46, 1837.
12. RAMMAL R. and BENOIT A. (1985), Phys. Rev. Lett. 55, 649.
    RAMMAL R. and BENOIT A. (1985), J. Physique Lett. (Paris), 46, L667.
13. STINCHCOMB B.B. (1983), in Phase Transitions and Critical Phenomena, Edited by C. Domb and J.L. Lebowitz (Academic Press, New York), vol. 7.

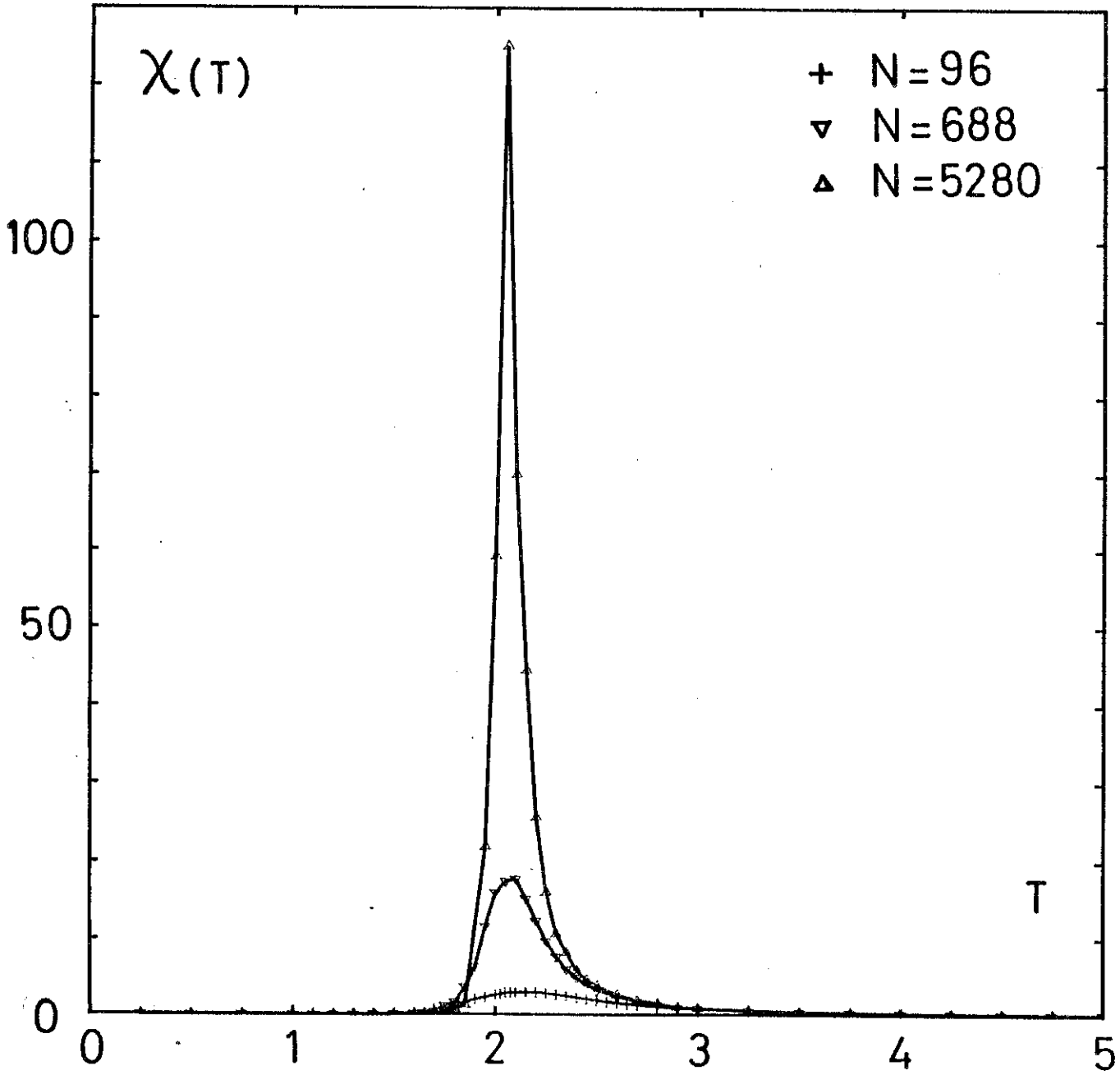


Fig 1

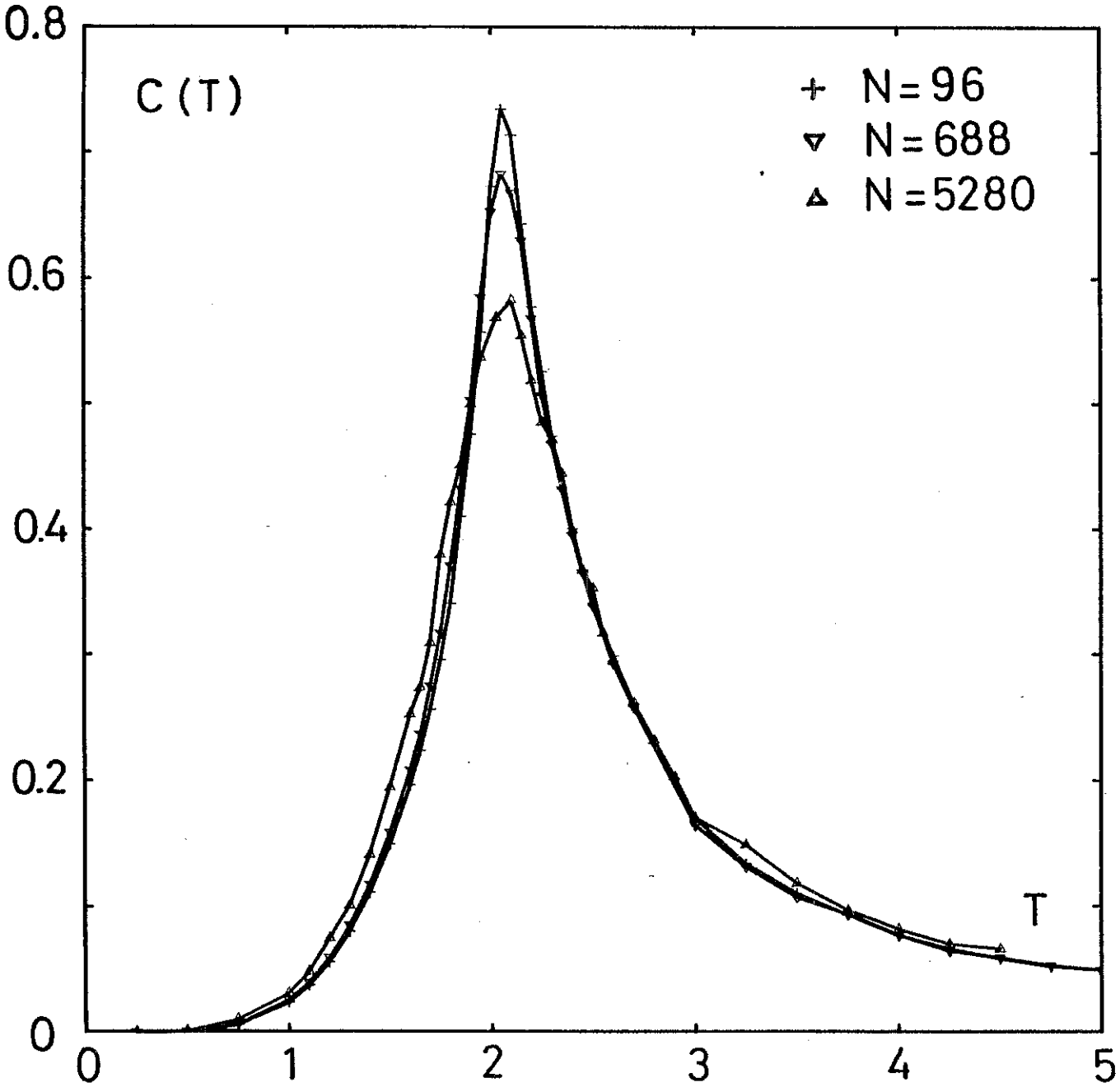


Fig 2

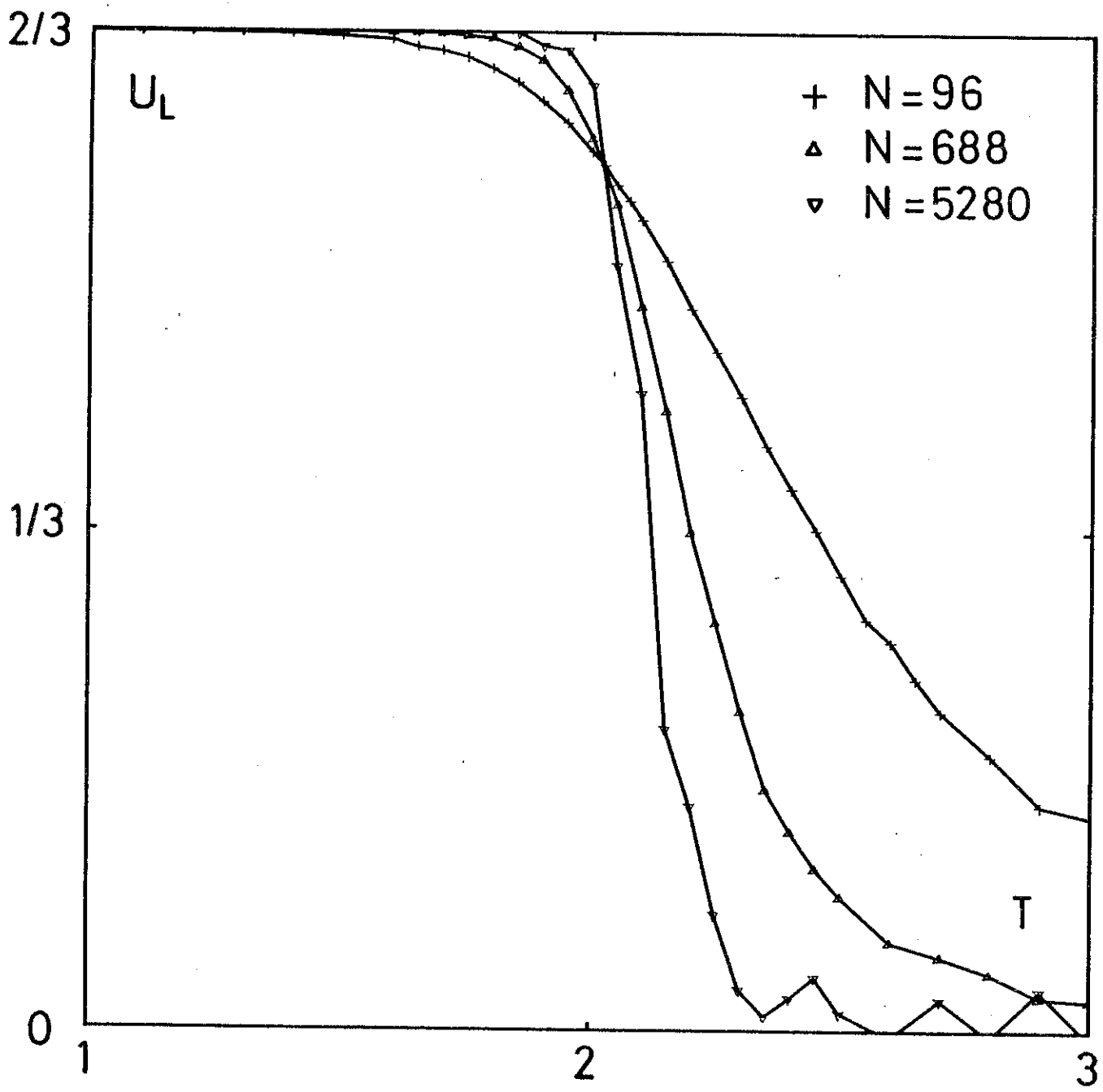


Fig. 3

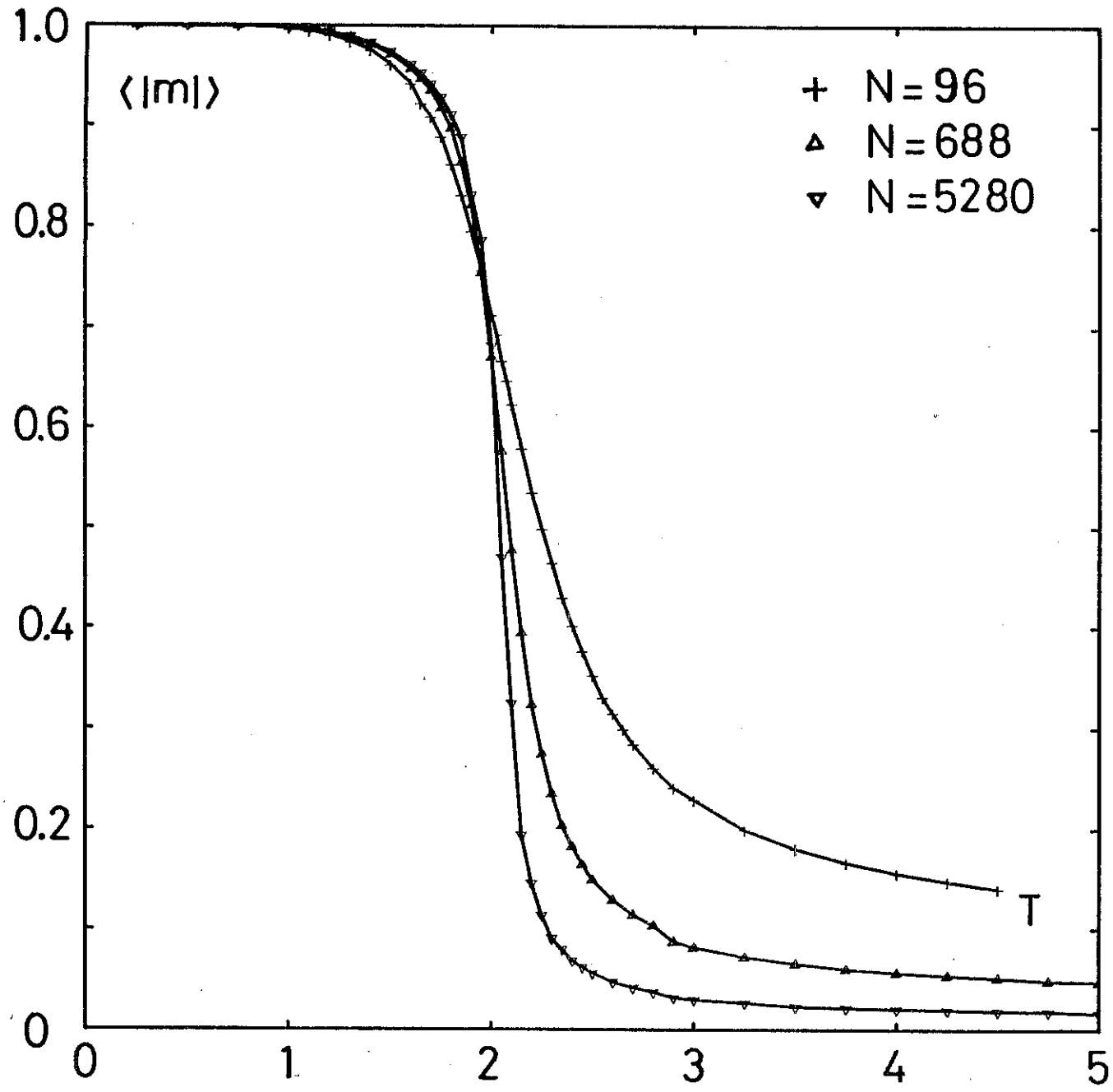


Fig 4

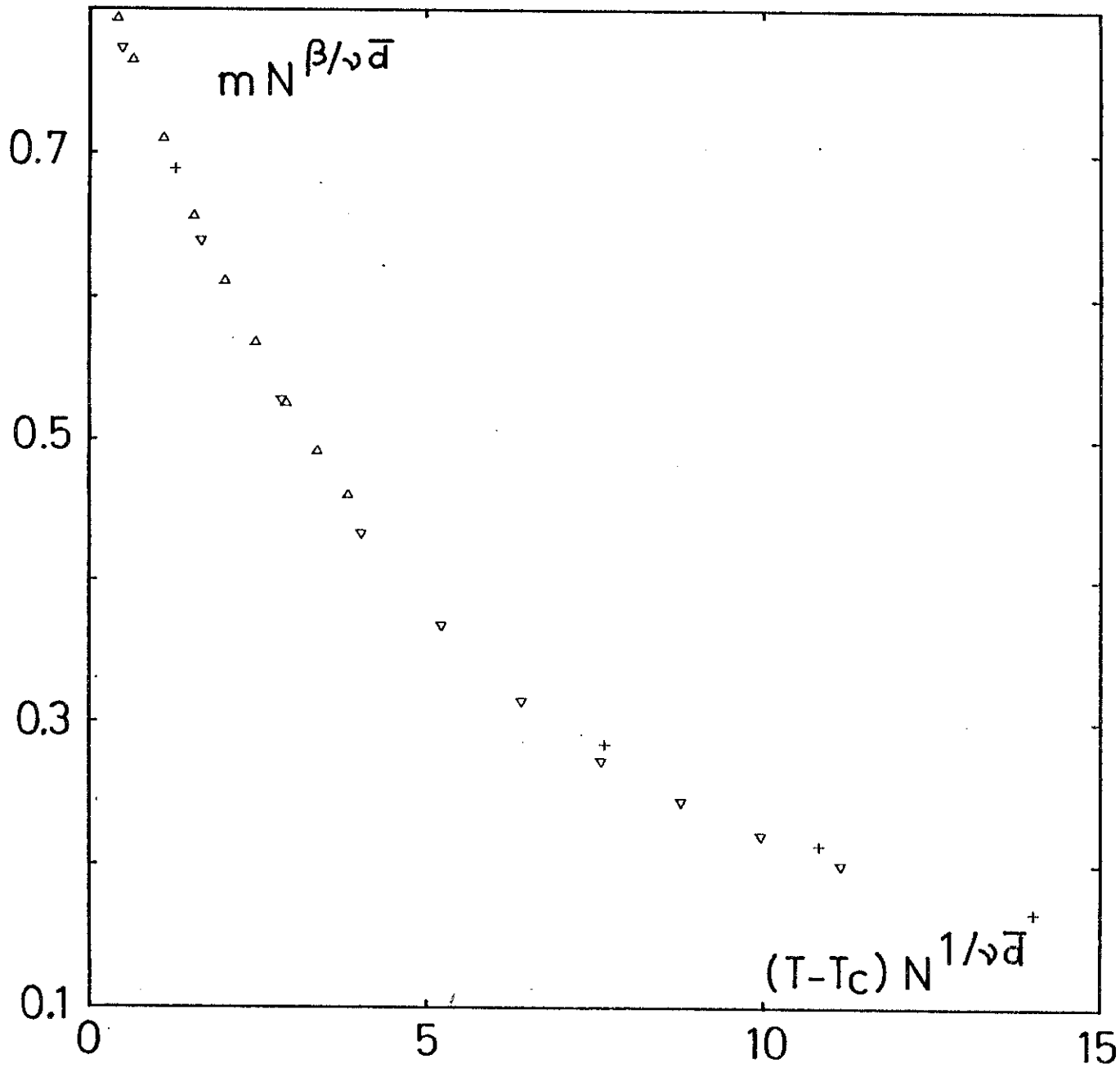


Fig. 5

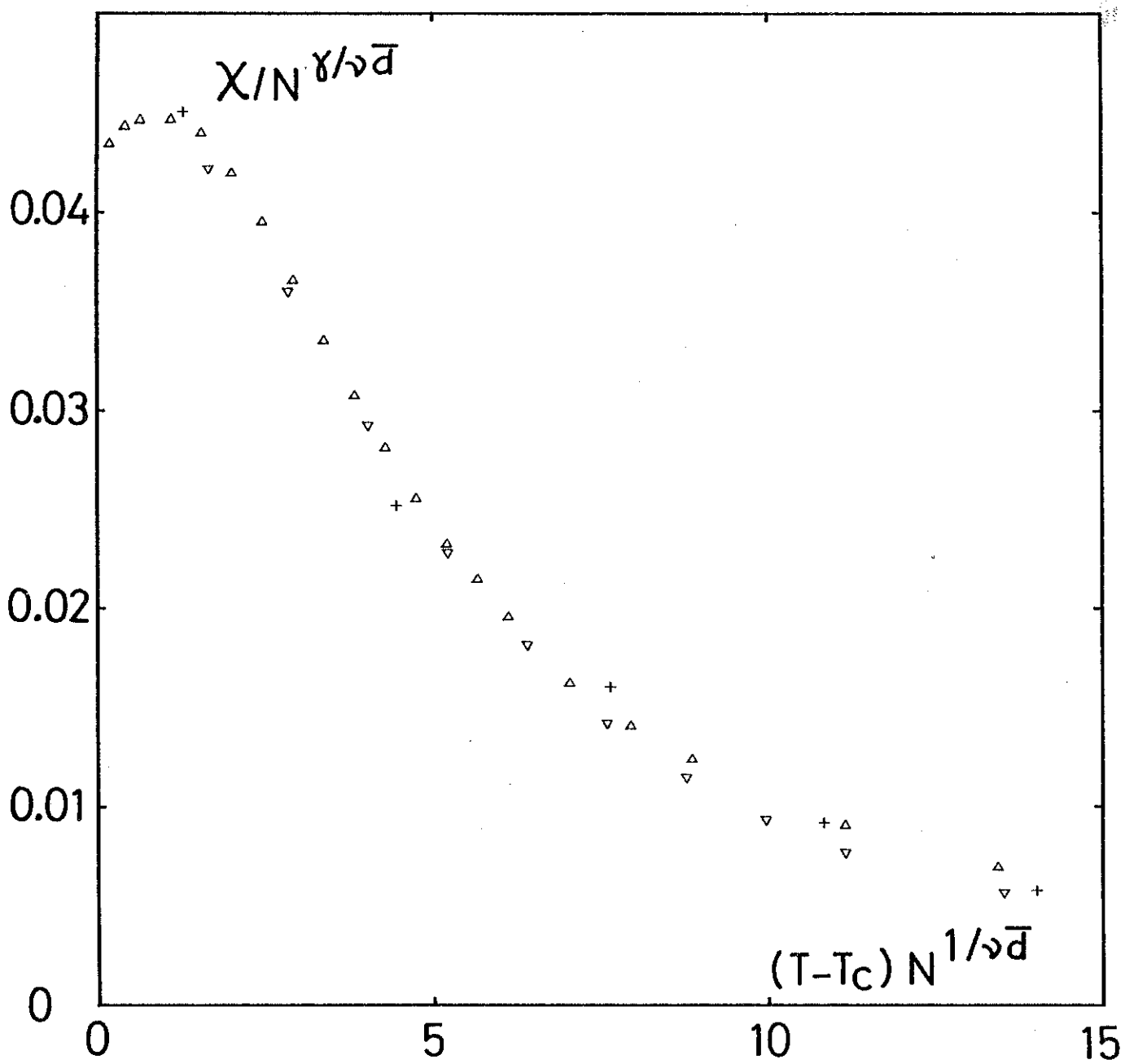
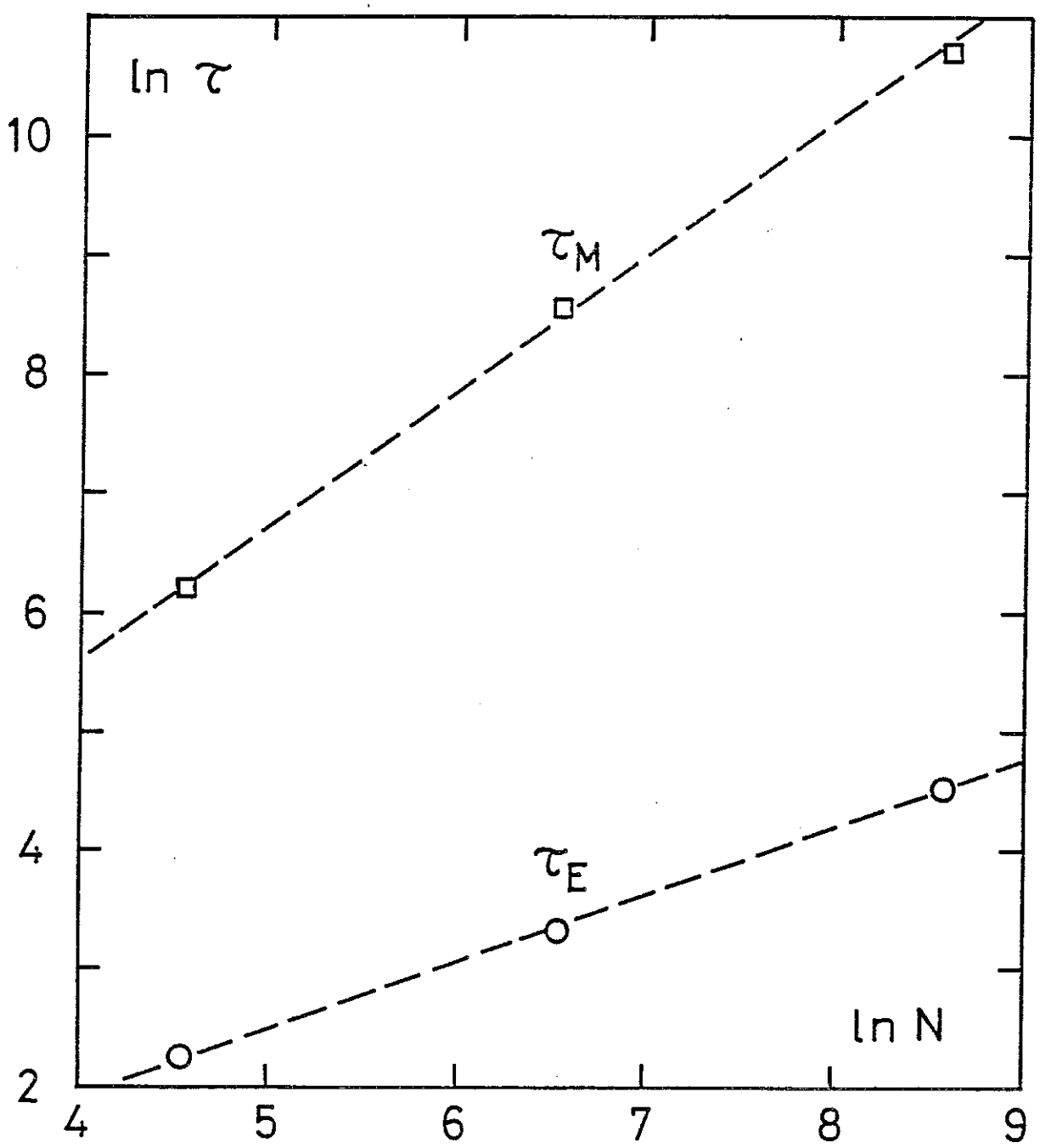


Fig 6


ln τ
10
8
6
4
2
τM
τE
ln N
4
5
6
7
8
9

A P P E N D I C E

PROCEDURE DE CODAGE DES SITES DU TAMIS DE SIERPINSKI

Partant du coin le plus bas à gauche du tamis, un codage naturel des sites est facilement obtenu en suivant les règles suivantes. Chaque triangle vers le haut (plaquette) est codé sur le tamis construit jusqu'au pas n, par un mot de n éléments : $(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ où $x_i = 0$, 1 ou 2 $(1 \leqslant i \leqslant n)$ et sont définis récursivement du pas n au pas n+1 (fig. 1). Chaque plaquette a trois plaquettes voisines, dont le code est trouvé facilement en utilisant le codage ci-dessus. De cette manière chaque site du tamis (en dehors des trois sites externes) est codé avec les deux plaquettes auxquelles il appartient.

i) Deux plaquettes p_1 et p_2 sont adjacentes si et seulement si leurs codes respectifs sont de la forme suivante

$$p_1 : \; x_o\, x_1 \ldots x_k \overbrace{y\, z\, z \ldots z}^{\ell}$$

$$p_2 : \; x_o\, x_1 \ldots x_k \overbrace{z\, y \ldots y}^{\ell} \quad , \ell \geqslant 0$$

où x_i, y et z sont éléments de $A = \{0,1,2\}$ et $x_k \neq y,z$.

Le site commun à p_1 et p_2 est codé avec le mot de n éléments suivants :

$$x_o\, x_1 \ldots x_k\, u \underbrace{33 \ldots 3}_{\ell}$$

où $u \in A - \{y,z\}$.

Inversement, un site codé par

$$x_o\, x_1 \ldots x_k\, u \underbrace{33 \ldots 3}_{\ell}$$

est le site commun aux deux plaquettes suivantes :

$$x_o\, x_1 \ldots x_k\, v \overbrace{w\, w \ldots w}^{\ell} \quad \text{et}$$

$$x_o\, x_1 \ldots x_k\, w \underbrace{v\, v \ldots v}_{\ell}$$

où $\{u,v,v\} = A$.

ii) Règles pour trouver les sites voisins d'un site donné.

Pour trouver les quatre voisins du site $x_o \ldots x_k\, u\, \overset{\ell}{3} \ldots 3$ deux cas sont à distinguer :

a) $\ell = 0$ (i.e. $k = n-1$) : les deux premiers voisins sont donnés par

$$x_o\, x_1 \ldots x_k\, v$$

et $\quad x_o\, x_1 \ldots x_k\, w \quad$ où $\{u,v,w\} = A$.

Les deux autres voisins sont donnés par

$$x_o\, x_1 \;\; x_j\, y\, z \ldots z$$

et $\quad x_o\, x_1 \;\; x_j\, z\, y \ldots y \quad$ où j ($\leqslant k$) désigne le premier entier (depuis la droite), tel que $x_j \neq u$ et $\{x_{j+1}, y, z\} = A$.

b) $b \neq 0$. Aucun des quatre voisins n'a 3 dans son code et les voisins du site $x_o \ldots x_k\, u\, \overbrace{3 \ldots 3}^{\ell}$ sont donnés par :

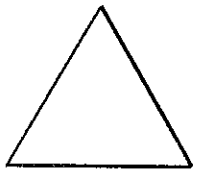
$$x_o x_1 \ldots x_k\, v.\overbrace{u\, w\, w \ldots w}^{\ell}$$

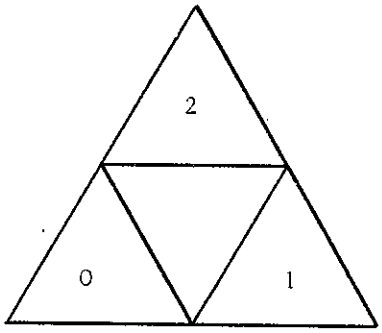
$$x_o x_1 \ldots x_k\, v.w\, u\, u \ldots u$$

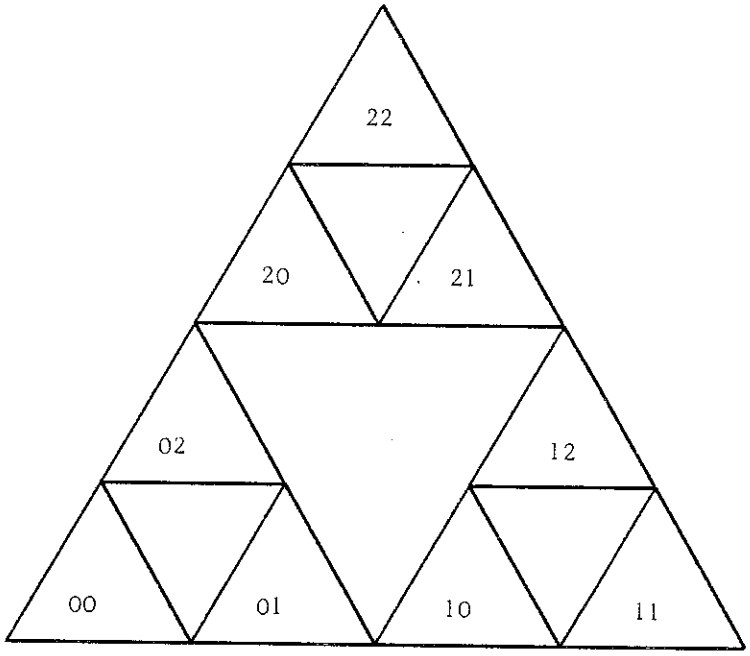
$$x_o x_1 \ldots x_k\, w.u\, v\, v \ldots v$$

$$x_o x_1 \ldots x_k\, w.v\, u\, u \ldots u$$

où $\{u,v,w\} = A$.




2
0
1


22
20
21
02
12
00
01
10
11

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE I

(Ale(a)) S. ALEXANDER,
Phys. Rev. B 27, 1541 (1983).

(Ale(b)) S. ALEXANDER, R. ORBACH
J. Physique Lettres 43, L625 (1982).

(Ale(c)) S. ALEXANDER, J. BERNASCONI, R. SCHNEIDER, R. ORBACH,
Review of modern physics, vol. 53, n° 2 (1981).

(Ang(a)) J.C. ANGLES d'AURIAC, A. BENOIT, A.B. HARRIS, R. RAMMAL,
Spreading dimension of Percolation clusters : a new universal exponent (ci-joint).

(Ang(b)) J.C. ANGLES d'AURIAC, A. BENOIT, R. RAMMAL,
J. Phys. A : Mat. Gen 16, 4039 (1983) (ci-joint).

(Ang(c)) J.C. ANGLES d'AURIAC, R. RAMMAL,
J. Phys. C 16, L825 (1983) (ci-joint).

(Ang(d)) J.C. ANGLES d'AURIAC, R. RAMMAL,
J. Phys. A : Math. Gen. 17, L15 (1984) (ci-joint).

(Ang(e)) J.C. ANGLES d'AURIAC, R. RAMMAL,
soumis pour publication (ci-joint).

(Ban) J.P. BANAVAR, J. WILLEMSEN,
Phys. Rev. B 30, 6778 (1984).

(Gla) R.J. GLAUBER,
J. Math. Phys. 4, 294 (1963).

(Gug) R.A. GUYER,
Preprint 84.

(Hav) S. HAVLIN, D. MOVSHOVITZ, B. TREES, G.M. WEISS,
J. Phys. A : Math. Gen. 18, L179 (1985).

(Man) B. MANDELBROT,
Les objets fractals (deuxième édition),
Nouvelle Bibliothèque scientifique, Flammarion (1984).

(Mon) E.W. MONTROLL, B.J. WEST in Fluctuations Phenomena,
Eds E.W. Montroll, J.L. Lebowitz (North-Holland, 1979).

(Osh) B.O.'SHAUGHNESSY, I. PROCACCIA,
Phys. Rev. Lett. 54, 155 (1985).

(Ram(a)) R. RAMMAL, T. LUBENSKY, G.TOULOUSE,
Phys. Rev. B 27, 2820 (1983).

(Ram(b)) R. RAMMAL, G. TOULOUSE,
J. Phys. Letters 44, L13 (1983).

(Ram(c)) R. RAMMAL,
J. Phys. Letters 45, 1007 (1984).

(Ram(d)) R. RAMMAL, J.C. ANGLES d'AURIAC, A. BENOIT,
J. Phys. A : Math. Gen. 17, L491 (1984) (ci-joint).

(Ram(e)) R. RAMMAL, G. TOULOUSE, J. VANNIMENUS,
J. Phys. 45, p. 389 (1984).

(Ram(f)) R. RAMMAL, J.C. ANGLES d'AURIAC, A. BENOIT,
J. Phys. A : Math. Gen. 17, L9 (1984) (ci-joint).

(Ram(g)) à paraître.

(Ram(h)) R. RAMMAL, J.C. ANGLES d'AURIAC, A. BENOIT,
Phys. Rev. B, vol. 30, n° 7, 4087 (1984) (ci-joint).

(Van) J. VANNIMENUS, J. NADAL, H. MARTIN,
J. Phys. A : Math. Gen. 17, L351 (1984).

CHAPITRE II

OPTIMISATION COMBINATOIRE DANS LES MODELES DE LA MECANIQUE STATISTIQUE

I - INTRODUCTION

II - LE PROBLEME DES VERRES DE SPINS ET LE PROBLEME DU COUPLAGE

II.1. Le problème des verres de spins
II.2. Formulations du problème d'optimisation associé
II.2.a. Cas général
II.2.b. Cas d'un graphe planaire
II.3. Résolution du problème P
II.4. Ligne T = 0 du diagramme de phase : anti-phase aléatoire

III - LE MODELE DU CHAMP ALEATOIRE

III.1. Le modèle
III.2. La recherche du fondamental
III.2.a. Rappel de notions de théorie des graphes
III.2.b. Transformation du problème de la recherche du fondamental
III.3. Recherche d'une coupe minimum
III.4. Etude de la rigidité
III.4.a. Etude en terme de théorie des graphes
III.4.b. Application au champ aléatoire
III.5. Extension au modèle de Potts
III.6. Antiferromagnétique sous champ aléatoire
III.6.a. q = 2 modèle d'Ising
III.6.b. q > 2 modèle de Potts

IV - CONCLUSION

APPENDICE A : Algorithme pour le fondamental d'un verre de spins

APPENDICE B : Algorithme pour le fondamental du modèle de champ aléatoire

I - INTRODUCTION

Beaucoup de modèles de physique statistique cherchent à mettre en évidence des propriétés remarquables sur des systèmes les plus simples possibles. On est alors souvent amené à envisager des problèmes sur réseaux et où les variables ont un nombre fini d'états possibles. Le plus célèbre de ces modèles a été proposé par Ising en 1925 (Isi). Depuis de nombreux problèmes à spins d'Ising ont été résolus, ou étudiés abondamment. On peut citer les modèles de verre de spins (où les couplages entre spins sont de signe aléatoire), les modèles à vertex, le modèle de Potts (Bax), et les modèles purs ou frustrés sur des réseaux particuliers (fractals réguliers, amas de percolation,etc.).

La résolution d'un tel problème passe toujours par une bonne compréhension du comportement à $T = 0$, où seuls les états de moindre énergie sont probables. Pour certains modèles,par exemple le modèle d'Ising pur ou le modèle à interactions aléatoires à 1D, les états fondamentaux sont triviaux à trouver ; mais pour d'autres modèles, typiquement ceux comprenant désordre et frustration, les états de base peuvent être très difficiles à trouver, bien que le nombre d'états du système soit fini. Pour N objets (spins, atomes,...) à q états chacun , constituant le système, il s'agit de trouver parmi les q^N configurations C_i, ayant chacune une énergie $E(C_i)$, la (ou les) configuration(s) qui réalise(nt) le minimum des $E(C_i)$. Le nombre q^N devenant vite très grand, toute solution énumérative est intractable. Il reste cependant parfois des méthodes d'optimisation combinatoire qui peuvent être appliquées, comme il va être développé dans les paragraphes suivants. On peut noter ici que, réciproquement, des méthodes de mécanique statistique ont pu apporter en retour une aide pour aborder des problèmes d'optimisation combinatoire (Kir)(Pre).

Il est aussi naturel de se demander si la transformation en problème d'optimisation d'un problème de mécanique statistique n'a pas un sens plus profond. Plus précisément, on définit en optimisation combinatoire différents types de problèmes (Gar). Pour rester assez précis,

sans toutefois trop rentrer dans les détails, définissons un problème comme :

1° une instance : c'est-à-dire l'ensemble des données

2° une question dont la réponse sera "oui" ou "non".

Exemple : le problème du voyageur de commerce.

Instance :

. un ensemble C de m villes
. des distances $d(C_i, C_j) \in Z^+$ pour tout couple de villes
. un entier B.

Question :

Existe-t-il un tour de longueur totale au plus B ?
c'est-à-dire existe-t-il une permutation π telle que

$$\sum_{i=1}^{m} d(C_{\pi(i)}, C_{\pi(i+1)}) \leqslant B \ ? \ (\pi(n+1) \equiv \pi(n))$$

Il est clair que ce problème est équivalent au problème de trouver "la plus courte tournée". Pour des problèmes ainsi définis, on distingue plusieurs classes :

- la catégorie NP très générale des problèmes tels que le temps nécessaire pour vérifier par un ordinateur qu'une solution est bien optimale croît polynomialement avec la taille des données. Une définition plus rigoureuse nécessiterait l'introduction de la notion de machine de Turing, inutile ici.

- la catégorie P des problèmes NP tels que l'on connaît un algorithme pour les résoudre dont le nombre d'opérations croît comme une puissance de la taille des données. Ce sont des problèmes "faciles".

- la catégorie des problèmes NP-complets. Ce sont des problèmes NP dont on n'a pas su montrer qu'ils étaient P, mais dont on a su montrer que, s'ils étaient P, tous les autres problèmes de la catégorie NP (historiquement tous équivalents au problème de la satisfiabilité), le

seraient aussi. Ce sont des problèmes difficiles et il est très probable que $P \neq NP$.

Les travaux sur les modèles de frustration (voir section II) ont indiqué la possibilité d'une relation entre la complexité de l'espace des phases d'un système et la difficulté du problème d'optimisation combinatoire associé. Plus précisément, la question est la suivante (Ang(a)) : "Y a-t-il une relation entre l'existence, pour un système non trivial (c'est-à-dire avec frustration et désordre) d'une transition de phase à température non nulle et la complexité (appartenance à P ou à NP-complet) du problème d'optimisation associé ?". Les paragraphes suivants vont montrer que la réponse à cette question est négative.

II - LE PROBLEME DES VERRES DE SPINS ET LE PROBLEME DU COUPLAGE

II.1. Le problème des verres de spins.

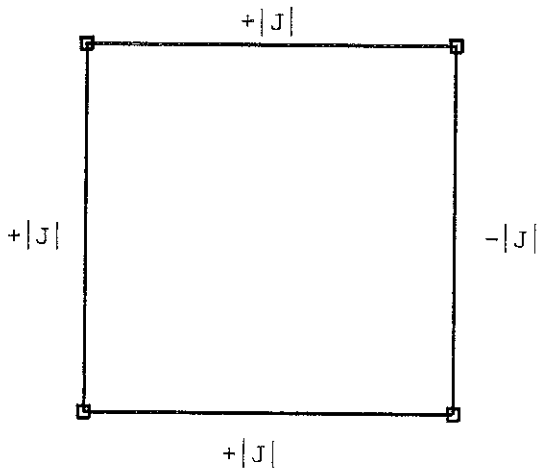
Le premier exemple d'utilisation de méthodes d'optimisation combinatoire dans le domaine de la mécanique statistique est le problème des verres de spins.

Les verres de spins sont des systèmes magnétiques caractérisés principalement par deux éléments : le désordre de la position des moments magnétiques et la frustration due au conflit des interactions entre spins (interaction RKKY). Un ordre conventionnel à longue distance (ferromagnétique, antiferromagnétique,...) ne peut avoir lieu. Cependant la susceptibilité présente un accident à une température T_c sans que la chaleur spécifique n' en présente (Ram). Le fait que ce phénomène se produise aussi bien dans des alliages dilués (CuMn, AuFe,...) que dans des alliages non métalliques ($Eu_xSr_{1-x}S$) ou des amorphes concentrés (Gd_xAl_{1-x}) justifie le modèle simple suivant (Edw) : les interactions sont à courte portée (1er voisin), ce sont des variables aléatoires indépendantes (gaussiennes ou binaires) : $\mathcal{H} = - \sum_{<i,j>} J_{ij}\sigma_i\sigma_j$, $\sigma_i = \pm 1$ $<i,j>$ est l'arête entre les sites i et j du réseau, où par exemple la distribution $P(J_{ij})$ a la forme binaire suivante :

$$P(J_{ij}) = (1 - x)\delta(J_{ij} - J) + x\delta(J_{ij} + J)$$

x est la concentration de liaisons antiferromagnétiques. Variant x de 0 à 1, on passe du ferromagnétisme (x = 0) à l'antiferromagnétisme (x = 1), au moins dans le cas des réseaux simples (cubique, carré).

Les états de base associés à $\mathcal{H}$, i.e. les configurations de spins $\{\sigma_i\}$ telles que $\mathcal{H}$ soit minimum ne sont, en général, pas simples à trouver. L'exemple ci-dessous :



montre que l'état de base n'est pas unique, et que dans un état de base certaines liaisons pourront ne pas être satisfaites (i.e. $J_{ij}\sigma_i\sigma_j > 0$). Pour un réseau assez grand, cette dégénérescence est à l'origine de la difficulté d'optimisation de $\mathcal{H}$.

II.2. Formulations du problème d'optimisation associé.

Les formulations du problème de la recherche du fondamental en terme d'optimisation peuvent être classées en deux catégories : (Bar(a)), (Bar(b)), (Bac), (Bie(a)), (Bie(b))

II.2.a. Cas général :

La première formulation nous apprend que dans sa généralité ce problème est NP-complet : il est très difficile (impossible ?) de trouver un algorithme polynomial de recherche du fondamental pour un réseau quelconque.

Pour le voir, rappelons la définition d'un cocycle(Gon) : soit un graphe $G = \{X,E\}$, étant donné un ensemble de sommets $S \subset X$, on appelle cocycle $\omega(s)$ l'ensemble des arêtes de E ayant une extrémité dans S et l'autre dans $\overline{S} \equiv E-S$. Si les arêtes portent des poids J_e, le poids du cocycle sera défini par

$$P\ [\omega(S)] = \sum_{e \in \omega(S)} J_e \ .$$

L'énergie d'une configuration $\{\sigma_i\}$ peut s'écrire

$$E(\{\sigma_i\}) = - \sum_{<i,j>} J_{ij}\sigma_i\sigma_j = - \sum_{<i,j>} J_{ij} + 2 \sum_{<i,j>/\sigma_i \neq \sigma_j} J_{ij} \qquad (1)$$

En effet, une liaison telle que $\sigma_i = \sigma_j$ ne sera comptée que dans la première somme et contribuera pour $- J_{ij}$, tandis qu'une liaison telle que $\sigma_i \neq \sigma_j$ sera comptée dans les deux sommes et contribuera pour $-J_{ij} + 2J_{ij} = J_{ij}$. Associons au réseau des spins un graphe dont les sommets sont les sites et les arêtes les liaisons. A une configuration de spins $\{\sigma_i\}$ on peut associer l'ensemble $U = \{i \in X | \sigma_i = +1\}$ des sites portant un spin +(up). Le terme $\sum_{<i,j>/\sigma_i \neq \sigma_j} J_{ij}$ de (1) est le poids du cocycle $\omega(U)$. Ainsi à chaque configuration de spins σ_i on peut associer un cocycle $\omega(U)$ et

$$E(\{\sigma_i\}) = - \sum_{<i,j>} J_{ij} + 2P [\ \omega\ (U)]$$

A un cocycle correspond deux configurations où tous les spins sont opposés (donc de même énergie).

Ainsi la recherche d'un fondamental se réduit à la recherche d'un cocycle de poids minimum dans le graphe associé. Or ce dernier problème est connu comme étant un problème NP-complet (Edm(a)), (Gar). Donc, dans le cas d'un graphe quelconque, la recherche du fondamental du système de spins défini par le modèle de frustration est NP-complet.

II.2.b. Cas du graphe planaire :

Lorsque l'on se restreint au cas d'un graphe planaire, le problème devient polynomial.

Notons d'abord que l'énergie que nous avions au paragraphe précédent écrite

$$- \sum_{<ij>} J_{ij} + 2 \sum_{\sigma_i \neq \sigma_j} J_{ij}$$

peut aussi s'exprimer

$$- \sum_{<i,j>} |J_{ij}| + 2 \sum_{J_{ij} \text{ violées}} |J_{ij}|$$

Cette remarque, pourtant triviale, est à la base de la preuve que le problème devient polynomial en 2 dimensions. Pour voir cela, rappelons que le problème P suivant est polynomial :

P $\begin{cases} \text{Etant donné un graphe } G = \{X,E\} \text{ dont les arêtes portent des} \\ \text{poids et une partie } I \subset X \text{ telle que } |I| \text{ soit pair, coupler deux à} \\ \text{deux les sommets de I par des chaînes d'arêtes de E, telles que} \\ \text{la somme des poids des arêtes soit minimale.} \end{cases}$

Ce résultat a été obtenu par Edmonds (Edm(a)) pour résoudre le problème du postier chinois. Dans ce problème, un postier doit effectuer une tournée dans une ville en parcourant toutes les rues, il cherche la tournée la plus courte. Si tous les carrefours sont constitués d'un nombre pair de rues, le graphe est eulerien et une plus courte tournée n'empruntera chaque rue qu'une seule fois (Eul). S'il y a des carrefours impairs, on rajoute des arêtes fictives, copies des arêtes qu'elles doublent, qui couplent entre eux et deux à deux les carrefours impairs, rendant ainsi le graphe eulérien. On cherche bien sûr à rajouter des copies dont la somme des poids soit minimum, car elles devront être parcourues pendant la tournée. On reconnaît aisément le problème P où l'ensemble I est constitué de l'ensemble des sommets impairs. On peut d'ailleurs facilement montrer qu'aucune rue ne sera parcourue plus de deux fois.

Le problème de la frustration peut être ramené au problème P de la manière suivante :

De notre graphe initial (réseau), choisissons une base de cycles qui ait la propriété π suivante : "toute arête du graphe appartient à au plus deux cycles de cette base". Une telle base existe puisque le graphe est planaire et c'est une propriété caractéristique non triviale des graphes planaires (Mac). Elle correspond à l'ensemble des contours des faces finies dans une représentation planaire.

Construisons alors un graphe associé (dual) de la manière suivante :

- A chaque cycle de la base choisie, vérifiant π correspond un sommet du graphe associé ; et on ajoute un sommet supplémentaire s (correspondant à la face infinie).

- A chaque arête du graphe initial :

  . si elle appartient à deux cycles, correspond une arête dans le graphe associé, de même poids, et qui joint les deux sommets correspondants aux deux cycles qui la contiennent ;

  . si elle appartient à un seul cycle, correspond une arête de même poids qui joint le sommet correspondant à ce cycle au sommet supplémentaire s.

Ainsi il y a correspondance bi-univoque entre les arêtes du graphe initial et celles du graphe associé. Minimiser l'énergie dans le problème de la frustration, revient donc à résoudre le problème P sur le graphe associé où l'ensemble I est pris comme l'ensemble des sommets correspondants à des cycles frustrés, c'est-à-dire contenant un nombre impair d'arêtes négatives. A toute arête du couplage optimum correspondra une arête violée dans le fondamental. En effet :

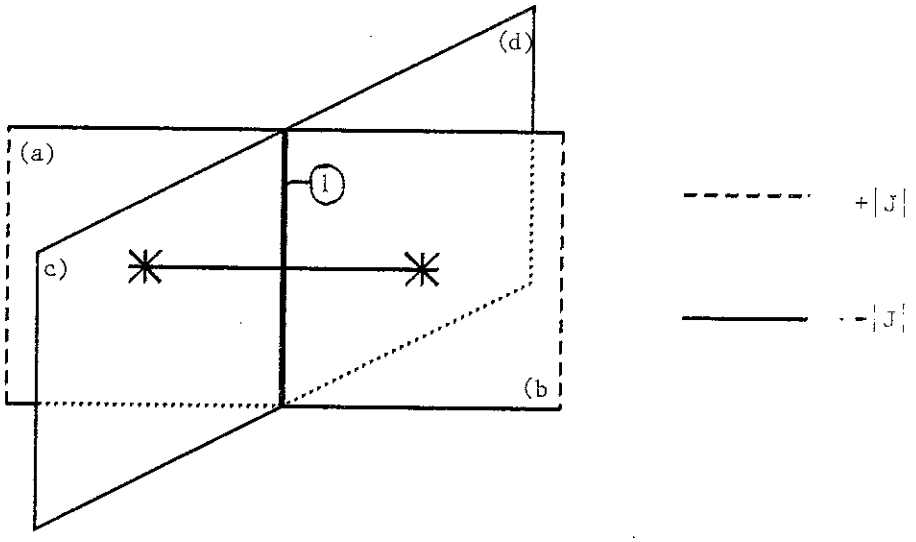
i) lorsque l'on réalise un couplage dans le graphe associé, on définit une configuration de spins (en fait 2 configurations conjuguées $\{\sigma_i\}$ et $\{-\sigma_i\}$) . En général à toute configuration de liaisons violées ne correspond pas une configuration de spins (variables non indépendantes) . Mais une condition nécessaire et suffisante pour qu'une configuration de liaisons violées soit admissible (c'est-à-dire corresponde à une configuration de spins) est que le nombre de liaisons retournantes (positives violées ou négatives satisfaites) de chaque cycle d'une base de cycles soit pair. Les liaisons violées définies par le couplage vérifient bien cette condition.

ii) L'état de chaque liaison (violée ou non) n'est défini qu'une fois car une arête appartient à deux cycles au plus.

iii) Le poids du couplage vaut la somme des poids des arêtes violées et est bien minimum.

Remarque 1 : Le graphe que l'on construit est le graphe dual et l'ensemble des cycles est l'ensemble des contours des faces (finies ou infinies). On retrouve le schéma du couplage des plaquettes frustrées proposé dans (Tou).

Remarque 2 : Le point ii) est primordial et explique bien pourquoi l'algorithme qui consisterait à coupler entre elles les plaquettes frustrées ne marche pas à 3d. Dans l'exemple de la figure ci-contre :



L'arête (1) appartient à 4 plaquettes et devrait être violée comme appartenant au couplage (1) où les plaquettes (a) et (b) sont couplées et à la fois satisfaite comme n'appartenant pas au couplage (2) de (c) et (d).

Cette remarque s'applique à tout graphe non planaire , tel que les modèles de frustration à longue portée (graphe complet). Mais ceci n'exclut pas la possibilité de trouver, pour une sous-classe de graphes autres que les graphes planaires un algorithme polynomial.

II.3. Résolution du problème P.

Le problème linéaire associé au problème P peut se formuler ainsi :

$$P \begin{cases} \min \sum_{e} |J_e| \, x_e \\ \sum_{e \in \omega(x^*)} x_e \quad \text{impair}, \ \forall x^* \text{ plaquette frustrée} \\ \sum_{e \in \omega(x^*)} x_e \quad \text{pair}, \ \forall x^* \text{ plaquette non frustrée} \\ x_e \in \{0,1\} \end{cases}$$

$x_e = 0$ signifie que l'arête est satisfaite, $x_e = 1$ signifie que l'arête e est violée, et plaquette frustrée signifie cycle élémentaire ayant un nombre impair de liaisons négatives.

Suivant la première démarche d'Edmonds (Edm(a)), on peut alors construire un graphe complet sur les plaquettes frustrées, où les arêtes portent comme poids la longueur d'une plus courte chaîne entre les sommets définissant cette arête. Il s'agit alors de trouver un couplage parfait dans ce graphe (Bie(a)). Mais ultérieurement, Edmonds et Johnson ont pu montrer que ce problème P peut ramener au problème suivant P' : (Edm(b))

$$P' \begin{cases} \text{Min} \sum_{e \in E} |J_e| \, x_e \\ \sum_{e \in \omega(S)} x_e \geqslant 1 \quad , \quad \text{pour tout } S \subset X \text{ tel que : } |S \cap I| \text{ impair} \\ x_e \geqslant 0 \end{cases}$$

dont le problème dual P'_d est

$$P'_d \begin{cases} \text{Max} \sum_{S \in Q} y_S \\ \sum y_S \leqslant |J_e| \ , \quad \forall\, e \in E \\ y_S \geqslant 0 \quad , \quad S \in Q \end{cases}$$

où $\qquad Q = \{S \text{ tel que } |S \cap I| \text{ impair}\}$

L'algorithme proposé dans (Bar(b)) maintient une solution réalisable x de P' ainsi qu'une solution y de P'_d vérifiant

$$\begin{cases} y_S \geqslant 0 & S \in Q \\ x_e > 0 \quad \Rightarrow & \sum_{S/e \in \omega(S)} y_S = |J_e| \\ y_S > 0 \quad \Rightarrow & \sum_{e \in \omega(S)} x_e = 1 \end{cases}$$

L'algorithme de (Bar(b)) modifie x et y jusqu'à ce que y devienne réalisable.

Remarque 1 : En pratique, les deux algorithmes utilisés sont en fait les deux algorithmes d'Edmonds passés de "dual" à "primal", de façon à avoir toujours une configuration de spins ((Bie(a))(Bar(b)). Le premier algorithme, en réduisant le réseau un graphe complet des plaquettes frustrées, perd les détails du couplage, à la différence du deuxième algorithme.

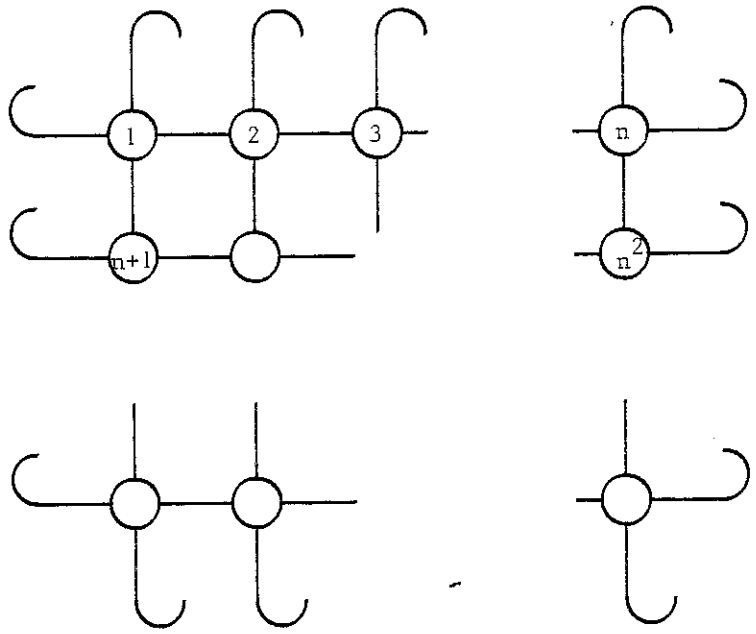
Remarque 2 : Un algorithme post-optimal (Bar(b)) permet aussi de trouver les liaisons qui sont violées dans tous les fondamentaux ou qui ne le sont dans aucun : ce sont les liaisons rigides, et celles dont l'état (violée ou non) varie selon les fondamentaux (liaisons non rigides).

Remarque 3 : Les conditions de bord choisies sont particulières et bien adaptées à l'étude de l'existence d'une paroi magnétique dans un échantillon $\{J_{ij}\}$ donné. L'idée initiale serait de représenter le réseau sur le tore. Mais un tel graphe n'est pas planaire et l'algorithme d'Edmonds ne peut plus être utilisé a priori. Sur un tel graphe ayant n x n sommets,

une base de cycle aura, d'après la relation d'Euler, $2n^2 - n^2 + 1 = n^2 + 1$ cycles, on peut prendre comme base les n^2 plaquettes élémentaires et le cycle $(1,2,\ldots, n)$ des n sommets de la première ligne. Si on enlève par exemple ce dernier cycle, l'ensemble des cycles restant vérifie bien la propriété π et l'on pourra continuer à utiliser l'algorithme d'Edmonds. L'interprétation des résultats se fait alors de la manière suivante :

- si le cycle enlevé n'est pas violé : on obtient bien une configuration de spins et on peut paver le plan infini avec la grille obtenue, les "bords" se raccordent correctement.

- si le cycle enlevé est violé : alors les spins des sites 1 à n sont "doublement valués" (voir figure ci-après). Selon qu'ils sont vus par leurs voisins des sites $\{n+1, n+2, \ldots, 2n\}$ ou par leurs voisins des sites $\{n^2 - n+1, n^2 - n+2, \ldots, n^2\}$ ils voudront une valeur ou son opposée. Le pavage du plan se fera donc alternativement avec les deux choix possibles.



G	G	G	G
G	G	G	G
G	G	G	G
G	G	G	G

Le cycle n'est pas violé

G	G	G	G
$\overline{G}$	$\overline{G}$	$\overline{G}$	$\overline{G}$
G	G	G	G
$\overline{G}$	$\overline{G}$	$\overline{G}$	$\overline{G}$

Le cycle est violé $(\sigma_{ij}(\overline{G}) = -\sigma_{ij}(G))$

II.4. Ligne T = 0 du diagramme de phases : anti-phasesaléatoires.

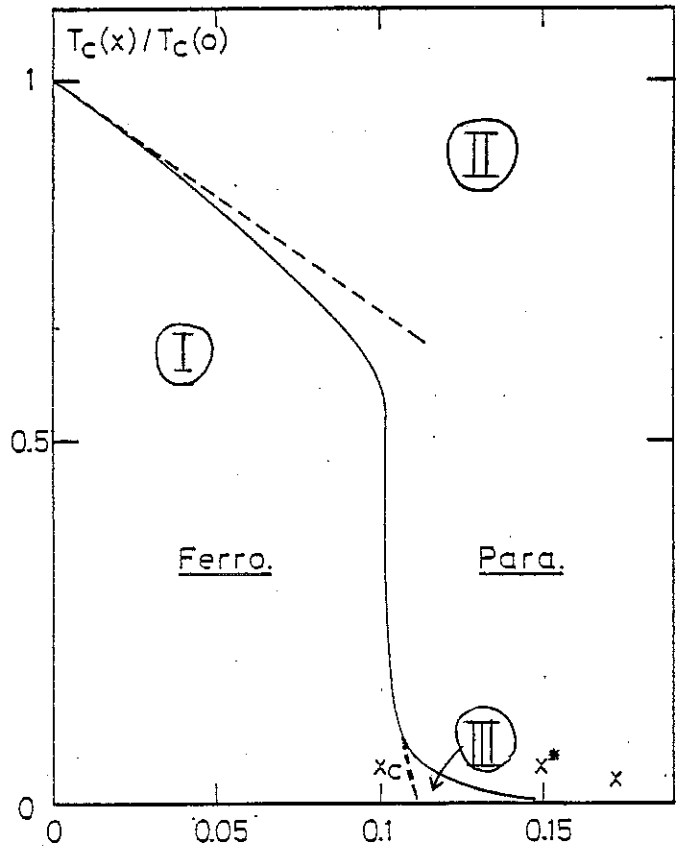
Les publications sur le problème des verres de spins sont très nombreuses, voir l'article de Revue (Ram) autant que les questions théoriques, expérimentales ou numériques non encore résolues. La méthode proposée au paragraphe précédent est la seule, à notre connaissance, qui permette d'avoir des résultats sur le système à température nulle. Il est très intéressant de comparer les résultats qu'elle donne avec les extrapolations $T \to 0$ des autres méthodes (Monte-Carlo, Matrice de transfert,...).

Cette méthode est adaptée pour l'étude des modèles de frustration à 2D et ceci pour toutes les lois $P(\{J_{ij}\})$.Le calcul de la rigidité des états de base nous contraint à limiter l'étude pratique au modèle $\pm J$. En effet, pour une distribution $P(\{J_{ij}\})$ continue, il n'y a que deux fondamentaux, les nombreuses excitations de très basse énergie reflète alors la dégénérescence du cas $P(J_{ij}) = \pm J$. Les résultats de l'étude numérique présenté dans (Ang(b)) ci-joint se rapportent à

$$\mathcal{H} = - \sum_{<i,j>} J_{ij}\sigma_i\sigma_j \qquad \sigma_i = \pm 1$$

où $$P(J_{ij}) = x\,\delta(J + J_{ij}) + (1 - x)\delta(J - J_{ij})$$

x représente la concentration en liaisons négatives (x = 0 : cas pur). Sur un réseau carré simple, le diagramme de phase d'un tel système, déterminé par une méthode de renormalisation dans l'espace direct et indépendamment par la méthode énoncée précédemment, a été proposé dans (May), (Bie(b)), (Bar(c)).



Pour commenter ce diagramme de phase, il convient d'introduire deux types de lignes de défaut :

- les contours d'énergie nulle (Van) (Bra), faits d'autant de liaisons violées que de liaisons satisfaites (appelées aussi "ligne de fracture" (Bar(c)) (May) et "boucle non triviale" (Mor)), correspondant à des excitations d'énergie nulle ;

- les parois magnétiques faites de liaisons positives violées ou négatives non violées : elles séparent des domaines d'orientations opposées.

Les trois phases du diagramme sont les suivantes :

Phase ferromagnétique I : il n'y a pas de contour d'énergie nulle, ni de paroi traversant l'échantillon (percolante). Cette phase est donc caractérisée par un fond de spins rigides de même orientation avec une faible fraction de spins orientés dans la direction opposée : l'échantillon est rigide et l'aimantation macroscopique est non nulle.

Phase paramagnétique II : prolifération des contours d'énergie nulle définissant des amas libres de spins solidaires entre eux : il n'y a ni rigidité ni aimantation résultante.

Phase "anti-phase aléatoire" III : dans cette phase, bien qu'il n'y ait pas de contour d'énergie nulle percolant, il y a des parois séparant des domaines macroscopiques d'aimantations opposées : il y a rigidité, mais pas d'aimantation résultante.

L'existence de cette troisième phase n'est pas admise par tous les auteurs (Mor). Notons qu'elle n'apparaît qu'à des températures si basses qu'elle est difficile à mettre en évidence avec des techniques telles que la simulation ou les matrices de transfert. Par contre, la méthode du couplage est particulièrement bien adaptée à l'étude de cette région et en particulier pour :

- trouver les contours d'énergie nulle : par l'utilisation de la méthode post-optimale ;

- trouver les parois magnétiques : choix libre par l'algorithme des conditions de bords.

Les résultats numériques, voir l'article joint (Ang(b)), ont confirmé l'existence d'anti-phase aléatoire. Toutefois, si l'utilisation d'un CRAYI pendant plusieurs heures nous a permis d'étudier une famille d'échantillons (20) de 50 x 50 spins, les deux objections suivantes peuvent être faites :

- une taille beaucoup plus grande (? x ?) montrerait peut-être que les lignes de fractures encerclent les parois magnétiques, auquel cas la phase AFA serait en effet de taille finie ;

- la taille étudiée : 50 x 50 n'est pas assez grande pour justifier l'absence de moyenne sur le désordre (différentes réalisations des J_{ij}).

En conclusion, les résultats numériques obtenus constituent de sérieuses indications qu'il existe à 2D une phase "anti-phase

aléatoire", sorte de trace à 2D de la phase "verre de spins" à 3D. Ce résultat est confirmé, par des méthodes exactes (Geo), d'analyse de la topologie du diagramme de phase (x,T). Cette question est toujours contreversée aujourd'hui, et elle n'a pas encore de réponse tranchée.

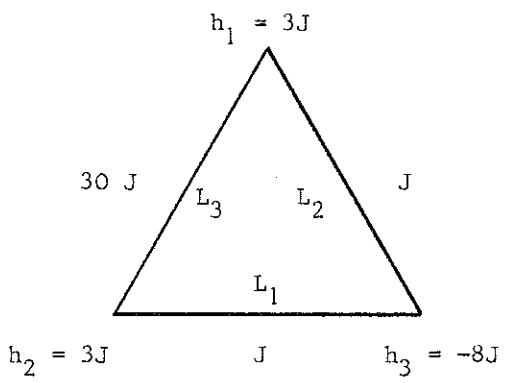
III - LE MODELE DU CHAMP ALEATOIRE

III.1. Le modèle.

Un chapitre complet (chap.III) porte sur l'étude des résultats que l'on a obtenus pour ce modèle, utilisant en partie la méthode exposée dans cette section. L'objet des sections suivantes est l'étude de la complexité de ce modèle. Rappelons très brièvement qu'il s'agit de spins d'Ising $\{\sigma_i\}$ couplés avec $J_{ij} = J$ uniforme et soumis à un champ aléatoire externe $\{h_i\}$:

$$\mathcal{H} = - \sum_{<i,j>} J\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i \quad , \quad \sigma_i = \pm 1 \quad , J > 0$$

Les h_i sont indépendants et de même loi. Le désordre est ici représenté par les h_i. L'exemple ci-dessous prouve qu'il y a dans ce système une compétition entre l'interaction d'échange J_{ij} et les champs h_i vus par les spins.



Le spin du site 3 devra satisfaire L_1 et L_2 et violer h_3, ou satisfaire h_3 et violer L_1 et L_2.

III.2. La recherche des états de base.

Le problème de la recherche du fondamental du modèle du paragraphe précédent peut être transformé en un problème classique d'optimisation combinatoire : la recherche d'une coupe minimum (Ang(a)),(Bar(d)), ce dernier problème étant soluble par un algorithme puissant dû à Ford et Fulkerson (F & F). Donc le problème de la recherche d'un état de base est en principe un problème facile.

III.2.a. Rappel de quelques notions de théorie des graphes (Gon) :

Un graphe $G = (V,E)$ est un couple où V est un ensemble : l'ensemble des sommets et E est une partie de $V \times V$, c'est l'ensemble des arcs $e = (x,y)$, x est l'extrémité initiale, y est l'extrémité finale. Si l'arc (x,y) n'est pas orienté, c'est une arête notée $\{x,y\}$. Une arête $\{x,y\}$ est équivalente à 2 arcs (x,y) et (y,x) (dans notre cas, nous aurons principalement à considérer des arêtes).

Soit $A \subset V$; $\omega^+(A)$ (resp. $\omega^-(A)$) est l'ensemble des arcs ayant leur extrémité initiale (resp. finale) dans A et leur extrémité finale (resp. initiale) dans $V-A$.

Une coupe séparant 2 sommets distincts a et b est un ensemble d'arcs de la forme $\omega^+(A)$ où $a \in A$ et $b \notin A$.

On définit une fonction C de E dans $\mathbb{R}^+$, $C(e)$ est la capacité de l'arête e. On appelle capacité C de la coupe la somme des capacités de ses arcs :

$$C(\omega^+(A)) = \sum_{e \in \omega^+(A)} C(e)$$

Quant aux spins, ils sont sur les sites d'un réseau. Ces sites sont reliés par des liaisons, chaque site porte aussi un champ local aléatoire, mais fixe.

III.2.b. Transformation du problème de la recherche du fondamental :

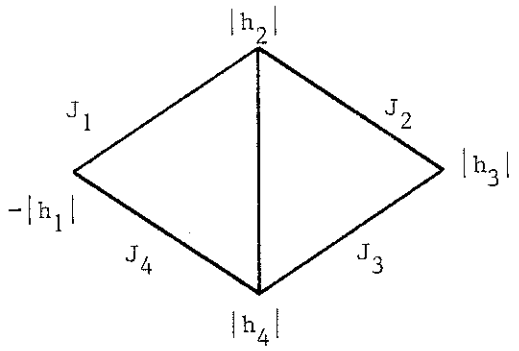
Au réseau de spins, nous allons associer un graphe de la manière suivante :

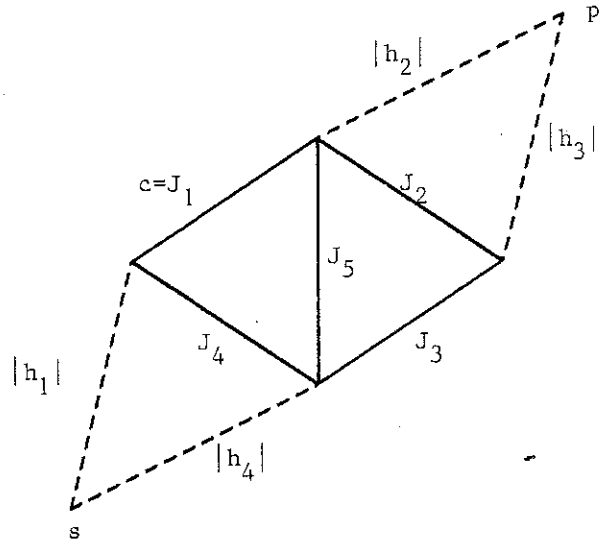
- à chaque site du réseau est associé un sommet du graphe ;

- à chaque liaison du réseau est associée une arête du graphe ayant pour capacité la valeur de la liaison ;

- on adjoint un premier sommet supplémentaire, noté s, correspondant à un premier "super-spin" fictif ; ce premier sommet est relié à tous les sommets correspondant à des sites portant un champ négatif. La capacité de l'arête est la valeur absolue du champ local dudit site ;

- on adjoint un second sommet supplémentaire, noté p, correspondant à un deuxième "super-spin" fictif ; ce deuxième sommet est relié à tous les sommets correspondant à des sites portant un champ positif.





Remarque: une arête qui relie deux sommets s_1 et s_2 est équivalente à deux arcs (s_1, s_2) et (s_2, s_1) . On ne considère dans ce problème que des arêtes.

Soit maintenant une configuration quelconque Γ de spins : c'est une partition de l'ensemble des sites en deux ensembles D et U, où D est l'ensemble des sites portant un spin "down" et U l'ensemble des sites portant un spin "up". A cette partition de l'ensemble des spins correspond une partition de l'ensemble des sommets en 2 ensembles S et P où S est l'ensemble des sommets associés aux sites de D plus le sommet s, et où P est l'ensemble des sommets associés aux sites U plus le sommet p. On définit donc sur le graphe une coupe γ séparant s de p. Si on appelle $E(\Gamma)$ l'énergie de la configuration Γ et γ la coupe associée alors :

$$E(\Gamma) = - E^{*} + 2C(\gamma)$$

où $$E^{*} = \sum_{i} |h_i| + \sum_{ij} J_{ij}$$

En effet :

1) Soit une liaison associée à une arête de la coupe :

- ou bien elle relie s à un sommet de U différent de p ce qui correspond à un spin up sur un site où le champ est négatif : le champ est violé et sa contribution à l'énergie vaut $- h_i$, c'est-à-dire la capacité de l'arête ;

- ou bien elle relie un sommet de D différent de s à p, ce qui correspond à un spin down sur un site où le champ est positif : le champ est violé et sa contribution à l'énergie vaut $+h_i$, c'est-à-dire la capacité de l'arête ;

- ou bien elle relie un sommet de D différent de s à un sommet de U différent de p ce qui correspond à une liaison ferromagnétique entre un spin up et un spin down : la liaison est violée et sa contribution à l'énergie vaut J_{ij}, c'est-à-dire la capacité de l'arête.

Dans tous les cas la liaison ou le champ associé est violé et sa contribution à l'énergie vaut la capacité de l'arête.

2) Soit une arête hors coupe :

- ou bien elle relie deux sommets de D ce qui correspond soit à une liaison ferromagnétique entre deux spins down, soit à un champ local négatif appliqué à un spin down. Il n'y a pas de violation et la contribution à l'énergie vaut la capacité de l'arête ;

- ou bien elle relie deux sommets de U, ce qui correspond soit à une liaison ferromagnétique entre deux spins up, soit à un champ local positif appliqué à un spin up. Dans tous les cas, la liaison ou le champ n'est pas violé et la contribution à l'énergie vaut:- la capacité de l'arête. On en déduit aisément :

$$E = - E^{*} + 2C(\gamma)$$

La recherche du fondamental revient donc à la recherche d'une coupe minimum séparant s de p. Tous les spins sur un site associé à un sommet de S seront down, tous les autres seront up. Remarquons que si l'on énumère toutes les coupes minimums on énumère ainsi tous les fondamentaux.

III.3. Recherche d'une coupe minimum.

Il s'agit d'un problème très classique en Optimisation Combinatoire. La méthode consiste à transformer ce problème de recherche de coupe minimum en un problème de flot maximum. Ce dernier problème étant soluble par un algorithme efficace (F & F). Ainsi le problème initial de la recherche du fondamental est d'abord transformé en un problème de recherche de coupe minimum, qui lui-même est transformé en un problème de flot maximum.

Problème du flot maximum :

1) Etant donné un graphe dont les arcs sont numérotés de 1 à m, on appelle flot sur ce graphe un vecteur $\varphi = (\varphi_1, \ldots, \varphi_m) \in \mathbb{R}^{+m}$ vérifiant

$$\sum_{i \in \omega^-(x)} \varphi_i = \sum_{i \in \omega^+(x)} \varphi_i \quad , \quad \forall x \in V$$

Cette égalité traduit une conservation du flux à chaque sommet (loi de Kirch'hoff) ; on interprète φ_i comme le flux sur l'arc i.

2) Si chaque arc i porte une capacité c_i, on dit que le flot est <u>compatible</u> avec ces capacités si

$$0 \leqslant \varphi_i \leqslant c_i \qquad , 1 \leqslant i \leqslant m$$

3) Etant donné un graphe dont les arcs portent des capacités, le problème du flot maximum consiste à trouver un flot compatible qui maximise la valeur du flot sur un arc donné.

<u>Remarque 1</u> : Ce problème peut être défini de manière plus générale en imposant des valeurs minimum du flot sur chaque arc. Ce n'est pas utile ici.

<u>Remarque 2</u> : Si l'on a un flot compatible $\varphi = (\varphi_1, \ldots, \varphi_m)$ avec des capacités $c = (c_1, \ldots, c_m)$, $\alpha\varphi = (\alpha\varphi_1, \ldots \alpha\varphi_m)$ sera aussi un flot : il sera compatible avec $\alpha c = (\alpha c_1, \ldots, \alpha c_m)$. Supposons que $c_i \in Q$, $1 \leqslant i \leqslant m$, $c_i = p_i/q_i$, en choisissant $\alpha = \text{ppcm}\ (q_i)$ on se ramène à des capacités entières. On supposera dorénavant que l'on est toujours dans ce cas, c'est-à-dire que les capacités sont entières.

Reprenons le problème de la coupe minimum séparant s de p, ajoutons au graphe un arc fictif (p,s) de capacité infinie :

<u>Théorème</u> (F & F) : La valeur du flot maximum sur l'arc (p,s) est égale à la valeur de la coupe minimum séparant s de p.

<u>Preuve</u> :

a) Soit un flot quelconque de valeur f et une coupe quelconque de valeur C, c'est-à-dire une partition de l'ensemble des sommets en $S \ni s$ et $P \ni p$. Tout le flot quittant s pour p devra passer de S à P donc emprunter les arcs de la coupe, donc $f \leqslant C$. Tout flot est inférieur

ou égal à toute coupe.

b) La suite de la démonstration est constructive et donne aussi l'algorithme de recherche du flot. Partons d'un flot compatible, par exemple le flot nul, et définissons la règle de marquage suivante :

- s est toujours marquable ;

- $y \in V$ est marquable s'il existe $x \in V$ déjà marqué et un arc (x,y) telle que $\varphi(x,y) < c(x,y)$;

- $y \in V$ est marquable s'il existe $x \in V$ déjà marqué et un arc (y,x) telle que $0 < \varphi(y,x)$.

L'algorithme est le suivant :

1. Marquer s.

2. Marquer tous les sommets marquables.

3. Si p n'est pas marqué : terminer.

4. Si p est marqué: on a trouvé un chemin de s à p ne passant que par des sommets marqués, donc n'empruntant que des arcs non saturés dans le sens positif ou des arcs à flots non nuls dans le sens négatif. Modifier les flots sur ce chemin de manière à le saturer. Retourner à 1.

A chaque pas de l'algorithme, le flot augmente (en restant compatible), il s'arrêtera donc forcément. Soit S l'ensemble des sommets marqués en 3 et P l'ensemble des sommets non marqués. On a $s \in S$, $p \in P$ $S \cup P = V$ et $S \cap P = \emptyset$, on définit donc une coupe sur G. Tous les arcs qui sortent de S sont saturés, tous ceux qui y entrent portent un flot nul. Donc le flot sur l'arc (p,s), c'est-à-dire qui va de s à p est égal à la somme des capacités des arcs de S vers P, qui est la capacité de la coupe : on a trouvé une coupe et un flot égal, ils sont donc optimaux tous les deux (cf § a.). c.q.f.d.

Remarque 1 : Le problème du flot maximum peut être considéré comme un problème de programmation linéaire et le problème de la coupe minimum est alors son dual.

Remarque 2 : Les graphes que nous considérons sont toujours très particuliers : chaque sommet est relié soit à la source, soit au puits. Donc le flot final sera long (au sens du nombre de pas de l'algorithme) à trouver, presque chaque arc portant du flot dans la solution optimale. Il sera alors nécessaire, mais facile, de partir d'un flot initial non nul.

Remarque 3 : Un flot compatible pour un graphe G et ses capacités $\{c_i\}$ reste compatible pour le même graphe G et des capacités $\{c'_i\}$ telles que $c_i \leqslant c'_i$, $1 \leqslant i \leqslant m$. Cette remarque est d'un grand intérêt pratique, puisque nous serons amenés à étudier le comportement d'un système lorsque l'on augmente H (en fait $\sqrt{\overline{H^2} - \overline{H}^2}/J$). Ainsi on constituera des familles : après avoir trouvé le flot optimal sur un graphe G, on augmentera de manière ad-hoc les capacités des arcs correspondant à des champs et on prendra comme flot initial du nouveau problème le flot final de l'ancien.

III.4. Etude de la rigidité.

Le réseau de départ est donc transformé en un graphe $G = \{V,E\}$ et une fonction c de E dans $\mathbb{R}^+$. Une arête e de E est soit issue d'une liaison J (intégrale d'échange entre deux spins) dans ce cas $c(e) = J$, soit d'un champ local h_i, dans ce cas $c(e) = |h_i|$. Il est possible par un calcul simple de déterminer si une arête est dans toutes les coupes, si elle n'est dans aucune coupe ou si elle appartient à certaines coupes optimales sans appartenir aux autres. On va donc pouvoir déterminer

- des spins rigides : ce sont des spins dans le même état dans tous les fondamentaux. En effet, si on montre qu'une arête associée à un champ local est dans toutes (resp. aucune) coupes, alors on en déduira que le spin correspondant n'est jamais (resp. toujours) aligné sur le champ local qu'il voit.

- des liaisons rigides : ce sont des liaisons dans le même état (violées ou satisfaites) dans tous les fondamentaux. En effet, de même si une arête associée à une liaison n'est dans aucune (resp. toutes les) coupe(s) alors la liaison correspondante (ne) sera jamais (resp. toujours) violée.

III.4.a. Etude en termes de théorie des graphes :

Soit les notations :

Problème P :

Etant donné un graphe $G = \{V,E\}$ et une fonction $c : E \to \mathbb{R}^+$ définissant des capacités, trouver une coupe minimum de G séparant s et p (sommet source et sommet puits). On note v^* la valeur de cette coupe (c'est aussi la valeur du flot maximum entre p et s).

Problème $P(a,\varepsilon)$:

Pour le même graphe G et pour la fonction $c_a^\varepsilon : E \to \mathbb{R}^+$ défini par :

$$\forall (e \neq a) \in E \quad , \quad c_a^\varepsilon(e) = c(e) \qquad ; \; c_a^\varepsilon(a) = c(a) + \varepsilon$$

trouver une coupe minimum séparant s et p. On notera $v^*(a,\varepsilon)$ la capacité de cette coupe ($\varepsilon \in \mathbb{R}$ peut être positif ou négatif).

$A \subset E$ est l'ensemble des arêtes n'appartenant à aucune coupe optimale.

$T \subset E$ est l'ensemble des arêtes appartenant à toutes les coupes optimales.

$C \subset E$ est l'ensemble complémentaire de $A \cup T$. On a donc $A \cup T \cup C = E$ $(A \cup T) \cap C = \phi$. On définit de plus, K étant une coupe :

$$C(K) = \sum_{e \in K} c(e) \quad \text{et} \quad C_a^\varepsilon(K) = \sum_{e \in K} c_a^\varepsilon(e)$$

Il est évident que l'on a les 4 propriétés suivantes :

$\forall K \qquad C_a^{-|\varepsilon|}(K) \leqslant C(K) \leqslant C_a^{+|\varepsilon|}(K) \qquad [P1]$

$v^*(a,-|\varepsilon|) \leqslant v^* \leqslant v^*(a,+|\varepsilon|) \quad [P2]$

$a \notin K \Rightarrow C_a^{-|\varepsilon|}(K) = C_a^{+|\varepsilon|}(K) = C(K) \qquad [P3]$

$a \in K \Rightarrow C_a^{-|\varepsilon|}(K)+|\varepsilon| = C_a^{+|\varepsilon|}(K)-|\varepsilon| = C(K) \quad [P4]$

<u>Théorème</u> (Ang(a)) : avec les notations précédentes, et en posant :

$$\alpha = \min_{\{K/C(K) \neq v^*\}} \{C(K) - v^*\}$$

On a :

1°) $\forall \varepsilon > 0 \quad , \quad a \in T \Leftrightarrow v^* < v^*(a,+\varepsilon)$

2°) $\forall \varepsilon \; 0 < \varepsilon \leqslant \alpha, \; a \in A \Leftrightarrow v^* = v^*(a,-\varepsilon)$

<u>Preuve</u> : Démontrons la contraposée de 1°) plutôt que 1°) :

$$v^* = v^*(a,+\varepsilon) \Leftrightarrow a \notin T .$$

a) Supposons $v^* = v^*(a,+\varepsilon)$ et soit $K/C_a^+(K) = v^*(a,+\varepsilon)$. a ne peut appartenir à K sinon on aurait $C(K) = C_a^{+\varepsilon}(K) - \varepsilon$ [P4] d'où l'on déduirait $v^* < v^*(a,+\varepsilon)$ contraire à l'hypothèse. On a donc une coupe optimale K de $P(a,+\varepsilon)$ à laquelle a n'appartient pas. Mais $C(K) = C_a^{\varepsilon}(K)$ [P3] donc K est aussi optimale pour P, ainsi $a \notin T$.

b) Si $a \notin T$, il existe une coupe K telle que $a \notin K$ et $C(K) = v^*$, donc $C_a^{+\varepsilon}(K) = C(K) = v^*$ (d'après [P3] ce qui rapproché de [P1] et [P2] conduit à $v^*(a,+\varepsilon) = v^*$.

Démontrons maintenant 2°) :

c) Si $v^*(a,-\varepsilon) = v^*$. Raisonnons par l'absurde et supposons qu'il existe K telle que $a \in K$ et $C(K) = v^*$. On aurait (d'après [P4]) $C_a^{-\varepsilon}(K) = C(K) - \varepsilon = v^* - \varepsilon$ or $v^*(a,-\varepsilon) \leqslant C_a^{-\varepsilon}(K)$, donc $v^*(a,-\varepsilon) \leqslant v^* - \varepsilon < v^*$ en contradiction avec l'hypothèse. Donc $\forall K/C(K) = v^* \Rightarrow a \notin K$ et finalement $a \in A$.

d) Si $a \in A$. Soit K une coupe, il y a deux possibilités

. K est minimale pour P, dans ce cas $a \notin K$ donc

$$C_a^{-\varepsilon}(K) = v^* \text{ (d'après [P3])}$$

. K n'est pas minimale donc $C(K) \geqslant v^* + \alpha$ par définition de α d'où $C_a^{-\varepsilon}(K) \geqslant C(K) - \varepsilon \geqslant v^* + \alpha - \varepsilon \geqslant v^*$ (car $\varepsilon \leqslant \alpha$) et donc $C_a^{-\varepsilon}(K) \geqslant v^*$.

Donc, pour toute coupe K, $C_a^{-\varepsilon}(K) \geqslant v^*$, donc $v^*(a,-\varepsilon) \geqslant v^*$ qui rapproché de [P2] donne $v^*(a,-\varepsilon) = v^*$. Le théorème est ainsi démontré.

<u>Conséquence 1</u> : Si une arête n'est pas saturée dans un flot optimal, elle n'est dans aucune coupe. Il suffit d'appliquer le théorème avec $\varepsilon = -f(a) + c(a)$ où $f(a)$ est le flot sur l'arête a.

<u>Conséquence 2</u> : Comment décider si une arête est rigide ? Après avoir trouvé un flot maximum du problème P et donc une coupe minimum, on décide de l'état de l'arête a par les règles suivantes :

- si a n'est pas saturée alors <u>$a \in A$</u> ;

- si a est saturée et est dans la coupe trouvée, on augmente sa capacité de 1 :
  . si la valeur de l'optimum est la même alors <u>$a \in C$</u> ;
  . si la valeur de l'optimum est différente alors <u>$a \in T$</u> ;

- si a est saturée et hors de la coupe trouvée, on diminue sa capacité de 1 (toutes les capacités J et h_i sont choisies entières) :
  . si la valeur de l'optimum est la même, alors <u>$a \in A$</u> ;
  . si la valeur de l'optimum est différente, alors <u>$a \in C$.</u>

<u>Remarque</u> : On a déjà noté qu'une énumération de toutes les coupes énumérait tous les fondamentaux, cependant en énumérant tous les flots maximums, on n'énumère pas toutes les coupes optimales ni donc tous les fondamentaux. Notre algorithme ne peut donc trouver tous les fondamentaux. Cependant la méthode présentée ci-dessus détermine des propriétés communes à absolument tous les fondamentaux !

III.4.b. Application au champ aléatoire :

Le nombre α du paragraphe précédent a une interprétation très simple : c'est la différence d'énergie entre le premier état excité et le fondamental. Cependant en se limitant au cas $J/h_i \in Q$ (ce qui est une contrainte obligatoire en utilisant un ordinateur !), on peut prendre J et h_i entiers. On choisira alors $\varepsilon = 1$, et après avoir trouvé un fondamental, on appliquera pour toutes les liaisons et tous les champs locaux, les règles suivantes. Si une liaison est associée à une arête

- appartenant à C : cette liaison est non rigide

- appartenant à A : cette liaison est toujours satisfaite

- appartenant à T : cette liaison est toujours violée.

Si un champ local est associé à une arête

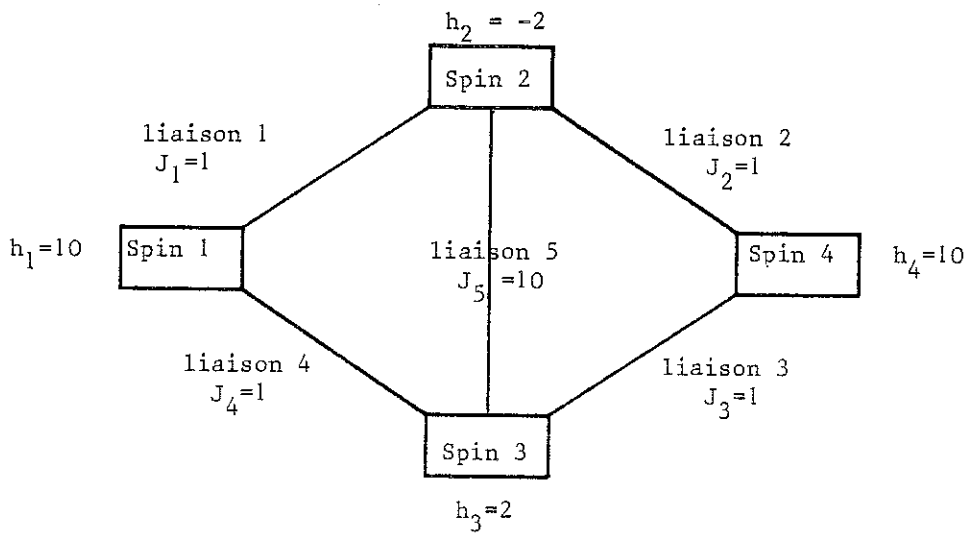
- appartenant à C : le spin correspondant est parfois up, parfois down

- appartenant à A : le spin correspondant est aligné sur le champ qu'il voit

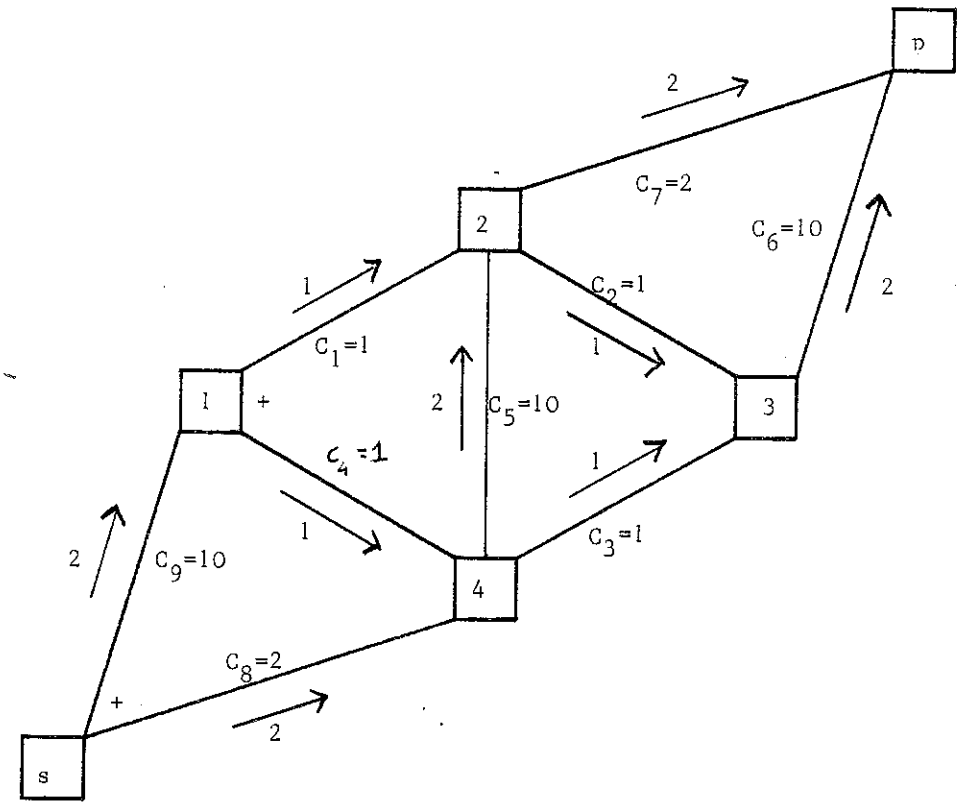
- appartenant à T : le spin correspondant est à l'inverse du champ qu'il voit.

Exemple illustratif

Au réseau de spins suivant :



On associe le graphe suivant :



Seul le site (1) est marqué. Il sera donc le seul spin valant "-1", les spins (2) (3) et (4) valant "+1".

Un flot optimal figure sous la forme $\overset{f_i}{\rightarrow}$. La coupe correspondante est constituée des arêtes 1, 4 et 8. Les arêtes 9, 5 et 6 ne sont pas saturées : $\{9,5,6\} \in A^3$, donc le spin (1) est <u>toujours</u> down et le spin (3) toujours up et les spins (2) et (4) toujours parallèles.

Les arêtes 1, 2, 3, 4, 7 et 8 sont saturées. En augmentant la capacité de l'arête 1 jusqu'à la valeur 2, le flot optimum reste à 2, donc $1 \in C$. Finalement les spins (2) et (4) peuvent être tous les deux up ou tous les deux down.

III.5. Extension au modèle de Potts

On peut étendre le modèle étudié ici au cas où les spins sont des variables à q états (modèle de Potts) (Bax). L'hamiltonien considéré sera

$$\mathcal{H} = - \sum_{<i,j>} J(q\delta_{\sigma_i\sigma_j} - 1) - \sum_i H(q\delta_{\varepsilon_i\sigma_i} - 1)$$

où $\sigma_i \in \{1,2,\ldots,q\}$. Le désordre est introduit ici par les ε_i indépendants tels que $P(\varepsilon_i = k) = \frac{1}{q}$, $1 \leqslant k \leqslant q$. Si $q = 2$, on retrouve le modèle précédent. Pour trouver les fondamentaux d'un tel système, il convient d'introduire les q-coupes :

Etant donné un graphe $G = \{X,E\}$ dont les arêtes portent des poids J_e et q sommets $s_1, \ldots, s_q$ on appelle <u>q-coupe</u> séparant $s_1, s_2, \ldots$ et s_q une partition des sommets en q sous-ensembles $S_1, \ldots, S_q$ deux à deux disjoints et tels que $s_i \in S_i$, $1 \leqslant i \leqslant q$ à q. Le <u>poids</u> d'une q-coupe sera la somme des poids des arêtes ayant leurs extrémités dans des sous-ensembles différents.

Nous pouvons maintenant utiliser la même construction que pour le cas précédent. A partir du réseau de spins, on construit un graphe en adjoignant q sommets $S_1, \ldots, S_q$. Chaque S_i est relié par une arête de poids H à tous les sommets affectés de ε_i ; les autres arêtes portent un poids J. A toute configuration de spins d'énergie E, il correspond

une q-coupe séparant s_1, s_2, ... et s_q de valeur ϕ avec

$$E = (q-1)\ (mJ + nH) + q\phi$$

m = nombre d'arêtes
n = nombre de sommets.

La recherche d'une configuration d'énergie minimum se ramène donc à la recherche d'une q-coupe de poids minimum. La complexité de ce dernier problème n'est pas connue.

III.6. Antiferromagnétique sous champs aléatoires.

Le modèle précédent peut aussi être envisagé avec $J_{ij} < 0$ c'est un antiferromagnétique sous champ. Trouver un fondamental revient alors à trouver une configuration d'énergie maximum du cas ferromagnétique, en inversant le signe de tous les h_i (Ang(a)). On peut discuter la complexité du problème de l'état d'énergie maximum (pour un ferromagnétique) donc d'une coupe maximum.

Montrons pour cela la proposition P1 suivante :

Proposition P1 : Le problème d'une q-coupe de poids maximum séparant q sommets donnés est de même complexité que le problème d'une q-coupe maximum. En effet, on utilise 2 transformations :

a) transformation du problème d'une q-coupe maximum en une q-coupe maximum séparant q sommets donnés : on cherche le maximum des C_N^q ($\sim N^q$) coupes séparant chacun des q-uplets sommets;

b) transformation du problème d'une q-coupe maximum séparant q sommets en une q-coupe maximum : on adjoint des arêtes de poids $\sum_{e \in E} J_e + 1$ entre les q sommets S_i (J_e = poids de l'arête e ; la somme porte sur toutes les arêtes).

III.6.a. Cas $q = 2$: modèle d'Ising

Le problème de la recherche d'une coupe maximum séparant 2 sommets est NP-complet.

Pour démontrer ceci, on utilise la proposition P1 du paragraphe précédent et on se ramène au problème MAX-CUT (ND 16) page 210 de (Gar).

III.6.b. Cas $q > 2$: modèle de Potts :

Le problème de la recherche d'une q-coupe ($q > 2$) séparant q sommets est NP-complet.

En effet, on utilise encore la proposition P1 et on se ramène au problème d'une q-coupe maximum. Le problème de la q-coloriabilité d'un graphe (GT4) page 191 de (Gar) se transforme alors en un problème de la recherche d'une q-coupe maximum de la manière suivante. On affecte à chaque arête un poids 1 et on cherche une coupe de cardinalité maximum. Celle-ci vaut $|E| = n$ si et seulement si le graphe est q-coloriable.

On peut alors résumer ce paragraphe par le tableau suivant :

	Etat fondamental ≡ q-coupe séparante minimum	Etat le plus excité ≡ q-coupe séparante maximum
$q = 2$	Polynomial	NP-complet
$q > 2$	?	NP-complet

IV - CONCLUSION

Les deux exemples des paragraphes II et III montrent que l'apport pratique de l'optimisation combinatoire au physicien est indéniable. Une fois la réalisation du désordre choisie, l'optimisation combinatoire fournit un outil puissant d'étude. Notons que l'aspect "échantillonnage" de la simulation n'est pas complètement abandonné puisque seules les réalisations les plus probables du désordre sont étudiées, on peut parler de "simulation exacte".

Mais de plus, la question posée dans l'introduction concernant une relation possible entre une transition de phase à une température non nulle et la complexité du problème d'optimisation associé peut maintenant être examinée avec l'aide des paragraphes précédents :

i) Au modèle des verres de spins à 2D, comme au modèle du champ aléatoire à 2D, tous deux réputés avoir une température de transition de phase T_c nulle, est associé un problème d'optimisation polynomial.

ii) Au modèle des verres de spins à 3D dont la température critique T_c est strictement positive (comme il est communément admis) est associé un problème d'optimisation NP-complet.

Mais :

iii) Au modèle du champ aléatoire à 3D (ou plus) dont le T_c est fini, est associé un problème polynomial.

iv) Le cas de deux plans couplés, où les interactions sont aléatoires (en verres de spins en dimension $2 + \varepsilon$) est un exemple d'un système qui n'a pas de transition à une température finie, mais dont le problème d'optimisation associé est NP-complet.

Cette discussion peut être résumée dans le tableau suivant, prouvant que l'existence d'une température de transition de phase non

nulle pour un système de mécanique statistique avec interactions en compétition n'est pas lié à la complexité du problème d'optimisation associé qu'est la recherche des états d'énergie minimum.

	$T_c = 0$	$T_c > 0$
Problème d'optimisation polynomial	Verre de spins ou modèle du champ aléatoire à 2D	Modèle du champ aléatoire à 3D
Problème d'optimisation NP-complet	Verre de spins en $2+\varepsilon$ dimensions (voir texte)	Verre de spins à 3D

Solid State Communications, Vol. 49, No. 8, pp. 785–790, 1984.
Printed in Great Britain.

0038–1098/84 $3.00 + .00
Pergamon Press Ltd.

ON THE RANDOM ANTIPHASE STATE IN THE ± J SPIN GLASS MODEL IN TWO DIMENSIONS

J.C. Angles d'Auriac and R. Maynard

CRTBT, CNRS, 25 Avenue des Martyrs B.P. 166 X, 38042 Grenoble, Cédex, France

(*Received* 14 *October* 1983 *by E.F. Bertaut*)

Numerical calculations of a ground state and the rigidity have been made for samples of 50 × 50 Ising spins interacting via ± J bonds on a square lattice using Edmond's algorithm, a method well established in optimization theory. For some value of the concentration ($0.1 < x < 0.2$) of antiferromagnetic bonds ($-J$), an ordered (rigid) state occurs with zero magnetization due to magnetic wall separating domains of opposite spins. This new phase, here named a random antiphase state, could be an intermediate phase between ferromagnetism and paramagnetism.

1. INTRODUCTION

IN THE ± J MODEL, the ferromagnetic ($+J$) and antiferromagnetic ($-J$) bonds are distributed at random on a square lattice of Ising spins. By increasing the concentration x of antiferromagnetic bonds from 0 to 0.5 at very low temperatures, the ferromagnetism disappears and a dislocated phase appears which resembles a superparamagnet. This property is well established, but there has been some controversy as to whether a random antiphase occurs between the ferromagnetic phase and superparamagnetic at $T = 0$ K. This postulated phase has been suggested [1, 2] from the observation of a series of exact ground states exhibiting both rigidity and a magnetic wall at intermediate concentrations $0.1 < x < 0.15$.

On the other hand, Morgenstern [3] has obtained the correlation function $\overline{\langle S_0 S_R \rangle^2}$ at the temperature $T = 0.1\,J$ by exact calculation based on the transfer-matrix method: this function does not show a change in its form as x increased through the intermediate concentration. The author is thus not in favour of the existence of a random antiphase. It is useful to use the concept of defect lines to analyse this problem. In fact two types of defect lines are present here: the first type is known variously as a "contour of zero energy" [4], a "fracture line" [1, 2] or a "non trivial loop" [3] made up of equal numbers of violated and non-violated bonds, such that the energy is invariant on reversing all the spins in the cluster surrounded by the contour. The second type of line has been called a "magnetic wall" [1, 2] and is made up of non-violated negative bonds and violated positive bonds which separate two domains of oppositely directed spins in a rigid configuration of spins (with the same orientation for all the ground states). Therefore the random antiphase state will exist only if the magnetic walls surround the fracture lines. This is in contrast to the conclusion of [3]. It seemed clear to us that further numerical studies on larger samples were necessary. Moreover, the study of the interface energy [5] at $T = 0$ K on strips of width up to 9 spins is rather imprecise in this intermediate range of concentration and further investigations on large samples using this technique would be required to improve the accuracy. In this paper, we report new simulations on samples 50 × 50 which exhibit random antiphase at $x = 0.103$ and $x = 0.176$. As far as we know they are the biggest samples for which ground states and rigidity have been calculated.

2. CHINESE POSTMAN PROBLEM AND THE EDMONDS'S ALGORITHM

The problem of the ground state in the ± J model is formulated as an optimization problem: the minimum length of the strings between plaquettes corresponds to the ground state. This problem is then mapped into the problem of the Chinese postman, i.e. achievement of the minimum round (= minimum energy) of a postman delivering the mail along a set of streets connecting cross-roads. When odd cross-roads (frustrated plaquettes) are present, the minimum round must use repeated streets (strings) between odd nodes.

The polynomial algorithm of Edmonds is then used to solve the ground state problem. This algorithm is described elsewhere [1, 2] and only two aspects are emphasized here: firstly, not only one particular exact ground state can be generated by this algorithm but the rigidity of all the ground states is obtained (a given rigid bond is either always violated or always non-violated in all the ground states). Let us recall that the accepted estimate of the residual entropy per spin in the ± J model [6] is $0.075\,k_B$; the number of equivalent ground states of a sample of 2500 spins is about 10^{80} at $x = 0.5$ (!), which is indeed beyond any enumerative algorithm. Secondly, periodic or antiperiodic boundary

Table 1. Characterization of the eleven samples 50 × 50 calculated by the Edmonds algorithm. We indicate the concentration, the energy per spin of the ground state, the number of rigid bonds, the rigidity of the sample, and the type of boundary conditions

Concentration	0.0812	0.0906	0.1036	0.1150	0.1258	0.1336	0.1400	0.1538	0.1662	0.1766	0.1814
Energy	−1.686	−1.655	−1.619	−1.596	−1.575	−1.555	−1.539	−1.520	−1.503	−1.495	−1.484
No. of rigid bonds	4552	4304	4229	4069	3718	3506	3771	3413	3206	3555	3040
Rigidity	Yes	Yes	Yes	No	No	No	No	No	No	Yes	No
Periodic–antiperiodic	P	P	A		A					A	P
Antiphase	No	No	Yes							Yes	

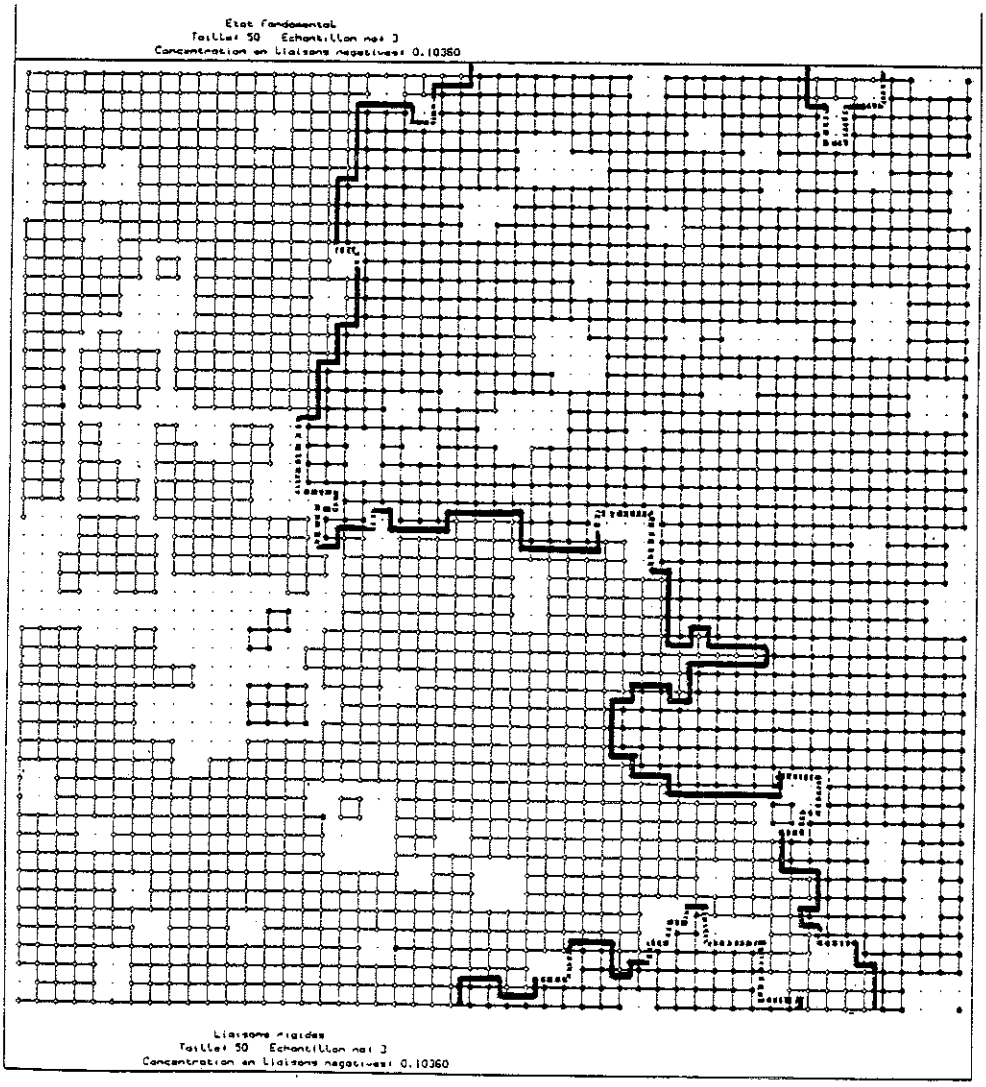


Fig. 1. The sample contains 50 x 50 spins; full circles represent the up spins and open circles the down spins. The concentration of antiferromagnetic bonds is 0.1036. *Rigid* bonds (i.e. with same state in all the ground states) are represented by straight segments while non-rigid bonds are omitted. The whole sample is rigid and therefore ordered, because the rigid bonds constitute a large percolating cluster. Periodic boundary conditions are applied on the vertical edges of the sample whereas the horizontal edges are submitted to the antiperiodic conditions. The magnetic wall separates the domain of up spins from the domain of down spins. It cuts the rigid bonds (straight lines) as well as non-rigid bonds (dashed lines) where the path is not uniquely defined.

conditions can be chosen by the algorithm for optimality. This additional degree of freedom for the sample is important since it reveals presence of a magnetic wall.

3. NUMERICAL RESULTS

A single family of samples, with varying concentrations x of negative bonds has been generated on the CRAY-ONE computer. The size 50 x 50 corresponds to 5000 bonds and 2500 spins. The characteristics of the 11 samples are reported in Table 1.

Several remarks can be made about these data: first the energy of the ground states are systematically inferior by about 2% to the previous results on smaller samples [7]. Although no sample averaging has been done, we believe that this difference is significant. This property can be understood in terms of the pressure ($-\partial E_0/\partial L^2$, L^2 = number of spins) arising from the matching of frustrated plaquettes in restricted geometry.

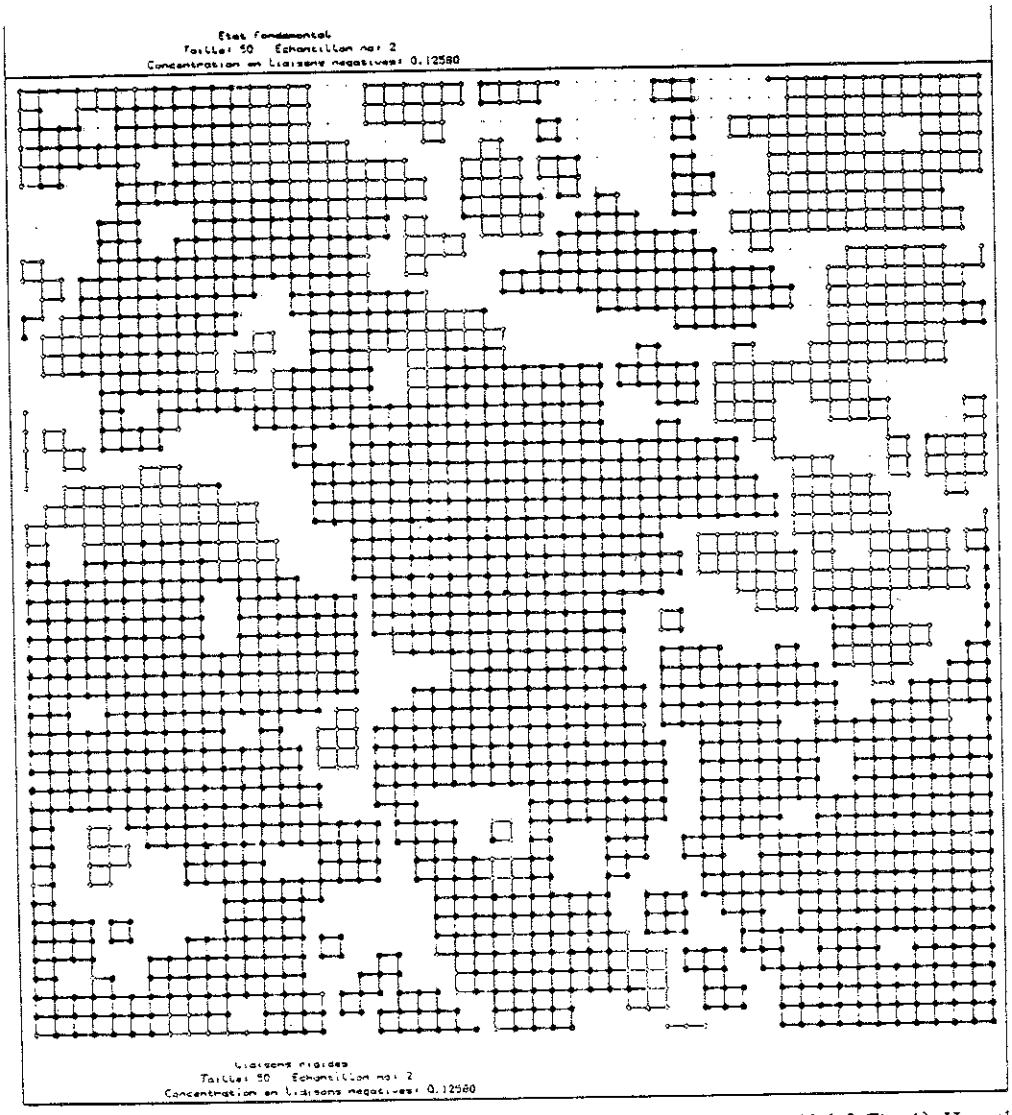


Fig. 2. This figure shows a sample with antiferromagnetic bonds concentration of 0.1258 (cf. Fig. 1). Here the rigidity is destroyed by a fracture line which crosses the sample horizontally.

In large samples, all the contours of zero energy can grow up to their natural size and there is an improvement in the optimum matching. Second, the decrease of the number of rigid bonds, when x increases is non monotonic.

From Table 1, it is apparent that no simple relation exists between the number of rigid bonds and the percolation of the corresponding cluster. This shows the strong correlation in the distribution of rigid bonds. Third, the proper choice of periodic or antiperiodic boundary conditions is meaningful only for a rigid sample. The two samples which exhibit antiperiodicity are identified as random antiphase states [2]. If the sample had been forced to obey periodic conditions, the energy would have been higher.

Among the eleven samples, three are illustrated in Figs. 1, 2 and 3. On Fig. 1, the antiphase state of the sample $x = 0.1036$ is shown (we present maps of the rigid bonds). The magnetic wall separates the regions of up and down. Only a few parts of the boundary line cross the non-rigid regions of the map (dashed line), where the path is not uniquely defined. By virtue of boundary conditions, periodic on vertical edges and antiperiodic on the horizontal edges, the magnetic wall is infinite in a repeated zone scheme, it separates the two domains of oppositely directed spins. When $x = 0.1258$

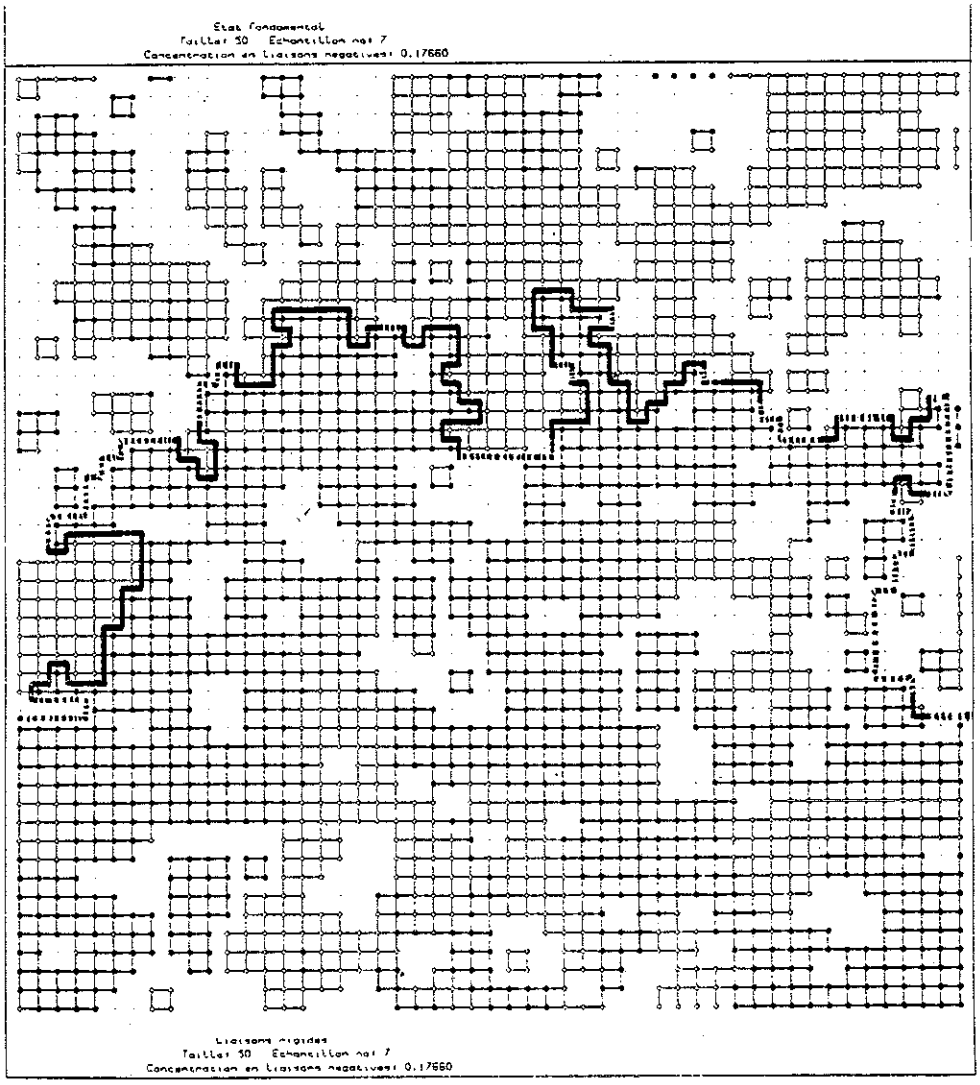


Fig. 3. This figure shows a sample with an antiferromagnetic bond concentration of 0.1766. Here, the antiperiodic boundary conditions appear on the vertical edges in Fig. 1. The magnetic wall has a more tortuous path than in Fig. 1 crossing a larger region of non-rigid bonds.

the cluster of rigid bonds cannot percolate in the vertical direction because of the presence of a fracture line (see Fig. 2); therefore it is a non-rigid sample and the problem of defining an antiphase does not exist. The rigidity recurs at $x = 0.1766$ and the magnetic wall has a more tortuous path (see Fig. 3). Subportion of this line crosses the non-rigid domains on the map.

4. DISCUSSION

The occurence of spontaneous "macroscopic" walls as in case of the random field model in 2 dimensions has been found in two samples of very large size 50 x 50, indicating that the ground states are made up of rigid domains of oppositely directed spins. This is the main result of this paper and confirms the previous observations on smaller sized samples 20 x 20. This observation is rather a presumption than a firmly settled results, since no sampling average has been performed for such large lattices. The non observation by other methods [3] of the random antiphase state arises from the use of samples of too small a size as well as from the use of too high a temperature. Moreover the employment of the correlation function $\langle S_0 S_r \rangle^2$ is a less sensitive probe than direct observation of a magnetic wall in a rigid ground state.

From the present study the characteristic length ξ of the domains is comparable to the size of the sample, i.e. 50 interspin distances. In fact, ξ must be x-dependent diverging at the ferromagnetic critical concentration. Studies of the dependence on size are currently in progress in order to obtain the function $\xi(x)$.

The increase of the tortuous character of the wall as x is increased from 0.1036 to 0.1766 is in agreement with previous observations by Kirkpatrick [8] on large samples 80 x 80, the low energy states of which were generated by a Monte Carlo method. However, the occurrence of the antiphase at both ends of the intermediate range of concentration is puzzling: it differs from previous determinations of the range of the random antiphase state. Further study seems necessary to clear up this point. Our results can be generalized to a continuous distribution of J (as a Gaussian distribution of non-zero mean value $\bar{J}$) for the following reason: taking advantage of the huge degeneracy of the ground state, we may calculate the rigidity by thermal averaging over the low energy excited states of the continuous J-distribution model. One can then expect a pocket of random antiphase states near the critical value $\bar{J}_c$ of the ferromagnetism.

Finally, the exact ground states can be used in quite different studies (in spin dynamics for example). The list of ferromagnetic, antiferromagnetic, violated and rigid bonds can be sent on request.

Acknowledgement – We are grateful to C. Lacôte and F. Barahona for access to their program, R. Rammal and J.P. Uhry for stimulating discussions, and to O. Wright for a critical reading of the manuscript.

REFERENCES

1. F. Barahona, R. Maynard, R. Rammal & J.P. Uhry, *J. Phys.* **A15**, 673 (1982).
2. R. Maynard & R. Rammal, *J. Phys. (Paris) Lett.* **43**, L347 (1982).
3. I. Morgenstern, *Phys. Rev.* **B25**, 6071 (1982).
4. J. Vannimenus & G. Toulouse, *J. Phys.* **C10**, L537 (1977); A.J. Bray, M.A. Moore & P. Reed, *J. Phys.* **C11**, 1187 (1978).
5. B. Derrida & J. Vannimenus, *Phys. Rev.* **B27**, 4401 (1983).
6. I. Morgenstern & K. Binder, *Phys. Rev.* **B22**, 288 (1980).
7. I. Bieche, R. Maynard, R. Rammal & J.P. Uhry, *J. Phys.* **A13**, 2553 (1980).
8. S. Kirkpatrick, *Ill-Condensed Matter*, Les Houches 1978, session XXXI. (Edited by R. Balian, R. Maynard & G. Toulouse) p. 398. North-Holland (1979).

Tome 46 N° 5 1er MARS 1985

LE JOURNAL DE PHYSIQUE - LETTRES

J. Physique Lett. **46** (1985) L-173 - L-180 1er MARS **1985**, PAGE L-173

Classification
Physics Abstracts
05.50

The random field Ising model : algorithmic complexity and phase transition

J. C. Angles d'Auriac, M. Preissmann (*) and R. Rammal

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures. CNRS, 25, avenue des Martyrs, B.P. 166 X, 38042 Grenoble Cedex, France

(*Reçu le 9 novembre 1984, accepté le 10 janvier 1985*)

Résumé. — Le modèle d'Ising en champ aléatoire (RFIM) est étudié du point de vue de la complexité algorithmique. On montre que le problème d'optimisation de la recherche d'un état de base du modèle ferromagnétique est polynomial (P) en toutes dimensions. Un nouvel algorithme de rigidité pour l'étude de la morphologie des états de base est aussi donné. Par opposition, le problème associé au modèle antiferromagnétique est démontré être NP-complet. L'absence d'une dépendance explicite de la complexité du RFIM avec la dimensionnalité contraste avec les résultats connus pour le modèle de frustration des verres de spins. Nos résultats montrent en particulier l'absence d'une correspondance simple entre les propriétés : NP-complet et existence d'une transition de phase à T_c fini dans les modèles de mécanique statistique avec des interactions en compétition.

Abstract. — The random field Ising model (RFIM) is investigated from the complexity point of view. We prove that finding a ground state of the ferromagnetic RFIM is a polynomial (P) optimization problem in any dimension d. A new rigidity algorithm for the search of the ground state morphology is also given. In contrast, the problem associated to the antiferromagnetic RFIM is shown to be an NP-complete optimization problem. The absence of any sensivity to d contrasts sharply with the known results previously obtained for the frustration model of spin glasses. Our results show, in particular, the absence of a simple one to one correspondence between finite T_c phase transition and NP-completeness properties in statistical mechanics models with competing interactions.

1. — Recent studies [1-3] of spin-glass models suggest the possibility of some connections between the computational complexity of the problem of finding a ground state and the existence of a finite T_c phase transition in a given model (e.g. $\pm J$ Ising models). More precisely, it has been proved [3, 4] that the spin-glass problem defined as an optimization problem (i.e. find the ground states) is NP-complete in dimensions larger than 2. Though it is polynomial [1, 2] in 2D, it becomes NP-complete for two coupled planes [3] (i.e. at $d = 2 + \varepsilon$). Accordingly, it is tempting to link NP-completeness [5] with the occurrence of a sharp phase transition at finite temperature T_c

(*) Permanent address : Laboratoire ARTEMIS, IMAG, B.P. 68, 38402 Saint Martin d'Hères, Grenoble, France.

in the thermodynamic (large size) limit. Indeed, according to current wisdom [6, 7], it is generally believed that there is a sharp spin-glass transition for $d = 3$ and above, and none in $d = 2$ which would agree with the preceding suggestion. It does seem first that NP-completeness is generally associated with some sort of ergodicity breaking, leading to non trivial configuration space landscapes (valley structure, large number of metastable states, ...). The purpose of this Letter is to show that such a direct connection between finite T_c and NP-completeness is incomplete and a more refined classification of these NP-complete problems is in order. More precisely, we shall show that the random field Ising models (RFIM) provide a simple example where algorithmic complexity and finite T_c phase transition can be compared and understood in simple terms.

In section 2, we show that the optimization problem associated with the ferromagnetic RFIM is a polynomial (P) problem in any dimension and can be solved using a polynomial-time flow algorithm. As a byproduct of this result, a new rigidity algorithm, outlined in section 3, is given for the search of ground state morphology. In section 4, the optimization problem associated with the antiferromagnetic RFIM is shown to be, in general, an NP-complete problem in sharp contrast with the ferromagnetic case. The extension of our results to the q-state Potts model is outlined and proposed to shed a new light on the connection between NP-completeness and finite T_c transition in random systems with competing interactions. In our conclusion we indicate some new directions for the search of such a connection.

2. Ferromagnetic RFIM.

Let us consider the random field Ising model, defined by the following Hamiltonian

$$\mathcal{H} = -\sum_{(ij)} J_{ij}\, \sigma_i\, \sigma_j - \sum_i h_i\, \sigma_i \tag{1}$$

where $\{ \sigma_i \}$ denote Ising spins ($\sigma_i = \pm 1$) located at the vertices of a given lattice and $\{ J_{ij} \}$ are the interaction constants. The first sum runs over all bonds (ij) of the considered lattice whereas the second runs over all nodes (i). The random magnetic fields $\{ h_i \}$ are taken according to a given probability distribution $p(\{ h_i \})$. For a given set of random fields, the search for a ground state of the model can be formulated as the following optimization problem.

Problem P1 : minimize the objective function

$$E = -\sum_{(ij)} J_{ij}\, \sigma_i\, \sigma_j - \sum_i h_i\, \sigma_i\,, \quad J_{ij} \geqslant 0$$

subject to $\sigma_i \in \{ -1, 1 \}$ for all i.

In what follows, we shall show that P1 can be converted into a Min-cut problem and then can be solved using a polynomial-time flow algorithm. In order to show this transformation some notations and basic concepts from graph theory are of some help (for more complete discussion, we direct the reader to classical textbooks [8]).

A graph $G = (\mathrm{V}, \mathrm{E})$ consists of a set of vertices V and a subset $\mathrm{E} \subset \mathrm{V} \times \mathrm{V}$ of pairs of vertices called arcs and denoted $e = (i, j)$, $i \in \mathrm{V}$, $j \in \mathrm{V}$. An undirected arc is called an edge and is denoted $\{ i, j \}$. The edge $\{ i, j \}$ is equivalent to the two arcs (i, j) and (j, i).

For a given subset of vertices $\mathrm{A} \subset \mathrm{V}$, $\omega^+(\mathrm{A})$ (resp. $\omega^-(\mathrm{A})$) denotes the set of arcs originating (resp. terminating) in A and terminating (resp. originating) in $\mathrm{V} - \mathrm{A}$.

A cutset is a set of arcs of the form $\omega^+(\mathrm{A})$, $\mathrm{A} \subset \mathrm{V}$. An (a, b)-cutset separating two given vertices a and b of G is a set of arcs of the form $\omega^+(\mathrm{A})$, where $a \in \mathrm{A}$ and $b \notin \mathrm{A}$. Such (a, b)-cutset can then be « viewed » as a partition of V into A and $\mathrm{V} - \mathrm{A}$, with $a \in \mathrm{A}$ and $b \in \mathrm{V} - \mathrm{A}$.

Suppose that each arc e of G has assigned to it a non negative number C_e, called capacity of e, the capacity of a given cutset is defined by

$$\mathcal{C}(\omega^+(\mathrm{A})) = \sum_{e \in \omega^+(\mathrm{A})} C_e\,.$$

To the problem P1, we shall associate the following graph structure $G = (V, E)$. To each node of the considered lattice is associated a vertex of G. To each bond of the lattice is associated an edge e and a capacity $C_e = J_e$ given by the ferromagnetic coupling constant. Two ghost vertices, denoted s and t, respectively, are added to the set of vertices. The first new vertex s is connected to all vertices where the local magnetic field h_i is negative, by new edges each having a capacity $C_i = | h_i | = - h_i$. Similarly, t is connected to each vertex where $h_i \geqslant 0$ by new edges of capacity $| h_i | = h_i$ (see Fig. 1). It is clear that any configuration of spins Γ can be viewed as a partition into two disjoint subsets : $\mathfrak{D}$, the subset of spins down and $\mathfrak{U}$ the subset of spins up. Let us denote $\mathcal{S} = \mathfrak{D} \cup \{ s \}$ and $\mathcal{T} = \mathfrak{U} \cup \{ t \}$. This construction defines a natural (s, t)-cutset γ, associated with $\mathcal{T} \cup \mathcal{S}$, and it is not difficult to show the following result.

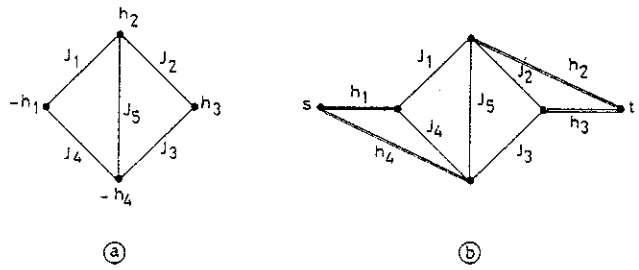


Fig. 1. — (a) A set of 4 Ising spins with the corresponding ferromagnetic interactions J_e and the local magnetic fields h_i ($h_i > 0$). (b) The corresponding graph is obtained by adding two ghost vertices s and t, and the associated edge capacities.

Proposition [9] : Let $E(\Gamma)$ be the energy associated with the configuration Γ and γ the corresponding (s, t)-cutset. Then

$$E(\Gamma) = - E^* + 2\, \mathcal{C}(\gamma)$$

where $E^* = \sum_{(ij)} J_{ij} + \sum_i | h_i |$, a constant quantity independent of Γ.

According to this result, problem P1 reduces to the search for an (s, t)-Min-cutset (i.e. of minimum capacity) separating the vertices s and t. This correspondence is one to one : to each Min-cutset is associated one ground state of the RFIM and *vice-versa*. Furthermore, the exhibited mapping between these two problems holds for any lattice, i.e. independently of the dimensionality d of the considered lattice, and does not involve the particular distribution $p(\{ h_i \})$ of random fields.

A classical result in combinatorial optimization [10] shows that the minimum capacity of a (s, t)-cutset is equal to the maximum value of a flow in the considered structure (Max-flow Min-cut theorem), where an extra arc (t, s) of capacity $C_{ts} = \infty$ has been added. However, the Max-flow problem is known to be a polynomial (P) problem [11], i.e. there is an algorithm giving a Max-flow and then a Min-cut in a polynomial-bounded number of steps, for any real number capacities.

In general, for an RFIM on a lattice consisting of L^d vertices, the number of steps increases as L^{3d}. Considered as a linear programming problem, the Max-flow is the dual to the Min-cut problem. Such a program has been implemented at $d = 2$ and 3 ($L \leqslant 128$ at $d = 2$, $L \leqslant 20$ at $d = 3$) for the investigation of the ground state structure. Further details and numerical results will be given elsewhere [12].

The above result calls for two comments. First, the problem of finding a ground state for the ferromagnetic RFIM is polynomial, whatever the dimensionality d of the lattice. Therefore, the algorithmic complexity of the associated optimization problem is not related to the existence

of a finite T_c phase transition [13] : $T_c = 0$ at $d = 2$ and $T_c \neq 0$ at $d = 3$. Second, this situation contrasts with the $\pm J$ frustration model of spin glasses, where the algorithmic complexity of the associated optimization problem is very sensitive to d [1-4]. For the sake of clarity, some of the relevant results are summarized in table I.

Table I. — *Algorithmic complexity* (P : *polynomial*, NPC : NP-*complete*) *of the optimization problems associated to different spin models. Here* $d = 2 + \varepsilon$ *refers to two coupled planes.*

	$T_c = 0$	$T_c \neq 0$
P	$d = 2$ Spin glass	Ferromagnetic RFIM ($d \geqslant 3$)
NPC	$d = 2 + \varepsilon$ Spin glass	$d \geqslant 3$ Spin glass

3. Ground state rigidity.

In general, many spin configurations are associated to the ground state energy. In order to study the degeneracy of the ground state we introduce the notion of rigid spins and rigid bonds. A spin is rigid if its value (+ 1 or − 1) is the same in all ground states. It is clear that if the edge of capacity C_i, associated to the local field h_i, belongs to all the (s, t)-Min-cutset, then the corresponding spin σ_i is in the opposite direction of its local field h_i in all ground states (i.e. $h_i\ \sigma_i < 0$). Inversely, if the associated edge does not belong to any (s, t)-Min-cutset, then $h_i\ \sigma_i > 0$ in all ground states. Similarly, a lattice edge e (bond) of capacity $C_e = J_e$ is rigid if it is either satisfied or unsatisfied in all ground states (i.e. e is associated to two solidary spins). It is clear that if e does not belong to any (s, t)-Min-cutset, then e is satisfied in all ground states. Inversely, if e belongs to all the (s, t)-Min-cutset then e is unsatisfied.

In a given sample : $G = (V, E)$, $\{ J_{ij} \}$ and $\{ h_i \}$ let us denote by $T \subset E$ the set of edges that belong to all the (s, t)-Min-cutsets, $A \subset E$ that of edges not belonging to any (s, t)-Min-cutset and $C = E - A \cup T$. Using these notations a bond is rigid and always satisfied if the associated edge $e \in A$. This bond is rigid and never satisfied if $e \in T$. Finally, this bond is non-rigid if $e \in C$. Similarly, a spin σ_i is always in the same (resp. inverse) direction of the local field h_i if the associated edges $e \in C$ (resp. $e \in T$). Therefore, the search for the morphology of the ground states reduces to finding the sets A, T and C. This can be carried out efficiently with a post-optimality procedure [14]. In the following we outline such a procedure. For this we use the following notation.

Problem P : Given a graph $G = (V, E)$ and a capacity function $C : E \to \mathbb{R}^+$, find an (s, t)-Min-cutset separating s (source) and t (sink). v^* will be the value of the capacity of such a cutset.

Let $a \in E$ and ε be a positive real number.

Problem $P(a, \varepsilon)$: For the same graph $G = (V, E)$ and the capacity function C^ε defined by

$$C_a^\varepsilon = C_a + \varepsilon \quad \text{and} \quad C_e^\varepsilon = C_e \quad \text{for} \quad e \neq a$$

find an (s, t)-Min-cutset separating s and t. $v^*(a, \varepsilon)$ will be the value of the capacity of such a cutset.

Finally, for a given cutset K, let us denote :

$$\mathcal{C}(K) = \sum_{e \in K} C_e \quad \text{and} \quad \mathcal{C}_a^\varepsilon(K) = \sum_{e \in K} C_e^\varepsilon .$$

Using the previous notation, one can show, as in reference [2] :

Proposition : Given a cutset K, an edge a and $\varepsilon > 0$, we have

(i) $\mathcal{C}_a^{-\varepsilon}(K) \leqslant \mathcal{C}(K) \leqslant \mathcal{C}_a^{\varepsilon}(K)$

(ii) $v^*(a, -\varepsilon) \leqslant v^* \leqslant v^*(a, \varepsilon)$

(iii) if $a \notin K$ then $\mathcal{C}_a^{-\varepsilon}(K) = \mathcal{C}_a^{+\varepsilon}(K) = \mathcal{C}(K)$

(iv) if $a \in K$ then $\mathcal{C}_a^{-\varepsilon}(K) + \varepsilon = \mathcal{C}_a^{+\varepsilon}(K) - \varepsilon = \mathcal{C}(K)$.

This leads to the following theorem :

Theorem : Let $\Delta = \min_{\{K \mid \mathcal{C}(K) \neq v^*\}} \{ \mathcal{C}(K) - v^* \}$, then

(i) for $\varepsilon > 0$: $a \in T \Leftrightarrow v^* < v^*(a, \varepsilon)$

(ii) for $0 < \varepsilon < \Delta$: $a \in A \Leftrightarrow v^* = v^*(a, -\varepsilon)$.

This theorem yields an efficient algorithm for the search of rigidity [12], the corresponding algorithm is actually polynomial as expected. Let us notice that the number Δ which appears in the above theorem has a simple physical meaning : it is nothing else other than the energy gap between the first excited state and the ground state energy. Note also that we can limit ourselves to the cases where $\{ J_{ij} \}$ and $\{ h_i \}$ are rational, i.e. J_{ij} and h_i are integers and then take $\varepsilon = 1$ in practice.

4. Antiferromagnetic RFIM.

Let us now consider the following Potts model [15] :

$$\mathcal{H} = -\sum_{(ij)} J_{ij}(q\delta_{\sigma_i\sigma_j} - 1) - \sum_i H_i(q\delta_{\varepsilon_i\sigma_i} - 1) \tag{2}$$

where σ_i is a Potts spin variable, located at vertex i of a given lattice, which can attain q different values ($\sigma_i = 1, 2, \ldots, q$). Here $J_{ij} \geqslant 0$ and $H_i \geqslant 0$ have the same meaning as defined previously. The random field variables ε_i favour the state $\sigma_i = \varepsilon_i$, and have the same probability $1/q$ to be along each one of the q available states. It is clear that for $q = 2$, equation (2) reproduces the RFIM discussed in the previous sections.

As for the RFI model, we use the concept of cutset in the investigation of the optimization problems associated with equation (2). Given a graph $G = (V, E)$ and an integer $q \geqslant 2$, a q-cutset is a partition of V into q subsets $S_1, S_2, \ldots, S_q \left(\bigcup_i S_i = V, S_i \cap S_j = \varnothing \text{ for } i \neq j \right)$. A q-cutset separating q given vertices $s_1, s_2, \ldots, s_q$ is a q-cutset such that : $s_i \in S_i$ ($1 \leqslant i \leqslant q$).

To the model defined by (2) we associate as above a graph structure, by adding q ghost vertices $s_1, s_2, \ldots, s_q$. Each s_i ($1 \leqslant i \leqslant q$) is connected to the vertices having a local field i, using new edges of capacity H_i. The capacity of the lattice edges (bonds) are $\omega_e = J_e$, as before. Following the same line of ideas, one can show that there is one to one correspondence between the spin configurations, of energy E and the q-cutsets separating $s_1, s_2, \ldots, s_q$ of capacity Φ

$$E = -(q-1)E^* + q\Phi,$$

where

$$E^* = \sum_{(ij)} J_{ij} + \sum_i H_i.$$

In the limiting case $q = 2$ we recover the RFI model, and we have shown that the corresponding optimization problem (i.e. min E) is polynomial. For $q > 2$, the situation is more complicated and the search for max E can be carried out using the following results. Detailed proof will be given elsewhere [16].

Proposition 1 : The problem of finding a maximum q-cutset has the same algorithmic complexity as the problem of finding a maximum q-cutset separating q given vertices.

Proof : Based mainly on two transformations :

a) Max q-cutset into Max q-cutset separating q given vertices : add q new vertices $\{ s_i \}$ $(1 \leqslant i \leqslant q)$, use edges of zero capacities to connect them to the graph vertices and then find a Max q-cutset separating the new vertices $\{ s_i \}$.

b) Max q-cutset separating q given vertices into a Max q-cutset : for this we add $q(q-1)/2$ new edges each of capacity $1 + \sum_{e \in E} \omega_e$ between the vertices s_i $(1 \leqslant i \leqslant q)$.

Note that Proposition 1 holds even in the relevant case where the set $V - \{ s_1, s_2, ..., s_q \}$ is partitioned into V_i with $V_i = \{ a \in V \mid \{ a, s_i \} \in E \}$ $1 \leqslant i \leqslant q$ and for any capacities [16].

Proposition 2 : The problem of finding a Max 2-cutset separating two given vertices s_1 and s_2 is an NP-complete problem.

Proof : Using Proposition 1, we reduce the so-called MAX-CUT problem ([ND 16], p. 210, Ref. [5]) which is known to be NP-complete, to our problem.

Proposition 3 : The problem of the Max q-cutset ($q > 2$) separating q given vertices is NP-complete.

Proof : Using again Proposition 1, we have to find the complexity of the problem of a Max q-cutset. The answer is given by the following transformation of the so-called « K-colourability of a graph » problem ([GT 4], p. 191 of Ref. [5]): to each edge is assigned a capacity + 1. If Φ denotes the value of a Max cutset, then $\Phi = | E |$ if and only if the considered graph is colourable with q colours.

The results of this section are summarized in table II. Two combinatorial optimization problems are associated with the model defined by equation (2). For $q \geqslant 2$ we have shown that finding the maximum of E is equivalent to the search for a Max q-cutset and therefore is an NP-complete problem. For $q = 2$ the problem of finding the minimum of E reduces to the search for a 2-cutset separating two given vertices and then a polynomial problem. The case $q > 2$ which corresponds to finding a ground state of the q-state Potts model remains unsolved.

Note that all the previous results are general and independent of the lattice dimensionality d. The result of Proposition 2 has a transparent physical signification. In fact, it is easy to see that for $q = 2$ the maximum of E is nothing else than the ground state energy of the antiferromagnetic RFI model (Eq. (1) with negative J_{ij}'s). This implies simply that the optimization problem (i.e. find a ground state) associated with the antiferromagnetic RFIM is an NP-complete problem, and hence probably intractable [5] in the sense that no algorithm requiring a time bounded by a

Table II. — *Algorithmic complexity of the problem of finding a Min- or Max-cutset separating q given vertices.*

	min E	max E
$q = 2$	P	NPC
$q > 2$	?	NPC

polynomial of the volume can exactly solve it. This result is somewhat surprising but probably related to the fact that the magnetic field is not conjugate to the magnetization in this case, already in the absence of disorder. This suggests that the ground states morphology is probably more rich in the antiferromagnetic case than the ferromagnetic one. It is important to notice that in some special cases the antiferromagnetic RFIM can lead to a polynomial problem. This is actually the case of lattices which can be viewed as bipartite graphs, i.e. can be decomposed into two independent sublattices. In such a case (for instance the square lattice), a simple gauge transformation reduces the actual problem to that of the ferromagnetic case, even in the presence of random fields. This particular example does not contradict our general statement holding for general graph structure.

5. Conclusion.

We conclude with two remarks.

a) It is not difficult to find trivial examples of spin models with random interactions, where the associated optimization problem is trivial. This is the case of random ferromagnetic interactions ($J_{ij} \geqslant 0$) : equation (1) with $h_i = 0$ for all i. On the other hand, the presence of the frustration in a planar antiferromagnetic Ising model under a uniform magnetic field (special case of Proposition 2, see also Ref. [3]) leads to NP-completeness. Therefore, frustration and competing interactions appear as the first ingredients for drawing the connection between statistical mechanics models and the combinatorial optimization problems. The concepts of dimensionality and symmetry (i.e. number of components of the spin variables) as well as the nature of interactions are certainly of basic importance for the search of a possible connection between the two fields. We believe that the valley structure (large or small number of valleys, dominant valleys, ...) is the key of the solution. In this respect, it would be very interesting to investigate the nature of the phase transition of the RFIM, for instance at $d \geqslant 3$: is it a spin-glass like transition (infinity of thermodynamic equilibrium states, fluctuation from sample to sample, ...) or rather of a more trivial character ?

b) The recent progress in solving the Travelling Salesman problem [17, 18] tells us the importance of using statistical mechanics methods (e.g. Monte Carlo simulation) in the investigation of NP-complete problems. We believe that, more generally, the probabilistic analysis of combinatorial optimization problems, as outlined in reference [19] will provide a natural framework for a cross fertilization of statistical mechanics and combinatorial problems and this will call for further extensions.

Acknowledgments.

We would like to thank Dr. J. P. Uhry for pointing to us the connection between the ferromagnetic RFIM and the Min-cutset problem. Fruitful and friendly discussions with Dr. G. Toulouse are gratefully acknowledged.

References

[1] Bieche, I., Maynard, R., Rammal, R. and Uhry, J. P., *J. Phys. A* **13** (1980) 2553.
[2] Barahona, F., Maynard, R., Rammal, R. and Uhry, J. P., *J. Phys. A* **15** (1982) 673 ; Angles d'Auriac, J. C. and Maynard, R., *Solid State Commun.* **49** (1984) 785.
[3] Barahona, F., *J. Phys. A* **15** (1982) 3241.
[4] Bachas, C. P., *J. Phys. A* **17** (1984) L709.

[5] For a good introduction to computational complexity see GAREY, M. R. and JOHNSON, D. S., *Computers and Intractability : A guide to the theory of NP-completeness* (San Francisco : Freeman) 1979.
[6] Heidelberg Colloquium on Spin Glasses, *Lectures Notes in Physics* **192** (Springer) 1983.
[7] OGIELSKI, A. T. and MORGENSTERN, I. (1984) preprint.
[8] See for instance BERGE, C., *Graphes and Hypergraphes* (Dunod, Paris) 1970.
[9] UHRY, J. P., private communication.
[10] FORD, L. R. and FULKERSON, D. R., *Can. J. Math.* **8** (1956) 399.
[11] See for instance LAWLER, E., *Combinatorial Optimization : Networks and Matroids* (New York, Holt Rinehard and Winston) 1976.
For more recent references, see PAPADIMITRIOU, C. H. and STEIGLITZ, K., *Combinatorial Optimization* (Prentice-Hall) 1982.
GONDRAND, M. and MINOUX, M., *Graphes et Algorithmes* (Paris : Eyrolles) 1979.
[12] ANGLES D'AURIAC, J. C. and RAMMAL, R., to be published.
[13] For a recent review, see for instance GRINSTEIN, G., *J. Appl. Phys.* **55** (1984) 2371.
[14] DANTZIG, G. B., *Linear Programming and Extensions* (Princeton, N.J. : Princeton Univ. Press) 1962.
[15] NOSHIMORI, H., *Phys. Rev. B* **28** (1983) 4011.
BLANKSCHTEIN, D., SHAPIR, Y. and AHARONY, A., *Phys. Rev. B* **29** (1984) 1263.
[16] ANGLES D'AURIAC, J. C. and PREISSMANN, M., in preparation.
[17] KIRKPATRICK, S., GELATT, C. D. Jr. and VECCHI, M. P., *Science* **220** (1983) 671.
[18] KIRKPATRICK, S. and TOULOUSE, G. (1984) preprint.
[19] KARP, R. M., in *Algorithms and Complexity : new directions and recent results*, Ed. J. E. Traub (Academic Press, New York) 1976, p. 1.

MAX-CUTS IN NEARLY BIPARTITE GRAPHS - CONNECTION WITH STATISTICAL MECHANICS

M. PREISSMANN

Laboratoire ARTEMIS, IMAG, B.P. 68, 38402 SAINT MARTIN D'HERES Cédex

J.C. ANGLES d'AURIAC

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, 25, avenue des Martyrs, B.P. 166 X, 38042 GRENOBLE Cédex

ABSTRACT

The max-cut problem in general is NP-complete. But it has been shown polynomially solvable in the case of (a,b)-nearly bipartite graphs, that is for graphs with two vertices a and b, whose deletion leads to a bipartite graph. We give here polynomial algorithms for finding a maximum (a,b)-separating cut and a maximum (a,b)-joining cut in such graphs.

We show how they can be applied and understood in statistical mechanics framework.

INTRODUCTION

We first give some definitions, notations and known results (the reader is referred to (5) for general definitions).

Let $G = (V,E)$ be an undirect graph.

Let A be a subset of V. We denote by $\Omega(A)$ the set of edges of G having exactly one extremity in A.

A cut K is a set of edges such that there exists $A \subset V$ such that $\Omega(A) = K$. Let $w : E \to \mathbb{Z}^+$ be a weight function defined on the edges of G. Let $F \subseteq E$, the weight of F is

$$W(F) = \sum_{e \in F} w(e)$$

The problem of finding a max-cut (that is a cut of maximum weight) is known to be N.P. complete (8,12) for general graphs, but it can be solved in polynomial time in some particular cases (2,3,4,9,10,11,14).

An (a,b)-nearly bipartite graph is a graph $G = (X \cup Y \cup \{a,b\}, E)$ such that the deletion of a,b and the edges having a or b as extremity leads to a bipartite graph.

F. Barahona (4) has shown that the max-cut problem is polynomially solvable for such graphs. More precisely a max-cut of an (a,b)-nearly bipartite graph G is the complement of an edge set corresponding to a minimum two-commodity cut in a graph $\overline{G}$ associated to G.

But the search of a minimum two-commodity cut in a graph is carried out through two max-flow algorithms. In this paper, we will show that each of them corresponds to a subproblem of the max-cut problem in (a,b)-nearly bipartite graphs.

Let $K = \Omega(A)$ be a cut of a graph G. Two vertices a and b of G are said to be separated by K if one is in A and the other in the

complement of A denoted by $\bar{A}$. In that case K is said to be an <u>(a,b)-separating</u> cut. Otherwise a and b are said to be <u>join</u> by K and K is an <u>(a,b)-joining cut</u>.

Here we consider the following two problems :

<u>P1</u> : find a maximum (a,b)-joining cut in an (a,b)-nearly bipartite graph;

<u>P2</u> : find a maximum (a,b)-separating cut in an (a,b)-nearly bipartite graph.

We will show that such max-cuts can be explicitely obtained from minimum (s,p)-separating cuts in two graphs G_J and G_S associated to the initial graph G.

But a minimum (s,p)-separating cut is easy to find by a max-flow from s to p (max-flow,min-cut theorem of Ford and Fulkerson (7)).

1. <u>The problem P1</u> :

Find a maximum (a,b)-joining cut in an (a,b)-nearly bipartite graph.

Let $G = (X \cup Y \cup \{a,b\}, E)$ be an (a,b)-nearly bipartite graph, whose edges are weighted by $w : E \to \mathbb{Z}^+$. Let $G_J = (V_J, E_J)$ be the graph obtained from G as follows :

$$V_J = X \cup Y \cup \{s,p\}$$

$$E_J = \{\{x,y\} \; ; \; x \in X, \; y \in Y, \; \{x,y\} \in E\}$$

$$\cup \; \{\{s,x\} \; ; \; x \in X, \; \{a,x\} \in E \text{ or } \{b,x\} \in E\}$$

$$\cup \; \{\{p,y\} \; ; \; y \in Y, \; \{a,y\} \in E \text{ or } \{b,y\} \in E\}$$

It is clear that there is a one-to-one correspondence between the edges of G and those of G_J and this define obviously a weight function w_j on the edges of G_J.

Theorem 1 :

Let K_{max} be a maximum (a,b)-joining cut of G and K_{min} be a minimum (s,p)-separating cut of G_J Then we have

$$W(K_{max}) = W(E) - W_J(K_{min})$$

Proof : Let us define a one-to-one correspondence of complementarity between the (a,b)-joining cuts of G and the (s,p)-separating cuts of G_J as follows :

To each (a,b)-joining cut $K = \Omega(\{a,b\} \cup A)$ of G, one associates a (s,p)-separating cut K_J of G_J where

$$K_J = \Omega(\{s\} \cup (\bar{A} \cap X) \cup (A \cap Y))$$

It is easy to verify that this correspondence is one-to-one and that

$$W(K) = W(E) - W_J(K_J) \qquad \text{Q.E.D.}$$

2. The problem P2 :

Find a maximum (a,b)-separating cut in an (a,b)-nearly bipartite graph.

Let $G = (X \cup Y \cup \{a,b\}, E)$ be an (a,b)-nearly bipartite graph, whose edges are weighted by $w : E \to \mathbb{Z}^+$.

Now let $G_S = (V_S, E_S)$ be the graph obtained from G as follows :

$$V_S = X \cup Y \cup \{s,p\}$$

$$\begin{aligned} E_S = & \{\{x,y\} ; x \in X, y \in Y, \{x,y\} \in E\} \\ & \cup \{\{s,x\} ; x \in X, \{a,x\} \in E\} \cup \{\{s,y\} ; y \in Y, \{b,y\} \in E\} \\ & \cup \{\{p,x\} ; x \in X, \{b,x\} \in E\} \cup \{\{p,y\} ; y \in Y, \{a,y\} \in E\} \end{aligned}$$

It is clear that there is a one-to-one correspondence between the edges of G and those of G_S and this defines obviously a weight function w_S on the edges of G_S.

<u>Theorem 2</u> :

Let K_{max} be a maximum (a,b)-separating cut of G and K_{min} be a minimum (s,p)-separating cut of G_S. Then, we have

$$W(K_{max}) = W(E) - W_S(K_{min})$$

Proof : Let us define a one-to-one correspondence of complementarity between the (a,b)-separating cuts of G and the (s,p)-separating cuts of G_S as follows :

To each (a,b)-separating cut $K = \Omega(\{a\} \cup A)$ of G, one associates a (s,p)-separating cut K_S of G_S where

$$K_S = \Omega(\{s\} \cup (\overline{A} \cap X) \cup (A \cap Y))$$

It is easy to verify that this correspondence is one-to-one and that

$$W(K) = W(E) - W_S(K_S)$$

Q.E.D.

3. Statistical mechanics and (a, b)-separating cuts in (a, b)-nearly bipartite graphs.

A random field Ising model (RFIM) is defined (1) by :

- an undirected graph $G = (V,E)$,
- an interaction constant J_{ij} associated to each edge $\{i,j\}$,
- a random magnetic field h_i associated to each vertex i, choosen according to a given probability distribution,
- a two states variable σ_i of value +1 or -1 called Ising spin, associated to each vertex i.

For a given set of random magnetic field $\{h_i\}$ the search for a ground state of the R.F.I. Model can be formulated as the following optimization problem P :

Minimize the objective function

$$\varepsilon(\{\sigma_i\}) = -\sum_{\{i,j\} \in E} J_{ij}\, \sigma_i \sigma_j - \sum_{i \in V} h_i\, \sigma_i$$

subject to $\sigma_i \in \{-1,+1\}$ for all i in V. $\varepsilon(\{\sigma_i\})$ is the energy of the configuration of spins $\{\sigma_i\}$

An antiferromagnetic RFIM is such that all J_{ij} are negative. We will first show that in that case the problem P can be converted into a maximum (a,b)-separating cut problem.

Indeed let $G' = (V',E')$ be the following associated graph :

$V' = V \cup \{a,b\}$

$E' = \{\{i,j\} ; \{i,j\} \in E\} \cup \{\{a,i\} ; i \in V, h_i \geqslant 0\}$
$\cup \{\{b,j\} ; j \in V, h_j < 0\}$

Let w' be the weight function :

if $\{i,j\} \in E$ then $w'(\{i,j\}) = - J_{ij}$

if $\{a,i\} \in E'$ then $w'(\{a,i\}) = h_i$

if $\{b,j\} \in E'$ then $w'(\{b,j\}) = - h_j$

($w'(e') \geqslant 0 \quad \forall e' \in E'$ results trivially from the definition).

It is clear that any configuration Γ of spins can be viewed as a partition into two disjoint subsets: $\mathcal{D}$ the set of spins down ($\sigma_i = -1$) and $\mathcal{U}$ the set of spins up ($\sigma_i = +1$).

To such a partition, one can associate an (a,b)-separating cut of G' defined by $K = \Omega(A)$ where $A = \{a\} \cup \mathcal{D}$. Inversely we can associate a configuration of spins $\{\sigma_i\}$ from an (a,b)-separating cut of G (1).

<u>Proposition</u> : let $\varepsilon(\Gamma)$ be the energy of a spins configuration Γ, and K be the corresponding (a,b)-separating cut in G'. We have

$$\varepsilon(\Gamma) = \varepsilon^{*} - 2\, W(K)$$

where $$\varepsilon^{*} = - \sum_{\{i,j\} \in E} J_{ij} + \sum_{i \in V} |h_i|$$

According to this result, the problem P reduces to the search of a maximum (a, b)-separating cut in G'.

This result is of main importance, because usually the lattices considered in statistical Mechanics are square or simple cubic lattices (see fig. 1), and so are bipartite graphs.

In that cases, we know from § 2. that one can find a ground state by finding a minimum (s,p)-separating cut in graph G_s. But it is easy to verify (1) that such a minimum cut corresponds to a ground state of a ferromagnetic RFIM (all J_{ij} are positive) defined on the same lattice where the interaction constant associated to the edge $\{i,j\}$ is equal to $-J_{ij}$ and where the random magnetic field on a vertex x in X is h_x and on a vertex y in Y is $-h_y$.

The transformation from G' to G_s can be viewed as the transposition in combinatorial optimization field of the well-known gauge transformation (16) which reduces all non frustrated models to the ferromagnetic model on the same lattice. Indeed an antiferromagnetic on a bipartite graph is a non frustrated model.

CONCLUSION

Having an algorithm for finding a max-cut in an (a,b)-nearly bipartite graph (4), it is not difficult to find :

- a maximum (a,o)-separating cut, by adding a sufficiently large weighted edge between a and b ;
- a maximum (a,b)-joining cut, by replacing a and b by a single vertex adjacent to all vertices which were adjacent to a or b .

Nevertheless the method presented here permits to find such cuts with the use of only one max flow algorithm (instead two). Moreover the corresponding bipartitions of the vertices are explicitely obtain.

Note that the algorithms exhibited here have a complexity of $O(|V|^3)$ like the best max-flow algorithms (6,13,15).

ACKNOLEDGMENTS

Fruitful and friendly discussions with R. RAMMAL are gratefully acknowledged.

REFERENCES

1. J.C. ANGLES D'AURIAC, M. PREISSMANN and R. RAMAL, The random field Ising Models : algorithmic complexity and phase transition : to be published.

2. F. BARAHONA, Balancing signed toroidal graphs in polynomial time, Dept de Matematicas, Universidad de Chile, Santiago, Chile, June 1982.

3. F. BARAHONA, The max cut problem on graphs not contractible to K_5, Oper. Res. Lett., vol. 2, number 3 (1983), 107-111.

4. F. BARAHONA, On some weakly bipartite graphs, Oper. Res. Lett., vol. 2, number 5 (1983), 239-242.

5. C. BERGE, Graphs and Hypergraphs, North-Holland, Mathematical Library, Vol. 6 (North-Holland, Amsterdam, 1976).

6. E.A. DINIC, Algorithm for solution of a problem of maximum flow in a network with power estimation, Soviet Math. Dokl, 11, 1277-1280 (1970).

7. L.R. FORD and D.R. FULKERSON, Maximal flow through a network, Canad. J. of Math., 399 (1956).

8. M.R. GAREY and D.S. JOHNSON, Computers and Intractability : A guide to the theory of NP-completeness (Freeman, San Francisco, 1979).

9. M. GRÖTSCHEL and G.L. NEMHAUSER, A polynomial algorithm for the max-cut problem on graphs without long odd cycles, Report n° 8221-OR, Universität Bonn (1982).

10. M. GRÖTSCHEL and W.R. PULLEYBLANK, Weakly bipartite graphs and the max cut problem, Oper. Res. Lett.1, 23-27 (1981).

11. F.D. HADLOCK, Finding a maximum cut of a planar graph in polynomial time, SIAM J. Comput. 4, 221-225 (1975).

12. R.M. KARP, Reducibility among combinatorial problems, in R.E. Miller and J.W. Thatcher (eds), Complexity of Computer Computations, Plenum Press, New York 85-103 (1972).

13. A.V. KARZANOV, Determining the maximal flow in a network by the method of preflows, Soviet Math. Dokl. 15 (1974), 434-437.

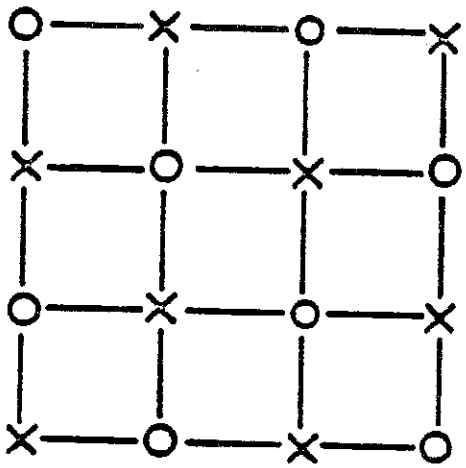
14. G.I. ORLOVA and Y.G. DORFMAN, Finding the maximum cut in a graph, Engrg.Cybernetics 10, 502-506 (1972).

15. V.M. MALHOTRA, M.P. KUMAR, S.N. MAHESHWARI, An $O(|V|^3)$ algorithm for finding maximum flows in networks, Information Proc. Letters, vol.7, number 6 (1978), 277-278.

16. G. TOULOUSE, Theory of the frustration effect in Spin Glasses 1, Comm. on Physics 2 (1977), 115-119.

FIGURE CAPTION

Figure 1 : A square lattice in 2 dimensions viewed as a bipartite graph.



A P P E N D I C E A

ALGORITHME POUR LA RECHERCHE DU FONDAMENTAL DANS LE MODELE DE LA FRUSTRATION

L'algorithme que nous présentons ici est l'un des plus sophistiqué de l'optimisation combinatoire. Nous allons l'exposer sans donner toutes les justifications. La mise en oeuvre pratique ne sera pas non plus discutée (voir (Bal) pour une telle discussion).

Rappelons brièvement que le problème de la recherche du fondamental d'un modèle de verres de spins se ramène à l'un ou l'autre des deux problèmes d'optimisation équivalents suivants :

i) recherche d'un couplage par des arêtes de poids minimum dans un graphe complet ;

ii) recherche d'un couplage par des chaînes d'arêtes de poids minimum dans un graphe quelconque ;

La résolution directe de ii) est plus compliquée que celle de i). Cependant elle permet une étude de post-optimale (rigidité) et c'est elle que nous exposerons ici.

Du point de vue algorithmique, la transformation du problème des spins en un problème de couplage ne présente pas de difficultés. On suppose donc donnés un graphe $G = \{V,E\}$ où les arêtes e portent des poids $\omega_e > 0$ et un ensemble ICV de cordinalité paire. On cherche un couplage entre les sommets de I par des chaînes d'arêtes de poids minimum.

A. Programmes linéaires associés

On a donné au paragraphe II.3 le problème linéaire associé et le problème dual. L'utilisation du théorème des écarts complémentaires nous permet de donner la forme définitive suivante au problème (les notations sont celles du chapitre II).

Trouver x_e et Y_S , x_e et Y_S réels, tels que

(1) $\sum_{e \in \omega(S)} x_e \geqslant 1$; $\forall S \leqslant V$, $|S \cap I|$ impair

(2) $x_e \geqslant 0$; $\forall e \in E$

(3) $Y_S \geqslant 0$; $\forall S \leqslant V$, $|S \cap I|$ impair

(4) $x_e > 0 \Rightarrow \sum_{e \in \omega(S)} Y_S = \omega_e$, $\forall e \in E$

(5) $Y_S > 0 \Rightarrow \sum_{e \in x_e} = 1$, $\forall S \leqslant V, |S \cap I|$ impair

(6) $\sum_{e \in \omega(S)} y_S \leqslant \omega_e$, $\forall e \in E$

Les variables x_e sont des variables associées aux arêtes qui valent 0 ou 1 suivant que l'arête e appartient ou non au couplage (il y en a $|E|$). Les variables Y_s sont associées aux ensembles dits impairs (i.e. ayant un nombre impair de sommets impairs). Un dénombrement simple montre qu'il y a $2^{|V|-1}$ (si $I \neq \emptyset$) variable Y_s. Bien sûr parmi les : $|E| + 2^{|V|-1}$ variables très peu sont non nulles et c'est ce qui rend l'algorithme d'Edmonds possible.

B. Méthode générale - idée de l'algorithme

L'idée générale de l'algorithme est la suivante. On part d'une "solution" initiale (trouvée grâce à la procédure décrite en C), c'est-à-dire d'un jeu de variables $\{x_e\}$ et $\{Y_S\}$ qui vérifie (1),(5) mais pas (6). A chaque pas de l'algorithme on améliore la solution courante. Très globalement, l'algorithme peut se décrire ainsi

- dès que (6) est vérifiée pour tout $e \in E$ on s'arrête ;

- s'il existe e telle que (6) n'est pas vérifiée alors on augmente le coût réduit $\overline{\omega_e} \equiv \omega_e - \sum_{e \in \omega(S)} Y_S$ jusqu'à le rendre positif ou nul

  afin que (6) soit vérifiée pour cette arête. Cela se fait en changeant les valeurs primales ($\{x_e\}$) ou duales ($\{Y_S\}$) en assurant (1)-(5) vraies et (6) vraie pour les arêtes pour lesquelles elle l'était précédemment.

C. Solution initiale

On part d'une solution initiale en rajoutant des arcs fictifs de la manière suivante :

Soient $v_1, v_2, \ldots, v_{2k}$ les sommets de I ($|I| = 2k$) et ℓ_i la longueur d'un chemin quelconque de v_{2i-1} à v_{2i} ($1 \leqslant i \leqslant k$). On rajoute les k arêtes $\{v_1, v_2\}, \ldots \{v_{2k-1}, v_{2k}\}$ au graphe et on leur affecte les poids $\ell_1, \ell_2, \ldots \ell_k$ (il est clair que si la solution finale utilise l'une de ses arêtes on peut la remplacer par le chemin correspondant). Puis on pose :

$x_e = 1$ pour tout $e = \{v_{2i-1}, v_{2i}\}$, $1 \leqslant i \leqslant k$

$x_e = 0$ pour les autres arêtes

$Y_{S_e} = \omega_e$ pour tout $S_e = \{v_i\}$ où $e = \{v_{2i-1}, v_{2i}\}$ $1 \leqslant i \leqslant k$

$Y_{S_e} = 0$ pour tous les autres sommets impairs.

Remarquons que sur les $|E| + 2^{|V|-1}$ variables seules $|I|$ seront non nulles ! On peut montrer que les valeurs des x_e et Y_S ainsi déterminées vérifient bien (1)-(5). On a donc bien une solution initiale.

D. Algorithme

L'algorithme n'opère pas directement sur la forme "programme linéaire", mais sur le graphe lui-même en le modifiant à chaque pas. Il y a effectivement $|E|$ variables représentant les x_e. En revanche il n'y a pas $2^{|V|-1}$ variables pour les Y_S ! Seuls les Y_S non nuls sont représentés et ceci sous forme de pseudo-sommets. Un pseudo-sommet est la contraction de sommets ou de pseudo-sommets (structure emboîtée). Un pseudo-sommet contient donc toujours un nombre impair de sommets impairs. Il est toujours adjacents à une et une seule arête du couplage et toute arête du couplage est adjacente à au moins un pseudo-sommet (éventuellement deux).

Au cours de l'algorithme, on modifie le graphe en contractant des sommets et pseudo-sommets en pseudo-sommets et, en éclatant des pseudo-sommets. Ces opérations sont expliquées plus loin en E. On montre que si l'ensemble des pseudo-sommets vérifie les conditions ci-dessus, alors les propriétés (1)-(5) du paragraphe C. sont satisfaites. L'algorithme est alors le suivant

1°) trouver une solution initiale ;

2°) il existe une arête e telle que le coût réduit $\overline{\omega}_e \equiv \omega_e - \sum_{e \in \omega(S)} Y_S < 0$?
oui : aller en 10
non : aller en 3

3°) e a forcément au moins une extrémité dans un pseudo-sommet P.
Soit x l'autre extrémité de e (x est un sommet ou un pseudo-sommet) et e = (P,x).

4°) faire le marquage à partir de P (cette étape est expliquée au paragraphe E).

5°) existe-t-il un pseudo-sommet marqué + contenant x ?
oui : aller en 6°)
non : aller en 8°)

6°) modification primale (cette étape est expliquée au paragraphe G).
C'est une modification du couplage.

7°) effacer les marques et aller en 2°).

8°) modification duale (cette étape est expliquée au paragraphe H).

9°) effacer les marques et aller en 2°).

10°) éclater tous les pseudo-sommets.
FIN : les arêtes du couplage sont celles sont la variable x_e associée valent 1.

Les différentes étapes de l'algorithme sont expliquées dans la suite.

E. Marquage à partir d'un pseudo-sommet P, contraction

Le marquage se fait par la construction d'un arbre alterné dont les sommets sont tous marqués alternativement + et - . La racine de l'arbre sera P, on la marque -.
(Une marque + signifie que l'on va augmenter la variable Y_S associée, une marque - signifie qu'on va la diminuer).

Les règles de marquage sont les suivantes :

i) à partir d'un pseudo-sommet Q marqué- :

Soit v le sommet ou pseudo-sommet relié à Q par une arête du couplage (v existe forcément et n'est pas déjà marqué) :

- si v est un pseudo-sommet : le marquer +

- si v est un sommet : considérer l'ensemble A des pseudo-sommets différents de Q et relié à v par des arêtes du couplage. Contracter A et v en un pseudo-sommet dit de type I. Le marquer + et lui associer un poids nul.

ii) à partir d'un pseudo-sommet Q marqué + :

Considérer une à une les arêtes e d'extrémité Q telle que le coût réduit $\overline{\omega}_e$ soit nul. Soit j l'autre extrémité :

- si j est un pseudo-sommet marqué + : on remonte C_1 et C_2 les deux chaînes qui ont permis de marquer j et P. Elles ne peuvent se rencontrer qu'en un pseudo-sommet marqué +. On contracte C_1, C_2, j et Q en un pseudo-sommet dit de type II. On marque ce pseudo-sommet + et on lui affecte un poids nul.

- si j est un pseudo-sommet marqué - : on ne fait rien.

- si j est un pseudo-sommet non marqué : le marquer - et marquer ses successeurs immédiatement selon i).

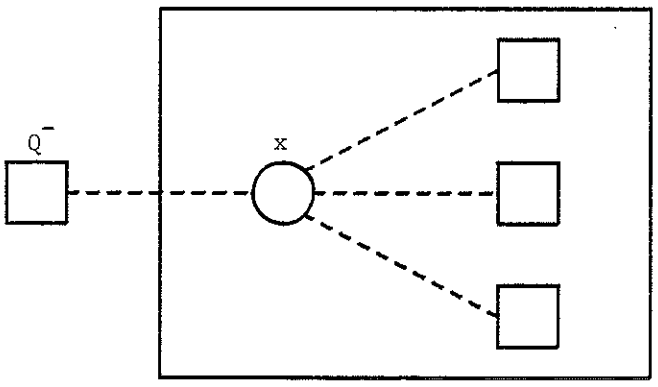
- si j est un sommet : faire une liste de tous les pseudo-sommets reliés à j par une arête du couplage. Ajouter Q et j à cette liste et contracter l'ensemble obtenu en un pseudo-sommet dit de type III. Lui affecter la marque + et un poids nul.

Pour construire l'arbre alterné, on marque à partir de la racine (marquée -) suivant la règle i). Puis on marque à partir des sommets + suivant les règles ii) jusqu'à épuiser l'ensemble des sommets que l'on peut marquer. Notons que l'ordre dans lequel on traite les sommets + est indifférent. En particulier on peut utiliser une pile (LIFO, Deepth First Search) aussi bien qu'une queue (FIFO, Breath First Search).

F. Forme générale et éclatement des pseudo-sommets

Au paragraphe précédent E, on a introduit trois types (I, II et III) de pseudo-sommets. Au cours de l'algorithme (pas 6, 8 et 9) il est nécessaire d'éclater ces pseudo-sommets. Avant de présenter les règles d'éclatement, précisons les conventions utilisées sur les figures. Un sommet est représenté par un cercle, un pseudo-sommet par un carré ; une arête du couplage par un trait interrompu, une arête hors couplage de coût réduit nul par un trait épais et une arête hors couplage de court réduit non nul par un trait fin. Les règles d'éclatement sont les suivantes :

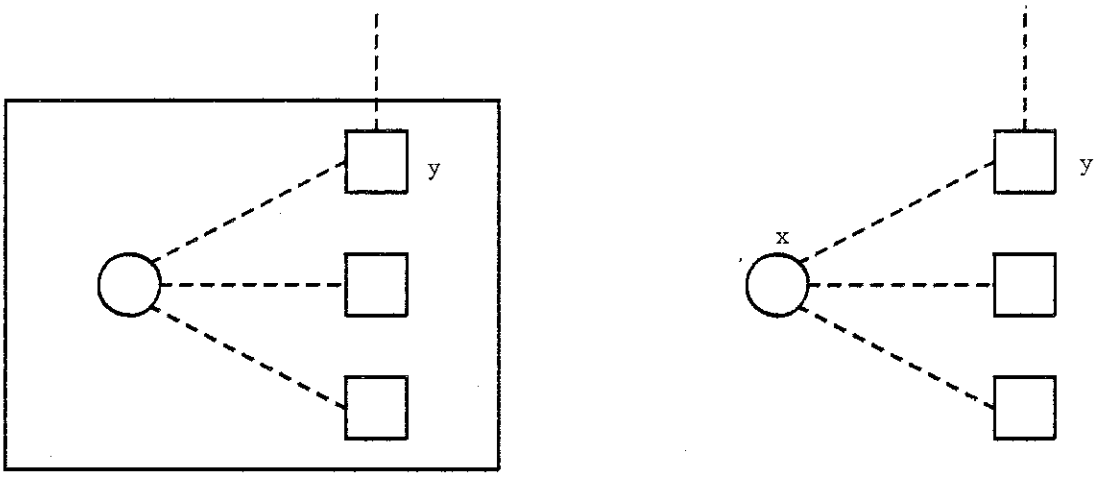
- pseudo-sommet de type I :
  Les pseudo-sommets de type I ont, lors de leur création, la forme suivante :



N.B. : Les éventuelles arêtes hors du couplage ne sont pas indiquées. Appelons R le pseudo-sommet de type I à éclater. Soit e l'arête du couplage adjacente à R lors de l'éclatement de R.

- si e a toujours x pour extrémité, l'éclatement est exactement l'opération inverse de la contraction (il n'y a pas de modification du couplage) ;

- si e n'a plus x pour extrémité, cette extrémité est un pseudo-sommet y de R relié à x par une arête du couplage. Cette arête sort du couplage lors de l'éclatement.

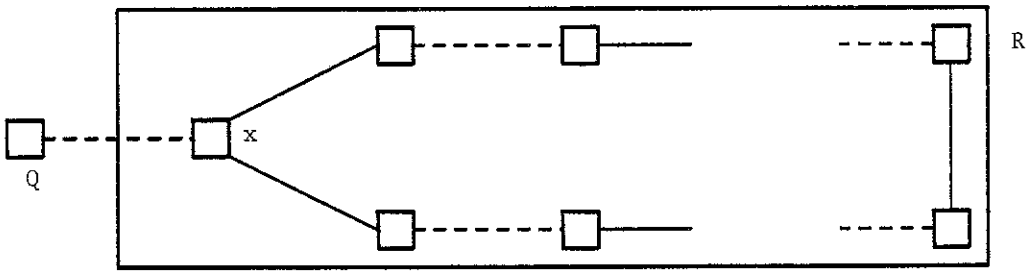


avant éclatement

après éclatement

- pseudo-sommets de type II :

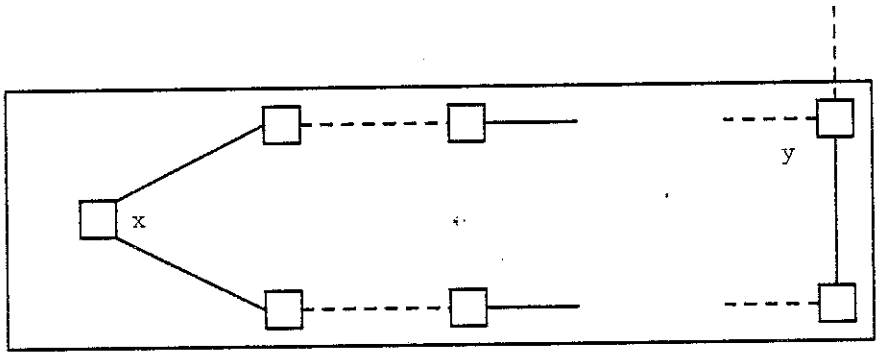
Ces pseudo-sommets ont, lors de leur création, la forme générale suivante :



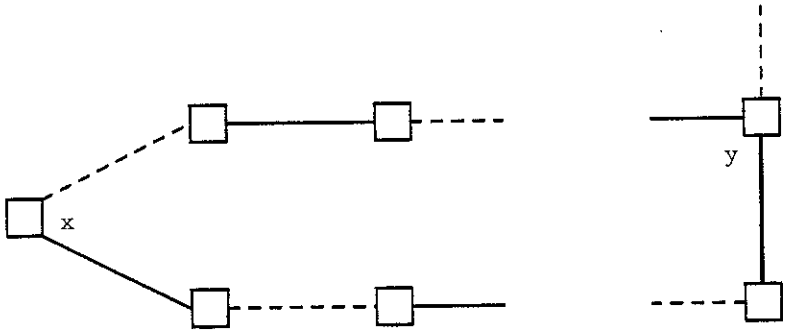
Soit e l'arête du couplage adjacente à R lors de l'éclatement de R.

- si e a toujours x pour extrémité, l'éclatement est exactement l'opération inverse de la contraction.

- si e n'a plus x pour extrémité, celle-ci est un pseudo-sommet y de R relié à x par une chaîne alternée dont l'arête adjacente à y est dans le couplage. Lors de l'éclatement cette chaîne alternée est inversée.



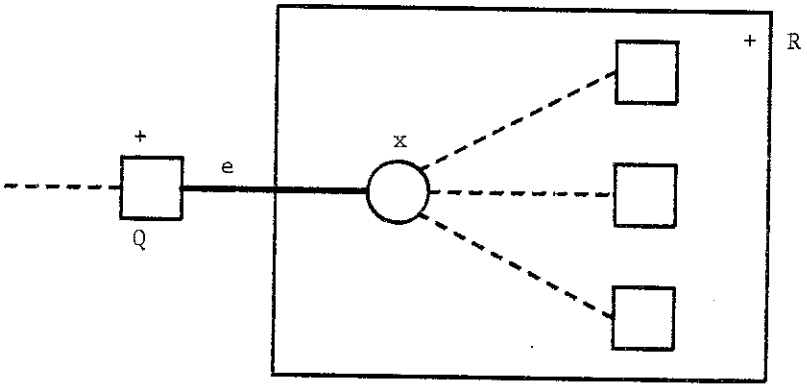
avant éclatement



après éclatement

- pseudo-sommets de type III :

Ces pseudo-sommets ont lors de leur création la forme suivante :

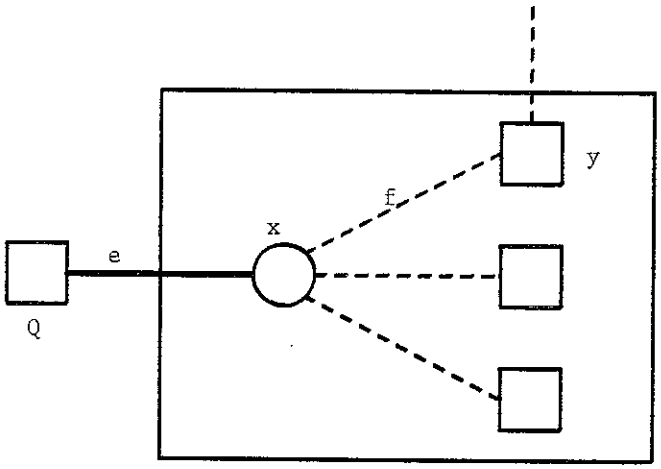


Soit e l'arête du couplage adjacente à R lors de son éclatement.

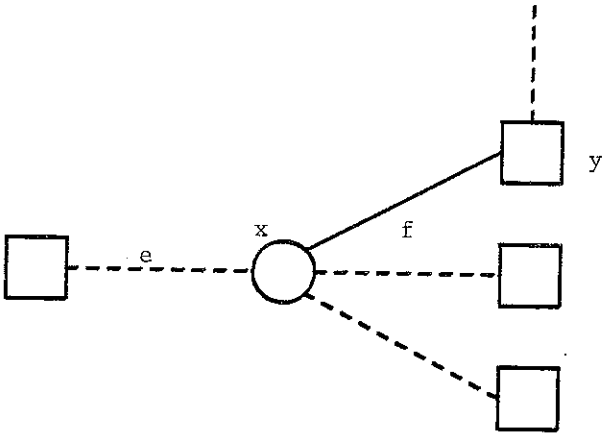
- si e a toujours Q pour extrémité, l'éclatement est exactement l'opération inverse de la contraction.

- si e a x pour extrémité, l'arête {Q,x} reste dans le couplage lors de l'éclatement.

- sinon, e a pour extrémité un pseudo-sommet y relié à x par une arête f du couplage. Lors de l'éclatement f sort du couplage et {Q,x} y rentre.



avant éclatement



après éclatement

G. Modification primale

On a trouvé une chaîne d'arêtes reliant P à x. En rajoutant e à cette chaîne, on obtient un cycle C alterné de longueur paire. C'est-à-dire que les arêtes de C sont alternativement dans le couplage et hors du couplage. La suite des opérations à effectuer est la suivante :

1) pour tout f dans C, faire $x_f := 1 - x_f$

2) tant que $\overline{w}_e < 0$, faire

soit Q un pseudo-sommet de e tel que $Y_Q > 0$

$Y_Q := Y_Q - \min \{Y_Q, -\overline{w}_e\}$

modifier les coûts réduits en conséquence
si $Y_Q = 0$ éclater Q.

3) éclater tous les pseudo-sommets Q tel que $Y_Q = 0$.

H. Modification duale

Soient $\delta_1 = \min \{\overline{w}_e/2 \mid \overline{w}_e > 0$ et les deux extrémités de e soient $+\}$, $\delta_2 = \min \{\overline{w}_e \mid \overline{w}_e > 0$ et une extrémité de e soit marquée +, l'autre n'étant pas marquée $\}$ et $\delta_3 = \min \{y_Q \mid Q$ soit marqué $-\}$. Posons $\delta = \min (\delta_1, \delta_2, \delta_3)$. La suite des opérations à effectuer est la suivante :

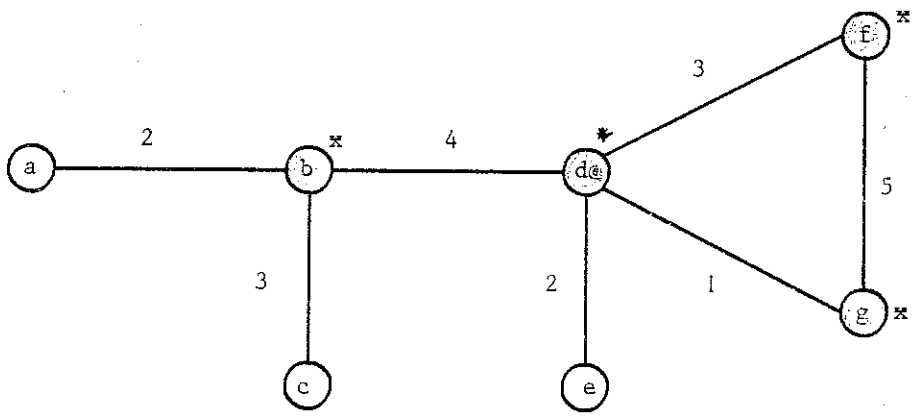
1°) pour tous les Y_Q marqués −, faire $Y_Q = Y_Q - \delta$

2°) pour tous les Y_Q marqués +, faire $Y_Q = Y_Q + \delta$

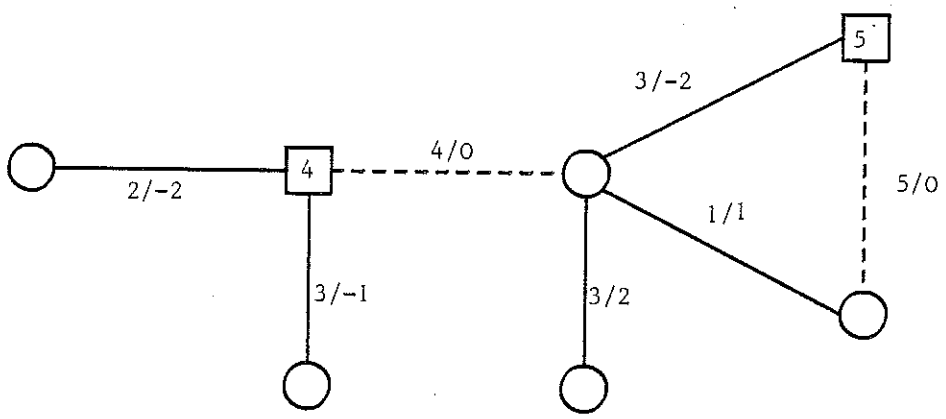
3°) éclater tous les sommets Q tels que $Y_Q = 0$.

I - Exemple illustratif

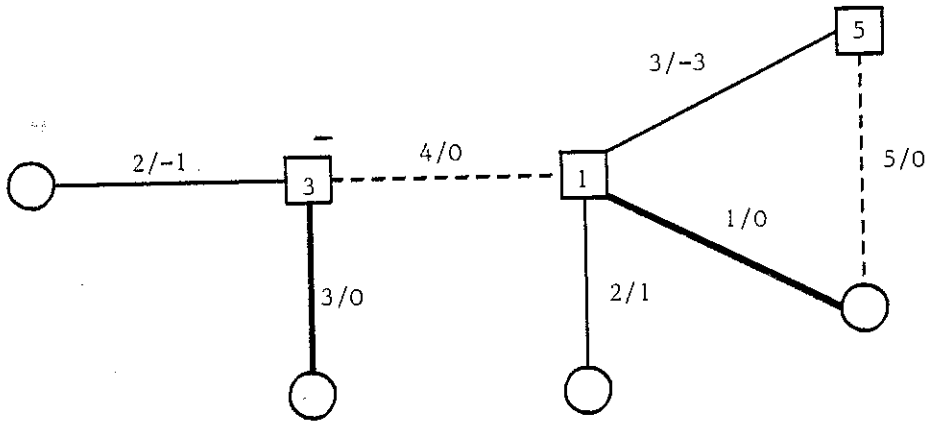
Soit le graphe suivant :



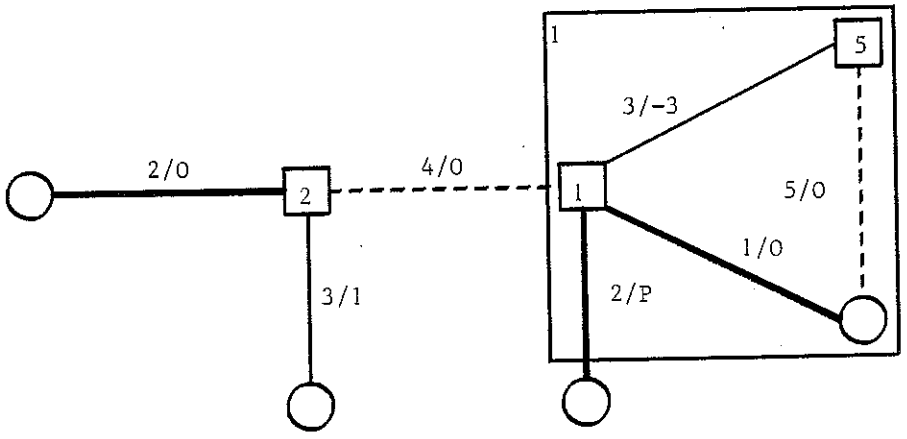
I = {b,d,f,g} . On va chercher un couplage minimum sur I par des chaînes d'arêtes. Pour cela on adoptera les mêmes conventions que celles utilisées dans les sections précédentes et on indiquera sur chaque arête son poids suivi de son coût réduit. Le poids d'un pseudo-sommet sera noté à l'intérieur de celui-ci. Partons du couplage initial suivant :



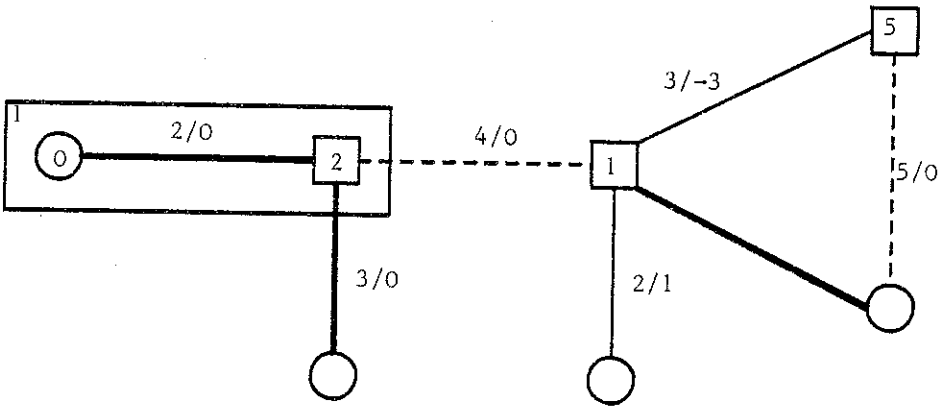
On choisit {b,c} parmi les arêtes de coût réduit négatif. L'exécution du premier pas de l'algorithme amène à créer un pseudo-sommet contenant b et marqué -, ainsi qu'un pseudo-sommet contenant d et marqué +. La modification duale se fait avec $\delta = \min(\infty, 1, 4)$. On obtient donc



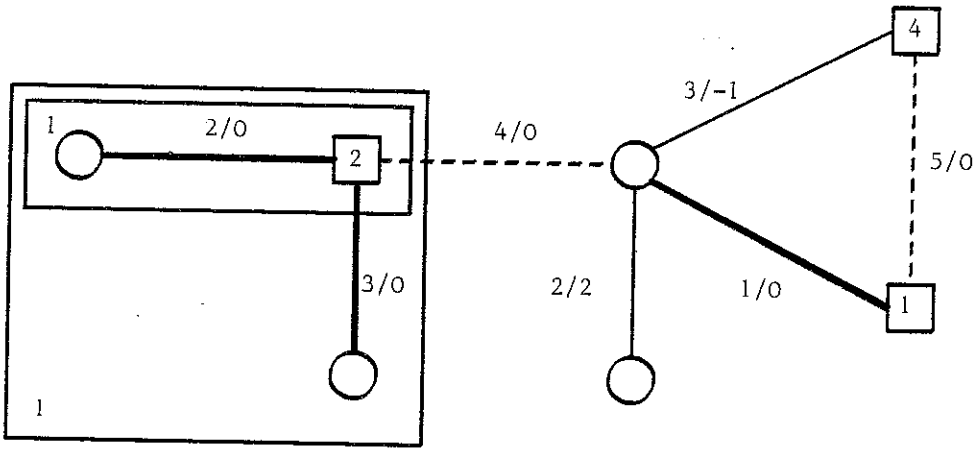
On choisit alors l'arête {a,b}. Après le marquage la modification duale a lieu avec $\delta = \min(\infty, 1, 3) = 1$.



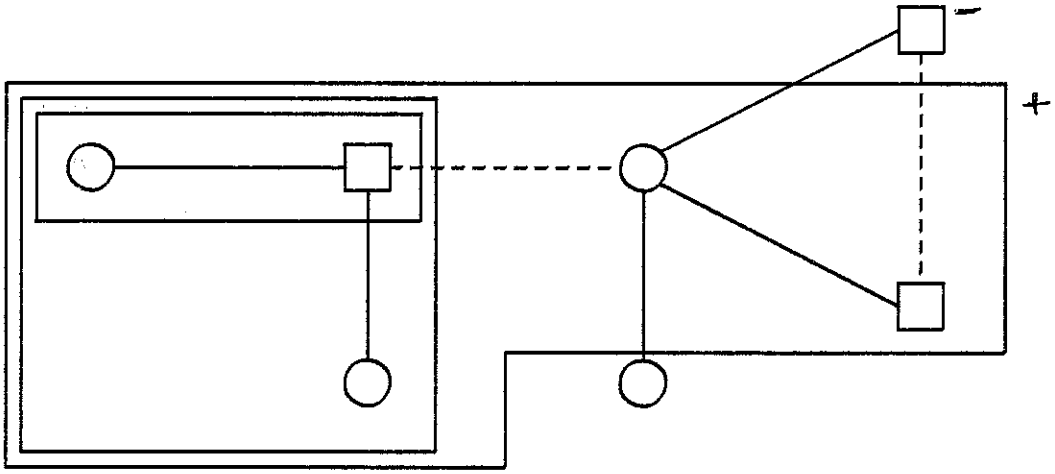
Il reste l'arête {d, f} de coût réduit négatif. Ses deux extrémités sont à l'intérieur du même pseudo-sommet que l'on marque -. On est conduit à une modification duale et l'on obtient



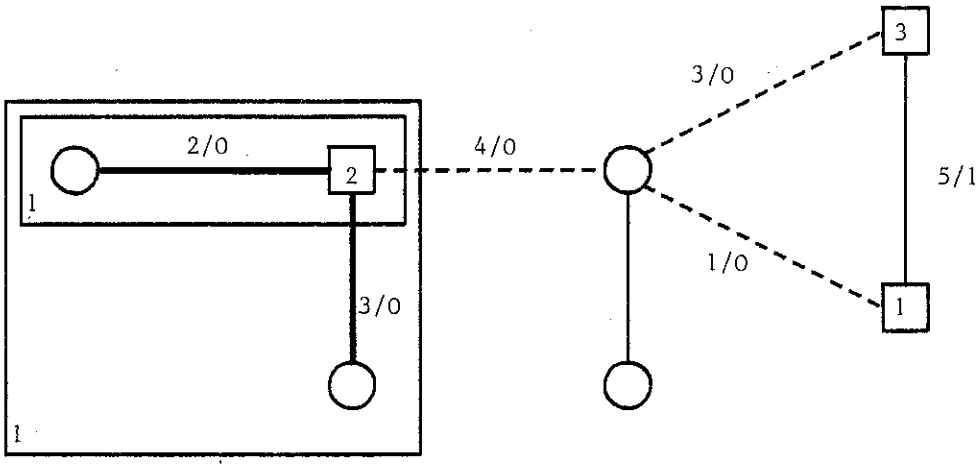
On doit prendre l'arête {d,f} et on choisit f comme pseudo-sommet initial. On est alors conduit à une modification duale ($\delta = 1$).



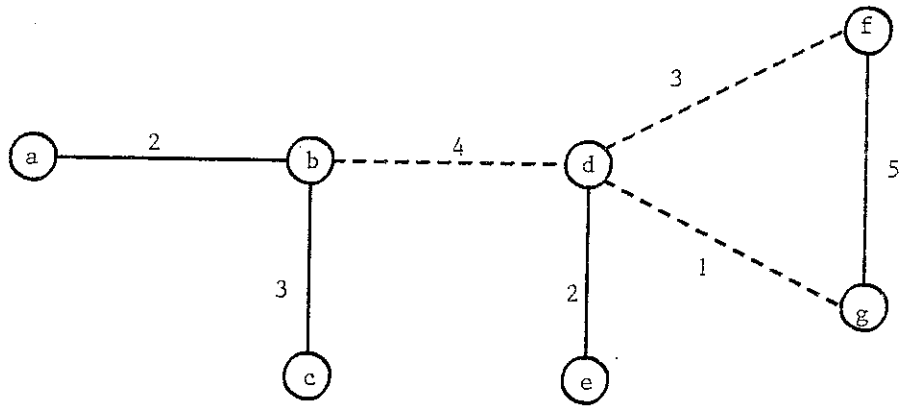
On doit maintenant prendre {d,f} comme arête à traiter et f comme pseudo-sommet initial. Le marquage donne le résultat suivant.



L'autre extrémité de l'arête initiale a été marquée +. On effectue donc une modification primale qui donne



Toutes les arêtes ont un coût réduit positif. Il ne reste donc qu'à éclater tous les pseudo-sommets et on obtient le couplage minimum de poids 8 suivant



On vérifie bien que $\Sigma\, \omega_e\, x_e = \Sigma\, Y_s$, sur la solution finale : $x_{bd} = 1$, $x_{df} = 1$, $x_{dg} = 1$, les autres x_e étant nuls.

A P P E N D I C E B

ALGORITHME POUR LA RECHERCHE DU FONDAMENTAL DU MODELE DU CHAMP ALEATOIRE

L'algorithme de Ford et Fulkerson (F.F.) a été largement décrit dans ce chapitre. On ne présente ici que sa mise en oeuvre.

Il convient tout d'abord de transformer le réseau des spins (site) en un graphe sur lequel on cherchera un flot maximum. On suppose cette transformation réalisée. Le graphe constitué de n sommets et m arêtes est donc donné (rappelons que l'ensemble des sommets consiste en les sites du réseau ainsi que les deux sites supplémentaires). Les sites sont numérotés de 0 à n-1. Les voisins du site i sur un réseau sont déterminés par une fonction très simple que nous ne décrivons pas. La place mémoire nécessaire se décompose ainsi :

1) deux tableaux de m entiers, l'un pour les flots et l'autre pour les capacités;

2) deux tableaux de n entiers : l'un pour mémoriser à partir de quel site un site donné a été marqué ou s'il ne l'a pas été. L'autre sert de pile. En représentant chaque entier sur deux octets, la place mémoire requise est de 4(m+n) octets. Par exemple pour un réseau carré périodique à trois dimensions de taille LxLxL, il faut réserver $4 \times (3L^3 + L^3) = 16L^3$ octets.

L'algorithme comporte deux phases distinctes répétées un grand nombre de fois. La première phase consiste en la recherche d'un chemin où l'on peut augmenter le flot. La deuxième consiste à augmenter effectivement le flot sur ce chemin. Pour cela différentes méthodes sont possibles. On présente ici la variante dite "recherche en profondeur d'abord" (Deepth First Search) qui consiste à construire une pile qui est une file d'attente où le dernier entré est le premier traité (LIFO : Last In First Out). Nous appellerons, par convention, A le dernier sommet empilé. On notera f_{AB} = flot sur l'arête AB. Si $f_{AB} > 0$ le flot va de A vers B, si $f_{AB} < 0$ le flot va de B vers A. La capacité de l'arête AB est notée C_{AB} et $C_{BA} = C_{AB} = |C_{AB}|$. Si un sommet A permet de marquer un sommet B, A sera le prédécesseur de B et noté pred(B). Dans ce cas, B est dit le successeur de A et est noté succ(A). On

appellera "gain" l'amélioration du flot que l'on a trouvé au pas considéré. L'algorithme est alors le suivant :

1°) construire un flot initial.

2°) empiler la source S ($S \to A$) ; gain = 0.

3°) existe-t-il B non marqué tel que $f_{AB} \neq C_{AB}$?
non : aller en 4
oui : aller en 6.

4°) dépiler A.

5°) la pile est-elle vide ?
non : aller en 3.
oui : FIN. Tous les sommets marqués correspondent à un spin (-) (si la convention adoptée consiste à relier les sites où $h_i < 0$ à la source S).

6°) B = Puits ?
non : aller en 7.
oui : aller en 8.

7°) gain := min (gain, si $f_{AB} < 0$ alors $-f_{AB}$ sinon $C_{AB} - f_{AB}$).
marquer B avec son prédécesseur A
empiler B
aller en 3.

8°) tant que B ≠ source 5
début C:= pred (B) ; $f_{BC} = f_{BC} + \text{sgn}(f_{BC}) \times \text{gain}$; B:= C ; fin,
aller en 2.

REFERENCES DU CHAPITRE II

(Ang(a)) J.C. ANGLES D'AURIAC, M. PREISSMANN, R. RAMMAL,
J. Physique Lett. 46 (1985), L173-L180 (ci-joint).

(Ang(b)) J.C. ANGLES D'AURIAC, R. MAYNARD,
Solid State Comm. 49 (1984), pp. 785-798 (ci-joint).

(Bac) C.P. BACHAS,
J. Phys. A : Math. Gen. 17 (1984), L709-L712.

(Bal) M.O. BALL, U. DERIGS,
Networks, vol. 13 (1983), 517-549.

(Bar(a)) F. BARAHONA
J. Phys. A, Math. Gen. 15 (1982), 3241.

(Bar(b)) F. BARAHONA,
Thèse de 3ème Cycle, Université de Grenoble (1980).

(Bar(c)) F. BARAHONA, R. MAYNARD, R. RAMMAL, J.P. UHRY,
J. Phys. A : Math. Gen. 15 (1982), 673.

(Bar(d)) F. BARAHONA,
J. Phys. A : Math. Gen. 18 (1985), L673-675.

(BaX) R.J. BAXTER,
Exactly solved models in statistical Mechanics,
Academic Press, 1982.

(Bie(a)) I. BIECHE,
Thèse de 3ème Cycle, Université de Grenoble (1979).

(Bie(b)) I. BIECHE, R. MAYNARD, R. RAMMAL, J.P. UHRY,
J. Phys. A : Math. Gen. 13 (1980), 2553.

(Bra) A.J. BRAY, M.A. MOORE, P. REED,
J. Phys. C 11 (1978), 1187.

(Edm. (a)) J. EDMONDS,
Journal of Research of the National Bureau of Standards B69
(1965), 125-130.

(Edm(b)) J. EDMONDS, E. JOHNSON,
Math. Prog. 5 (1973), 88-124.

(Edw) S.F. EDWARDS, P.W. ANDERSON,
J. Phys. F 5 §1975), 965.

(Eul) L. EULER,
Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis,
Comment. Academiae Sci. I. Petropolitanae 8 (1736), 128-140.

(F & F) L.R. FORD, D.R. FULKERSON,
Can. J. Math. 8 (1956), 399.

(Gar) M.R. GAREY, D.S. JOHNSON,
Computers and interactibility : A guide to the theory of NP Completeness (San Francisco : Freeman), 1979.

(Geo) A. GEORGES, P. HANSEL, P. LE DOUSSAL, J.P. BOUCHAUD, Preprint.

(Gon) M. GONDRAN, M. MINOUX,
Graphes et Algorithems, Paris, Eyrolles (1979).

(Isi) E. ISING,
Z. Physik 31 (1925), 235-238.

(Kir) S. KIRKPATRICK, S. GELATT, P.M. VECCHI,
Science 220 (1983), number 4598, 671.

(Mac) S. MAC LANE,
Duke Math. J3 (1937), 340-472.

(May) R. MAYNARD, R. RAMMAL,
J. Physique Lettres 43 (1982), L347-354.

(Mor) I. MORGENSTERN,
Phys. Rev. B 25 (1982), 6071.

(Pre) M. PREISSMANN, ANGLES D'AURIAC,
soumis (ci-joint).

(Tou) G. TOULOUSE,
Comm. on Physics 2 (1977), 115-119.

(Van) J. VANNIMENUS, G. TOULOUSE,
J. Phys. C 10 (1977), L537.

CHAPITRE III

DIAGRAMME DE PHASE DU MODELE D'ISING SOUS CHAMP ALEATOIRE

INTRODUCTION

I - PRESENTATION GENERALE

II - RESULTATS EXACTS

II.1. Limite du champ moyen ($d = \infty$)
II.1.a. Cas d'une distribution continue du champ aléatoire
II.1.b. Cas d'une distribution discrète
II.1.c. Etude à température nulle
II.2. Chaîne linéaire ($d = 1$)

III - ETUDE NUMERIQUE EN DIMENSION 2

III.1. Aimantation et aimantation projetée
III.2. Energie
III.3. Etude de la tension de ligne
III.4. Conclusion

IV - ETUDE EN DIMENSION 3

IV.1. Etude à température nulle
IV.1.a. Aimantation
IV.1.b. Fluctuations de l'aimantation
IV.1.c. Energie interne
IV.1.d. Energie d'interface
IV.1.e. Discussion
IV.2. Etude à température finie
IV.2.a. Méthode de Métropolis et algorithme de Monte Carlo
IV.2.b. Lois d'échelle en taille finie et ordre de la transition
IV.2.c. Résultats numériques
i) Diagramme de phase
ii) Etude de la ligne de transition

CONCLUSIONS

COMPLEMENT : Zéro de la fonction de partition pour le modèle du champ aléatoire à 3D

APPENDICE : Exemple détaillé d'un algorithme de Monte Carlo écrit en assembleur

INTRODUCTION

Ce chapitre est divisé en quatre paragraphes. Le paragraphe I est une présentation générale du problème. Certains aspects numériques, expérimentaux et théoriques déjà publiés y sont évoqués. Les problèmes étudiés dans la suite sont posés. L'approche de type champ moyen est l'objet du paragraphe II. L'accent est particulièrement mis sur l'étude à température nulle, le cas de la chaîne est aussi évoqué . Le paragraphe III est consacré au cas de la dimension 2, où seule la limite de température nulle a été étudiée. Le paragraphe IV traite du modèle en dimension 3 à température nulle ainsi qu'à température finie où les techniques de simulation numérique utilisées sont exposées et commentées. Après la conclusion, un complément présente des calculs des zéros de la fonction de partition de ce modèle en dimension 3.

I - PRESENTATION GENERALE

Les systèmes à désordre trempé sont intéressants pour au moins deux raisons : d'abord on les rencontre en fait partout (les modèles purs sont souvent une idéalisation), ensuite ils constituent des problèmes fondamentaux de la mécanique statistique. On peut introduire le désordre dans un modèle pur de différentes façons. Une des manières les plus simples est d'introduire un champ extérieur aléatoire, couplé au paramètre d'ordre. Ce programme a été initié par (Lac) pour la condensation de Bose-Einstein. Le résultat est que la transition subsiste, mais avec de nouveaux exposants critiques et que certaines relations d'échelle (Fisher, Josephson) peuvent être modifiées. Un autre type d'exemple peut être trouvé chaque fois que des défauts ou des impuretés perturbent un ordre cristallin : la destruction du réseau des Vortex dans un supraconducteur de type II (Lar) par des "accrochages aléatoires", l'adsorption sur des surfaces présentant des défauts (Vil(a)), les ondes de densité de charge commensurables dans un solide contenant des impuretés en sont des réalisations. Les systèmes expérimentaux relevant de ce type de modèles sont nombreux. L'hydrogène dissous dans l'alliage Niobium-Molybdène ($Nb_{0.95}Mo_{0.05}$) a été étudié expérimentalement et par simulation par (Hal) : un réseau cubique centré est constitué d'atomes de Niobium ou d'atomes de Molybdène, σ_a associé au site a vaut 0 ou 1 suivant que l'atome du site a est un Molybdène ou un Niobium. Les sites interstitiels sont occupés par un atome d'hydrogène, ou inoccupés. La variable dynamique τ_a associée au site interstitiel a vaut 0 ou 1 suivant que le site a est, ou non, occupé par un atome d'hydrogène. C'est un modèle de gaz sur réseau (Lattice Gas). L'hamiltonien peut s'écrire

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} \sum_{a,b} U_{ab}\, \tau_a \tau_b + \sum_a h_a \tau_a \quad \text{où } h_a = \sum_c U_{ac}\, \sigma_c$$

et U_{ac} est l'équivalent d'une énergie d'échange. On reconnaît ainsi un hamiltonien d'Ising qui fait partie de la classe des modèles étudiés dans ce chapitre. Une autre réalisation expérimentale consiste à placer un liquide binaire (par exemple de l'acide isobutyrique et de l'eau)

dans un gel (par exemple de la silice) pour en étudier le comportement critique (opalescence). Le gel semble agir comme un champ aléatoire (Mah). Dans un autre contexte (Azb) a proposé l'utilisation de ce type de modèles pour décrire les propriétés optiques de l'ADN. Enfin les réalisations les plus courantes sont dans le domaine du magnétisme : il s'agit principalement d'antiferromagnétiques dilués sous champ magnétique uniforme dont l'appartenance à cette classe de modèles va être précisée dans la suite. On voit donc qu'il s'agit d'un problème très général, néanmoins le modèle envisagé ici est particularisé aux systèmes magnétiques. Plus précisément, des spins d'Ising ($\sigma_i = \pm 1$) sont disposés sur un réseau (généralement une partie de Z^d). L'Hamiltonien est composé de deux parties $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ où $\mathcal{H}_0$ est l'Hamiltonien du système pur :

$$\mathcal{H}_0 = - \sum_{<i,j>} J_{ij}\, \sigma_i \sigma_j \quad , \; J_{ij} \geqslant 0 \quad , \; \sigma_i = \pm 1$$

où la somme porte sur les proches voisins et $\mathcal{H}_1$ est le terme de désordre :

$$\mathcal{H}_1 = - \sum_i h_i \sigma_i \quad , \quad \sigma_i = \pm 1 .$$

Les h_i sont des champs aléatoires fixes (désordre trempé) indépendants les uns des autres et de même loi de probabilité $P(h_i)$. Le modèle pur ($\mathcal{H}_1 \equiv 0$) est connu depuis longtemps. Ising (Isi) en 1925 a proposé ce modèle et l'a résolu à 1 dimension. En 1944, Onsager (Ons) l'a résolu à 2 dimensions. Il n'y a pas une solution analytique analogue à 3 dimensions. Toutefois les valeurs des exposants critiques et de la température critique sont connues très précisément à partir des développements en séries ou des simulations numériques. La théorie de champ moyen, valable pour d supérieur à la dimension critique supérieure $d_c = 4$ est aussi connue depuis longtemps.

Bien sûr la présence du terme $\mathcal{H}_1$ dans l'Hamiltonien $\mathcal{H}$ peut modifier le comportement du système pur. L'étude de ces changements, en fonction de la dimension d sera l'objet de ce chapitre.

Précisons d'abord quelques réalisations expérimentales, de type magnétique. Pour cela particularisons la distribution de champ aléatoire h_i à la forme suivante :

$$P(h_i) = \frac{1}{2}\,\delta(h_i - h) + \frac{1}{2}\,\delta(h_i + h) \qquad (I.1)$$

et $\qquad J_{ij} = J.$

On peut donc poser $h_i = \varepsilon_i\, h$ où $\varepsilon_i = \pm 1$. Il vient

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle ij\rangle} \sigma_i\sigma_j - h\sum_i \varepsilon_i\sigma_i$$

que l'on écrit

$$\mathcal{H} = -\sum_{\langle ij\rangle} J_{ij}\mu_i\mu_j - h\sum \mu_i$$

où

$$J_{ij} = J\varepsilon_i\varepsilon_j \quad \text{et} \quad \mu_i = \varepsilon_i\sigma_i$$

Les J_{ij} ne sont pas indépendants mais de même loi de probabilité. Lorsque l'on calcule la fonction de partition Z, on somme sur tous les $\{\sigma_i\}$, donc sur tous les $\{\mu_i\}$ et l'on reconnaît dans la deuxième forme de $\mathcal{H}$ un modèle de Mattis (Mat) sous champ uniforme. Ainsi avec le $P(h_i)$ choisi le modèle de champ aléatoire est équivalent à un modèle de Mattis sous champ. Cette remarque a permis à (Fis 1) de constater qu'un antiferromagnétique dilué sous champ uniforme peut être considéré comme une réalisation expérimentale d'un modèle ferromagnétique sous champ aléatoire. Les composés du type Rb_2MF_4 où M est un atome métallique sont bien modélisés par des réseaux à deux dimensions, tandis que les composés du type MF_2 sont, eux, bien modélisés par un réseau à 3 dimensions. C'est pourquoi de nombreux composés $Rb_2Co_{0,7}Mg_{0,3}F_4$, $Rb_2Mn_{0,5}Bi_{0,5}F_4$ (d = 2), $Co_cMn_{1-c}F_2$ et Mn_cZb_{1-c} (d = 3) ont été étudiés (voir (Bir), pour une revue) avec des techniques de bi-refringence ou de diffraction des neutrons. Les résultats des différents groupes expérimentaux semblent indiquer plusieurs points : i) le désordre, aussi faible soit-il, suffit à détruire l'ordre ferromagnétique à longue distance à 2 dimensions, mais pas à 3 dimensions (Jacc);

ii) on observe à 2 dimensions une ligne $T_F(H)$ dans le plan (T-H) séparant une région dite d'équilibre d'une région gelée où la méthode de refroidissement (refroidissement sous champ ou refroidissement sans champ puis établissement du champ) produit des comportements différents (Kin) ; iii) à 3 dimensions une transition apparemment discontinue survient à une température $T_N(H)$ entre un régime où le comportement dépend de l'histoire de l'échantillon et un régime où il n'en dépend pas. On observe aussi des relaxations logarithmiques avec le temps et de l'hystérésis (Bel) (Bir) dans la région de la transition.

Parmi les problèmes soulevés par ces études, seules les questions relatives au comportement à l'équilibre seront abordées dans la suite de ce chapitre. Les problèmes de dynamique (hystérésis, ralentissement critique,...) ne seront pas abordés ici. Plus précisément l'objectif va être de préciser i) la valeur de d_c où d_c est la dimension critique inférieure, c'est-à-dire la plus grande dimension où un désordre aussi faible soit-il détruit l'ordre ferromagnétique ; ii) de déterminer le diagramme de phase (champ, température) de ce modèle. Ce programme est l'équivalent, aussi bien sur le plan théorique que sur le plan de l'expérimentation numérique, des modèles du type Verres de Spins, qui sont aussi des modèles d'Ising désordonnés, mais où le désordre porte sur les variables de couplage des variables de spins (J_{ij} aléatoire). Les deux concepts dégagés par (Tou) dans le cadre des verres de spins : désordre et frustration sont aussi présents dans les deux classes de modèles. Dans le cas du modèle du champ aléatoire, le désordre est explicite, et la frustration se manifeste très bien sur l'exemple suivant :

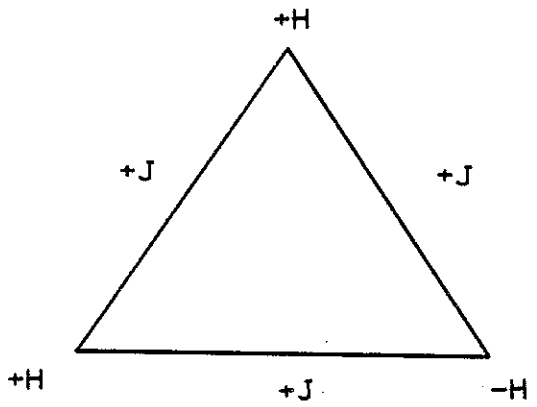


FIGURE 1

où l'on ne peut satisfaire à la fois les trois liaisons et les trois champs. La présence de la frustration rend la recherche des états d'énergie minimum difficile (voir chapitre II). La présence d'un autre désordre que le désordre thermique a de nombreuses conséquences. Par exemple, on peut s'attendre à une violation de la relation d'hyperscaling (Josephson) lorsque la transition du 2ème ordre subsiste. En effet, on peut comprendre cette relation de la manière suivante : à une température T proche de T_c ($\neq 0$), ξ est la taille typique des domaines qui peuvent être inclus dans la "mauvaise phase", à cause des fluctuations thermiques. Ces domaines mettent en jeu ξ^d spins et ont une énergie libre $\simeq \xi^d\ t^{2-\alpha} \simeq t^{-d\nu+2-\alpha}$ où $t = |T-T_c|/T_c$. Cette énergie libre doit être de l'ordre de kT, donc

$$t^{2-\alpha-\nu d} \sim kT \qquad (I.2)$$

d'où $d\nu = 2 - \alpha$. Le raisonnement ci-dessus valable pour le cas pur doit être modifié, dans le cas d'un désordre trempé, puisque l'énergie libre $t^{-d\nu+2-\alpha}$ n'est plus seulement compensée par l'énergie de l'agitation thermique kT, mais aussi par la fluctuation des champs aléatoires. Dans un volume ξ^d, la fluctuation des champs est de l'ordre de $\xi^{d/2} \sim t^{-\nu d/2}$, elle est couplée à l'aimantation $m \sim t^\beta$ et (I.2) devient $t^{2-\alpha-\nu d} \sim t^{\beta - \nu d/2}$ soit $2-\alpha-\nu d = \beta - \frac{\nu d}{2}$. Donc en utilisant $2\beta = 2 - \alpha - (2-\eta)\nu$ il vient (Imr(b)) :

$$2 - \alpha = \nu(d - 2 + \eta) \qquad (I.3)$$

L'argument précédent a été avancé dans le cadre de la controverse sur la dimension critique inférieure d_c. Cette controverse peut se résumer ainsi : bien sûr $d_c > 1$ puisque même le modèle pur à 1 dimension (chaîne d'Ising) n'admet pas d'ordre pour $T > 0$. La discussion est alors de savoir si $d_c = 2$ ou si $d_c = 3$. Différentes approches donnent des résultats contradictoires. La plupart des arguments en faveur de $d_c = 3$ reposent sur un argument de réduction dimensionnelle qui prétend qu'un modèle avec désordre couplé au paramètre d'ordre en d dimensions équivaut du point de vue des classes d'universalité à un modèle pur en (d-2) dimensions. Les dimensions critiques inférieures et supérieures du modèle d'Ising pur étant respectivement 1 et 4, on prédit alors des dimensions critiques inférieures et supérieures de 3 et de 6.

Ceci semble vrai pour la dimension critique supérieure (6), d'après les approches du type théorie des champs. Plusieurs auteurs ont alors tenté de justifier cet argument de réduction dimensionnelle pour tout d, en comparant le développement en $4-\varepsilon$ du modèle pur et le développement en $6-\varepsilon$ du modèle avec désordre à tout ordre en ε. (Gri(c)), (Aha(a)), (You(a)), (Par) ont introduit une formulation supersymétrique du problème. Enfin, un modèle d'interface sous champ aléatoire (Pyt) semblait aussi aller dans le sens de l'hypothèse $d_c = 3$ (Muk), (Kog). L'argument de réduction dimensionnelle semble en fait vrai lorsque la dimensionalité du spin est supérieure ou égale à 2 (spin XY, spin d'Heisenberg), mais dans le cas des spins d'Ising beaucoup de travaux le mettent en doute. L'argument original de Imry et Ma (Imr(a)) en faveur de $d_c = 2$ est le suivant : envisageons un état ordonné ferromagnétique à température nulle sur un réseau à d dimensions, le retournement d'un amas de spins de taille linéaire L coûte une énergie $\sim JL^{d-1}$. L'énergie due au couplage avec le champ aléatoire sera en moyenne nulle, mais on peut espérer, en choisissant correctement la position de l'amas, gagner la fluctuation de cette énergie, soit $hL^{d/2}$.

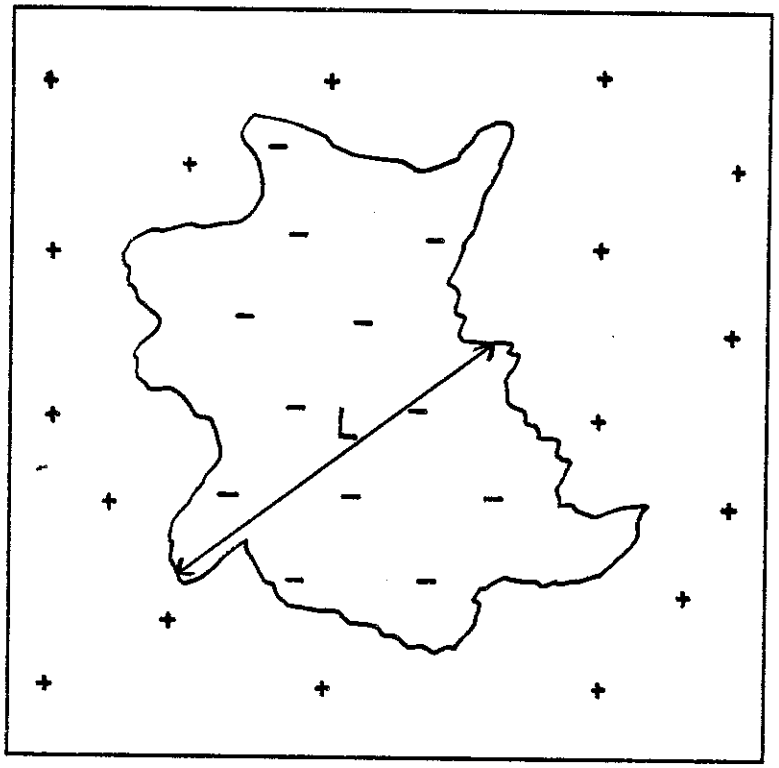


FIGURE 2

Ainsi l'énergie du retournement sera égale à $\Delta E = JL^{d-1} - hL^{d/2}$, donc :

$$\frac{\Delta E}{J} = L^{d-1} - (\frac{h}{J})L^{d/2} \qquad (I-4)$$

Si d = 1 : pour tout $x \equiv h/J$ on trouvera donc un L assez grand qui rende ΔE négatif. Si d = 3 le terme L^2 l'emportera sur $\frac{h}{J} L^{3/2}$ pour L grand et le retournement de l'amas ne sera pas favorable. Finalement, la dimension critique inférieure d_c sera donnée par $d_c - 1 = \frac{d_c}{2}$, soit $d_c = 2$. Ce résultat a été confirmé par des calculs plus raffinés à température nulle par (Cha),(Fis(c))(Imb). Cependant les deux termes de (I.4) sont peut-être sous-évolués ou sur-évalués si l'amas n'a pas un profil Euclidien (notons que si la dimensionalité du spin devient supérieure à 1 l'énergie des liaisons violées sera JL^{d-2} ce qui conduit à $d_c = 4$). Pour étayer cet argument, l'étude d'un interface sous champ aléatoire a été reprise (Vil (a)(b)) (Gri(a)(b)) (Bin(a)) par des arguments d'échelle et par des méthodes numériques utilisant les matrices de transfert (Fer). Cette étude est reprise largement dans la suite en utilisant la technique originale du chapitre II bien adaptée à la température nulle. D'autres simulations indiquent aussi $d_c = 2$: des simulations utilisant la méthode de Monte-Carlo (Lan) portent sur des tailles trop faibles pour être convaincantes. Enfin (You(b)) trouvent à 3 dimensions un comportement quasi-critique à une température $T_c(H)$ avec une transition qu'ils suggèrent être du 1er ordre.

On s'est limité dans cette présentation aux aspects statiques de la transition. Les publications sur les aspects dynamiques sont aussi nombreuses. Les arguments en faveur de l'une ou l'autre des hypothèses $d_c = 2$ et $d_c = 3$ sont nombreux. Le consensus des théories et des expériences semble néanmoins s'établir sur l'hypothèse $d_c = 2$. Le travail numérique des paragraphes qui suivent indique très nettement une évidence dans ce sens. Il reste alors à comprendre ce qui est erroné dans les arguments indiquant $d_c = 3$.

II - RESULTATS EXACTS ET CAS SOLUBLES

Un nombre limité de résultats analytiques sont disponibles pour le modèle d'Ising sous champ aléatoire.

II.1. Limite du champ moyen.

Pour N spins, l'Hamiltonien s'écrit :

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{<ij>} \sigma_i \sigma_j - \sum_{<i>} h_i \sigma_i$$

Par commodité, on prendra J = 1 dans la suite. Dans le cas pur ($h_i \equiv 0$), on a $T_c = J = 1$. A la différence du problème des verres de spins où le calcul en champ moyen ne se conduit pas aussi simplement, la moyenne de l'énergie libre du modèle de champ aléatoire peut se calculer facilement. La difficulté principale, pour les systèmes désordonnés en général, réside dans le fait qu'il convient de calculer $\overline{\ell n Z}$ (où $\overline{(\ldots)}$ désigne la moyenne sur le désordre) pour représenter un modèle où les impuretés qui créent le désordre ne sont pas des variables dynamiques (désordre trempé). Ceci est à opposer aux modèles dit recuits où l'on calcule $\ell n\, \overline{Z}$. Cette distinction est à l'origine des difficultés rencontrées dans le cas des verres de spins, que Parisi a proposé de résoudre par son "schéma de brisure de symétrie des répliques". Cependant, dans le cas du champ aléatoire, il apparaît que l'on peut se limiter à des solutions ne brisant pas la symétrie des répliques (Ram). Différentes méthodes (Sch) (Kle) conduisent à la solution suivante pour l'énergie libre f et l'aimantation m :

$$-\beta f = \int dh \quad P(h)[\ell n 2 \, ch\beta(m + h) - \frac{\beta}{2} m^2] \qquad \text{(II.1.a)}$$

$$m = \int dh \, P(h)[th\, \beta(m + h)] \qquad \text{(II.1.b)}$$

où β est l'inverse de la température ($\beta = 1/T$) et où P(h) est la distribution du champ aléatoire.

II.1.a. Cas d'une distribution continue P(h) :

Le cas où P(h) est une distribution uniforme de largeur 2H centrée autour de 0 : $P(h) = \frac{1}{2H}\ \delta_{[-H,+H]}$ est particulièrement simple. Le plan (H-T) comporte 2 régions : la région paramagnétique d'aimantation moyenne nulle, et la région ferromagnétique d'aimantation moyenne non nulle :

$$m = \frac{1}{2H\beta}\ \ell n\ \frac{ch\ \beta(m + H)}{ch\ \beta(m - H)} \quad .$$

Ces deux régions sont séparées par une ligne de transition du 2ème ordre d'équation $th\ \frac{H}{T} = H$.

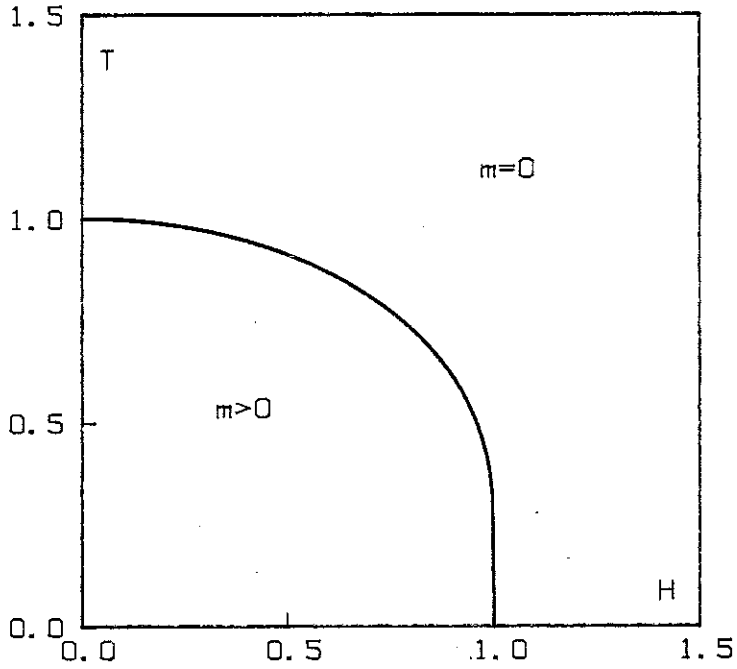


FIGURE 3

II.1.b. Cas d'une distribution discrète :

Le cas de la distribution $P(h_i) = \frac{1}{2}\,[\,\delta(h_i - h) + \delta(h_i + h)]$ est particulièrement riche, bien qu'en fait et malgré les apparences ce modèle ne soit pas un modèle désordonné. En effet, tous les sites étant équivalents, seul le nombre de sites portant un champ négatif intervient dans le calcul de $\overline{\ell n Z}$. De plus seule la réalisation du désordre (i.e. le nombre de champs négatifs) la plus probable contribue à

$\overline{\ell nZ} = \int P(\{h_i\})\ell nZ\{h_i\}$ .Il suffit alors de calculer la fonction de partition du modèle <u>sans désordre</u> suivant :

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{i,j} \sigma_i\sigma_j - h \sum_{i=1}^{N/2} \sigma_i + h \sum_{i=N/2+1}^{N} \sigma_i$$

où la première somme porte sur tous les couples.

En posant

$$M^+ = \sum_{i=1}^{N/2} \sigma_i \quad \text{et} \quad M^- = \sum_{i=N/2+1}^{N} \sigma_i \quad \text{et } M = M^+ + M^-$$

il vient

$$Z_N(\beta,h) = \sum_{\{\sigma\}} \exp\{\frac{\beta J}{2N} M^2 - \frac{\beta J}{2} + \beta h(M^+ - M^-)\}$$

Pour linéariser par rapport à M, remarquons que

$$\exp \frac{\beta J}{2N} M^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp\{-\frac{t^2}{2} + \sqrt{\frac{\beta J}{2N}} Mt\}$$

d'où

$$Z = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-\frac{\beta J}{2}) \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp\{-\frac{t^2}{2} \sum_{\{\sigma\}} \prod_{i=1}^{N/2} \exp(A\sigma_i) \prod_{i=N/2}^{N} \exp B\sigma_i\}$$

où

$$A = \sqrt{\frac{\beta J}{N}}\, t + \beta h \quad \text{et} \quad B = \sqrt{\frac{\beta J}{N}}\, t - \beta h$$

Pour linéariser par rapport à σ_i remarquons que $\exp A\sigma_i = (chA)(1+\sigma_i thA)$ la somme $\sum_{\{\sigma\}}$ peut être effectuée et il vient

$$Z_N(\beta,h) = \sqrt{\frac{N}{2\pi\beta J}}\, 2^N e^{-\frac{\beta J}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp N(-\frac{t^2}{2\beta J} + \frac{\ell n(ch(t+\beta h)) + \ell n(ch(t-\beta h))}{2})$$

Pour N grand on peut évaluer l'intégrale par la méthode du col. On trouve :

$$-\beta f(h,T) = \lim_{N\to\infty} \frac{\ell n\, Z_N}{N} = -\frac{t_0^2}{2\beta J} + \frac{1}{2} \ell n\{2ch(t_0+\beta h)\} + \ell n\, 2ch(t_0-\beta h)\}$$

où t_0 est le point col défini par

$$\frac{t_0}{\beta J} = \frac{\mathrm{th}(t_o + \beta h) + \mathrm{th}(t_0 - \beta h)}{2}$$

L'identification de m avec $\frac{t_0}{\beta J}$ ramène bien ce modèle sans désordre à celui étudié.

Une démonstration encore plus directe est la suivante. Notons :

$$m_o = \frac{2}{N} \sum_{i=1}^{N/2} \sigma_i \quad \text{et} \quad m_1 = \frac{2}{N} \sum_{i=N/2+1}^{N} \sigma_i$$

l'aimantation de chacun des deux "sous-réseaux". L'énergie interne par spin peut s'écrire

$$\frac{E}{N} \underset{N\to\infty}{\sim} -\frac{J}{8}(m_0 + m_1)^2 - \frac{h}{2} m_0 + \frac{h}{2} m_1$$

On peut aussi calculer facilement l'entropie

$$S \quad (m_0, m_1) = \ell n \binom{N_0^+}{N/2} \binom{N_1^+}{N/2}$$

où N_0^+(resp.N_1^+) est le nombre de spins du sous-réseau des sites où le champ est positif (resp. négatif) :

$$N_0^+ = \frac{N}{4}(1 - m_0) \quad , \quad N_1^+ = \frac{N}{4}(1 - m_1)$$

d'où en utilisant la formule de Stirling :

$$\frac{S}{N} \underset{N\to\infty}{\sim} -\frac{1}{4}\left[(1-m_0)\ell n\left(\frac{1-m_0}{2}\right) + (1+m_0)\ell n\left(\frac{1+m_0}{2}\right) + (1-m_1)\ell n\left(\frac{1-m_1}{2}\right) + (1+m_1)\ell n\left(\frac{1+m_1}{2}\right)\right]$$

On peut alors facilement écrire l'énergie libre sous la forme :

$$f(m_0,m_1) = -\frac{J}{8}(m_0+m_1)^2 - \frac{h}{2} m_0 + \frac{h}{2} m_1 + \frac{T}{4}\left[(1-m_0)\ell n\left(\frac{1-m_0}{2}\right) + (1+m_0)\ell n\left(\frac{1+m_0}{2}\right)\right.$$

$$\left. + (1-m_1)\ell n\left(\frac{1-m_1}{2}\right) + (1 + m_1)\ell n\left(\frac{1+m_1}{2}\right)\right]$$

La minimisation de f par rapport à m_0 et m_1 conduit à :

$$T \text{ Argth } m_0 = + \frac{J}{2} (m_0 + m_1) + h$$

$$T \text{ Argth } m_1 = - \frac{J}{2} (m_0 + m_1) - h$$

soit en notant $m = \frac{1}{N} \Sigma \sigma_i = m_0 + m_1$

$$m = \frac{1}{2} \text{ th } \beta(Jm + h) + \text{th } \beta(Jm - h)$$

On retrouve bien le résultat attendu plus haut. Le diagramme de phase est alors le suivant :

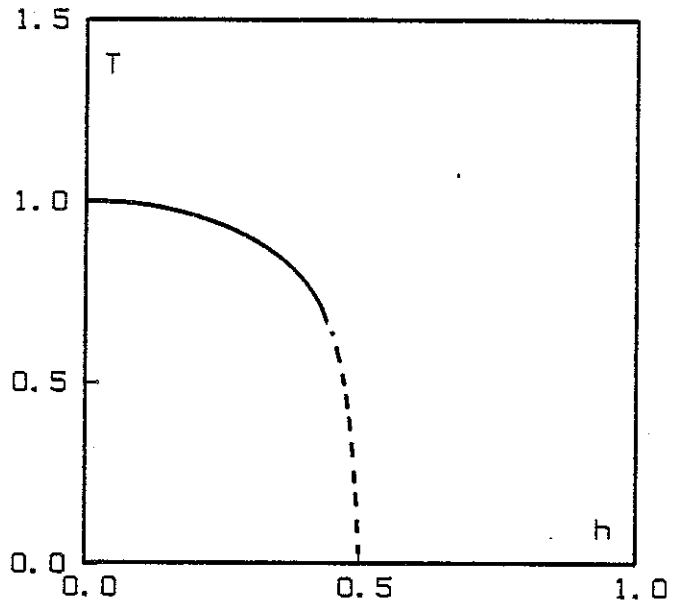


FIGURE 14

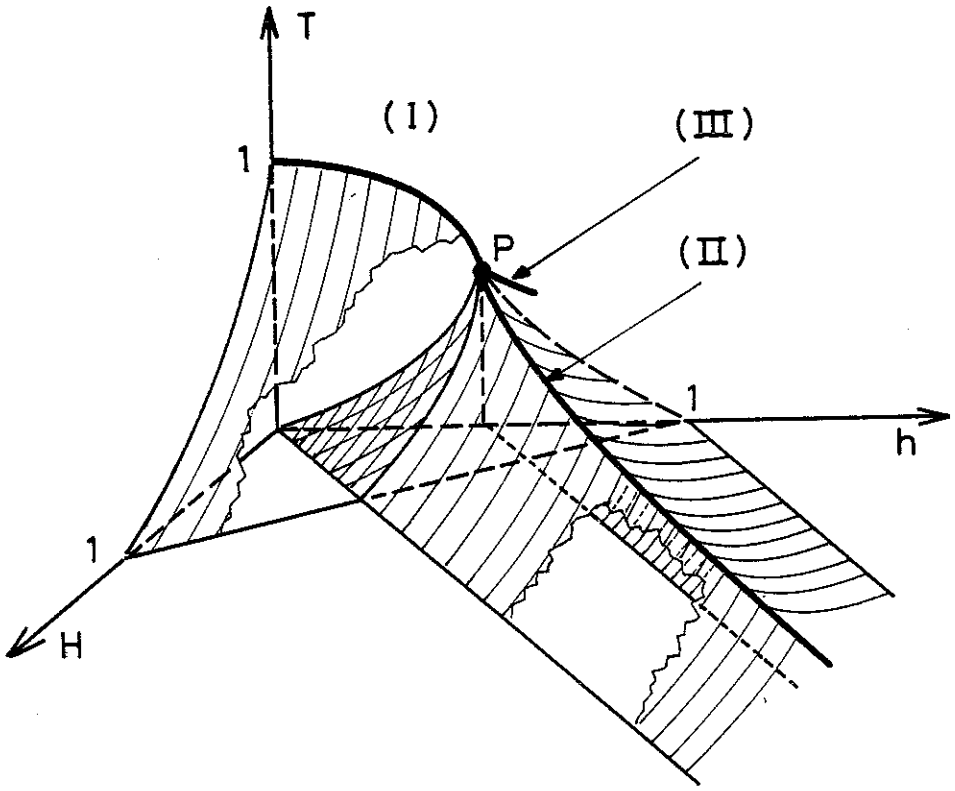
La ligne de transition du 2ème ordre a pour équation :

$$h = T \text{ Argth } \sqrt{1 - T} \quad (2/3 \leqslant T/J \leqslant 1) .$$

Le reste de la ligne est du premier ordre ($0 \leqslant T/J \leqslant 2/3$). Pour comprendre la nature du point tri-critique ($T = 2/3$, $h = 2/3 \text{ Arth } \frac{1}{\sqrt{3}}$) il faut ajouter un champ exterieur et la distribution des champs locaux, qui n'est plus centrée devient:

$$P(h_i) = \frac{1}{2} \delta(H + h - h_i) + \frac{1}{2} \delta(H - h - h_i)$$

Le diagramme de phase est alors le suivant :



(seule la partie correspondant a H>0 est representee)

FIGURE 5

Les surfaces spinodales (hachurées sur la figure) sont données par les deux équations

$$2m = \text{th}\,\beta(m + H + h) + \text{th}\,\beta(m + H - h) \qquad \text{(II.2.a)}$$

$$2 = \beta[2 - \text{th}^2\beta(m + H + h) - \text{th}^2\beta(m + H - h)] \qquad \text{(II.2.b)}$$

On vérifie bien que pour $h = 0$ on retrouve la ligne spinodale du cas pur : $H_s = \pm(\text{Argth}\sqrt{1-T} - \sqrt{1-T})$. Le point tricritique correspond au raccordement des 3 lignes critiques de deuxième ordre qui sont les bords des surfaces de transition du premier ordre : (I) : bord de la surface

contenue dans le plan H = 0, (II) et (III) étant les deux bords des surfaces symétriques par rapport à H = 0. Leur équation s'obtient en ajoutant l'équation

$$1 - 2T\ \mathrm{th}^2 \frac{2h}{T} = 0 \qquad \text{(II.3)}$$

aux deux équations précédentes (II.2.a) et (II.2.b).

On peut finalement obtenir l'équation des intersections des surfaces du 1er ordre avec le plan T = 0. Ce sont deux droites d'équation : h = 1/2 ± H (lignes en pointillé sur la figure 5).

La figure 6 ci-dessous représente l'intersection du diagramme de la figure 5 avec le plan T = 0,2. Sur la figure 6a,b,c et d, sont montrées les différentes courbes d'aimantation m(H) pour T = 0,2 et 4 valeurs différentes de h. On peut facilement voir le comportement m(H) à l'équilibre, ou dans un état métastable.

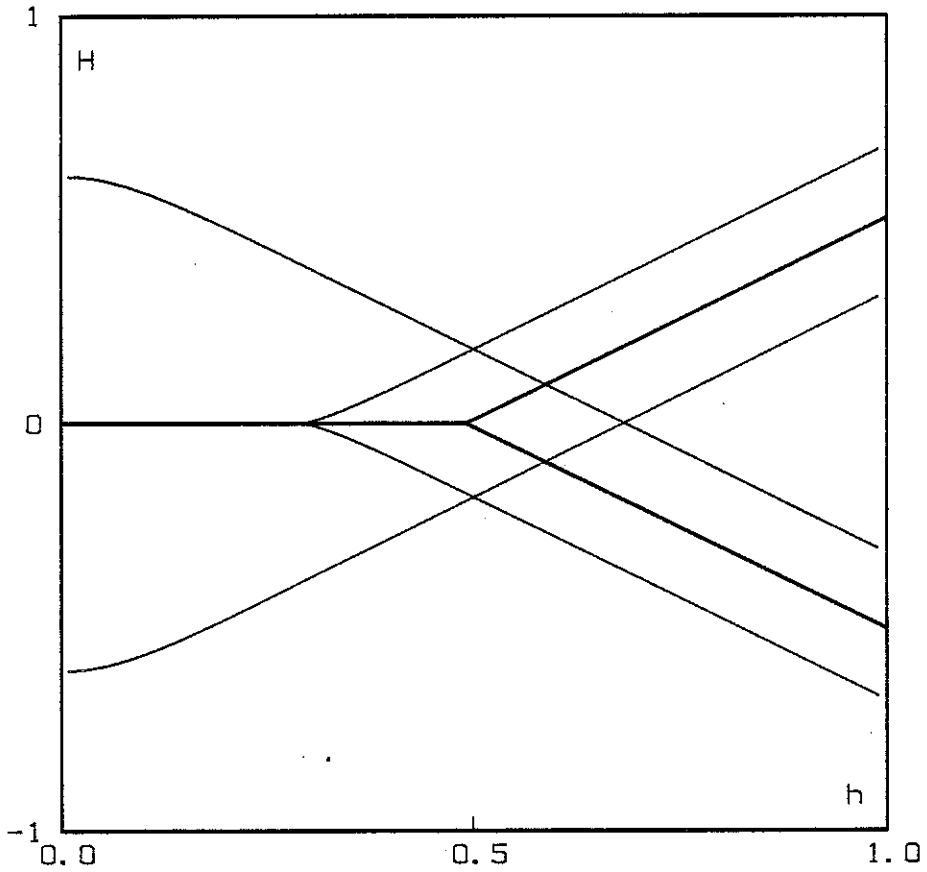


FIGURE 6

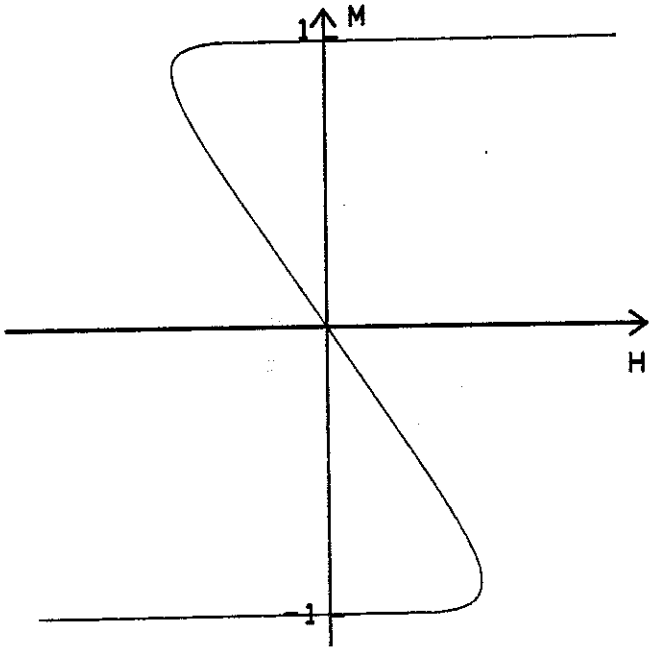


FIGURE 6 a) (T=0.2 , h=0.15)

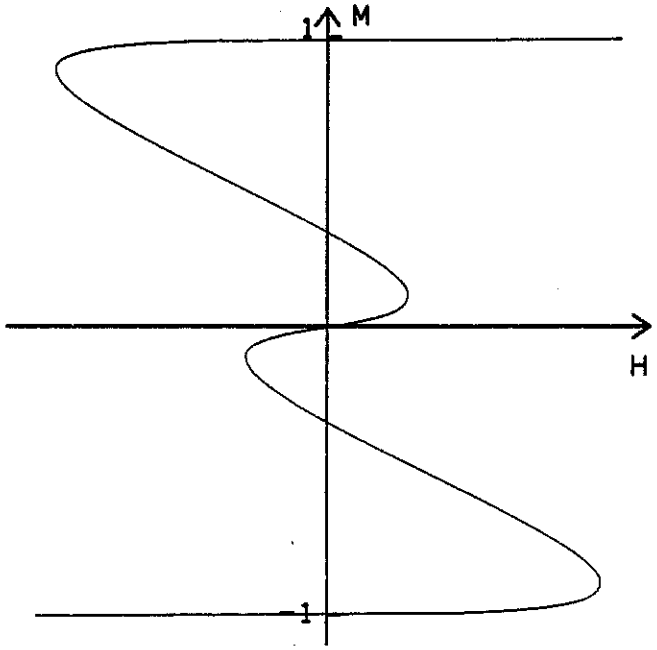


FIGURE 6 b) (T=0.2 , h=0.4)

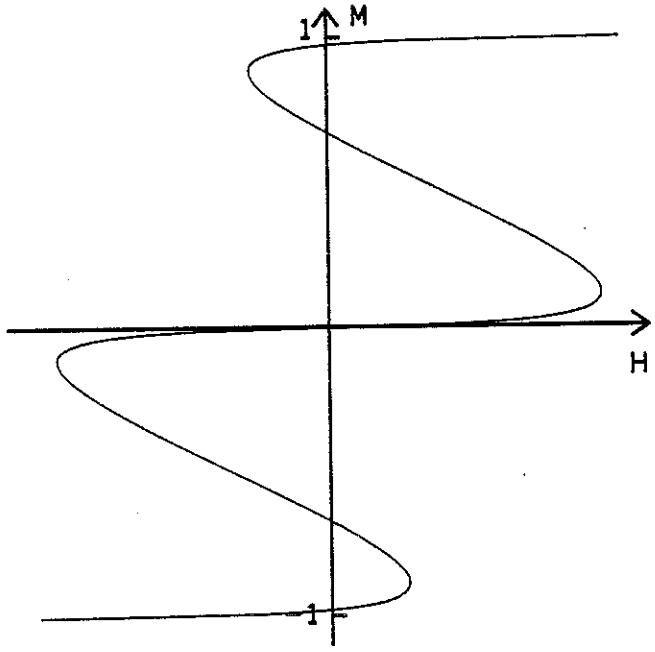


FIGURE 6 c) (T=0.2 , h=0.6)

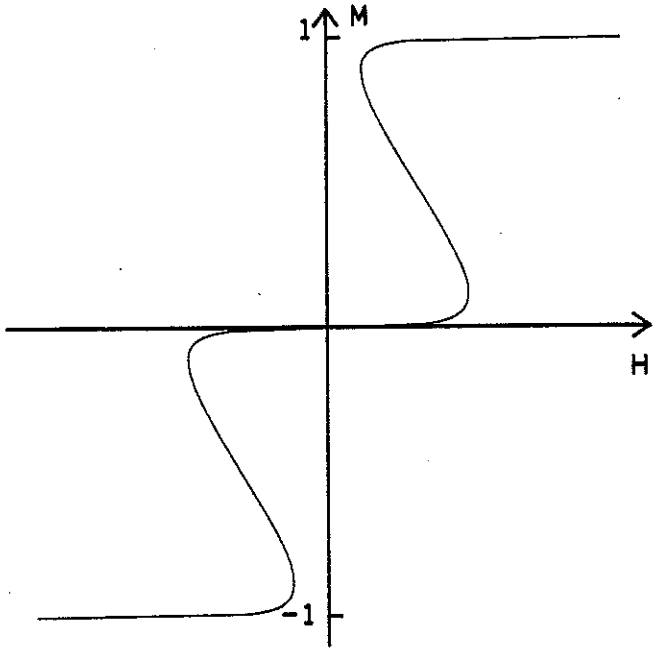


FIGURE 6 d) (T=0.2 , h=0.8)

Le cas où l'on dilue les champs aléatoires, c'est-à-dire que l'on introduit une probabilité α de présence du champ aléatoire

$$P(h_i) = (1 - \alpha)\delta(h_i) + \frac{\alpha}{2}[\delta(h_i - h) + \delta(h_i + h)]$$

conduit à des résultats semblables, où l'axe du champ extérieur H est remplacé par l'axe α.

II.1.c. Nature de la transition à température nulle :

Il est très remarquable que l'ordre de la transition dépende de la distribution de probabilité des champs. Lorsque le désordre est absent, la transition est toujours du 2ème ordre, mais à l'autre extrémité de la ligne de transition, c'est-à-dire pour $T \sim 0$ la transition peut être du premier ordre (distribution discrète) ou continue (distribution gaussienne). Un critère pour déterminer l'ordre de la transition à température nulle a été proposé dans (Aha(b))(Sax). Dans la région critique on peut écrire $m \sim Am - Bm^3 \ldots$ où

$$A = \beta J \int_{\mathcal{R}} dh\, P(h)\, th^2 \beta J$$

et

$$B = \frac{(\beta J)^3}{3} \int_{\mathcal{R}} dh\, P(h)\, [1 - th^2(\beta h)]\, [1 - 3th^2(\beta h)]$$

Le changement de variable $x = \beta h$ et l'hypothèse qu'autour de $h = 0$, $P(h)$ est analytique, conduisent à :

$$A = 2JP(0) + O(T^2) \qquad \text{et} \quad \beta = -\frac{1}{3} J^3 P''(0) + O(T^2)$$

D'où l'on déduit pour une distribution symétrique, $(P(h) = P(-h))$, une transition du premier ordre lorsque $P''(0) > 0$.

Lorsque la transition est du 2ème ordre, il est possible de considérer $x = \sqrt{\overline{h^2}}/J$ comme mesure de l'intensité du désordre, et de calculer les exposants critiques, associés à la transition au point $(T = 0,\ X = X_c)$. Le paramètre d'ordre est $m(x)$ et l'exposant β est

défini comme

$$m(x) \underset{x \to x_c^-}{\sim} (x_c - x)^{\beta}$$

On peut aussi définir l'exposant γ par

$$\chi(x) \underset{x \to x_c}{\sim} |x - x_c|^{-\gamma}$$

En ajoutant un champ extérieur uniforme, on définit δ par la relation $m(x = x_c, H) \underset{H \sim 0}{\sim} H^{1/\delta}$. L'exposant α ne doit plus être associé à la singularité de la chaleur spécifique, mais à la dérivée seconde de l'énergie libre. En effet, la chaleur spécifique, considérée comme la réponse en énergie interne à une fluctuation du paramètre de désordre thermique $C = \frac{dE}{dx}$, est associée à une dérivée première de l'énergie libre (et non seconde comme pour les transitions habituelles en température) car à température nulle $f = E$.

$$d^2E/dx^2 \sim |x-x_c|^{-\alpha}$$

Noter que C et χ ainsi définies ne peuvent plus être associées aux fluctuations thermiques de e et de m (théorie de la réponse linéaire, théorème de fluctuation-dissipation).

Les équations obtenues plus haut :

$$f(m) = \frac{1}{2} m^2 - \frac{1}{\beta} \int P(h)dh \, \ln 2\mathrm{ch}\, \beta(m + h + H)$$

et $$m = \int P(h)\mathrm{th}\, \beta(m + H + h)dh$$

deviennent à température nulle :

$$f(m) = \frac{J}{2} m^2 - 2\int_0^m (m + H - h)dh - 2\int_0^{\infty} hP(h)dh \qquad \text{(II.3.a)}$$

et $$m = 2\int_0^{m+H} P(h)dh \qquad \text{(II.3.b)}$$

où H est un champ extérieur uniforme (rappelons que P (h)est supposé symétrique). Différents cas sont à distinguer :

i) Cas d'une distribution gaussienne :

Les figures 7a, b, c, d montrent le comportement de : m, χ , $\frac{d^2f}{dx^2}$ en fonction de x et de m en fonction de H.

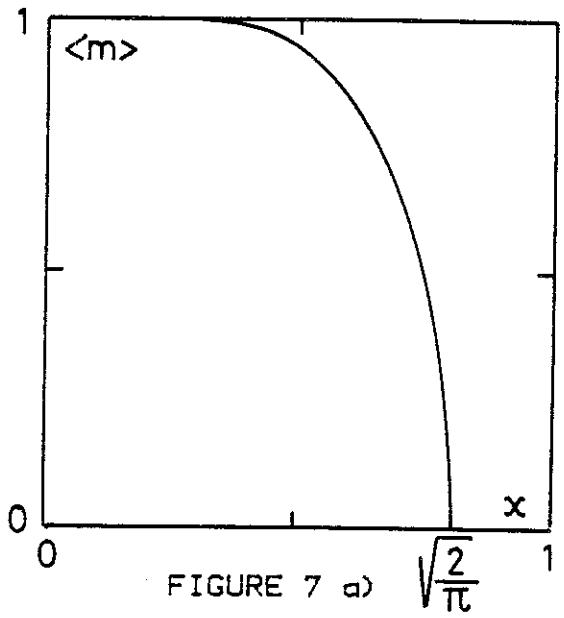


FIGURE 7 a)

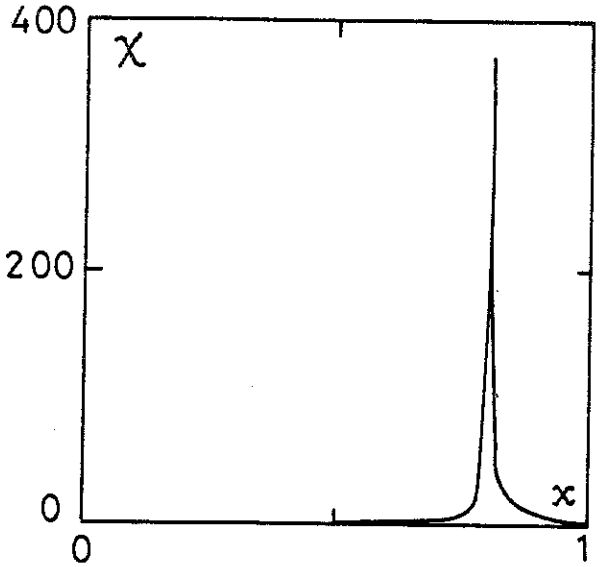


FIGURE 7 b)

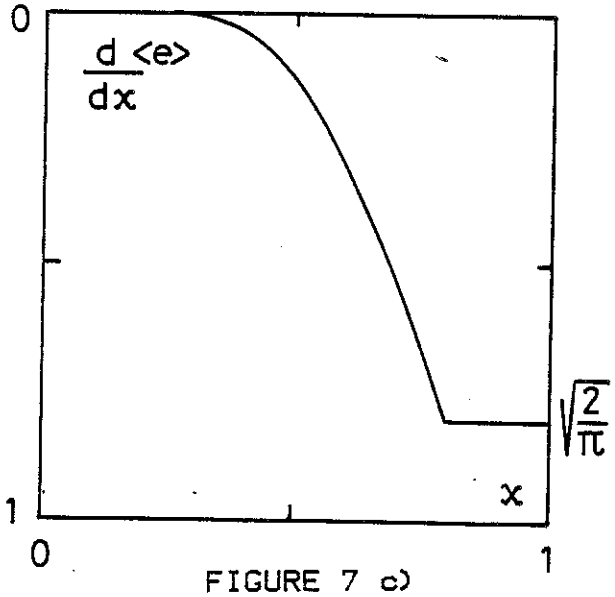


FIGURE 7 c)

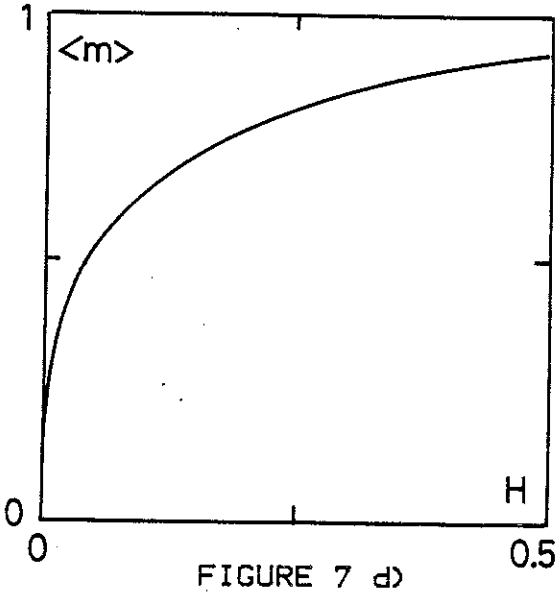


FIGURE 7 d)

Dans le cas présent :
(II.3.a) devient

$$f(m) = \frac{1}{2} m^2 - \frac{1}{x}\sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^m (m/H-h) \exp[-\frac{1}{2} (\frac{h}{2})^2] \, dh - x\sqrt{\frac{2}{H}} \qquad \text{(II.4.a)}$$

et (II.3.b) devient

$$m = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^{m+H} \exp[-\frac{1}{2}(\frac{h}{2})^2] \, dh \qquad \text{(II.4.b)}$$

Le développement de (II.4.a) autour du point critique ($x = x_c = \sqrt{\frac{2}{\pi}}$, $H = 0$) conduit à

$$m = \frac{2}{(2\pi)^{1/4}} \varepsilon^{1/2} + O(\varepsilon) \qquad \varepsilon = (x_c - x)$$

De même en dérivant (II.3.b) par rapport à H il vient

$$\chi \equiv \lim_{H \to 0} \frac{\partial m(x,H)}{\partial H} \sim \frac{2P(m)}{1-2P(m)}$$

d'où $\chi(x \gtrsim x_c) \sim \frac{2}{\pi} (x - x_c)^{-1}$ pour $x > x_c$

$\chi(x \lesssim x_c) \sim \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (x_c - x)^{-1}$ pour $x < x_c$

Finalement δ peut être calculé de la même façon. On trouve $\delta = 3$.

En résumé :
$\alpha = 0$; $\beta = 1/2$; $\gamma = 1$; $\delta = 3$ $(x_c = \sqrt{\frac{2}{\pi}})$

qui vérifie bien les relations de Rushbrooke et de Widom. Noter que c'est le même jeu d'exposants qui décrit la transition en température à $x = 0$, $T = T_c = 1$. C'est d'ailleurs la même situation le long de la ligne de transition dans le plan (x,T).

ii) Cas d'une distribution uniforme :

Le fait que toutes les dérivées de $P(h)$ soient nulles à l'origine ($h = 0$) rend cette distribution continue des champs intéressante. Le plan (H,x) se divise comme le montre la figure 8.

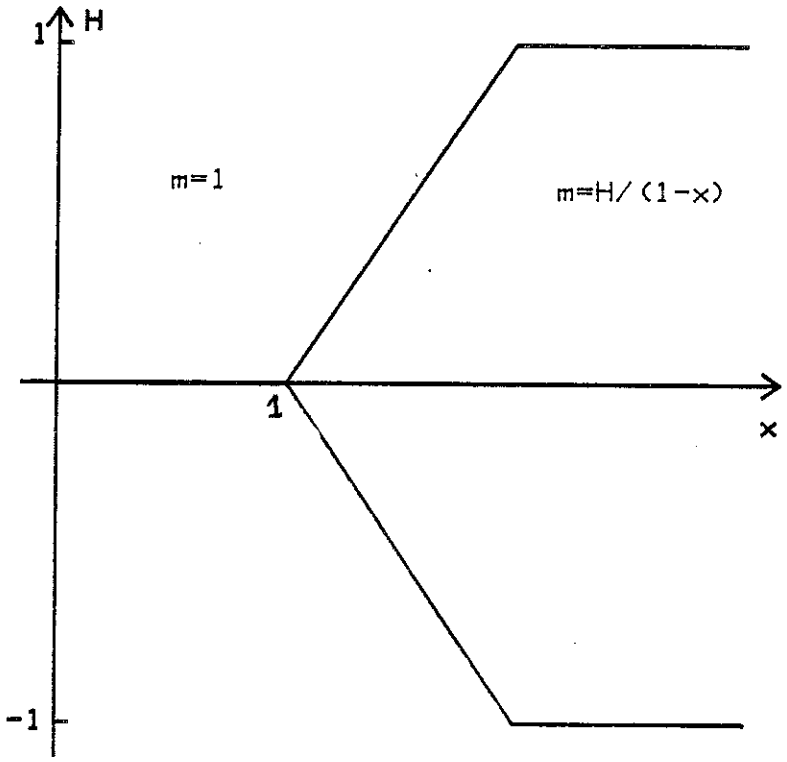


FIGURE 8

En posant $t = x - 1$, "l'équation d'état" peut s'écrire $m = \frac{H}{t}$ (II.5). Or une conséquence de l'hypothèse d'échelle est que, si t est la variable réduite, l'équation d'état peut s'écrire $m = H^{1/\delta}\phi(t/H^{1/\beta\delta})$ (Bax). On reconnaît cette forme dans (II.5) avec $\frac{1}{\delta} = 0$ et $\beta\delta = 1$.

De $\delta = \infty$ et $\beta\delta = 1$, on déduit $\beta = 0$. De plus il est clair que $\chi = H(x_c - 1)^{-1}$ donc $\gamma = 1$ et la relation de Widom $\gamma = \beta\delta - \beta$ est vérifiée. De la relation de Rushbrooke, on déduit $\alpha = 2 - 2\beta - \gamma = 1$, ce qui est compatible avec le saut de dE/dx à $x = x_c$.

En conclusion, cette transition, bien que présentant un saut d'aimantation est du deuxième ordre. Elle est exactement du type de la transition d'un modèle ferromagnétique à 1 dimension où $T_c = 0$. L'ambiguïté venant ici du fait qu'il n'y a pas de longueur de corrélation ξ , et que l'on ne peut pas définir ξ qui diverge au point critique.

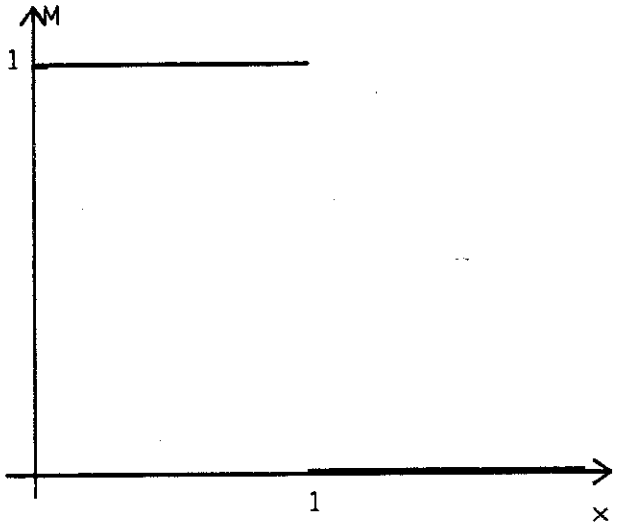


FIGURE 9 a)

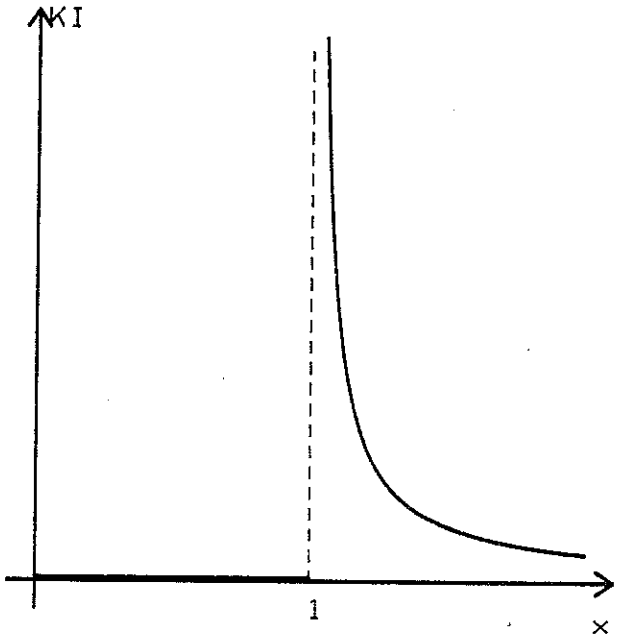


FIGURE 9 b)

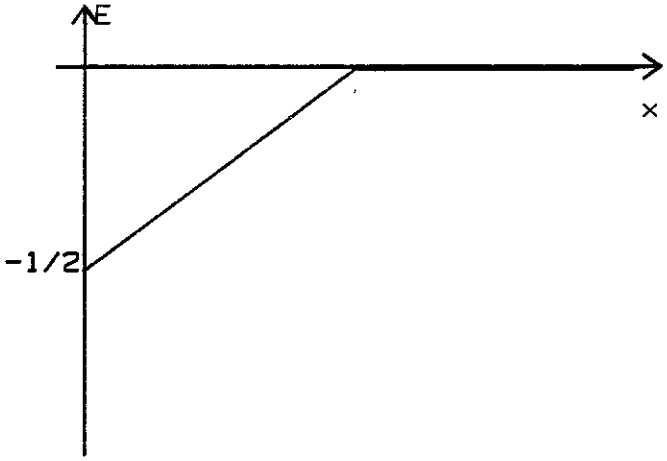


FIGURE 9 c)

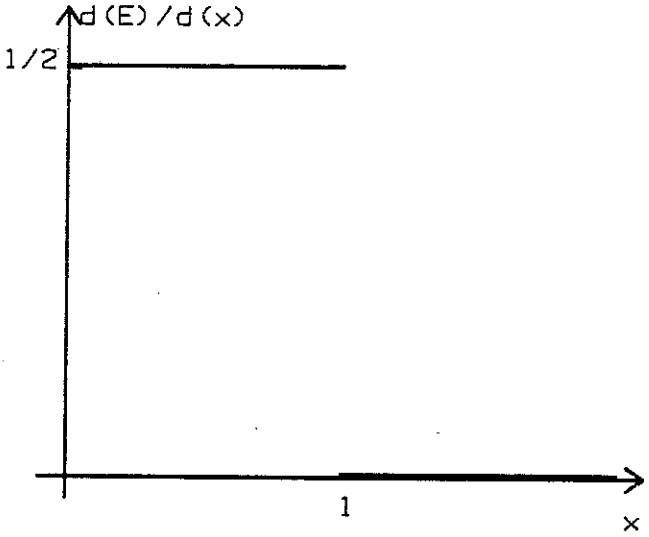


FIGURE 9 d)

Notons que le jeu d'exposants que l'on trouve dans ce cas : $\beta = 0$, $\alpha = 1$, $\gamma = 1$ est différent de celui qui décrit le transition en température ($T_c = 1$) à $x = 0$.

II.2. Cas de la chaîne linéaire (d = 1).

Alors que le modèle des verres de spins sur une chaîne linéaire est presque trivial en champ nul (en fait il se ramène au modèle ferromagnétique), le cas du modèle de champ aléatoire à 1D n'est pas aussi simple. La présence de champ aléatoire introduit de la frustration, tandis que la présence de liaisons antiferromagnétiques pour le modèle des verres de spins n'en introduisait pas. L'étude analytique à T = 0 a pu être menée à bien (Gri(e)), (Der(b)) à l'aide de la méthode des matrices de transfert. Des études numériques à haute température par des méthodes de matrice de transfert (Pum), ainsi que d'autres par l'itération des relations de récursion fonctionnelle (Brg), (Bru), vérifiées par la fonction de partition conduisent toutes aux résultats suivants :

Dans le cas d'une distribution $P(h_i) = \frac{1}{2}\,\delta(h-h_i) + \frac{1}{2}\,\delta(h+h_i)$ on obtient une courbe $m(\frac{h}{J})$ qui présente une infinité dénombrable de discontinuités. Plus précisément l'aimantation projetée $m' = \langle \sigma_i \operatorname{sgn} h_i \rangle$ se comporte (Der(b)) comme $m'(x) = 2/\ 2+E(2/x)$ où $x = \frac{h}{J}$ et $E(x)$ désigne la partie entière de x. De même l'entropie présente des sauts pour toutes les valeurs critiques $x = x_n = \frac{2}{2+n}$, et elle est constante entre ces valeurs. Notons que l'entropie par spins n'est pas évanescente à T = 0.

III - ETUDE NUMERIQUE EN DIMENSION 2

La question principale concernant la dimension 2 est de savoir si le ferromagnétisme peut ou non subsister sous un champ aléatoire d'intensité donnée. Il est donc naturel de s'intéresser à l'aimantation en fonction de l'intensité du désordre $x=\sqrt{\overline{h^2}}/J$. Nous avons étudié ce problème à T = 0 en utilisant la méthode décrite au chapitre II pour générer les états de base du modèle à d = 2, pour différentes tailles LxL et différentes valeurs de x. Les quantités étudiées sont respectivement m (aimantation), m' (aimantation projetée), E (énergie).

III.1. Aimantation spontanée et aimantation projetée.

i) Cas d'une distribution discrète :

La distribution utilisée ici est $P(h_i) = \frac{1}{2}[\delta(h-h_i)+\delta(h+h_i)]$. On notera $x = \frac{h}{J}$ et on posera

$$m = \overline{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \sigma_i} \quad \text{et} \quad m' = \overline{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} \mathrm{sgn}(h_i)\sigma_i}$$

où $\{\sigma_i\}$ désigne la configuration de spins dans un fondamental. Dans le cas où il y a dégénérescence, m et m' sont calculées sans moyenne sur toutes les configurations. Ici $\overline{(\ldots)}$ désigne la moyenne sur le désordre, c'est-à-dire sur différentes réalisations de la distribution $P(h_i)$.

Sur la figure 10 ci-dessous est représentée l'aimantation m(x) en fonction de x pour différentes tailles, LxL, avec des conditions aux bords libres. L = 10 (2000 échantillons), L = 20 (500 échantillons), L = 50 (20 échantillons) et L = 100 (4 échantillons).

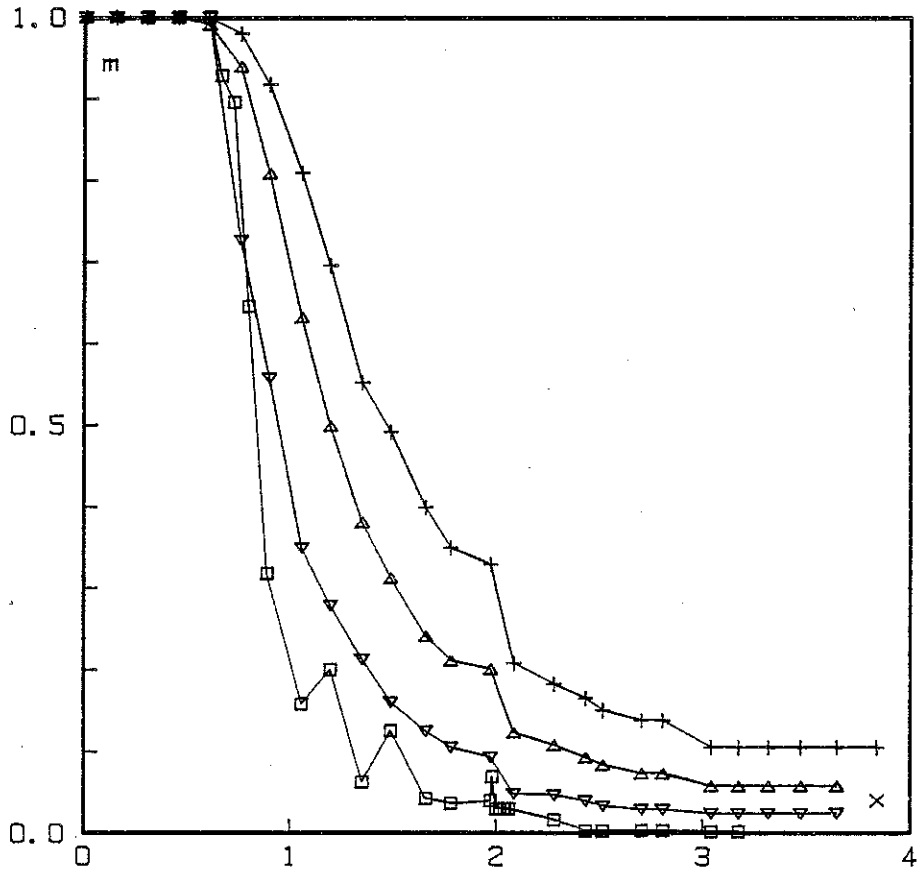


FIGURE 10

Notons que la valeur x = 4 correspond à celle du champ à partir de laquelle tous les spins s'alignent dans leurs champs locaux. En effet quelque soit l'état des spins voisins $J \sum_{\text{voisin}} \sigma_i \leqslant 4J \leqslant h$. On trouve donc une aimantation pour $x \geqslant 4$ qui tend vers 0 avec la taille comme $\frac{1}{\sqrt{N}} = \frac{1}{L}$. Les discontinuités observées sur la courbe m(x) s'expliquent mieux en terme de l'aimantation projetée m'(x) et ce point sera discuté plus loin. D'après la figure 10, il semble que le ferromagnétisme subsiste pour des valeurs de $x \simeq 0{,}6$. Cependant, comme les résultats suivants vont le montrer, il s'agit en fait d'effets de taille finie : les domaines de spins de l'argument d'Imry et Ma présenté dans l'introduction n'ont pas la place de se développer dans la grille simulée, même pour $L \sim 10^2$. Un argument très qualitatif peut être donné pour

justifier cette assertion. Le modèle proposé dans (Der(a))consiste à diluer sur un réseau carré de spins couplés ferromagnétiquement des champs aléatoires infinis $h_i = \pm \infty$. Ceci revient en fait à prendre :

$$P(h_i) = \frac{p}{2} \{\delta[h_i + 4J + \varepsilon] + \delta[-h_i + 4J + \varepsilon]\} + (1 - p)\delta(h_i)$$

Il a été prouvé dans(Der(a))que la fonction de corrélation sur un tel système se comporte à T = 0 comme

$$\overline{< \sigma(r)\ \sigma(r') >} \sim |r - r'|^{-\eta(p)} \quad \text{où} \quad \eta(p) = 2\pi p$$

dans la limite $p \to 0$. La correspondance entre ce modèle et le modèle standard peut s'effectuer de la manière suivante : le gain d'énergie obtenu en retournant dans le modèle standard un amas de taille linéaire L est de l'ordre de $hL^{d/2} \sim hL$. Ce gain est à comparer à celui obtenu dans le modèle des champs infinis dilués en retournant tous les spins d'un amas de taille L. Ce dernier peut être évalué comme la fluctuation du nombre de sites où le champ est positif, moins le nombre de sites où le champ est négatif dans un amas de taille L, c'est-à-dire $\sqrt{L^2pJ}$. On obtient donc : $hL \equiv L\sqrt{p}\,J$ soit $p \equiv x^2$. Ainsi on ne pourra développer un amas de spins "plus" dans une mer de spins "moins" que si x et L vérifient : $L^{-2\pi x^2}$ = Constante, soit $x^2 \ln L$ = constante. Ceci implique que la variable d'échelle est $x^2 \ln L$ ($x \sim 0$) et c'est avec cette combinaison qu'il faut comparer les résultats sur différentes tailles. Par exemple, si l'on note x^*_{10} le plus petit x pour représenter le modèle sur une grille 10x10 et x^*_{100} celui pour une grille 100x100, on aura $x^{*2}_{10} \ln 10 = x^{*2}_{100} \ln 100$, soit

$$x^*_{100} = \frac{x^*_{10}}{\sqrt{2}} \simeq 0{,}71\ x^*_{10}$$

Ceci implique donc des tailles LxL très différentes pour comparer les comportements associés à des valeurs voisines de x.

La figure 11 représente, pour différentes valeurs de L, l'aimantation projetée,m'(x) en fonction de x. m' a déjà été définie et, pour cette distribution discrète, peut être interprétée comme l'aimantation d'un modèle de Mattis sous champ (Mat). En effet, la fonction de partition

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp + \beta(\Sigma\, J\, \sigma_i\sigma_j + \sum_i h\, \varepsilon_i)$$

du modèle de champ aléatoire s'écrit aussi :

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp \beta(\Sigma\, J_{ij}\, \mu_i\mu_j + h\, \Sigma\, \mu_i) \quad ,$$

en posant $J_{ij} = \varepsilon_i\varepsilon_j\, J$ et $\mu_i = \varepsilon_i\sigma_i$. On reconnaît sous cette dernière forme la fonction de partition d'un modèle de Mattis sous champ, d'aimantation m'.

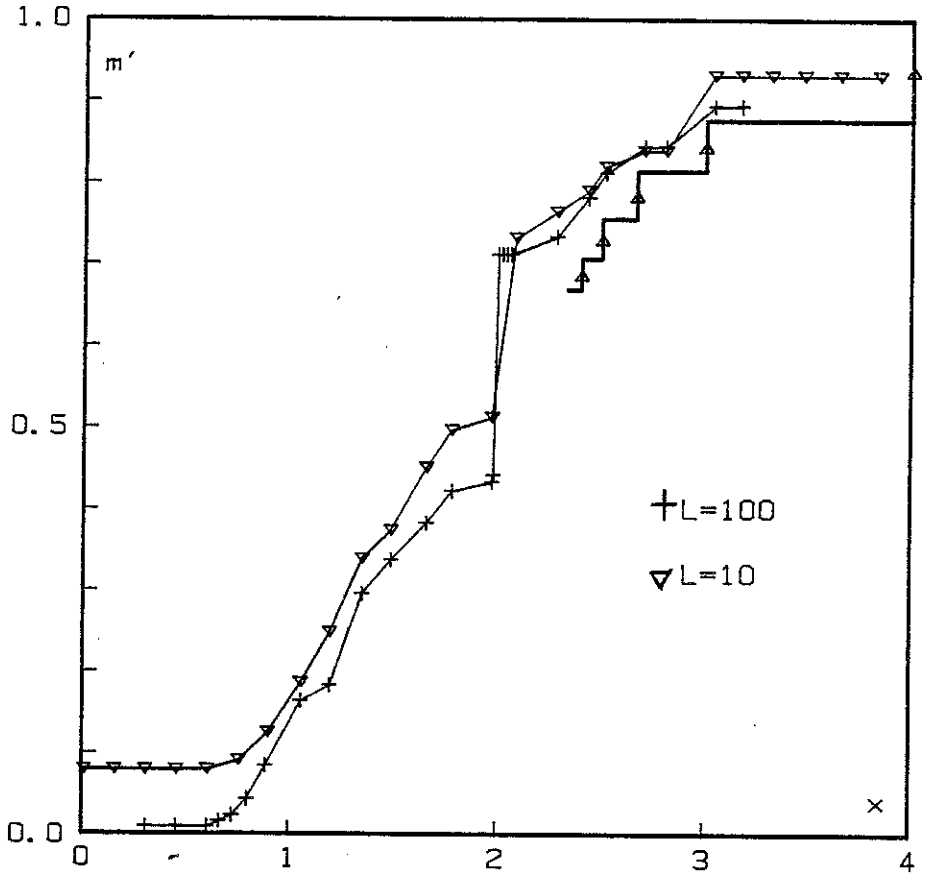
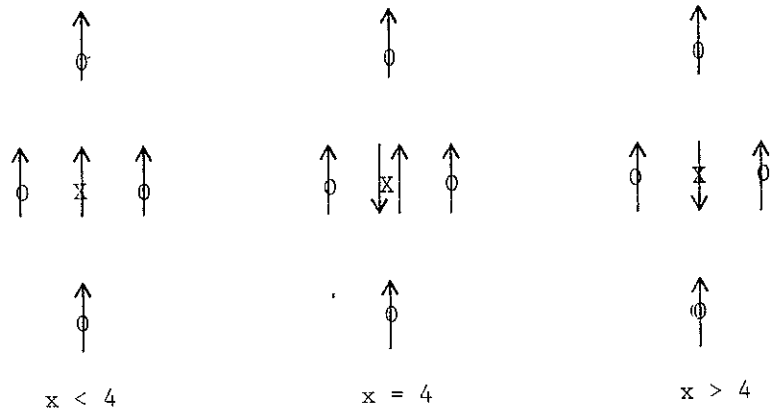


FIGURE 11

Les sauts caractéristiques de m'(x) peuvent être expliqués de la manière suivante : Lorsque $x = \frac{h}{J} > 4$ tous les spins s'alignent sur leurs champs locaux, quelque soit leurs voisins et donc m'(x) = 1 . Lorsque $\frac{h}{J} = 4$, un spin σ_0 situé sur un site où le champ local est

négatif et dont les quatre voisins $\{\sigma_i\}$ sont positifs ($\sigma_i = +1$) n'a pas une direction privilégiée : $\sigma_0 = \pm 1$, c'est-à-dire que l'énergie du système est invariante par le renversement de σ_0. Par contre lorsque $x < 4$, un tel spin s'oriente comme ses voisins : $\sigma_0 = +1$ pour satisfaire ses liaisons avec les $\{\sigma_i\}$. Donc la contribution à l'aimantation projetée $m'(x)$ de ces spins sera $+1$ si $x > 4$, 0 si $x = 4$ et -1 si $x < 4$.



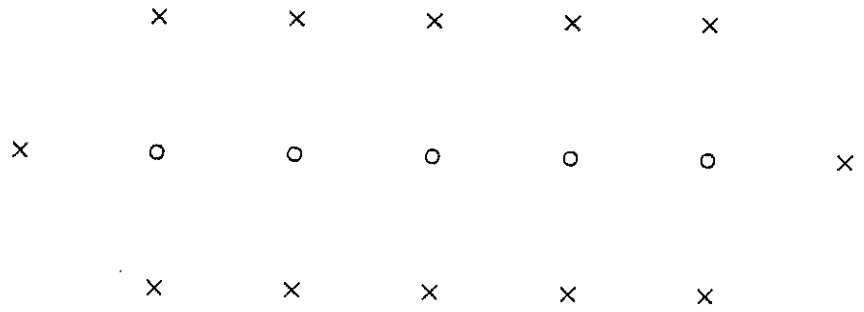
X désigne un champ négatif O désigne un champ négatif

FIGURE 12

L'approximation de (Mor) consiste à écrire :

$$m'(x) = \sum_{A\in\mathcal{A}^+} (1 \times Pr(A)) + \sum_{A\in\mathcal{A}^=} (0 \times Pr(A)) + \sum_{A\in\mathcal{A}^-} ((-1) \times Pr(A)) \qquad \text{(III.1)}$$

où $\mathcal{A}^+$ désigne l'ensemble des amas de spins tel que le rapport $\frac{\text{périmètre}}{\text{surface}} > x$. $\mathcal{A}^=$ l'ensemble des amas de spins tel que $\frac{\text{périmètre}}{\text{surface}} = x$ et $\mathcal{A}^-$ l'ensemble des amas tel que $\frac{\text{périmètre}}{\text{surface}} < x$. On prédit donc des sauts de $m'(x)$ pour toutes les valeurs de x telles qu'il existe un amas de périmètre p (nombre de sites voisins d'un site de l'amas) et de surface s avec $\frac{p}{s} = x$. Les amas très compacts de type rectangle ont un rapport $\frac{p}{s} \sim \frac{4L}{L^2} = \frac{4}{L} \to 0$ (L taille linéaire). Les amas les moins compacts sont les amas filiformes . Leur rapport $\frac{\text{périmètre}}{\text{surface}}$ sera $\frac{2L+2}{L} = 2 + \frac{2}{L}$.



o designe un champ < 0. × designe un champ > 0.

(L=5)

FIGURE 13

On attend donc des discontinuités de m'(x) pour des valeurs de x de la forme $x_n = 2 + 2/n$ (n = entier), cette suite x_n admet 2 pour point d'accumulation. En utilisant la formule (III.1), on peut évaluer m'(x) entre les points x_n. Par exemple pour $x_2 < x < x_1$, i.e. $3 < x < 4$, la probabilité d'un amas en forme de croix est $(\frac{1}{2})^5 \times 2$ (le facteur 2 désigne la dégénérescence du signe du champ au site σ_0). Donc

$$m'(3 < x < 4) = (1 - \frac{1}{16}) \times 1 + \frac{1}{16}(-1) = 1 - \frac{1}{8} = \frac{7}{8}$$

alors que pour x = 4 (III.1) devient :

$$m'(x = 4) = (1 - \frac{1}{16}) \times 1 + 0 \times \frac{1}{16} = \frac{15}{16} .$$

On peut alors évaluer les probabilités des amas de petites tailles, et avoir une approximation de m'(x). Noter que la formule (III.1) est toutefois une approximation pour m'(x). En effet, l'exemple suivant montre que l'on néglige les situations comme celle ci-dessous :

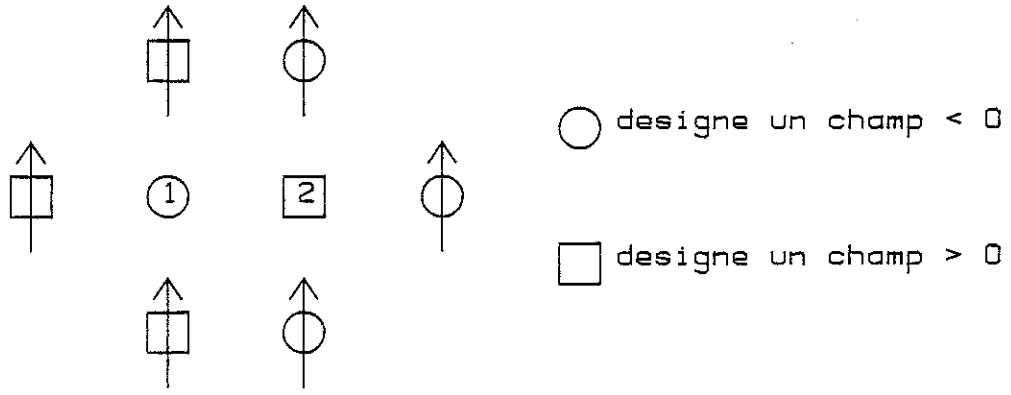


FIGURE 14

Les spins des sites 1 et 2 seront alignés sur leurs champs quand $x > 4$. L'argument précédent suggère qu'ils se retournent dès que $x < 4$. Or en considérant 1 et 2 <u>ensemble</u>, on voit qu'ils se retournent en fait dès que $7J - 2h = 5J + 2h$, c'est-à-dire pour $x = 3$. En résumé, on aura :

$$m'(x) = \begin{array}{ll} 1 & x < 4 \\ 15/16 & x = 4 \\ 7/8 & 3 < x < 4 \\ 27/32 & x = 3 \\ 13/16 & 8/3 < x < 3 \\ 401/512 & x = 8/3 \\ 193/256 & \frac{5}{2} < x < \frac{8}{3} \\ 747/1024 & x = 5/2 \\ 361/512 & \frac{12}{5} < x < \frac{5}{2} \\ 22479/32768 & x = \frac{12}{5} \\ 10927/16384 & \frac{7}{3} < x < \frac{12}{5} \end{array}$$

Ces résultats sont montrés en trait continu sur la figure 11, en comparaison avec les résultats numériques. L'algorithme utilisé ne permet pas de calculer $m'(x = x_n)$ car il n'y a pas de moyenne sur les différents fondamentaux d'une même grille.

ii) Cas d'une distribution uniforme :

On a vu que le caractère discret de $P(h)$ entraîne l'existence de sauts sur $m(x)$ et $m'(x)$. Nous avons étudié une distribution $P(h_i)$ continue uniforme :

$$P(h_i) = \frac{1}{2h} \quad \text{pour } |h_i| < h$$

où $$\overline{h^2} = \frac{1}{2h}\int_{-h}^{+h} x^2 dx = \frac{h^2}{3}$$. Dans la suite, on notera :

$$x = \frac{h}{\sqrt{3}J}$$

La figure 15 ci-dessous présente l'aimantation m en fonction de x avec des conditions aux bords libres pour différentes tailles : L = 10 (5000 échantillons), L = 20 (500 échantillons), L = 50 (25 échantillons).

La figure 16 présente, pour les mêmes échantillons que ceux de la figure 15, l'aimantation projetée $m'(x)$ en fonction de x. Il n'y a plus les sauts caractéristiques du modèle discret.

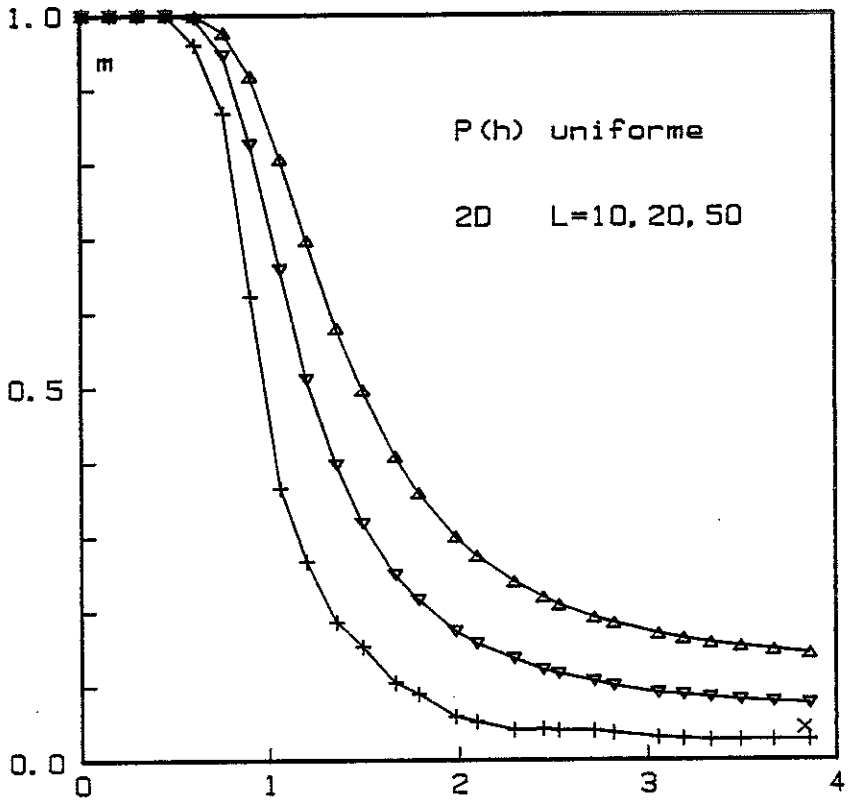


FIGURE 15

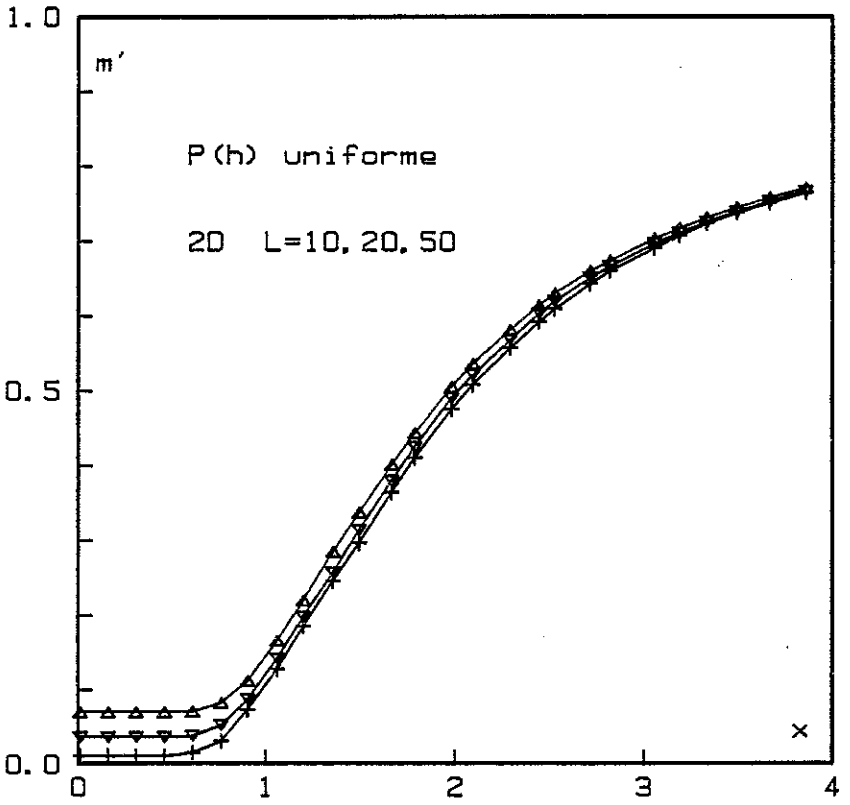


FIGURE 16

III.2. Energie interne e.

i) Cas d'une distribution discrète :

En reprenant exactement les mêmes échantillons qu'au paragraphe III.1.i), on a étudié l'énergie du fondamental en fonction de x. Cette énergie est définie comme

$$E = - \sum_{<i,j>} J\sigma_i\sigma_j - \sum_i h_i\sigma_i$$

La première somme porte sur les $2L^2-2L$ liaisons car les bords sont libres, et la deuxième sur tous les spins. Cette courbe est représentée sur la figure (17.a).

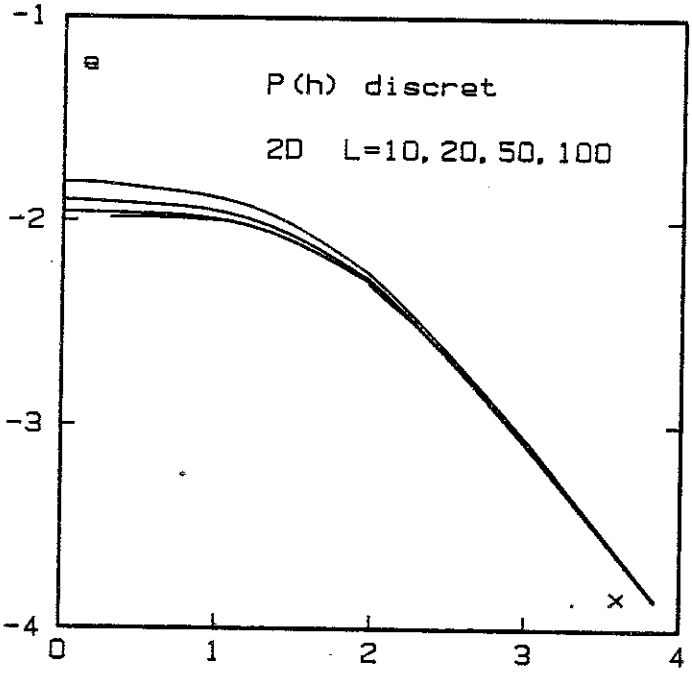


FIGURE 17 a)

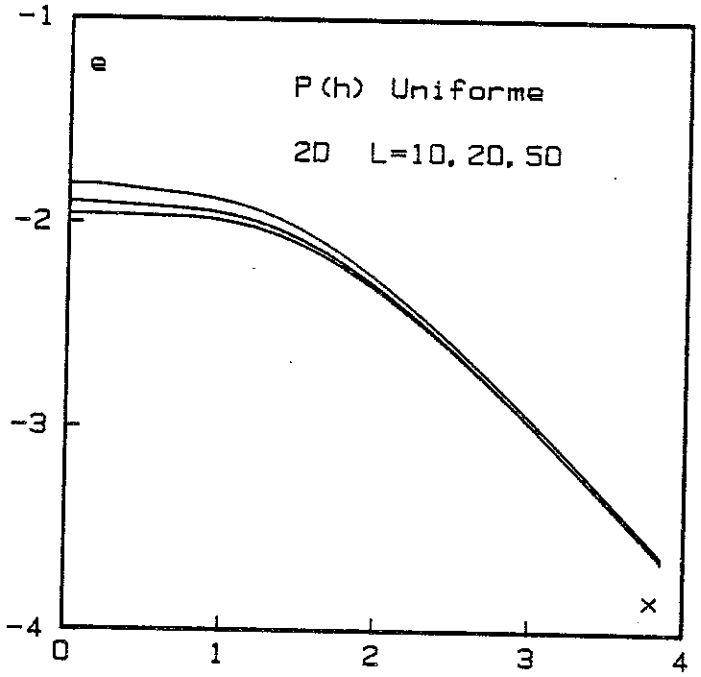


FIGURE 17 b)

Pour une taille donnée, il est intéressant de comparer l'énergie moyenne obtenue dans les deux situations extrêmes où les spins sont tous parallèles (ferromagnétisme) et celle où ils sont tous alignés sur leurs champs locaux. Si tous les spins sont parallèles entre eux, ils s'alignent selon la direction de la résultante des champs aléatoires et

$$E = E_0 = - J(2L^2 - 2L) - < |\sum_i h_i| >$$

$$\frac{E_0}{J} = - 2L(L - 1) - x\Delta$$

où $\Delta = < |\sum_{i=1}^{N} \varepsilon_i| >$ avec $N = L^2$.

On peut évaluer Δ de la manière suivante : supposons un nombre 2N de spins. On a donc 2N variables aléatoires qui valent chacune ± 1 avec probabilité 1/2, donc

$$\Pr [|\sum_{i=1}^{2N} \varepsilon_i| = 2(N-k)] = \frac{2}{2^{2N}} \binom{k}{2N} , \quad 0 \leqslant k \leqslant N-1$$

et $$\Pr [|\sum_{i=1}^{2N} \varepsilon_i| = 0] = \frac{1}{2^{2N}} \binom{k}{2N}$$

d'où $$\Delta = \frac{1}{4^{N-1}} \sum_{k=0}^{N} (N - k) \binom{k}{2N}$$

Ainsi pour $N \gg 1$: $\Delta \simeq 0,8 \, . \, N^{1/2}$.

- L'autre limite où chaque spin s'aligne sur son champ local aléatoire h_i conduit à $E = E_1 = - HL^2 - J < \Sigma \sigma_i\sigma_j >$, ici $< \Sigma \sigma_i\sigma_j > = 0$ et $\frac{E_1}{J} = - xL^2$.

La figure 18 représente $\frac{E_0}{J}$, $\frac{E_1}{J}$ et les résultats de la simulation pour L = 20.

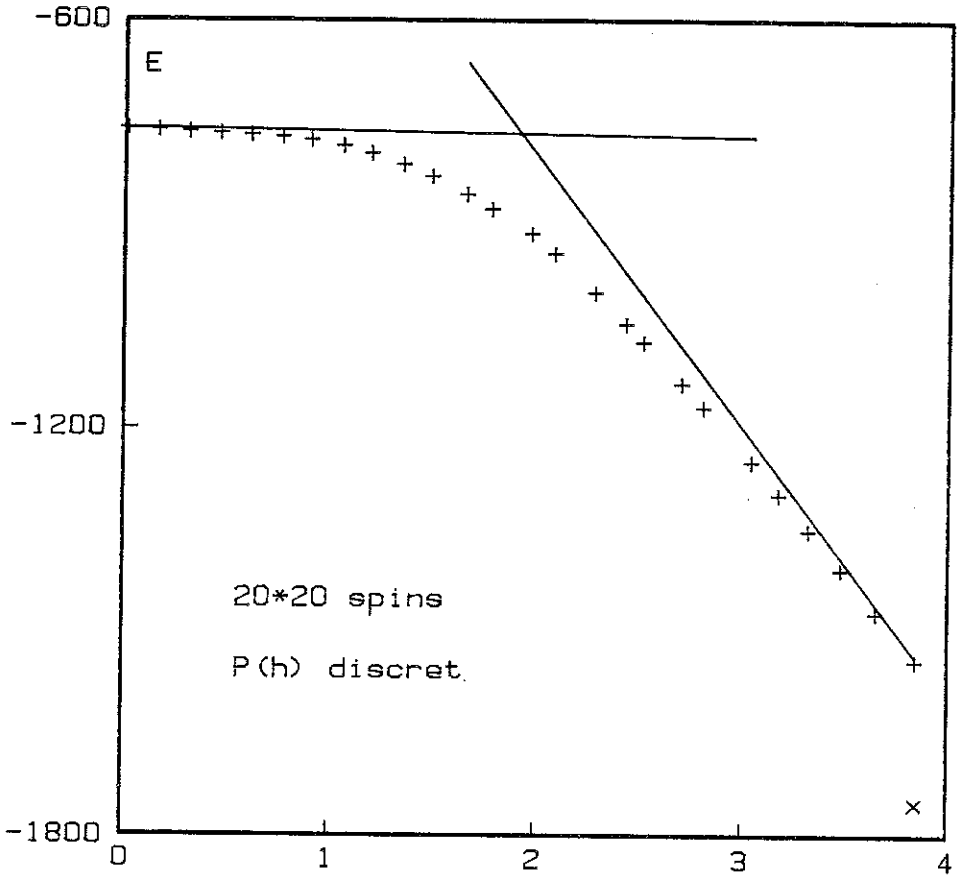


FIGURE 18

Les résultats numériques coïncident avec ces estimations dans les deux limites considérées.

ii) Cas d'une distribution continue :

Avec les échantillons du paragraphe III.1.a., on a tracé l'énergie moyenne en fonction de x. Nous l'avons représentée sur la figure 17.b.

III.3. Etude de la tension de ligne.

L'étude précédente n'a pas clairement montré qu'un faible champ aléatoire détruisait l'ordre ferromagnétique à température nulle. Ceci a pour cause les effets de taille finie. Il est donc nécessaire de trouver une autre grandeur plus sensible à la présence du champ aléatoire et c'est le but de ce paragraphe.

Les fluctuations dans le modèle du champ aléatoire ne sont plus seulement thermiques, mais aussi dues à la présence des champs aléatoires. Une grandeur certainement très sensible sera la rugosité d'un interface entre deux domaines de spins d'orientations opposées. Plusieurs études (voir (Imr(b)) pour une revue) ont porté sur la largeur W d'une paroi, comme fonction de la taille L de l'échantillon auquel on impose la paroi et de l'intensité h du champ aléatoire. Initialement (Vil(a)) (Vil(b)) (Gri(d)) ont suggéré qu'en dimension d et à température nulle, W(L,h) se comporte comme $(\frac{h}{J})^{2/3} L^{5-d/3}$, $h \sim 0$, $L \gg 1$ qui produit $W(h,L) \sim (\frac{h}{J})^{2/3} L$ en dimension 2 pour P(h) gaussien. Des modèles Solid on Solid (SOS) prédisent plutôt un comportement $W(h,L) \sim (\frac{h}{J})^2 L$ (Bin(a)), (Nat). Des études numériques utilisant des méthodes de la matrice de transfert (Fer) conduisent au même résultat $W(h,L) \sim (\frac{h}{J})^2 L$.

La méthode présentée au chapitre II permet de faire une étude à température exactement nulle, et sans faire d'hypothèses particulières (ex SOS) sur la forme géométrique de la paroi. La méthode que l'on a adoptée est la suivante. On tire au hasard les champs sur les sites internes. Puis les champs des bords sont choisis de la manière suivante. D'abord ils sont tous $+\infty$ (fig. 19), on calcule l'énergie E^+ du fondamental dans ce cas. Puis suivant que l'on désire créer une paroi "pincée" ou "libre" on choisira les champs aux bords suivant la figure 19b ou 19c. On calcule alors l'énergie E_p^- ou E_ℓ^- suivant le cas choisi. L'énergie de la paroi sera définie par $\Delta E = E^+ - E_\ell^-$. La tension de surface σ sera donc $\sigma(x,L) = \frac{\Delta E}{2JL}$.

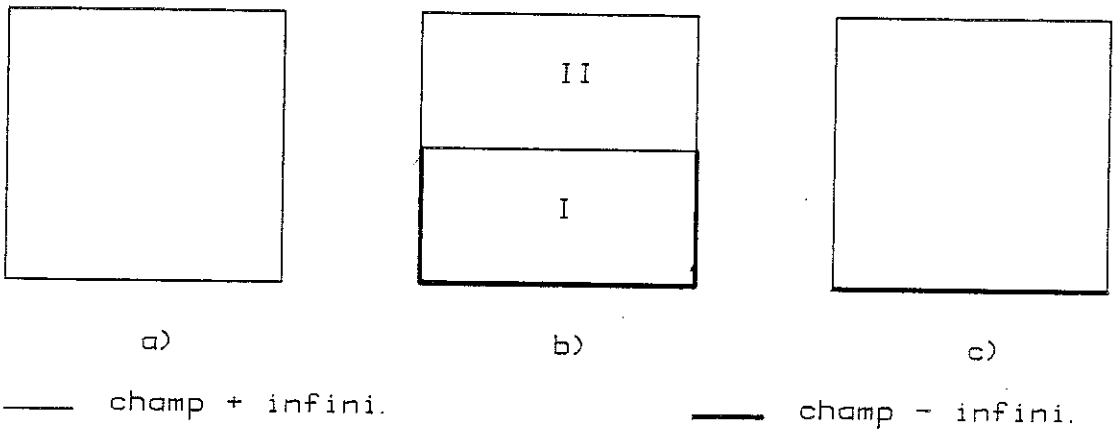
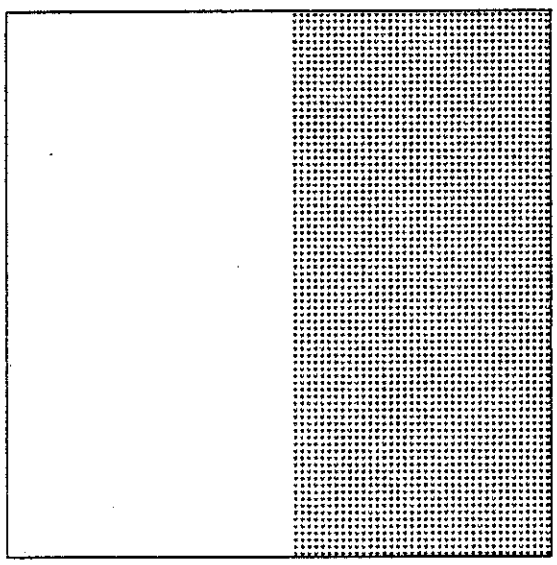


FIGURE 19

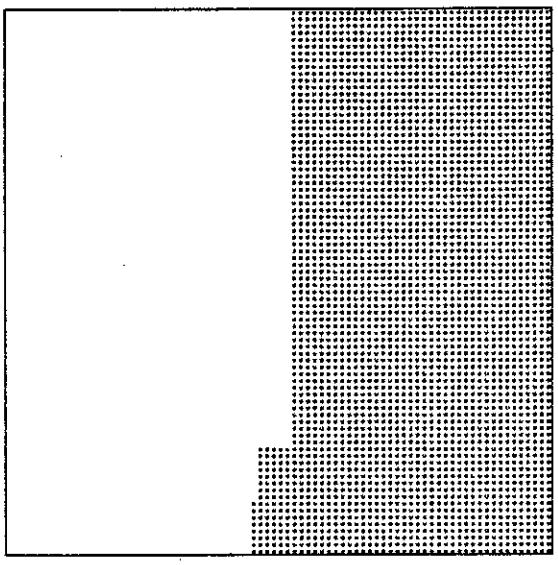
La série de la figure 20 ci-après présente le comportement de la paroi libre (fig. 19.c) pour L = 50 lorsque $x = \frac{h}{J}$ croît de 0 à 4. Pour $x = \frac{h}{J} > 4$ on a tout simplement la "carte des champs" puisque chaque spin s'aligne sur son champ local.

Il apparaît clairement que même pour des valeurs de x très petites, la paroi présente des surplombs.

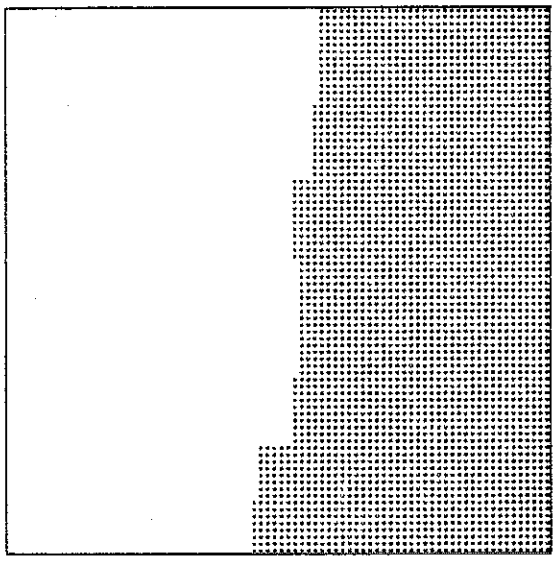
Avant de discuter les résultats numériques, il est utile de faire la remarque suivante : pour $x \sim 0$ il n'y a pas auto-moyennage de l'énergie de la paroi pincée ou libre. En effet, supposons x suffisamment petit pour que, malgré la présence des champs aléatoires h_i, la paroi, supposée pincée soit rectiligne et sépare deux domaines + et -. Dans ce cas on peut calculer ΔE comme : $\Delta E = 2JL + 2\,\Sigma'\, h_i$. Ici la somme Σ' porte sur les spins du domaine (région I, fig. 19.b). On aura donc $\sigma(x,L) = 1 + x\,A$ où $A = \frac{\Sigma'\,\varepsilon_i}{L}$ avec ε_i = signe du champ h_i. On a $\bar{A} = 0$, mais asymptotiquement A suit une loi normale de moyenne 0 et de variance $\frac{1}{L^2} \times \frac{L^2}{2} \times 1 = \frac{1}{2}$. Donc si l'on moyenne N_e échantillons de taille L x L on observera $\sigma(x,L\,;\,N_e) = 1 + x\,A_{N_e}$ où A_{N_e} suit une



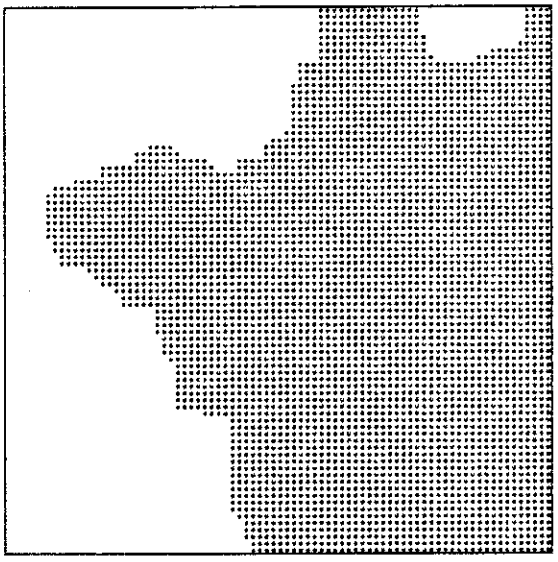
x=0.017



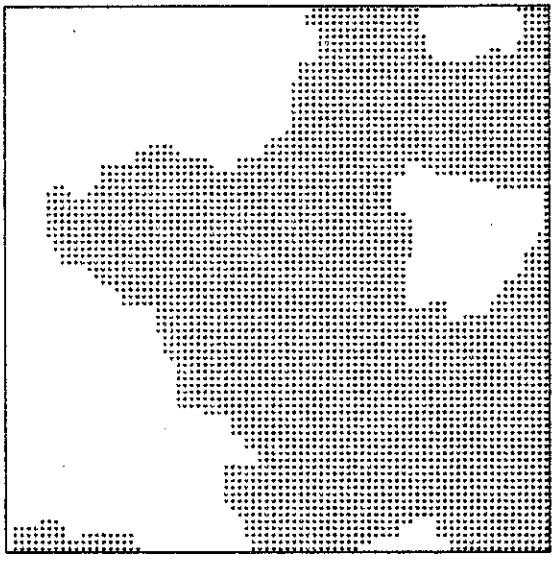
x=0.227



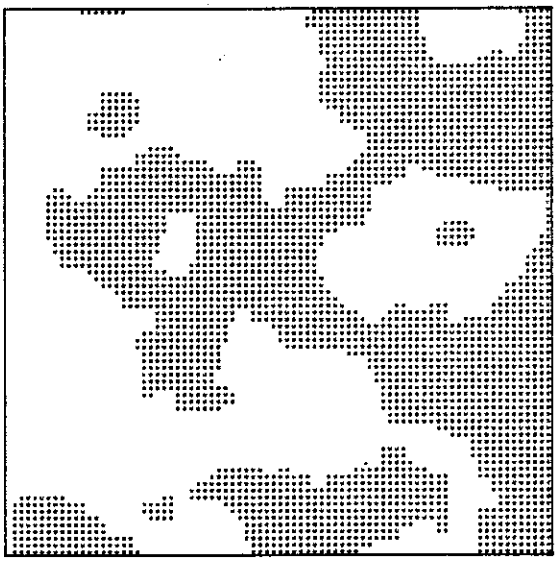
x=0.536



x=0.799



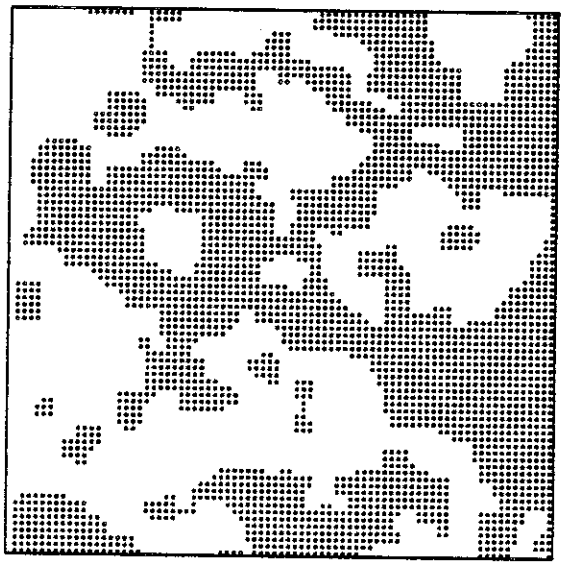
x=1.058



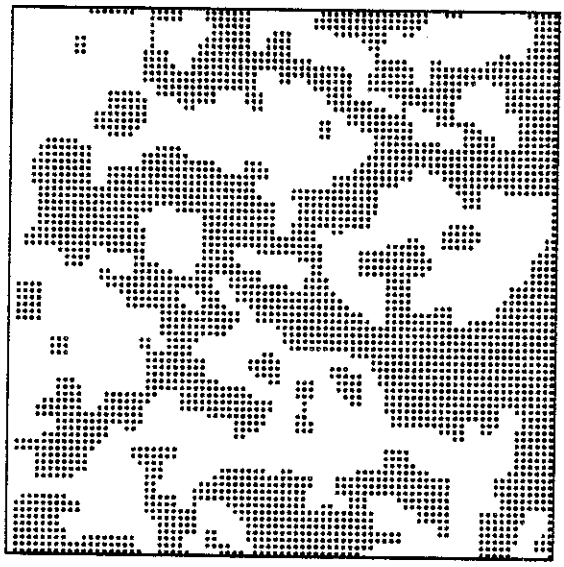
x=1.323

FIGURE 20

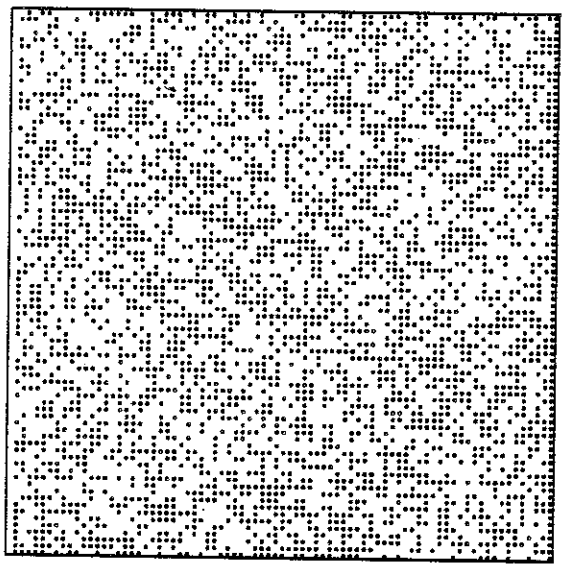
FIGURE 20



x=1.568



x=1.841



x>4

loi normale de moyenne nulle et de variance $\frac{1}{2N_e}$. Ainsi un très grand échantillon pourra donner une pente non nulle pour $\sigma(x,L \gg 1)$ à $x = 0$, ce qui est absurde, tandis qu'une moyenne de beaucoup de petits échantillons donnera toujours une pente nulle. Il convient donc de faire beaucoup de moyennes, même sur des grands échantillons. Une différence importante est à noter entre une paroi pincée (fig. 19.b) et une paroi libre (fig. 19.c). Reprenons le cas où $x \sim 0$ avec cette fois une paroi libre et des conditions de bord périodiques pour assurer que la paroi se referme sur les bords. Pour x suffisamment petit, la paroi sera encore une ligne droite, mais son degré de liberté supplémentaire fera qu'elle s'ajustera à une distance i du bord, afin de minimiser son énergie :

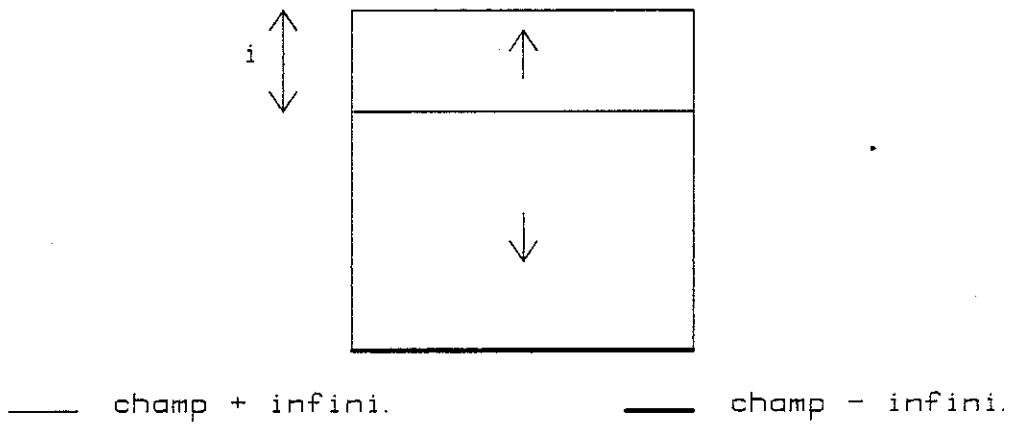


FIGURE 21

Pour évaluer l'énergie de la paroi libre, on peut procéder de la manière suivante : la paroi ajustée à $i = 1$ a une énergie en moyenne nulle $E_1 = 0$. En déplaçant la paroi en $L = 2$ on va avec une égale probabilité augmenter ou diminuer son énergie d'une quantité qui a pour variance $h\sqrt{L}$ et ainsi de suite jusqu'à $i = L$. L'énergie de la paroi libre pour $x \sim 0$ est donc égale à $2JL + \Delta$ où Δ est le déplacement maximum d'une promenade aléatoire symétrique ($p = q = 1/2$),

de pas d'amplitude $h\sqrt{L}$ à une dimension. Donc $\sigma(x,L) \sim 1 - x/2$. Ce terme 1/2 x provient du degré de liberté supplémentaire de la paroi et se trouve vérifié sur les résultats numériques. Cependant, il faut le soustraire si l'on veut trouver la variable d'échelle pour $\sigma(x,L)$. Afin de trouver $\sigma(x,L)$ en fonction d'une variable réduite, la manière la plus simple est l'utilisation des parois pincées (fig. 19.b). La figure 22 ci-dessous compare l'énergie d'une paroi pincée à l'énergie d'une paroi libre, en fonction de x et confirme le résultat précédent.

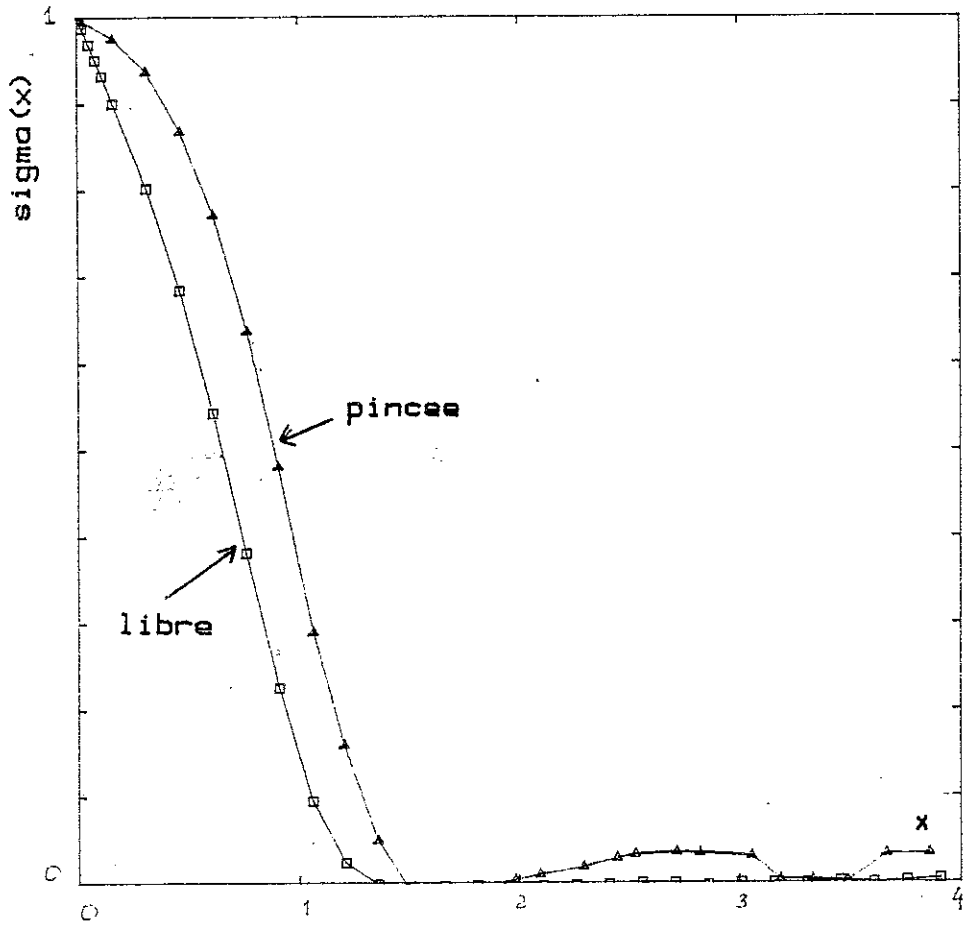


FIGURE 22

La figure 23 suivante présente pour différentes tailles LxL , $\sigma(x,L)$. Il s'agit d'une paroi pincée avec une distribution continue uniforme de champ aléatoire. Les moyennes portent sur 5000 échantillons pour L = 10, sur 350 pour L = 30 et sur 62 pour L = 50.

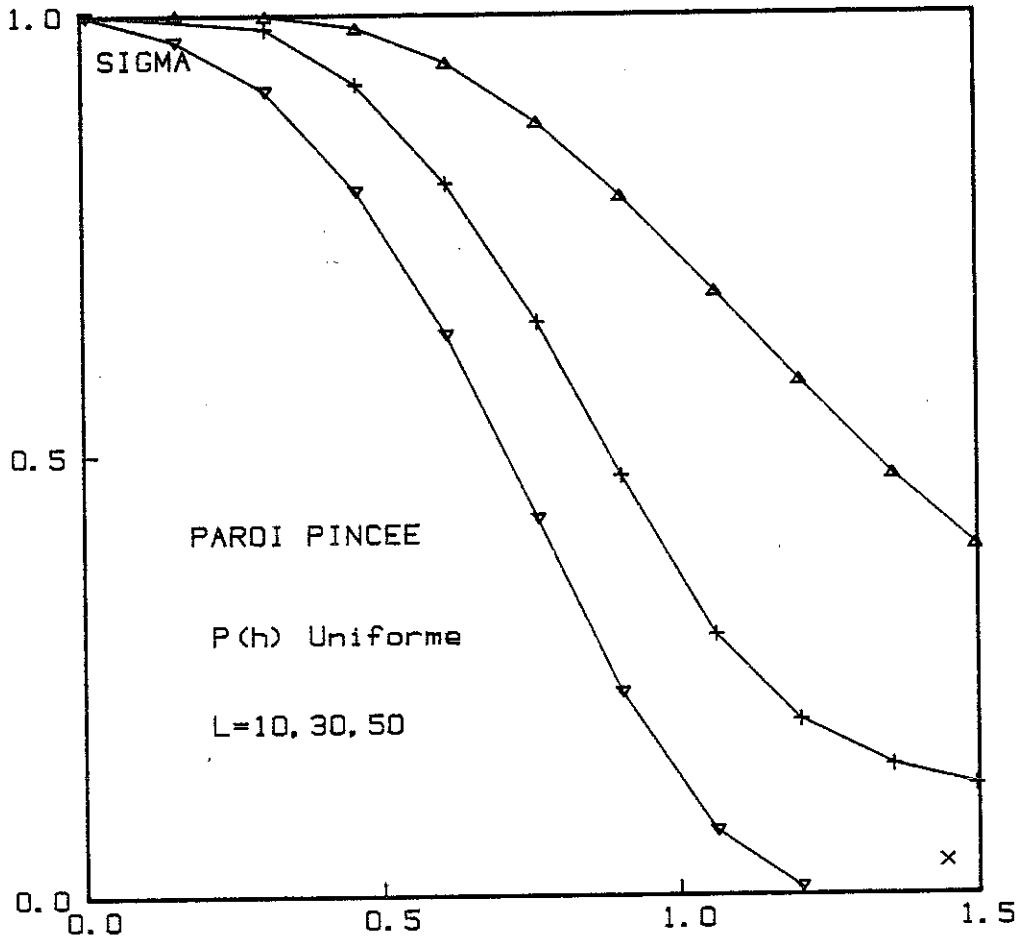


FIGURE 23

A la différence des courbes d'aimantation m(x), il est clair sur ce faisceau de courbes que l'ordre ferromagnétique est détruit la courbe limite pour $L \to \infty$ apparaissant comme :

$$\begin{cases} \sigma(x, L = \infty) = 0 & , \quad x \neq 0 \\ \sigma(x, L = 0) = 1 \end{cases}$$

Plus précisément, on a cherché la variable d'échelle en x et en L pour décrire ce faisceau de courbes. Rappelons à ce propos l'argument de (Bin(a)) qui conduit à une variable d'échelle en $x^2 \ell n L$: $\sigma(x,L) = 1 - Ax^2 \ell n\, L + \ldots$. Dans un échantillon LxL, un déplacement de W (figure 24.a) conduit, lors d'un déplacement favorable, à une variation d'énergie $\Delta U \sim 4WJ - HK\sqrt{WL}$ où K est une constante.

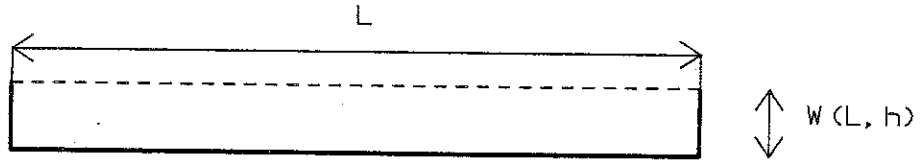


FIGURE 24 a)

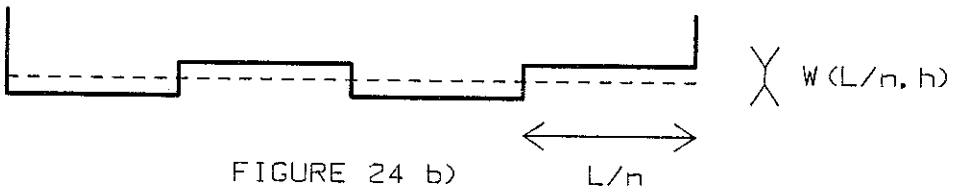


FIGURE 24 b)

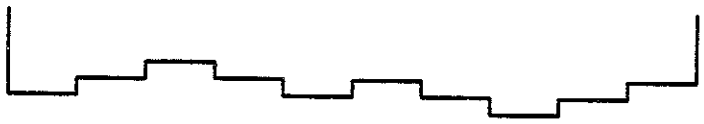


FIGURE 24 c)

La minimisation de ΔU par rapport à W conduit à $W = (\frac{K}{8}x)^2 L$ et $(\Delta U)_{min} = -4JL(\frac{K}{8}x)^2$. Pour $x = \frac{h}{J} \ll 1$ ce gain $(\Delta U)_{min}$ ne peut compenser l'énergie d'interface 2JL. Mais on peut recommencer l'opération du déplacement de la paroi, sur une plus petite échelle L/n, n > 1 (figure 24.b) et à une échelle L/n^2,etc. (fig. 24.c). Il est clair que la paroi ainsi construite ne présentera pas de surplomb. Appliquant la formule précédente à un morceau de largeur L/n^i on trouve $w_i(x) = (\frac{K}{8}x)^2 \frac{L}{n^i}$ et le gain d'énergie associé $\Delta U_i = -4J(\frac{K}{8}x)^2 \frac{L}{n^i}$. La plus grande valeur de i possible correspond à $n^{i_{max}} = L$, soit $i_{max} = \frac{\ell nL}{\ell nn}$. On peut alors évaluer ΔU ; en tenant compte des n^i marches possibles au pas i :

$$\Delta U \simeq \sum_{i=0}^{i_{max}} n^i \, \Delta U_i \sim -xhL \frac{\ell nL}{\ell nn}$$

donc $\frac{\Delta U}{JL} \sim x^2 \ell nL$.

Cet argument de type S.O.S. prédit donc une variable d'échelle en $x^2 \ell nL$. La figure 25 présente pour différentes valeurs de L, $\sigma(x,L)$ en fonction de $x^2 \ell nL$. L'accord n'est pas bon.

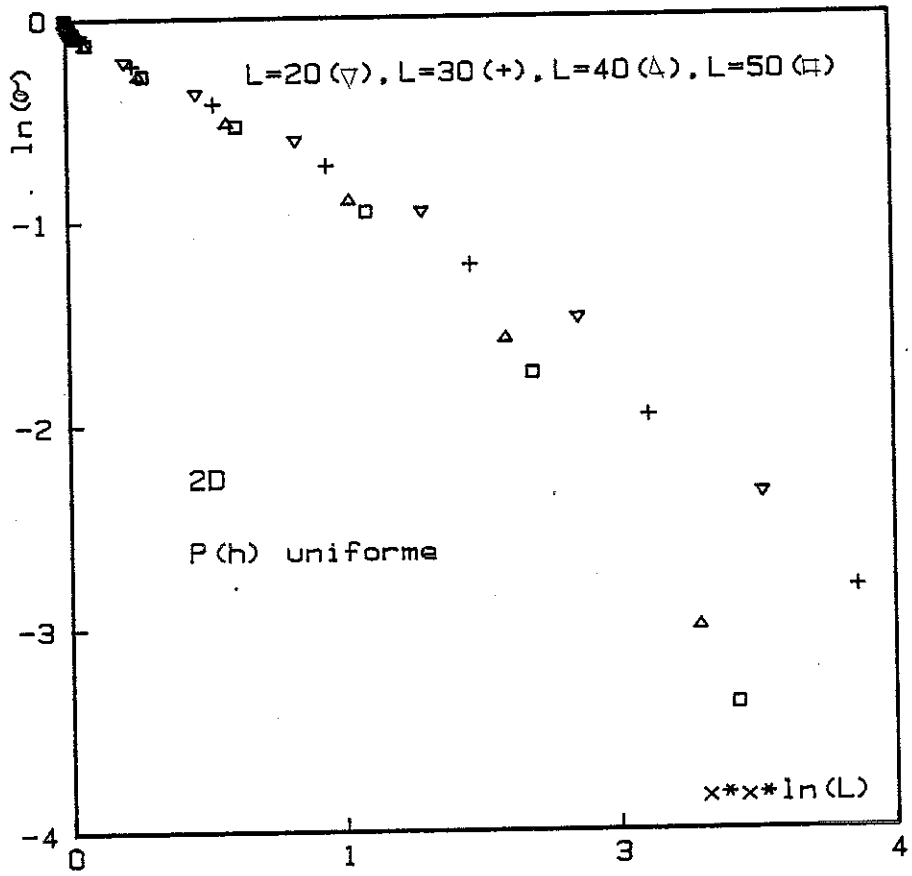


FIGURE 25

Ces mêmes données, ainsi que d'autres correspondant à un autre choix de la distribution $P(h_i)$ ou d'autres échantillons, sont montrées avec comme variable réduite $x^2 \ell n^2 L$, comme sur la figure 26.

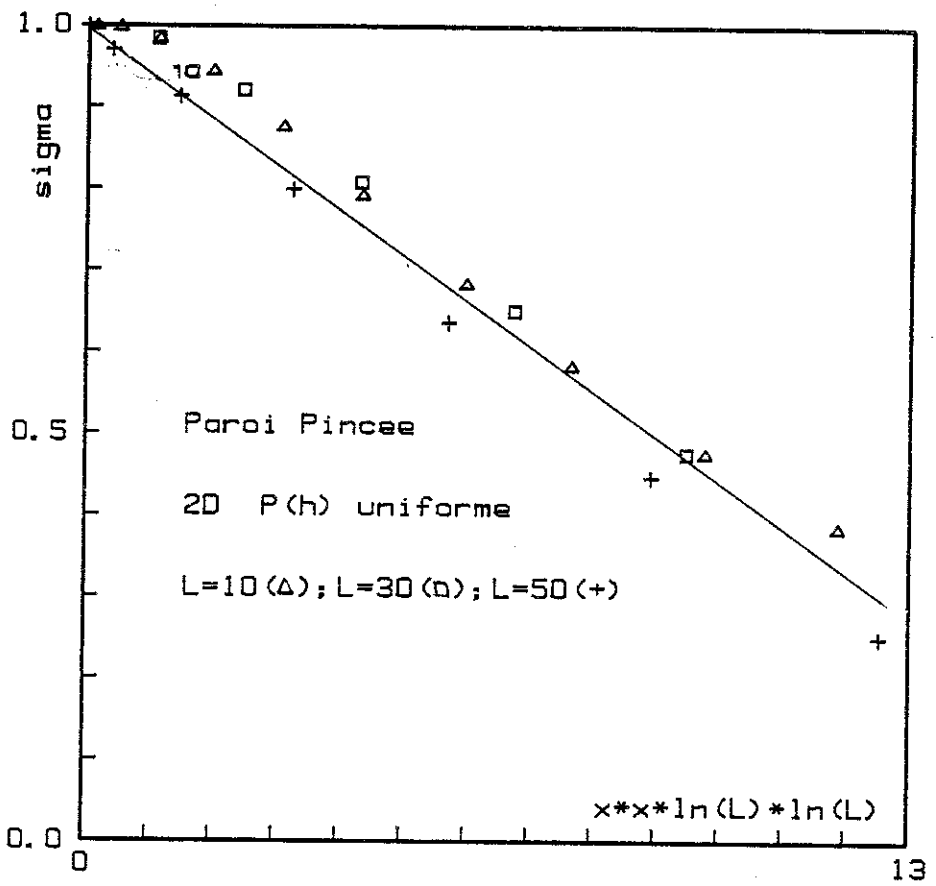


FIGURE 26

L'accord est plus satisfaisant et une régression linéaire conduit à $\sigma(x,L) = 1 - 0{,}06\ x^2 \ell n^2 L$. Ce résultat appelle deux remarques :

i) La variable d'échelle est $x^2 \ell n^2 L$ et non $x^2 \ell n L$ qui provient de l'hypothèse S.O.S. rappelée plus haut. D'ailleurs la série de figure 20 indique clairement la non-validité de cette hypothèse.

ii) Le résultat $\sigma(x,L) = f(x^2 L^{d-2})$ suggéré par les arguments d'échelle (voir paragraphe I) est conforme à nos résultats. La différence étant l'exposant du (ℓnL) dans la forme analytique de la tension de ligne $\sigma(x,L)$. Rappelons toutefois que ces arguments supposent que

$x \ll 1$ et $L \gg 1$, ce qui donne à l'expression proposée pour $\sigma(x,L)$ une valeur asymptotique sans préciser le domaine de validité (permutation des limites $x \to 0$, $L \to \infty$ par exemple).

Une autre façon d'interpréter le résultat précédent consiste à définir une longueur $\xi(x)$ définie par $\sigma(x, L = \xi) = 0$. Selon la forme SOS, on aura $\xi(x) \sim \exp(\frac{1}{x^2})$, tandis que le choix de la variable d'échelle $x^2 \ell n^2 L$ conduit à $\xi'(x) \sim \exp \frac{1}{x}$. Avec ces définitions on aura

$$\sigma(x,L) = 1 - \frac{\ell nL}{\ell n\xi} + \ldots \simeq L^{-Ax^2} \quad \text{(SOS)}$$

ou

$$\sigma(x,L) = 1 - (\frac{\ell nL}{\ell n\xi'})^2 + \ldots \simeq \exp - (\frac{\ell nL}{\ell n\xi'})^2$$

avec l'autre variable d'échelle. Ces deux lois indiquent que pour x fini et $L \to \infty$, $\sigma(x,L) \to 0$ et l'ordre ferromagnétique est immédiatement détruit par le champ aléatoire. Remarquons qu'il est difficile de distinguer ces deux lois. Mais il est clair que pour x assez petit, $\xi(x)$ et $\xi'(x)$ peuvent devenir très grands. Par exemple pour $x = 0,1$, $\xi(x) \simeq 10^{43}$, $\xi'(x) \simeq 10^{17}$. Ceci explique en particulier les effets de taille finie obtenus sur $m(x)$ et $m'(x)$. Il est utile de rappeler l'expression analogue de la tension de surface du modèle d'Ising à une dimension

$$\sigma(T,L) = - T \ \ell n \frac{1+e^{-L/\xi}}{1-e^{-L/\xi}}, \quad \xi = \frac{1}{\ell n[(1+t)/(1-t)]} \sim \frac{1}{2t} \qquad (t=\exp - \frac{2}{T})$$

III.4. Conclusion.

En dimension 2, et indépendamment du choix de la distribution (non pathologique) $P(h_i)$, un champ aléatoire $\{h_i\}$ couplé à l'aimantation, aussi petit soit-il, détruit l'ordre ferromagnétique. Le mécanisme de formation d'amas nécessite des échantillons très grands lorsque les valeurs de x sont petites. Plus précisément, la tension superficielle d'une paroi dans un échantillon de taille L se comporte pour $x \ll 1$ et $L \gg 1$ comme $\sigma(x,L) \sim 1 - Ax^2 \ln^2 L$. Cette paroi très rugueuse présente des surplombs négligés dans l'approche SOS. D'où le diagramme de phase :

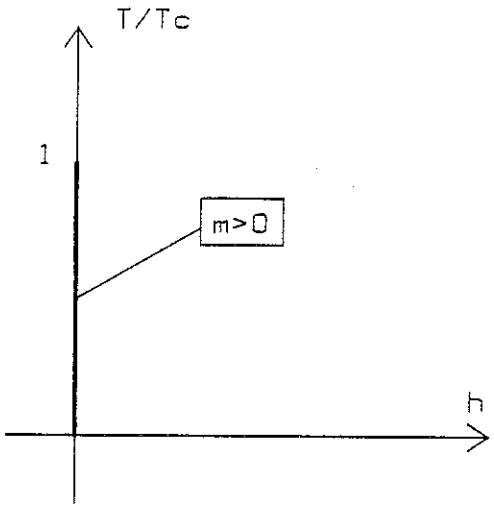


FIGURE 27

IV - ETUDE NUMERIQUE EN DIMENSION 3

A 3 dimensions, l'influence du champ aléatoire sur l'ordre ferromagnétique n'est pas du tout la même qu'à deux dimensions. En effet, un champ aléatoire faible ne détruit par l'ordre et seule la température critique où cet ordre apparaît est modifiée. Au contraire un champ aléatoire fort brisera l'ordre ferromagnétique à toute température, même nulle. L'objectif de ce paragraphe est de vérifier ceci et de préciser le diagramme de phase (champ-température). Les résultats du champ moyen prouvant que l'ordre de la transition dépend de la nature de la distribution $P(h_i)$, plusieurs distributions ont été ainsi envisagées. L'étude comporte deux parties. Une première partie à température nulle utilise les techniques du chapitre II. Une deuxième partie utilise les méthodes connues de simulation Monte-Carlo pour l'étude à température finie. Les aspects dynamiques du problème (ralentissement critique) n'ont pas été envisagés.

IV.1. Etude à température nulle.

Comme pour le cas de la dimension 2, le comportement de l'aimantation moyenne $m = \overline{\frac{1}{N}\Sigma\sigma_i}$ où $\overline{(\ldots)}$ désigne la moyenne sur le désordre, le comportement de l'aimantation projetée $m' = \overline{\frac{1}{N}\Sigma\, \mathrm{sgn}(h_i)\sigma_i}$ et le comportement de $e = -\overline{\frac{1}{N}(\Sigma J\sigma_i\sigma_j + \Sigma h_i\sigma_i)}$ en fonction de l'intensité du désordre :

$x \equiv \sqrt{\frac{\overline{h^2}}{J}}$ ont été analysés. De même, la tension de surface (i.e. énergie de paroi) a été étudiée et ceci en utilisant les mêmes distributions de champ $P(h_i)$ qu'en dimension 2.

IV.1.a. Etude de l'aimantation :

Les figures 28 et 29 ci-dessous présentent l'aimantation en fonction de x. La figure 28 se rapporte à une distribution discrète du

champ : $P(h_i) = \frac{1}{2}\delta(h-h_i) + \frac{1}{2}\delta(h+h_i)$. Les moyennes sont faites pour différentes tailles LxLxL avec des conditions aux bords libres, L = 5 (16800 échantillons), L = 10 (1030 échantillons), L = 15 (10 échantillons), L = 20 (20 échantillons). Sur la figure 29, sont montrés des résultats analogues obtenus pour une distribution continue des champs $P(h_i) = 1/2\ H$, $|h_i| \leqslant H$ avec différentes tailles : L = 5 (1775 échantillons), L = 10 (140 échantillons) , L = 15 (30 échantillons), L = 20 (12 échantillons).

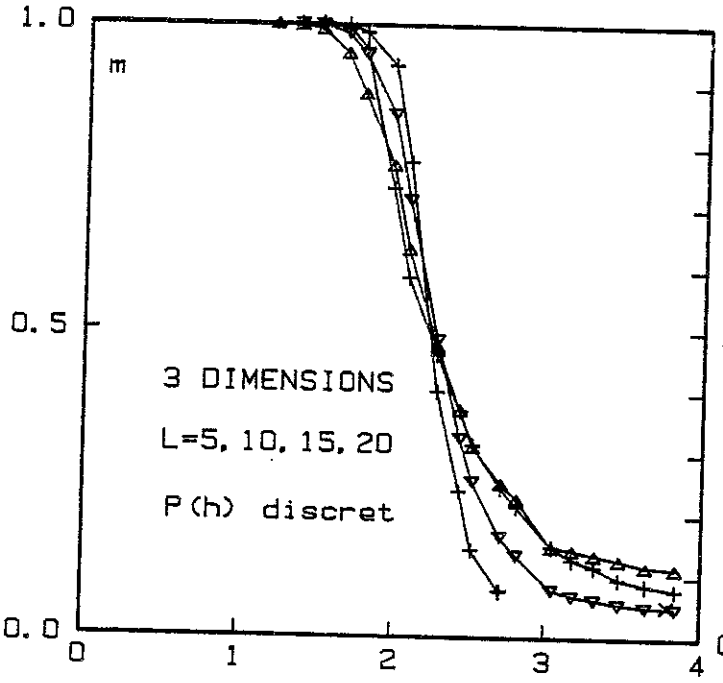


FIGURE 28

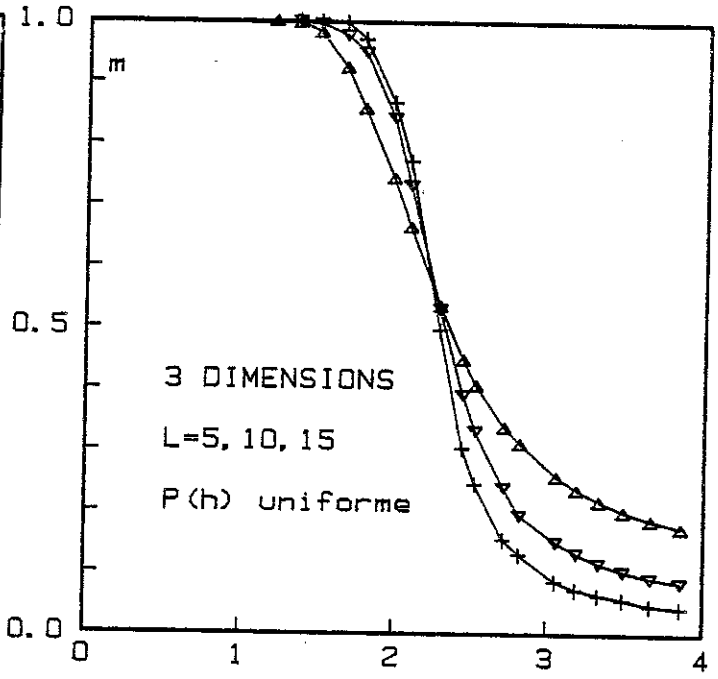


FIGURE 29

Dans le cas de la distribution discrète des champs, la valeur $x > 6$ équivaut à un champ infini, comme la valeur $x = 4$ pour 2d (à d dimension $x = 2d$). Il apparaît clairement sur ces courbes que l'aimantation reste saturée à $m(x) = 1$ pour les faibles valeurs de x ($x \leqslant x_c \simeq 2$). Pour montrer que cette saturation n'est pas un effet de taille comme ce fut le cas à 2 dimensions, on a étudié le comportement de la tension de surface $\sigma(x,L)$. Les résultats sont reportés au paragraphe suivant, et montrent que x_c est bien une valeur critique séparant deux régimes différents.

Les points à préciser sont donc les suivants : i) quelle est la valeur numérique précise de x_c ? ii) dans la limite des grandes tailles ($L \to \infty$), quel est le comportement critique de $m(x)$ au voisinage de x_c ? iii) y a-t-il une longueur de corrélation divergente à x_c ? La technique employée pour répondre à ces trois questions est développée dans les paragraphes suivants relatifs à l'analyse des résultats de simulation. Il s'agit de la méthode des lois d'échelles en taille finie, appliquée au cas particulier d'une quantité qui présente une discontinuité. Pour l'illustrer, le cas de la chaleur spécifique d'un modèle ferromagnétique à portée infinie est discuté ici brièvement. Dans la limite thermodynamique (Bax), cette chaleur spécifique est nulle à $T > T_c \equiv 1$ et devient finie pour $T < T_c$: $C(T_c^+) - C(T_c^-) = 3/2$. Il est d'usage d'associer à cette discontinuité l'exposant $\alpha = 0$. Partant de

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N-1} \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j$$

décrivant ce modèle à N spins, l'expression de la chaleur spécifique $C(T,N) = \beta^2 Z''/Z - (\beta Z'/Z)^2$ où $Z(\beta,N)$ désigne la fonction de partition :

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} \exp\{-\beta \mathcal{H}\}$$

et $Z' = dZ/d\beta$, $Z'' = d^2Z/d\beta^2$ peut être calculée comme somme finie. La figure 30 présente $C(T,N)$ pour $N = 50, 100, 300, 600$. La variable d'échelle pour un système comportant N spins est $N^{1/(2-\alpha)}(T-T_c)$, i.e. $\sqrt{N}(T-1)$ dans le cas présent. Sur la figure 31, $C(N,T)$ est portée en fonction de la variable réduite $(T-T_c)\sqrt{N}$. L'accord est satisfaisant pour $T \geqslant T_c$ où toutes les courbes se superposent. Ceci n'est pas le cas à $T < T_c$, dû aux corrections aux lois d'échelle. Toutefois le saut de $C(T)$ se manifeste

par l'intersection des courbes C(T,N) à T_c et ceci pour tout N, comme le montre la figure 30. Noter que le maximum de la chaleur spécifique pour une taille N est atteint pour $T = T_c(N) \simeq 1 - A/\sqrt{N}$ et ceci est l'origine du déplacement des maximas sur la figure 31.

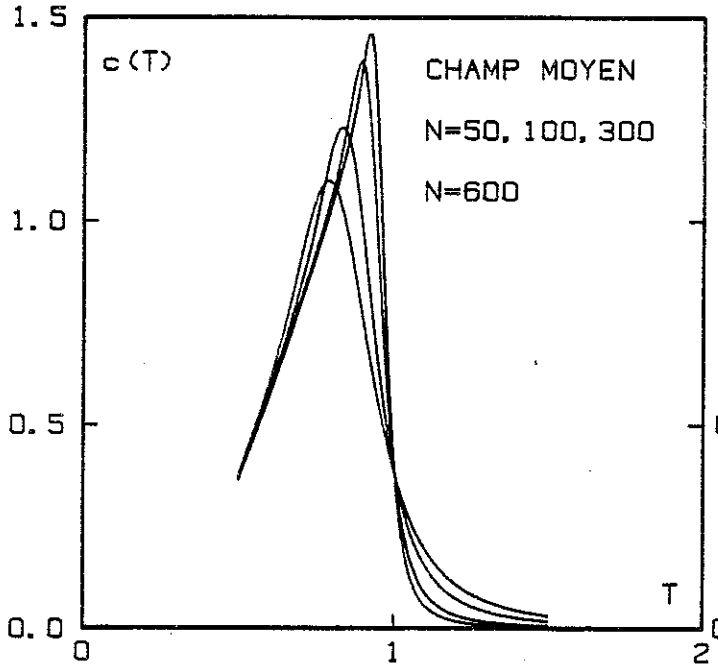


FIGURE 30

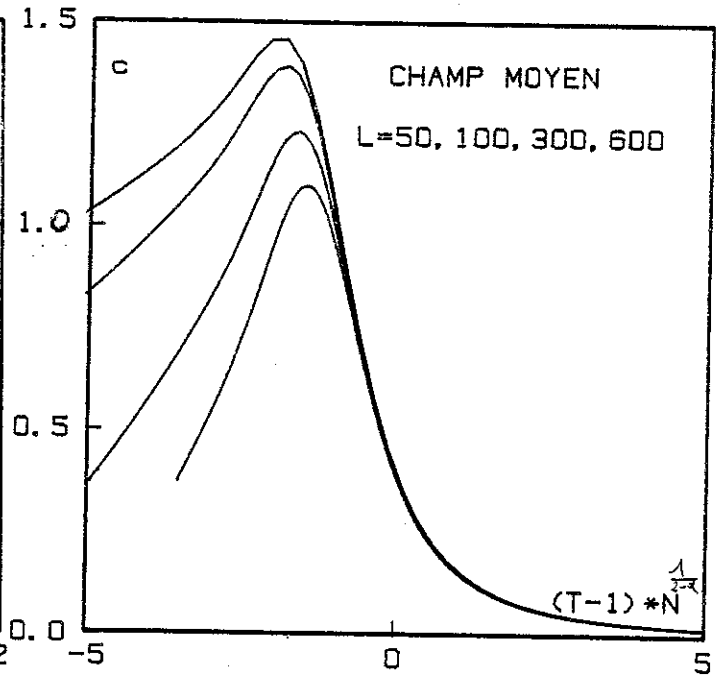


FIGURE 31

Revenons aux données de m(x) et m'(x) et cherchons à analyser le comportement critique à x_c (exposants β et ν). En prenant pour variables d'échelles $(x-x_c)L^{1/\nu}$ et $L^{\beta/\nu}$ m(x), nous avons reporté les données des figures 28 et 29 sur les figures 32 et 33. Les courbes 34 et 35 correspondent aux mêmes points que les courbes 32 et 33 et suggèrent, comme l'exemple précédent, $\beta = 0$ au cas où la transition est du deuxième ordre, ou bien une transition du premier ordre. Dans le

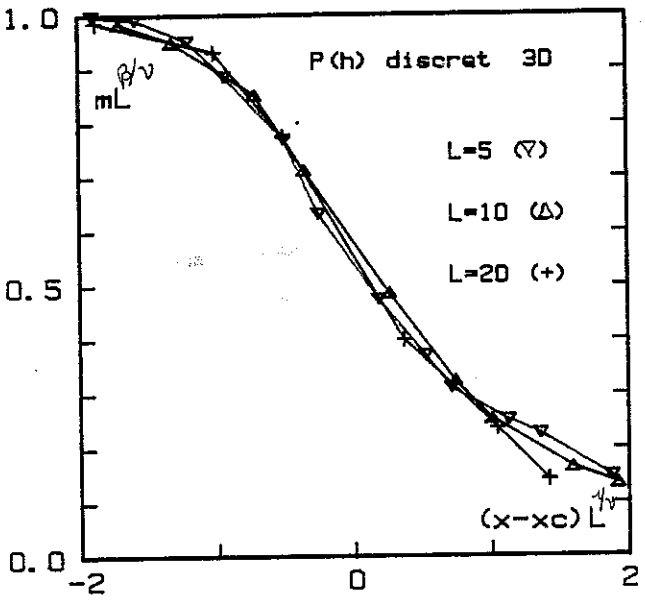


FIGURE 32

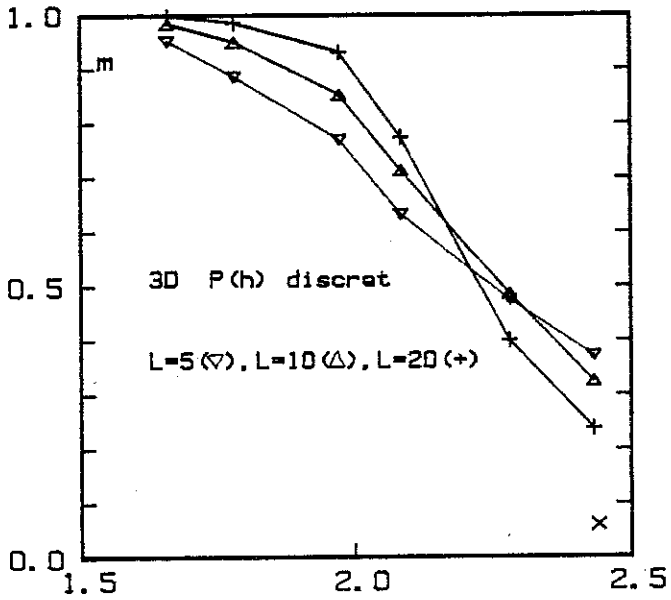


FIGURE 34

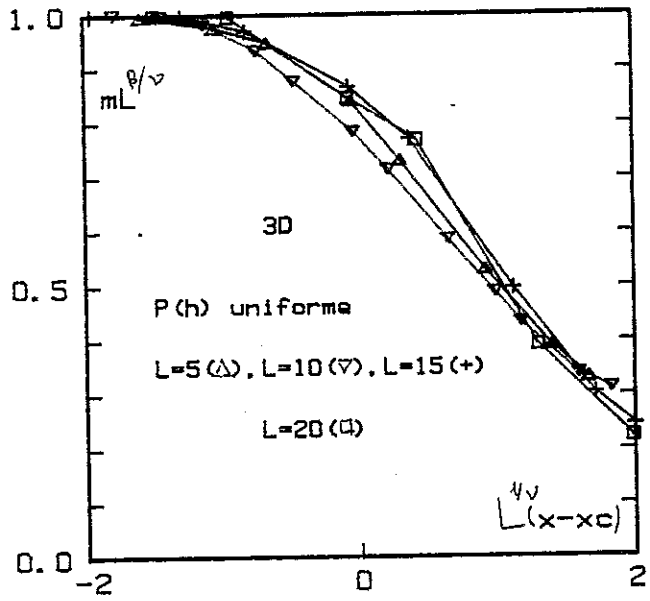


FIGURE 33

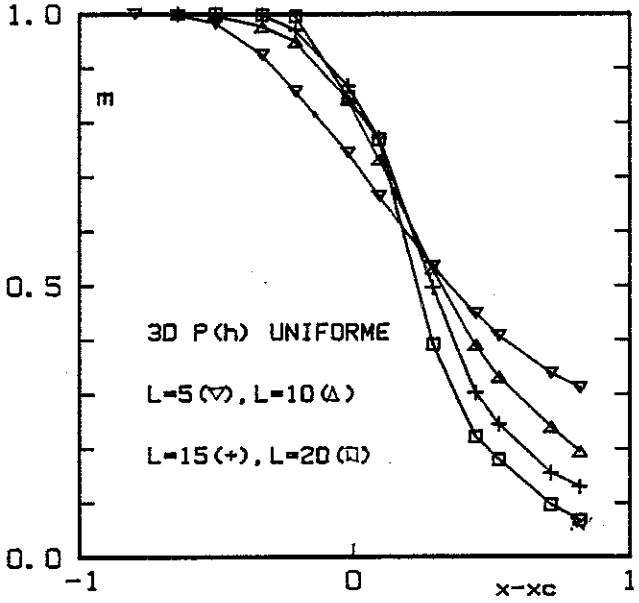


FIGURE 35

cas de la première hypothèse, les meilleures valeurs de ν et x_c ainsi obtenues sont $\nu = 2,0 \pm 0,1$ et $x_c = 2,2 \pm 0,1$ pour le cas de la distribution discrète (fig. 32) et $\nu = 2,0 \pm 0,1$ et $x_c = 2,0 \pm 0,1$ pour la distribution continue uniforme (fig. 33). Ce saut de $m(x)$ à $x = x_c$ et l'apparition d'une longueur caractéristique $\xi(x) \sim |x-x_c|^{-\nu}$ vont dans le sens d'une transition du deuxième ordre à $x = x_c$. Ce n'est pas le premier exemple où ce comportement apparaît en mécanique statistique. Citons deux exemples : i) la chaîne d'Ising ($d = 1$) où $T_c = 0$, $\xi \sim \exp(2J/T)$: $\alpha = 1$; $\beta = 0$, $\gamma = 1$, $\nu = 1$, ii) le modèle du champ aléatoire à portée infinie à $T = 0$ (paragraphe II). Dans ce sens, le cas $d = 3$ ressemble au cas $d = 2$: seule x_c devient finie à $d = 3$ et la forme de ξ change.

Dans le cas de la distribution discrète nous avons effectué la même analyse qu'à deux dimensions de l'aimantation projetée $m'(x)$ (fig. 36). On retrouve les sauts caractéristiques de $m'(x)$. Les amas filiformes donnent lieu à de tels sauts. Par exemple pour des chaînes linéaires on trouve les positions des sauts à $x = x_n = 4 + 2/n$ (n entier). Certains sauts sont indiqués sur la figure 36.

Par comparaison nous avons représenté sur la figure 37 le comportement de $m'(x)$ pour le cas de la distribution continue uniforme. Les sauts caractéristiques ont disparu. A la différence de $m(x)$, $m'(x)$ ne semble pas présenter de sauts dans le cas de cette distribution. Notons cependant que $m'(x)$ n'a pas ici de sens physique, à la différence du cas discret.

IV.1.b. Fluctuations de l'aimantation :

Les fluctuations de l'aimantation vont nous renseigner sur la présence ou non d'une longueur caractéristique $\xi(x) \sim |x-x_c|^{-\nu}$ au voisinage de x_c. Ces fluctuations sont des fluctuations dues au désordre trempé et non pas à l'agitation thermique puisque $T = 0$. Remarquons que dans le cas du modèle à portée infinie nous avions associé un exposant γ à la dérivée :

$$\chi(x) = \lim_{H \to 0} \frac{dm(x,H)}{dH} \sim |x - x_c|^{-\gamma}$$

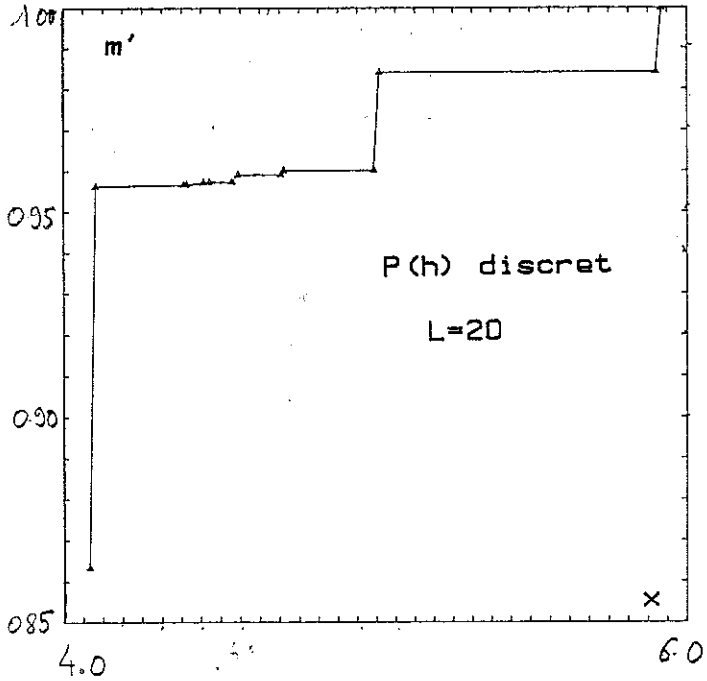


FIGURE 36

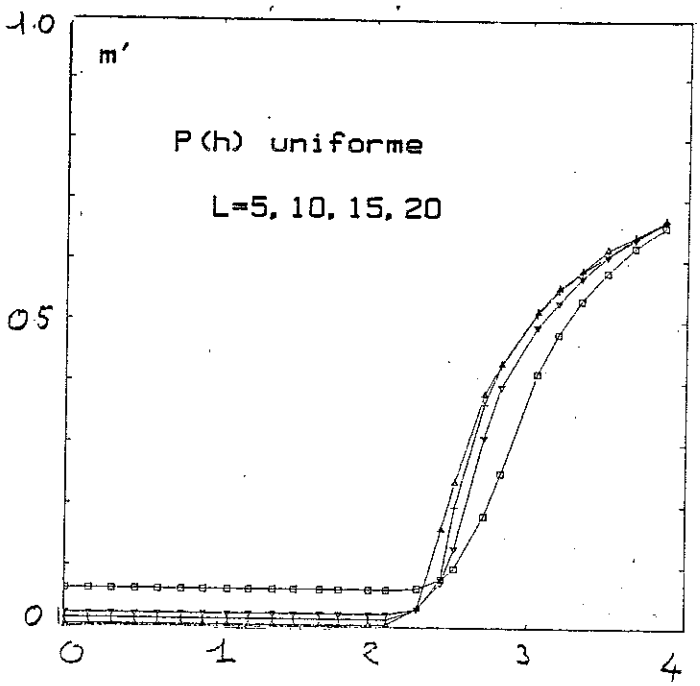


FIGURE 37

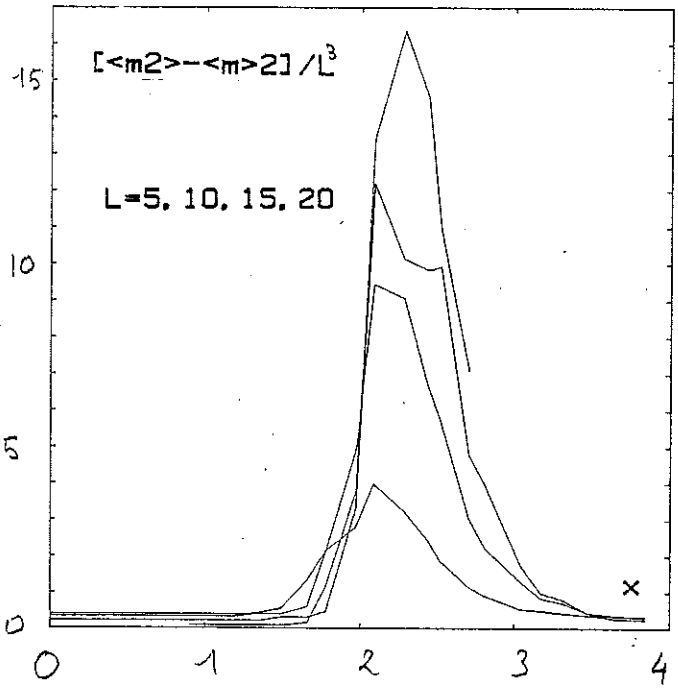


FIGURE 38

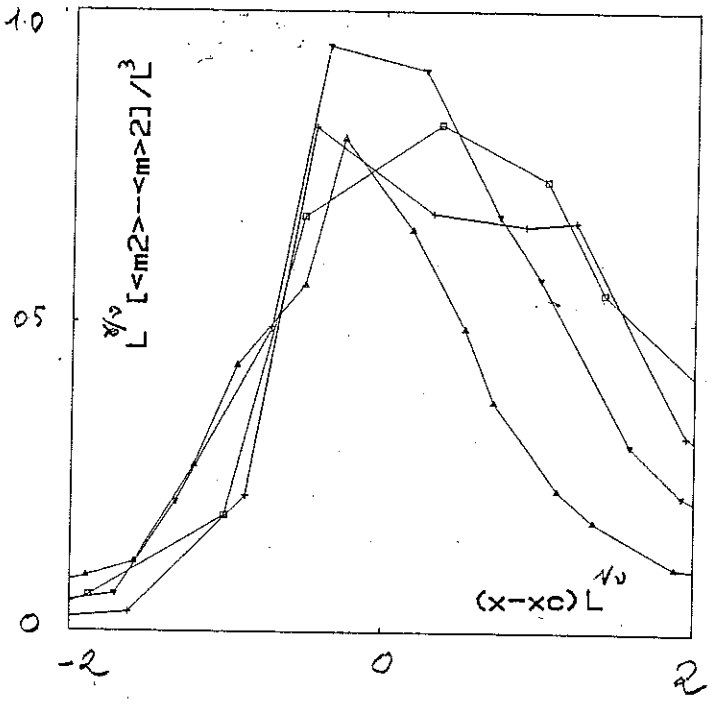


FIGURE 39

où H désigne un champ extérieur uniforme. Toutefois, sans appliquer H dans le cas présent, on peut étudier la distribution $P_L(m)$ de l'aimantation à température nulle. m(x) étudiée plus haut fournit une description du comportement du premier moment de $P_L(m)$ à $x \sim x_c$. Il est naturel de considérer le second moment de $P_L(m)$. Plus précisément nous avons porté sur la figure 38 $\chi(x) \equiv [< m^2 > - < m >^2]/L^3$ en fonction de x. On remarque que les courbes se superposent dans la phase désordonnée($x \sim 4$) ($x > x_c$), ce qui justifie la normalisation utilisée pour la variance de m. Il est donc naturel de tenter une transformation d'échelle pour ramener ce faisceau de courbes à une courbe universelle (fig. 39) en introduisant un exposant γ pour décrire le comportement de $\chi(x) \sim |x-x_c|^{-\gamma}$ à $x \sim x_c$. Cette courbe montre un accord relativement bon à $x < x_c$ et ainsi que pour les valeurs suivantes :
$1/\nu = 0,50 \pm 0,05$, $\gamma/\nu = 1,0 \pm 0,1$ et $x_c = 2,2 \pm 0,1$.
La dispersion des points est très probablement due au nombre limité d'échantillons. On déduit donc de $\chi(x)$: $\nu = 2,0 \pm 0,2$ $\gamma = 2,0 \pm 0,2$ et $x_c = 2,2 \pm 0,1$. Ces valeurs sont bien compatibles avec les valeurs obtenues à partir de l'analyse de m(x) plus haut.

IV.1.c. L'énergie interne :

Comme cette étude est menée à T = 0, l'énergie interne est aussi l'énergie libre. Pour chaque taille L^3 l'énergie trouvée peut être comparée aux deux cas limites $x \ll 1$ et $x \gg 1$.

Tout comme le cas d = 2, on peut calculer l'énergie E_o, correspondant à un ordre ferromagnétique($x \ll x_c$) $\frac{E_o}{J} = 3L(L-1) - 0,8\, x \sqrt{L^3}$ et l'énergie E_1 dans l'autre limite : $E_1/J = - xL^3$. Les figures 40 et 41 présentent cette comparaison pour N = 5 et N = 20 (conditions aux bords libres, P(H) discret). E_0 et E_1 sont des bornes supérieures de E(x), comme ce fut le cas à d = 2.

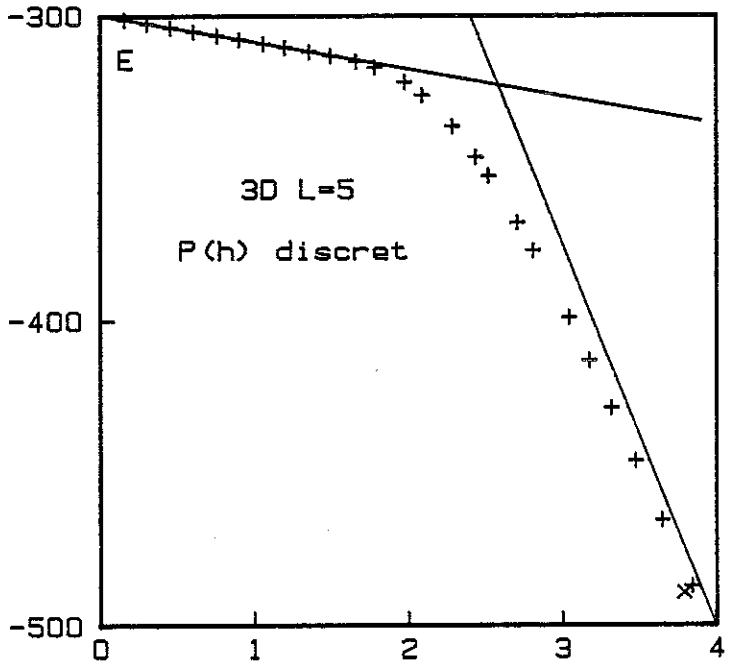


FIGURE 40

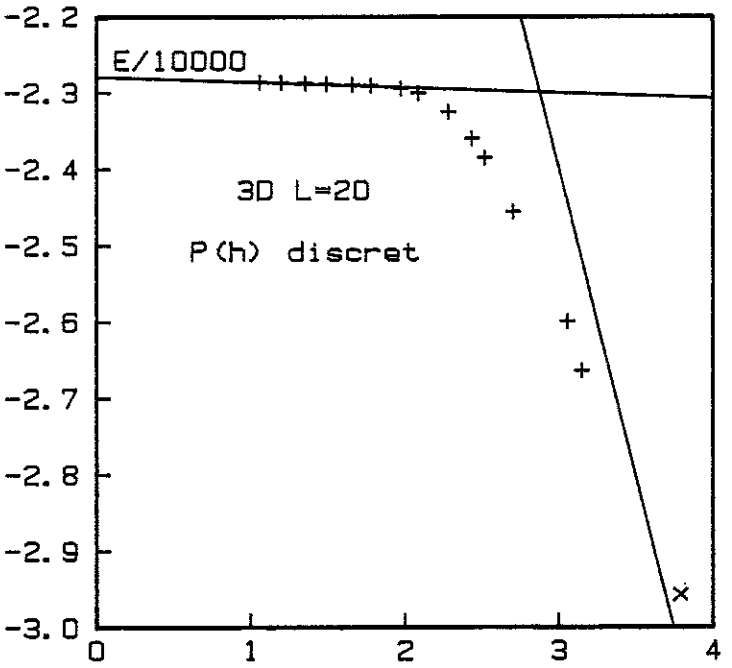


FIGURE 41

On peut en déduire une borne supérieure x_o de x_c en égalant $E_0(x) = -dL^d - AxL^{d/2} \simeq - dL^d$ avec $E_1(x) \sim -x\ L^d$, ce qui donne $x_0 = d$. D'où $x_c < d$, ce qui est bien confirmé par les résultats numériques.

<u>Remarque</u> : Cette borne x_0 ainsi définie par $E_0(x) = E_1(x)$, coïncide avec la valeur exacte de x_c dans la limite du modèle à portée infinie.

Pour définir un exposant critique α, on peut soit mesurer les dérivées (première ou seconde) de l'énergie $E(x)$, soit mesurer ses fluctuations. Le manque de précision dû au nombre insuffisant

d'échantillons pour la première définition et l'absence de données pour la deuxième nous limitent dans cette analyse. On peut néanmoins remarquer qu'il n'y aura pas de fluctuations dans la phase ordonnée $x \leqslant x_c$, puisque l'état fondamental correspondant est toujours ferromagnétique. Tandis que pour $x \gtrsim x_c$ ces fluctuations auront une valeur non nulle et probablement finie. Cette remarque nous conduit à postuler que l'exposant α est nul. Ceci satisfait la relation de Rushbrooke $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$, si on utilise les valeurs trouvées précédemment pour $\beta(= 0)$ et $\gamma(= 2)$.

Nous concluons donc que la transition à $x = x_c$ est du deuxième ordre ($x_c = 2{,}0 \pm 0{,}1$ pour p(h) uniforme, $x_c = 2{,}2 \pm 0{,}1$ pour p(h) discret) avec le jeu d'exposants $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 2$ et $\nu = 2$. Il faut noter que la relation de Josephson : $d\nu = 2 - \alpha$ se trouve donc violée à $x = x_c$ et il faudrait la remplacer par une nouvelle relation (Vil(c)), (Bra), (Fis(d)).

IV.1.d. Energie d'interface :

Pour confirmer nos résultats précédents (persistance de la phase ordonnée ferromagnétique à $x < x_c$) et pour déterminer x_c d'une manière différente, l'étude de l'énergie d'une paroi séparant deux domaines a été effectuée. Le même procédé qu'à deux dimensions pour créer la paroi a été utilisé. Les figures suivantes présentent pour le cas p(h) discret et le cas p(h) uniforme le comportement de la tension de surface $\sigma(x\ ;\ L)$ définie par $\sigma(x,L) = \frac{\Delta E(x,L)}{JL^2}$ pour différentes valeurs de L : pour le cas continu L = 5 (330 échantillons), L = 8 (304 échantillons), L = 10 (115 échantillons), L = 15 (26 échantillons) et pour le cas discret L = 6 (1164 échantillons), L = 8 (400 échantillons), L = 10 (125 échantillons), L = 15 (45 échantillons) et L = 20 (12 échantillons). La figure 42 se rapporte au cas continu et représente $\sigma(x\ ;L)$ en fonction de x.

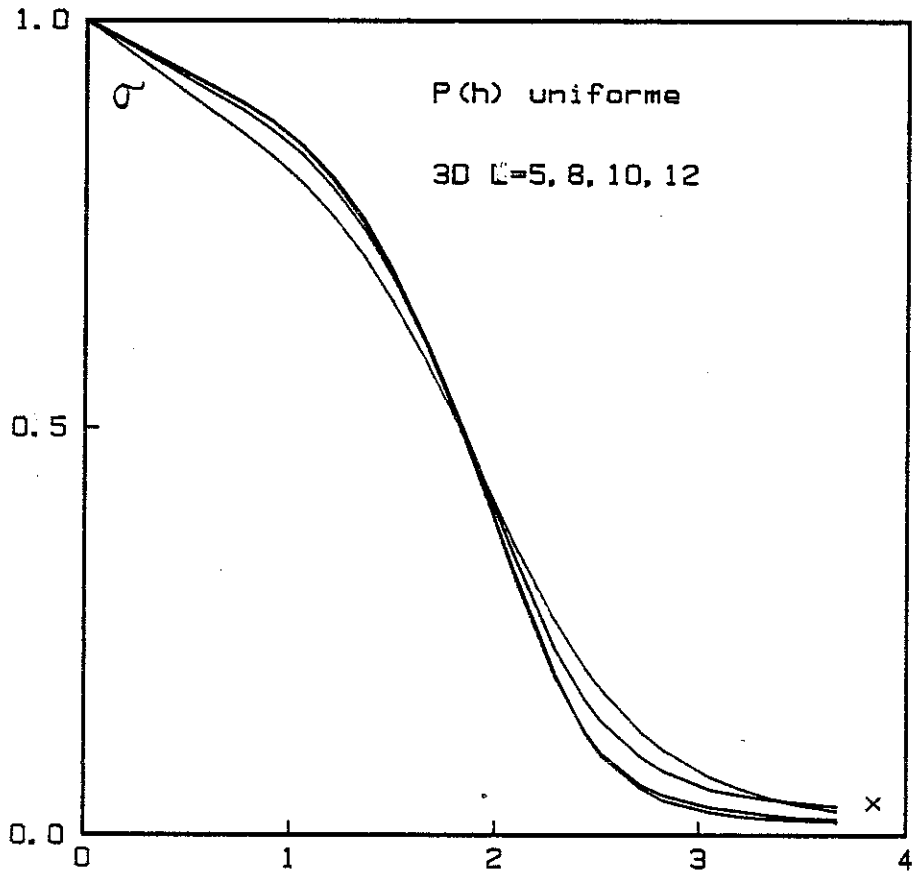


FIGURE 42

On voit clairement que $\sigma(x\ ;\ L)$ gardera une valeur non nulle quand L croît pour $x < x_c$, prouvant ainsi que la phase ordonnée ferromagnétique est stable pour $x < x_c$. Le comportement en taille de $\sigma(x,L)$ est caractéristique d'une quantité présentant un saut. On peut alors, comme pour l'aimantation,utiliser les variables réduites $(x-x_c)L^{1/\nu}$ et $\sigma(x\ ;\ L)\ L^{\mu/\nu}$ pour tester l'hypothèse d'invariance d'échelle et estimer des valeurs des exposants ν, μ et x_c. Ici l'exposant μ décrit le comportement de $\sigma(x,L = \infty)$: $\sigma \simeq (x-x_c)^{\mu}$. Le saut de $\sigma(x,L)$ observé nous conduit à tester l'hypothèse $\mu = 0$. La figure 43 correspond au cas p(h) discret.

La valeur trouvée pour ν étant $1/\nu = 0{,}50 \pm 0{,}05$ en parfait accord avec la détermination précédente de ν. Les valeurs de x_c ainsi trouvées sont $x_c = 1{,}9$ pour le cas p(h) uniforme et $x_c = 2{,}1 \pm 0{,}1$ pour le cas p(h) discret sont aussi compatibles avec les valeurs trouvées plus haut. Noter que ces résultats sont cohérents avec notre choix $\mu = 0$ pour l'exposant de la tension de surface (saut à $x = x_c$).

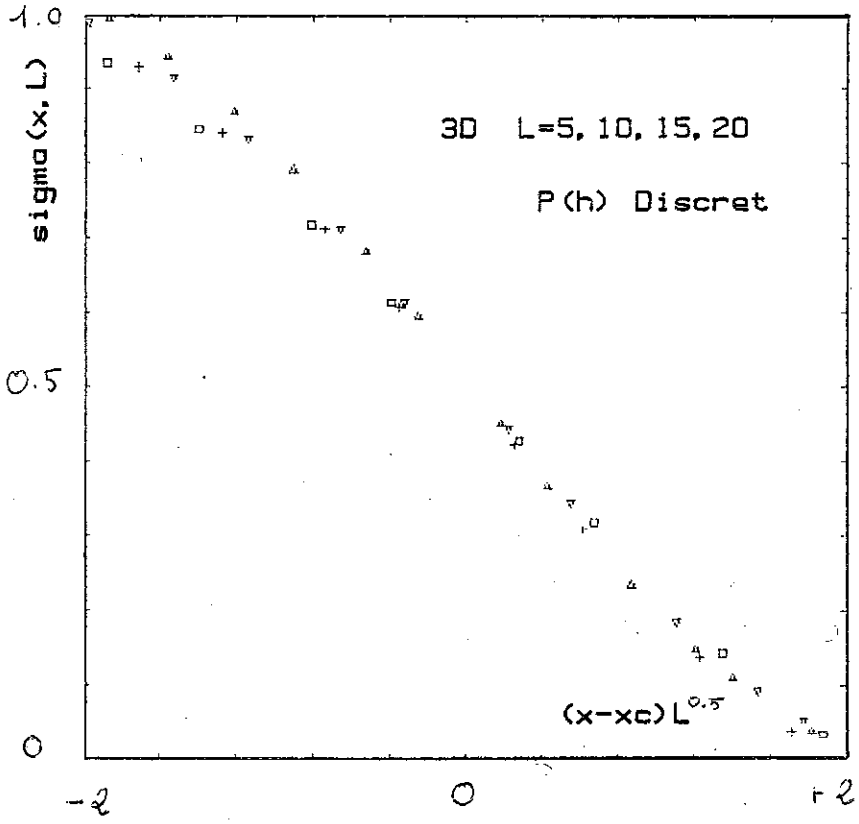


FIGURE 43

L'analyse des résultats pour $\sigma(x\ ;\ L)$ nous permet une autre estimation de x_c. Une première détermination consiste à assimiler x_c au point d'intersection de 2 courbes $\sigma(x\ ;\ L)$ pour deux valeurs différentes de L, ce qui fournit autant de x_c que de couples (L,L'). Une deuxième détermination qui ne fait intervenir qu'une seule valeur de L consiste à assimiler x_c à l'abscisse du maximum de la dérivée de $\frac{d\sigma}{dx}(x\ ;\ L)$. Ces deux déterminations sont cohérentes, c'est-à-dire que ces courbes s'intersectent entre elles au point où leur dérivée est maximum (voir la figure 44 correspondant à une distribution $p(h_i)$ continue). Ces nouvelles déterminations de x_c sont compatibles mais légèrement inférieures aux valeurs déterminées à partir de E(x) et m(x). La cause en est certainement liée aux problèmes de taille finie.

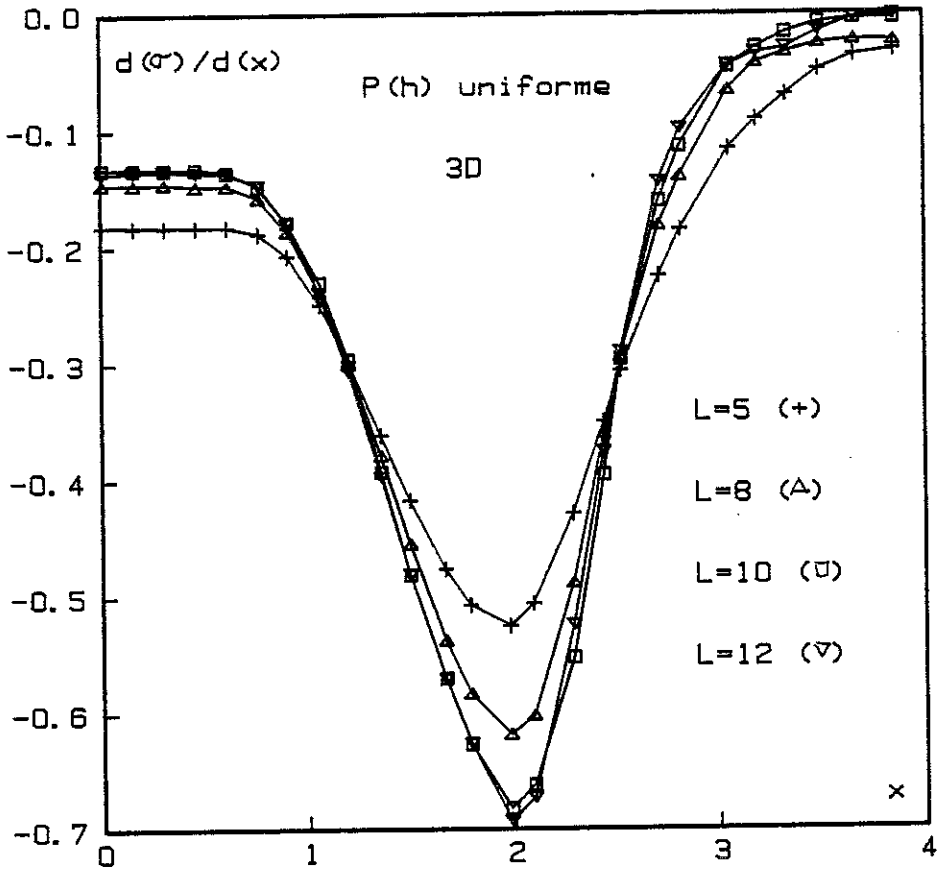


FIGURE 44

En conclusion, cette étude suggère qu'à température nulle, le modèle d'Ising sous champ aléatoire présente une transition de phase à $x = x_c$ où l'aimantation qui est le paramètre d'ordre saute discontinuement tandis qu'une longueur de corrélation $\xi(x)$ prend place et diverge à x_c. Le jeu d'exposants décrivant cette transition est : $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 2$, $\nu = 2$ et $\mu = 0$. C'est-à-dire que la relation de Rushbrooke $\alpha+2\beta+\gamma = 2$ est bien vérifiée tandis que la relation de Josephson $2-\alpha = d\nu$ devient $2-\alpha = (d-\theta)\nu$ où $\theta = 2$. Ce nouvel exposant θ a été introduit dans (Vil(d)), (Bra),(Fis(d)). On peut lui donner le sens suivant : $\bar{d} = d - \theta$ où $\bar{d}$ désigne la dimension fractale de l'ensemble des spins responsables des fluctuations à $x = x_c$. Pour un système homogène $\theta = 0$ et l'on retrouve la relation bien connue. Pour le modèle étudié ici, $\frac{d}{2} - \frac{\beta}{2} \leqslant \theta \leqslant d - 1$ ($\theta = 2$ à $d \geqslant 6$) en accord avec nos résultats. La présence de θ (ou $\bar{d}$) est là pour traduire les inhomogénéités des fluctuations, et peut intervenir dans différentes quantités. Par exemple, l'exposant μ de la tension de surface $\sigma(x,L) \equiv \Delta E/L^{d-1}$ est lié directement à θ :

$$\sigma(x) \sim \xi^{\theta-d+1} \sim (x - x_c)^{\mu} \quad , \quad \mu = \nu(d-1-\theta)$$

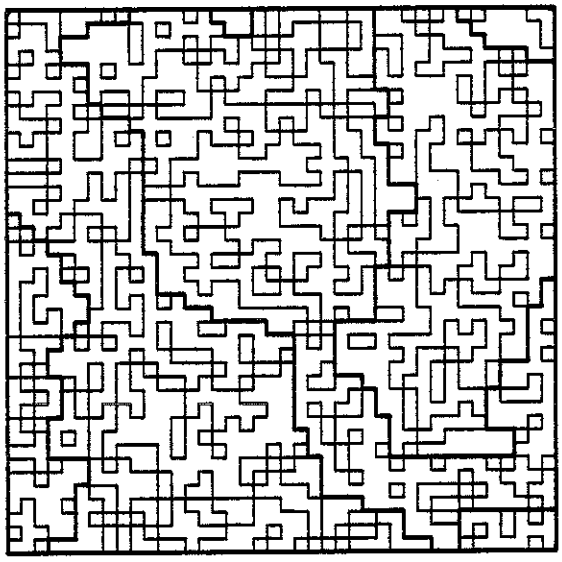
Cette relation est parfaitement compatible avec nos résultats,à la fois à $d = 3$ ($\theta = 2$, $\mu = 0$) et $d = 2$ ($\theta = 1$, $\mu = 0$).

Il faut noter que les valeurs numériques trouvées à $d = 3$ sont en désaccord avec la prédiction du développement à $d = 2 + \varepsilon$ (Bra) qui conduit à $\theta = 1 + \varepsilon/2$.

IV.1.e. <u>Morphologie de l'état fondamental</u> :

Une étude de la morphologie des amas de spins (+ et -) nous a semblé utile pour comprendre la transition à $x = x_c$. Les résultats de cette étude se résument ainsi. Lorsque $x < x_c$ il y a un seul amas de spins tous orientés dans la même direction. D'un autre côté lorsque $x > 6$ (pour le modèle $P(h) = \pm h$) chaque spin est aligné sur un champ local et il y a autant d'amas de spins que d'amas de sites (modèle de percolation à 3 dimensions).

Comment passe-t-on d'un seul amas à $x < x_c$ à beaucoup d'amas pour $x > 6$? L'étude faite n'a porté que sur un nombre limité d'échantillons (20 familles, $0 < x < 6$), où l'on a effectué l'analyse de la distribution des tailles des amas, ainsi que leur forme. Pour toutes les familles d'échantillons étudiés, lorsque x devient plus grand que $x_c \sim 2{,}0$, l'unique amas de spins ordonnés se casse en deux domaines uniquement, qui percolent à travers l'échantillon. Lorsque x augmente encore tout en restant inférieur à une valeur de l'ordre de $x \sim 3$, les deux domaines se déforment, mais il n'y en a toujours que deux. Leur déformation consiste à ajuster leur frontière afin de s'adapter aux frontières séparant les amas de sites définis par le signe du champ. Qualitativement cette déformation se traduit, en baissant x, par la disparition des bras morts d'une phase (+) dans l'autre phase (-) (figure 45).



—— frontiere des amas de champs.

—— frontiere des amas de spins.

FIGURE 45

Le caractère filiforme de ces dendrites est à rapprocher de la valeur $\overline{d} = 1$ trouvée plus haut comme dimension fractale des régions sources de fluctuations. Enfin pour x grand le nombre des domaines augmente pour atteindre un nombre $\sim L^3$ à $x > 6$. On voit ici la différence importante pour ce modèle entre la dimension 2 et la

dimension 3. En effet, en général, à 2 dimensions, 3 régimes sont possibles pour le problème de la percolation de sites : si $p < 1-p_c$ seuls les amas de sites éteints percolent, si $1-p_c < p < p_c$ aucun amas ne percole et si $p > p_c$ seuls les amas de sites allumés percolent (p probabilité pour un site d'être allumé). Par contre, à 3 dimensions dans le régime intermédiaire $p_c < p < 1-p_c$ les 2 types d'amas (amas de sites allumés et amas de sites éteints) percolent. Puisque, pour le problème du champ aléatoire, un site porte un champ positif ou négatif avec la probabilité $p = 1/2$ on est dans le régime intermédiaire qui différencie fortement la dimension 2 de la dimension 3.

IV.2 Etude à température finie.

Pour compléter le diagramme de phase (x,T), nous avons étudié la transition à $T_c(x)$, en fonction de la température. Pour cela on s'est limité aux propriétés d'équilibre, sans étudier les effets dynamiques à la transition. L'algorithme utilisé dans l'étude précédente à $T = 0$ permet d'obtenir les états de base uniquement. Donc il faut le remplacer par un autre qui échantillonne tous les états d'équilibre à $T \neq 0$.

Le paragraphe suivant décrit brièvement cet algorithme. L'analyse des résultats est précédée d'un résumé des méthodes d'analyse.

IV.2.a. Méthode de Métropolis et algorithme de Monte-Carlo :

La méthode de Métropolis (Met) est une méthode très générale qui permet de construire une chaîne de Markov dont la distribution limite est une distribution donnée à l'avance. Rappelons qu'on appelle une chaîne de Markov un processus aléatoire $\{X_n \in \mathbb{N}\}_{n \in \mathbb{N}}$, tel que

$$Pr(X_n = j | X_{n-1} = i_{n-1}, \ldots, X_0 = i_0) = Pr(X_n = j \,|\, X_{n-1} = i_{n-1})$$

Si $Pr(X_n = j | X_{n-1} = i)$ est indépendant de n, la chaîne de Markov est alors dite homogène et la matrice $P = (P_{ij})$ est stochastique.

A la matrice P d'une chaîne de Markov $\{X_n \in \{1, \ldots, p\}\}_{n \in \mathbb{N}}$ on associe un graphe à p sommets. A chaque état $i \in \{1, \ldots, p\}$ de la chaîne de Markov correspond un sommet. Deux sommets i et j sont reliés par un arc (i,j) si $P_{ij} > 0$. Une chaîne de Markov homogène est dite irréductible, si le graphe associé est fortement connexe. Si P_{ij}^n $i \in \{1,\ldots,p\}$ est l'élément (i,j) de la matrice P^n, i est la probabilité d'aller de l'état i à l'état j en n pas. Un état i est dit périodique de période λ si P_{ii}^n n'est non nul que pour n multiple de λ. Une chaîne de Markov est périodique de période λ si tous ses états sont de période λ (dans ce cas, on peut se ramener à λ chaînes de Markov de période 1). Une chaîne de Markov de période 1 est dite apériodique. Toutes des définitions permettent d'énoncer le théorème de base sur le comportement asymptotique des chaînes de Markov.

Si P est la matrice de transition d'une chaîne de Markov irréductible, homogène et apériodique et s'il existe un vecteur ligne π tel que $\Pi P = \Pi$ alors

i) Π est unique

ii) $\pi_i > 0 \quad \forall i$

iii) $\lim_{n\to\infty} P_{ij}^n = \pi_j \quad \forall i$

C'est-à-dire que, quelque soit la distribution de départ, on converge vers la distribution Π.

On peut maintenant exposer brièvement la méthode de Métropolis (Met). Soit donc une distribution de probabilité Π, comment construire une chaîne de Markov qui converge vers Π ? A partir d'une matrice stochastique apériodique et irréductible quelçonque P^*, on construit une matrice, elle-même stochastique P, de la manière suivante :

$$P_{ij} = \begin{cases} P_{ij}^* \times \dfrac{\pi_j}{\pi_i} & \text{si } \dfrac{\pi_j}{\pi_i} < 1 \\ P_{ij}^* & \text{si } \dfrac{\pi_j}{\pi_i} > 1 \end{cases} \qquad i \neq j$$

$$P_{ii} = 1 - \sum_{i \neq j} P_{ij}$$

Il est clair que P est bien stochastique et que $\pi_i P_{ij} = \pi_j P_{ji}$ pour tout (i,j). On en déduit facilement que $\Pi P = \Pi$. De plus le passage de P^* à P conserve les caractères d'irréductibilité et d'apériodicité de P^*. On a ainsi trouvé, avec P, la matrice d'une chaîne de Markov qui converge vers Π.

La méthode de Monte-Carlo (Met) réside dans le choix de la matrice P^* de i). Si le système comporte N spins d'Ising, la chaîne de Markov comporte 2^N états : $X_n \in \{0,1\}^N$.Si le ième élément de X_n vaut 1, c'est que le spin i est (+) à la date n, sinon il est (-). Il faut choisir une matrice P^* stochastique de taille $2^N \times 2^N$. Le choix de la méthode de Monte-Carlo est le suivant $P^*_{ij} = \frac{1}{N}$ si les états i et j ne diffèrent que par un spin ; $P^*_{ij} = 0$ sinon. C'est la méthode du "single-spin flip". Il est évident que P^* est stochastique. En terme de spins,l'algorithme s'énonce ainsi :

i) choisir un spin au hasard (ce pas correspond au choix de P^*) ;

ii) envisager la transition et évaluer le $\frac{\pi_j}{\pi_i}$ correspondant, c'est-à-dire $\exp - \frac{\Delta E}{T}$ où T est la température et ΔE la différence d'énergie associée au retournement du spin i.

La transition (i.e. le retournement du spin choisi) est effectuée avec la probabilité $\min(1, e^{-\Delta E/T})$. Beaucoup de variantes de cet algorithme ont été proposées, soit pour accélérer la convergence de cette méthode (c'est-à-dire diminuer le nombre de pas nécessaires avant d'être dans le régime asymptotique où l'on échantillonne réellement les états d'équilibre de la température T), soit pour étudier la dynamique (c'est-à-dire différents types de relaxations)(Bin(d)) Dans le chapitre I, une étude du temps de relaxation non linéaire de l'énergie et de l'aimantation d'un modèle ferromagnétique sur un réseau fractal est présenté, où l'on a utilisé cette méthode de Monte-Carlo.

La variante de la méthode standard, effectivement utilisée ici, s'appuie sur les considérations suivantes : soit $f(\Delta E)$ la fonction exprimant la probabilité de retournement d'un spin en fonction de la différence d'énergie ΔE associée à son retournement. Dans la méthode standard $f(\Delta E) = \min\ (1, \exp - \frac{\Delta E}{T})$. Notons δE l'énergie de la

configuration si le spin tiré est (+) moins l'énergie si le spin tiré est (-) : $\delta E = E(\sigma = "+") - E(\sigma = "-")$.

	Spin tiré (+)	Spin tiré (-)
Probabilité de mettre le spin tiré (+)	$1 - f(\delta E)$ (pas de retournement)	$f(-\delta E)$ (retournement)
Probabilité de mettre le spin tiré (-)	$f(\delta E)$ (retournement)	$1 - f(-\delta E)$ (pas de retournement)

Si l'on choisit f tel que $1-f(\delta E) = f(-\delta E)$ et $f(\delta E) = 1 - f(-\delta E)$ alors la probabilité pour un spin d'être mis (+) à un instant ne dépend pas de son état à cet instant, mais seulement de l'état de ses voisins. La fonction f qui vérifie cette propriété est $f(\delta E) = \frac{1}{1+\exp(\delta E/T)}$. C'est la dynamique de Glauber (Gla). Ce nouveau choix de la dynamique revient donc à remplacer $f(\Delta E) = \min(1, \exp - \frac{\Delta E}{T})$ dans la méthode standard, par

$$f(\Delta E) = \frac{\exp(-\frac{\Delta E}{T})}{1 + \exp(-\frac{\Delta E}{T})} ,$$

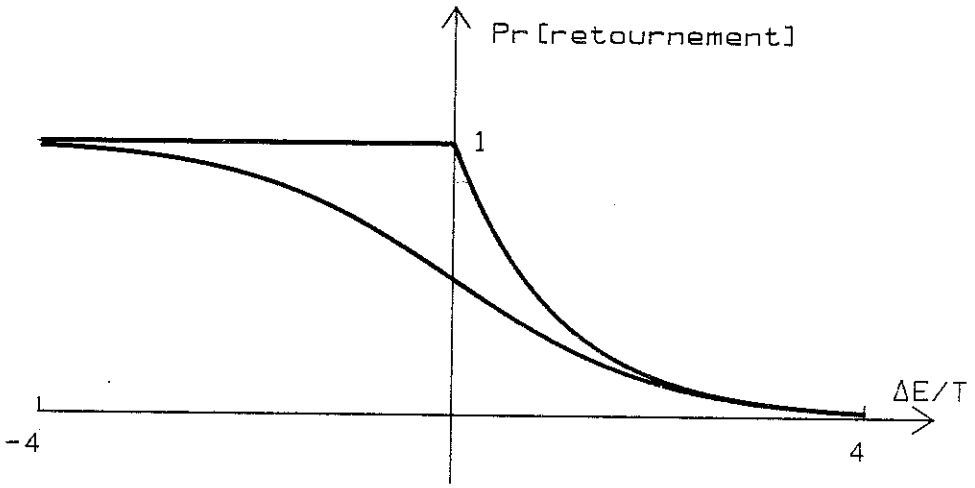


FIGURE 46

L'algorithme devient efficace dans sa mise en oeuvre sous la forme suivante :

i) choisir un spin au hasard

ii) le mettre (+) avec probabilité $\frac{\exp-(\delta E/T)}{1+\exp(-\delta E/T)}$.

Un exemple détaillé d'utilisation pratique est donné en Appendice à ce chapitre.

L'échantillonnage des états d'équilibre permet de mesurer les valeurs moyennes d'un observable à l'équilibre. Une transition de phase se traduira par un comportement singulier de certaines quantités. Le paragraphe suivant présente une méthode très fine d'analyse des résultats.

IV.2.t. Méthodes d'analyse des résultats : loi d'échelles en taille finie et ordre de la transition

A. On peut voir Bin(c) pour une revue sur ce sujet. Pour un système de taille finie L^d, l'énergie libre $f_L(T)$ par spin d'un modèle pur comme d'un modèle désordonné est toujours une fonction analytique (Z est une somme finie d'exponentielles). Les singularités ne peuvent apparaître que lors du passage à la limite $L \to \infty$. La difficulté de l'expérimentation numérique réside dans la recherche des traces dans la fonction analytique $f_L(T)$ des singularités de la fonction $f(T) = \lim_{L\to\infty} f_L(T)$. Cette tâche est d'autant plus malaisée qu'en général on ne connaît $f_L(T)$ que par des simulations et donc imparfaitement. La méthode utilisée couramment a été proposée par (Fis (a)(b)). Fondamentalement, elle consiste à supposer a priori comment la suite de fonction $f_L(T,H)$ converge vers la limite $f_{L=\infty}(T,H)$ autour du point critique ($T = T_c$, $H = 0$ par exemple). Elle s'applique principalement donc aux transitions de deuxième ordre. Un point particulièrement délicat est la détermination du domaine où les lois d'échelles s'appliquent, c'est-à-dire de ΔT tel que ces lois soient vraies pour $T \in [T_c - \Delta T, T_c + \Delta T]$.

Rappelons que la seule hypothèse que l'énergie libre puisse se mettre dans la région critique, sous la forme universelle $f(T,H) = f_{reg}(T,H) + |t|^{2-\alpha} f_u(H/t^{\Delta})$, ($f_{reg}$ est une fonction régulière de $t \equiv T - T_c$) conduit aux principales relations entre exposants critiques. De manière analogue, les lois d'échelles en tailles finies peuvent s'exprimer à partir d'une seule hypothèse aussi. Cette hypothèse consiste à supposer une forme particulière pour la distribution de probabilité $P_L(m\ ;\ T)$ de l'aimantation sur un échantillon de taille L, à la température T (Bin(b),(c)).

Différentes évaluations sont possibles pour l'aimantation moyenne $m_L(T,H)$. Dans le cas pur, les deux configurations $\{\sigma_i\}$ et $\{-\sigma_i\}$ sont de même probabilité et donc pour toutes températures $m_L(T, H = 0) = 0$. C'est-à-dire que si l'on calcule

$$m^{(1)} = \left\langle \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right\rangle_{H=0,T}$$

et si l'échantillonnage est correct on trouvera toujours $m^{(1)} \equiv 0$. En pratique lorsque l'on est à $T < T_c$ et T pas trop proche de T_c, on n'échantillonne qu'une moitié de la distribution à cause de la symétrie brisée (ou pour des temps $\ll$ temps ergodique) $\tau_L(m\ ;\ T)$). On ne trouvera donc pas $m^{(1)} = 0$. Par contre, pour $T \sim T_c$ il convient de calculer

$$m^{(2)} = < \left| \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i \right| >_{H = 0,T} ,$$

bien que la définition correcte serait

$$m^{(3)} = \lim_{H \to 0} < \frac{1}{N} \Sigma\, \sigma_i >_{H,T} .$$

Une quatrième expression

$$m^{(4)} = \sqrt{< (\frac{1}{N} \Sigma\, \sigma_i)^2 >}_{H = 0,T}$$

peut être aussi utilisée. En résumé, la valeur moyenne $m_L(H,T)$ sera calculée en pratique avec :

$$m_L(H,T) = \frac{1}{(t-q)} \sum_{k=q}^{t} \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i\right)_{k\Delta t}$$

où t désigne un temps suffisamment grand, et où le système est supposé à l'équilibre à l'instant où l'on commence le calcul de la moyenne(q assez grand).

La théorie des lois d'échelles en taille finie suppose que $P_L(m\ ;\ T) = f(L,\ m,\ T)$ ne s'exprime pas comme une fonction de trois variables indépendantes mais près du point critique, comme fonction de 2 variables réduites :

$$P_L(m) \sim L^{\beta/\nu} Q(L/\xi,\ mL^{\beta/\nu}) \qquad \text{(IV.1)}$$

pour $L \to \infty$, L/ξ fini (ξ = longueur de corrélation). De (IV.1) on déduit

$$m_L(T,H) \equiv \int m\, P_L(m)\, dm = L^{-\beta/\nu} \int M\, Q(L/\xi, M)\, dM$$

en posant $M = L^{\beta/\nu}$.

d'où :

$$m_L(T,n) \sim L^{-\beta/\nu}\tilde{m}(L/\xi)$$

où $\tilde{m}$ est une fonction d'échelle.

De même, la susceptibilité par spin s'écrit

$$\chi_L = L^3 \frac{< m^2 > - < m >^2}{T}$$

d'où $\chi_L \sim L^{d-2\beta/\nu}\,\tilde{\chi}\,(L/\xi)$ où $\tilde{\chi}$ est une fonction d'échelle,

soit $\chi_L \sim L^{+\gamma/\nu}\,\tilde{\chi}\,(L/\xi)$

où l'on a utilisé la relation d'hyperscaling et la relation de Rushbrooke.Lorsque la relation d'hyperscaling n'est pas vérifiée (par exemple pour un modèle d'Ising en dimension $d > 4$), la longueur de corrélation ξ est remplacée par une "longueur thermique" ℓ à laquelle il convient de comparer la taille L de l'échantillon. Près de T_c, ℓ se comporte comme (Bin(c)) :

$$\ell \sim |T - T_c|^{-\frac{\gamma+2\beta}{d}}$$

Enfin, les mêmes considérations s'appliquent à la chaleur spécifique $C_L \sim L^{\alpha/\nu}\,\tilde{C}(L/\xi)$, où $\tilde{C}$ est une fonction d'échelle.$\xi \sim |T-T_c|^{\nu}$ est supposée être la seule longueur caractéristique. La méthode des lois d'échelles en taille finie consiste à vérifier qu'un jeu d'exposants α, β, γ, ν et une valeur T_c sont compatibles en vérifiant que pour $|T-T_c|$ suffisamment petit les courbes $mL^{\beta/\nu}$ vs $L^{1/\nu}|T-T_c|$, $\chi L^{-\beta/\nu}$ vs $L^{1/\nu}|T-T_c|$ et $C\,L^{-\alpha/\nu}$ vs $|T-T_c|$ sont bien des courbes universelles indépendantes de L. La difficulté pratique que l'on rencontre est que chacun de ces ajustements fait intervenir au moins 3 paramètres (par exemple β, ν et T_c pour l'aimantation).

Pour trouver une méthode qui permette de déterminer les différents exposants indépendamment les uns des autres,(Bin(b)) a proposé la méthode des cumulants.

<u>Méthode des cumulants ou de la constante de couplage renormalisée</u> : (voir (Bin))

Pour illustrer cette méthode, considérons le cas simple d'un système de spins d'Ising ferromagnétique (couplage J) sous un champ extérieur (H). L'hypothèse de base de cette méthode, inspirée des techniques MCRG (Monte Carlo Renormalization Group (Swe)) est que la probabilité $P_L(m\ ;\ T)$ est de la forme suivante :

$$P_L(m\ ;\ T > T_c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\chi_L T/L^d)}}\ \exp - \frac{1}{2}\frac{m^2}{\chi_L T/L^d}$$

$$P_L(m;T < T_c) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(\chi_L T/L^d)}}\ \{\ \frac{1}{2}\exp - \frac{1}{2}(\frac{(m-m_{sp})^2}{2T(\chi_L/L^d)}) + \frac{1}{2}\exp -(\frac{1}{2}\frac{(m+m_{sp})^2}{2T\chi_L/L^d})\}$$

où $m_{sp} = \langle |m| \rangle$ et où χ_L est la susceptibilité par spin pour une taille L^d et à la température T. Cette forme se déduit d'une énergie libre "à la Ginzburg-Landau"

Pour $H \neq 0$ on observera le déplacement de la gaussienne vers $m_{sp}(T,\ H \neq 0)$ ou l'abaissement d'un des deux maximums par rapport à l'autre. Ceci est illustré sur les figures 47(a) et 47(b) qui représentent les distributions d'aimantation calculées par énumération sur un réseau 3x3x3. La figure 47(a) présente le cas $T = 5{,}75$ ($> T_c(L=3)$), à $H = 0$ en trait fort, ainsi que $H = 0{,}05$, $H = 0{,}10$, $H = 0{,}15$, $H = 0{,}20$, $H = 0{,}25$, $H = 0{,}30$ en traits fins. La figure 47(b) présente pour les mêmes valeurs de H le cas $T = 4{,}75$ ($< T_c(L = 3)$). Sur l'axe $H = 0$, on voit clairement les modifications de $P_L(m)$ en augmentant la température depuis $T = 0$ jusqu'à $T = \infty$. A $T < T_c$, $P_L(m)$ présentée est bimodale, à $T > T_c$, $P_L(m)$ devient unimodale.

D'autre part, à température fixe T, en se déplaçant en champ depuis $H > 0$ vers $H < 0$, on observe le comportement suivant de $P_L(m)$:

i) $T < T_c$: $P_L(m)$ est bimodale asymétrique à $H \neq 0$, et devient symétrique, juste au point de transition du premier ordre à $H = 0$. Au point de transition, $P_L(m)$ peut être approximée par une double gaussienne symétrique.

ii) $T > T_c$: $P_L(m)$ reste une simple gaussienne quelque soit H, centrée à une valeur positive ($H < 0$), négative ($H > 0$) ou nulle ($H = 0$).

iii) $T = T_c$: $P_L(m)$ n'est ni une gaussienne, ni une double gaussienne.

Un critère simple permettant de trancher entre ces trois possibilités sur l'ordre et l'existence de la transition ayant lieu en fonction de H à T donné est la constante de couplage renormalisée $U_L = -\frac{K_4}{3M_2^2}$, ici K_4 est le quatrième cumulant de la loi $P_L(m)$ et M^2 le deuxième moment.

En effet, si x désigne une variable aléatoire de densité

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha}{2}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x+\mu}{\sigma}\right)^2\right\} + \left(\frac{1}{2} + \frac{\alpha}{2}\right) \exp\left\{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right\} \right] \quad (-1 \leqslant \alpha \leqslant 1)$$

alors

$$-\frac{K_4}{3M_2^2} = \frac{2}{3}(\alpha^2 - 1)(3\alpha^2 - 1)\left(\frac{\mu^2}{\mu^2+\sigma^2}\right)^2 .$$

Dans le cas présent $\mu = \langle |m| \rangle$, $\mu^2 + \sigma^2 = \langle m^2 \rangle$ et $\alpha = 0$. Donc, dans la limite thermodynamique ($L = \infty$) $U_L \to \frac{2}{3}$ dans la phase ordonnée ($H = 0$, $T < T_c$). Par contre, si les fluctuations sont gaussiennes $U_L \to 0$ ($K_4 = 0$) (phase paramagnétique, $H = 0$, $T > T_c$). Finalement, au point de la transition du deuxième ordre ($T = T_c$) où apparaissent les fluctuations critiques, la distribution ne sera ni une gaussienne, ni une double gaussienne et U_L tend vers une valeur différente de 0 et de 2/3. Ceci est illustré par les figures 48 a-d. La figure 48a) montre $U_L(T)$ pour un système de 5x5 spins et différents H. La figure 48b) présente $U_L(H)$ pour la même taille et pour différentes températures : la croix correspond à $H = 0$, $U_L = 2/3$. Les distributions d'aimantation pour un système de 3x3x3 spins, $H = 0$ et différentes valeurs de T sont représentées sur la figure 48c). La figure 48d) représente les mêmes quantités que sur la figure 48a) mais pour un système de 3x3x3 spins.

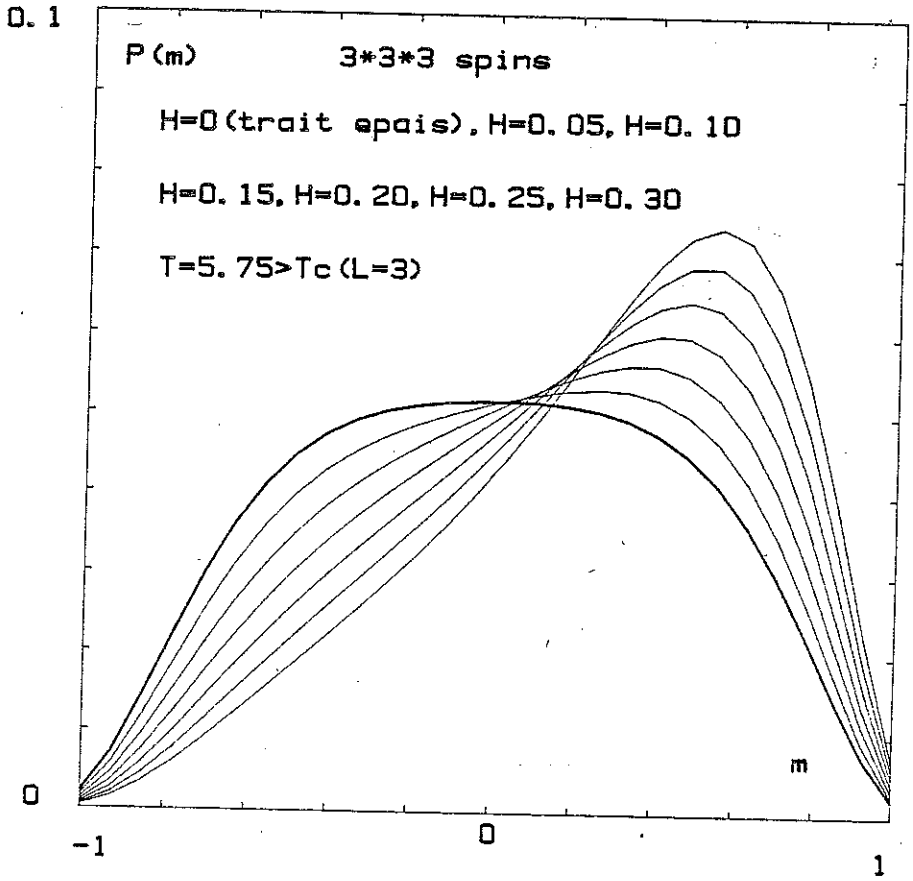


FIGURE 47 a)

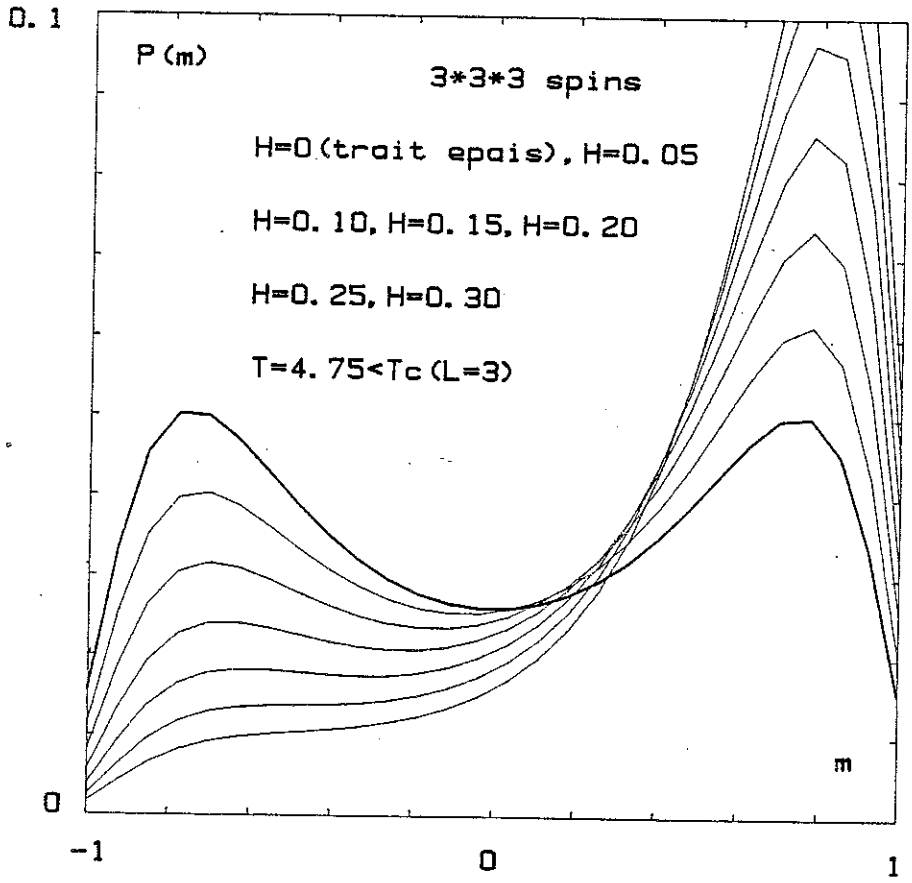


FIGURE 47 b)

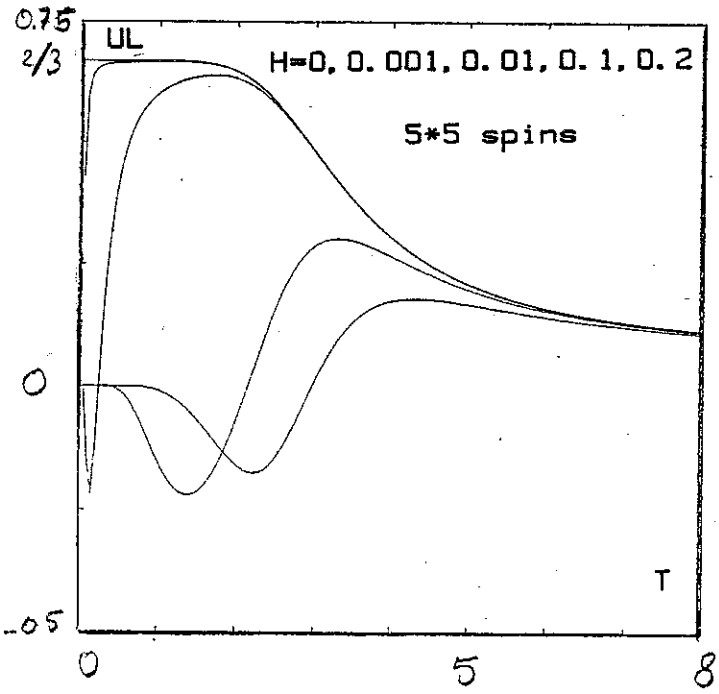


FIGURE 48 a)

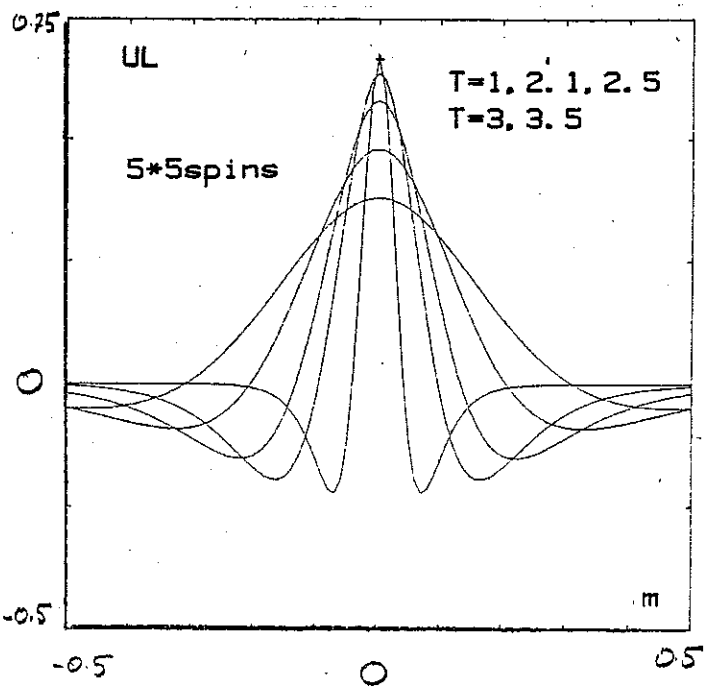


FIGURE 48 b)

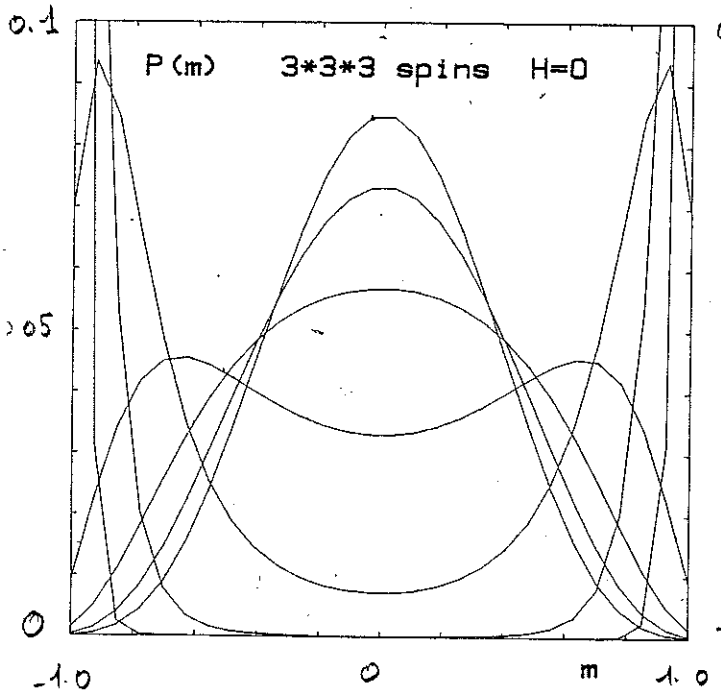


FIGURE 48 c)

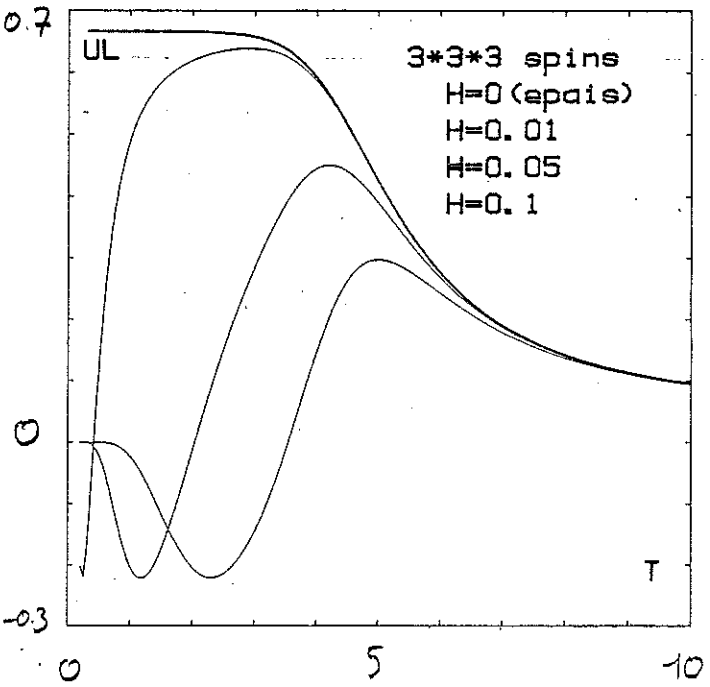


FIGURE 48 d)

Il est intéressant donc d'étudier le comportement de U_L en fonction de L afin de clarifier l'ordre et l'existence de la transition. Mais U_L peut servir aussi pour calculer T_c et d'autres exposants. Pour cela exprimons U_L en fonction des différents moments $< m^n >$ de $P_L(m)$:

$$U_L = -\frac{K_4}{3M_2^2} = -\frac{<m^4> - 3<m^2>^2 - 4<m><m^3> + 12<m^2><m>^2 - 6<m>^4}{3< m^2 >^2}$$

Tous les moments impairs de m sont nuls donc $U_L = 1 - \frac{< m^4 >}{3< m^2 >^2}$. Or l'hypothèse déjà faite sur la distribution $P_L(m)$ conduit à

$$< m^n > = \int m^n \, L^{-\beta/\nu} \, Q(L/\xi; \quad L^{\beta/\nu}) dm$$

donc $<m^n>$ prend la forme suivante $<m^n> = L^{-n\beta/\nu} \, \tilde{m}_n(L/\xi)$ et

$$U_L = 1 - \frac{\tilde{m}_4(L/\xi)}{3\tilde{m}_2^2(L/\xi)}$$

$\tilde{m}_4$ et $\tilde{m}_2$ désignant des fonctions d'échelle. L'étude en fonction de la taille consiste à comparer U_{bL} et U_L pour L grand. De l'équation précédente, on déduit

$$\frac{1}{\nu} = \frac{\ln(\partial U_{bL}/\partial U_L)}{\ln b} \Bigg|_{U^*}$$

où U^* est le point fixe.

La détermination de ν et T_c se fait alors indépendamment. Il suffit de représenter U_{bL} en fonction de U_L. Le point d'intersection avec la première bissectrice donnera U^* d'où l'on déduit T_c et la pente donnera $1/\nu$.

i) <u>Exemple de la chaîne linéaire</u> :

Il est bien connu (Isi) que la fonction de partition de la chaîne d'Ising peut s'écrire sous la forme suivante :

$$Z_N(T,H) = \lambda_+^N + \lambda_-^N \quad \text{d'où } \lambda\pm = e^K \operatorname{ch}(h) \pm \sqrt{e^{2K}\operatorname{sh}^2(h) + e^{-2K}}$$

avec $K = J/T$ et $h = H/T$ (N = nombre de spins).

D'autre part, en dérivant Z_N, on en déduit

$$< m^n > = \frac{1}{N^n Z_N(T,H)} \frac{d^n}{dh^n} Z_N(T,H)$$

d'où l'on tire :

$$\overline{m^2}(N,T) = \frac{1}{N} \frac{[(e^K+e^{-K})^{N-1}][e^K+e^{3K}]+[(e^K-e^{-K})^{N-1}][e^K-e^{3K}]}{[e^K+e^{-K}]^N + [e^K-e^{-K}]^N}$$

et

$$\overline{m^4}(N,T) = \frac{1}{N^3} \frac{[e^K+e^{-K}]^{N-2}\{-3e^{8K}+(3N-6)e^{6K}+(6N-2)e^{4K}+(3N+2)e^{2K}+1\}}{[e^K+e^{-K}]^N + [e^K-e^{-K}]^N} + \frac{1}{N^3}$$

$$+ \frac{[e^K-e^{-K}]^{N-2}\{3e^{8K}+(3N-6)e^{6K}-(6N-2)e^{4K}+(3N+2)e^{2K} - 1\}}{[e^K+e^{-K}]^N + [e^K-e^{-K}]^N}$$

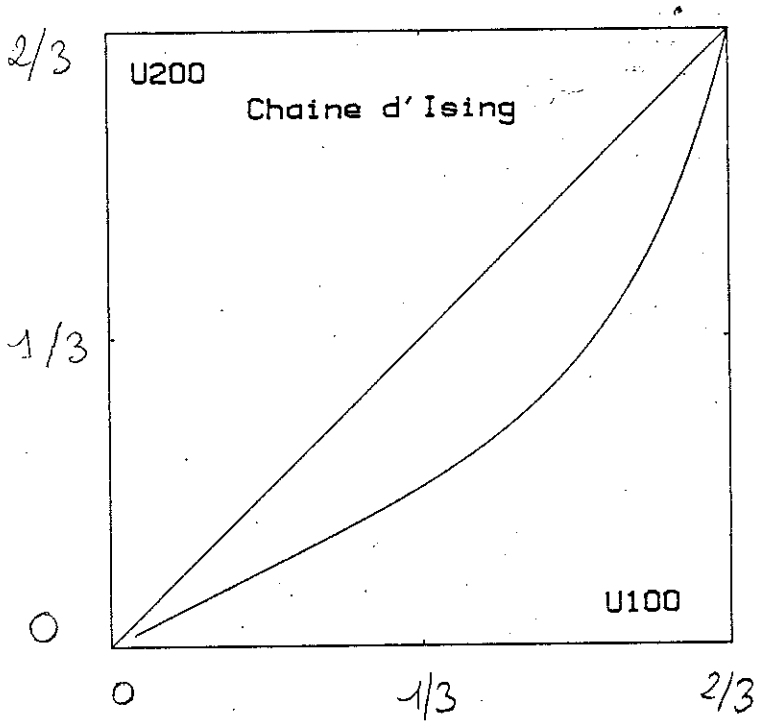


FIGURE 49

La figure 49 présente U_{200} en fonction de U_{100} calculées chacune à la même température T. On voit clairement que la transition est rejetée à T = 0.

ii) Cas du modèle à portée infinie :

Le même calcul de U peut se faire aussi pour le cas du modèle défini par l'Hamiltonien

$$\mathcal{H} = -\frac{J}{N} \sum_{<i,j>} \sigma_i \sigma_j$$

où N est le nombre de spins et où la somme porte sur tous les couples. Il est facile de voir que la probabilité $P_N(M)$ d'avoir une configuration d'aimantation M à la température T s'écrit

$$P_N(M) = \frac{1}{Z} \binom{N}{\frac{N+M}{2}} \exp\left\{-\frac{J}{N}\frac{M^2-N}{2}\right\}$$

où Z se calcule simplement en normant les probabilités. Il est alors facile de calculer numériquement $< m^2 >$, $< m^4 >$ et U_N où $m = \frac{M}{N}$. Les figures suivantes (fig.50a)b)c)) présentent $<m^2>$ en fonction de $1/\sqrt{N}$, à $T=T_c=1$, (a), $N<m^4>$ en fonction de $1/\sqrt{N}$(b) et U_N en fonction de $1/\sqrt{N}$(c). On trouve : $<m^2> \sim 1.1113/\sqrt{N}$, $N < m^4 > \sim -2,6158/\sqrt{N} + 2,9925$ et $U_N \sim \frac{0,3625}{\sqrt{N}} + 0,2696$. Finalement la figure 51 représente U_{580} en fonction de U_{300} et est conforme à ce que l'on attend. Toutefois, le point d'intersection U^* ainsi trouvé n'est pas identique à celui que l'on attend ($U^* = 0,2696$), et ceci à cause des effets de taille finie.

iii) Cas général :

On peut écrire $f(m) \sim t^{2-\alpha} \sim m^{\frac{2-\alpha}{\beta}}$ pour T proche de T_c. Or $\frac{2-\alpha}{\beta} = \delta + 1$ d'où $f(m) \sim m^{\delta+1}$. On peut alors calculer $P(m,T_c)$ qui est la probabilité d'avoir une aimantation m à T_c = $P(m;T_c) \simeq Ae^{-Nm^{\delta+1}}$ d'où

$$< m^{2k} > = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dm\, m^{2k} \exp -N\, m^{\delta+1}\right) / \left(\int_{-\infty}^{\infty} dm \exp -Nm^{\delta+1}\right)$$

En posant $u = Nm^{\delta+1}$ et en remarquant que $\int_{-\infty}^{+\infty} u^{k-1} e^{-u} du = \Gamma(u)$, il vient

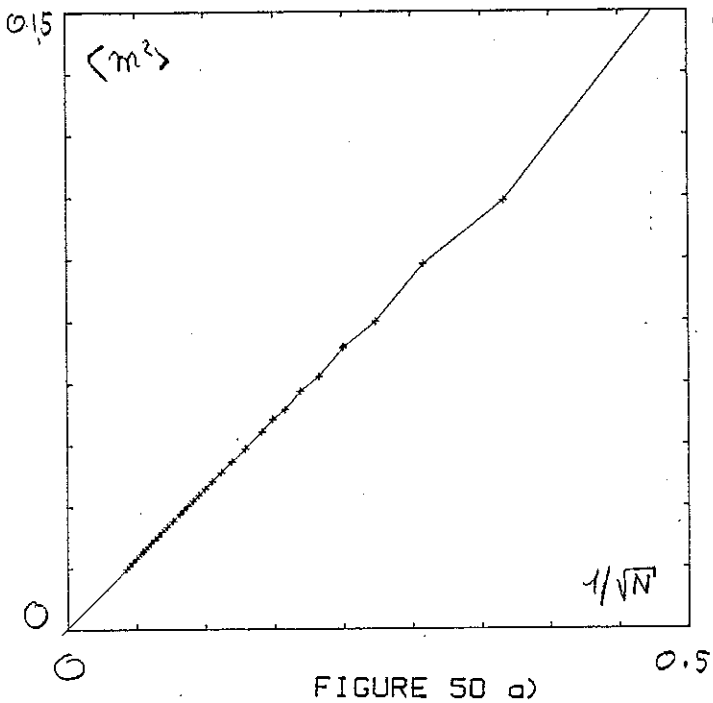


FIGURE 50 a)

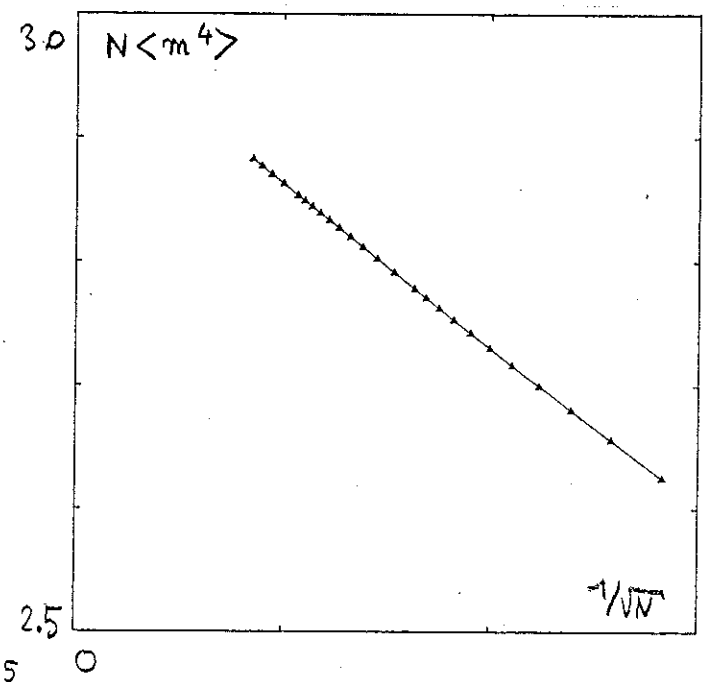


FIGURE 50 b)

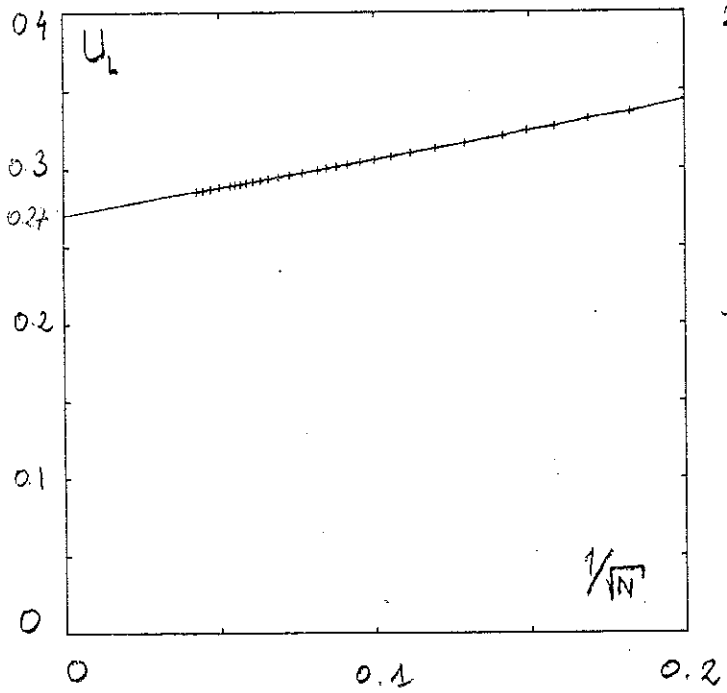


FIGURE 50 c)

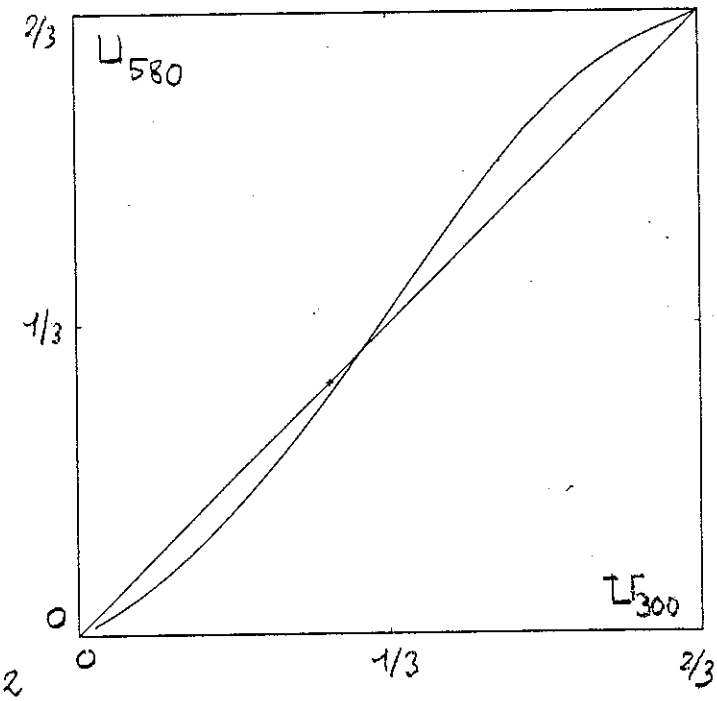


FIGURE 51

$$< m^{2k} > = \left(\frac{1}{N}\right)^{\frac{2k}{\delta+1}} \frac{\Gamma\left(\frac{2k+1}{\delta+1}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\delta+1}\right)}$$

et finalement

$$U_\infty^* = 1 - \frac{\Gamma\left(\frac{5}{\delta+1}\right)\Gamma\left(\frac{1}{\delta+1}\right)}{3\Gamma^2\left(\frac{3}{\delta+1}\right)} .$$

L'application numérique au cas du champ moyen où $\delta = 3$ conduit à $U_\infty^*(T_c) = 0{,}270509$ qui est en très bon accord avec le résultat numérique précédent. Le cas du modèle d'Ising à 2 dimensions où $\delta = 15$ conduit à $U_\infty(T_c) = 0{,}3875$. Cette valeur n'est pas du tout en accord avec les résultats des simulations numériques de (Bin(b)) qui trouve 0,52.

B. Ordre d'une transition.

Pour déterminer l'ordre d'une transition, différentes méthodes sont utilisées : cycles thermiques, sensibilité à l'état initial (métastabilité) et distribution du paramètre d'ordre (ou de l'énergie).

1. Cycles thermiques :

Un cycle thermique est la succession des opérations suivantes :

i) Après avoir stabilisé le système (à très basse température) dans un état d'équilibre, que l'on obtient après un grand nombre de MCS/Spin, on augmente la température T par des pas de $\Delta T = \alpha T_c$ $(10^{-2} \leqslant \alpha \leqslant 10^{-1})$. A chaque pas, le système s'équilibre pendant un temps Δt, et puis m(T), e(T), ..., etc.,sont mesurés.

ii) Après avoir dépassé T_c, le système est refroidi en suivant le même trajet en sens inverse.

Il n'est pas surprenant d'observer de l'hystérésis lors d'un cycle, et ceci quelque soit le cas étudié. En effet l'hystérésis en lui-même n'est pas le signe d'une transition du premier ordre. On observe de l'hystérésis lorsque le temps nécessaire pour atteindre l'équilibre croît (à une certaine température) pour devenir plus grand que le nombre

de MCS/S effectué. Donc,l'hystérésis, sur l'énergie interne par exemple, peut avoir lieu lorsque la transition est du second ordre et même lorsque la transition n'existe pas.

Afin de préciser la nature de la transition, il est donc utile d'utiliser un grand système et d'effectuer des cycles ralentis au voisinage de T_c.

i) grande taille : une petite taille pourra relever un comportement continu et donc masquer une éventuelle discontinuité sur e(T), qui pourra être la signature d'une transition du premier ordre.

ii) cycles ralentis à $T \sim T_c$, afin de permettre l'équilibre du système. Sur la figure 52, on a montré le comportement typique de l'énergie interne e(T) pour deux vitesses $\Delta T/\Delta t$, pour une transition du premier ordre. En pointillé sont marquées les branches de métastabilité.

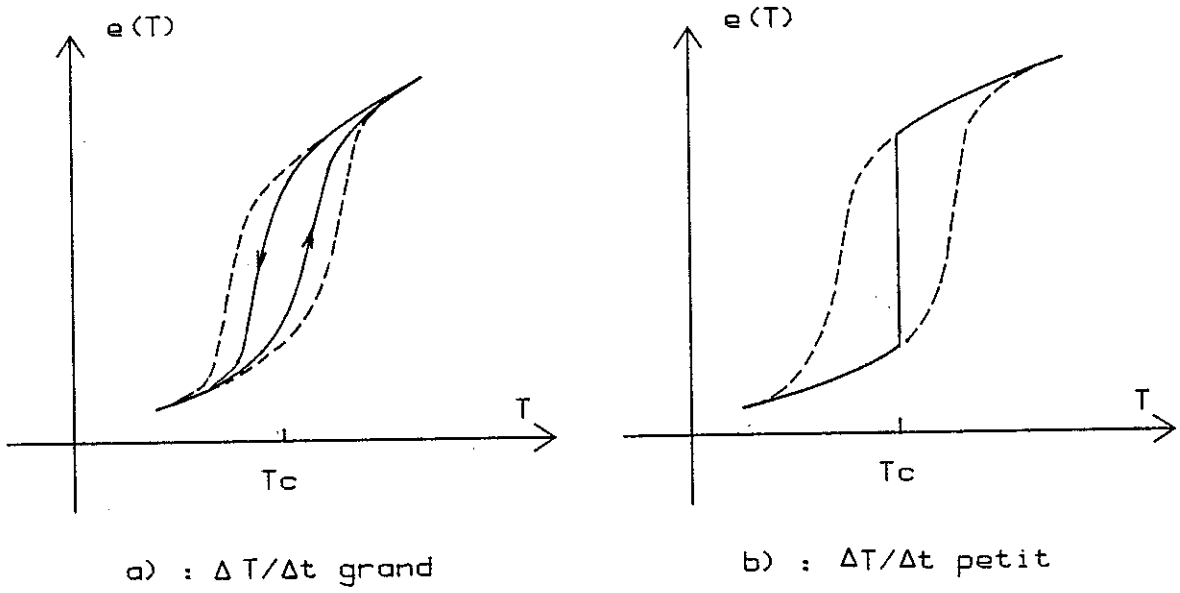


FIGURE 52

Dans le cas considéré, le saut Δe de $e(T)$ à T_c correspond à une entropie de transition $\Delta s = \Delta e/T_c$. Cette discontinuité n'existe pas pour les transitions continues, mais elle peut être masquée par : L petit ou $\Delta T/\Delta t$ grand. Donc, l'observation de l'hystérésis ne suffit pas pour conclure sur l'ordre de la transition.

2. Sensibilité à l'état initial (métastabilité) ;

a. Aspects qualitatifs :

Partons d'un état ordonné et laissons relaxer le système à une température $T \geqslant T_c$. Après un passage par un (ou plusieurs) paliers, aux temps courts, le système finit par rejoindre son état d'équilibre (phase désordonnée). L'existence de ces paliers traduit le séjour du système dans un état (ou états) métastables avant de rejoindre son état d'équilibre (fig. 53a).

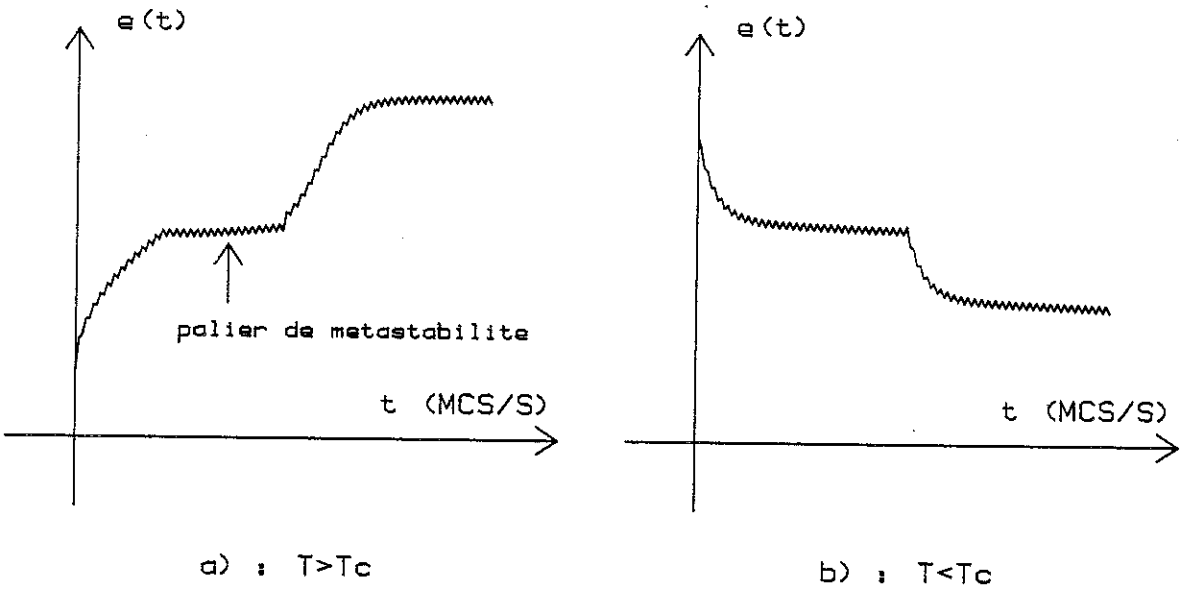
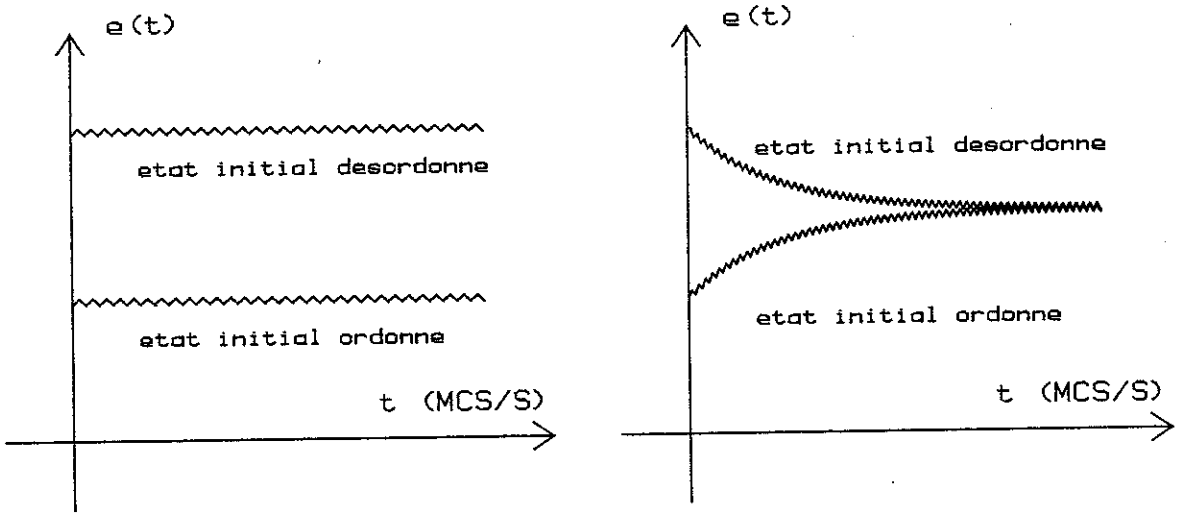


FIGURE 53

La même situation se produit, en partant (à $T < T_c$) d'un état désordonné (fig. 53b).

La présence de la métastabilité (un ou plusieurs paliers) peut être l'indication d'une transition du premier ordre, se traduisant par une discontinuité de e(T). Cependant la présence de plusieurs phases (états purs) à basse température, comme c'est le cas des verres de spins, peut compliquer l'image précédente. Il y a toutefois une façon de déterminer l'ordre de la transition (si elle existe) qui consiste à étudier le centre du cycle d'hystérésis.

Pour cela, on fixe T au centre du cycle, et on construit e(T) au cours du temps, en effectuant un grand nombre de MCS/S. Si T_c correspond à une transition du premier ordre, on peut avoir deux (ou plusieurs) valeurs limites, bien définies pour e(T), et ceci dépendra de l'état initial du système. Si T_c correspond par contre à une transition du second ordre, les énergies des deux phases seraient identiques (fig. 54).



a) : Transition du 1er ordre b) : Transition continue

FIGURE 54

Dans le cas (a), l'un des états est métastable, à la valeur considérée de T (car on ne connaît pas a priori le vrai T_c) et le système finira par quitter cet état pour aller dans la phase stable. Ce passage aura lieu au bout d'un temps court devant la durée de vie de la phase métastable. La situation décrite dans la figure 54a, pourra servir

comme une évidence en faveur d'une transition du premier ordre. Dans le cas (b), la convergence (lente) est toujours vers la même valeur asymptotique de e(T).

b. Détermination de T_c :

Le centre du cycle d'hystérésis fournit une estimation de T_c, que l'on peut raffiner de la façon suivante.

Pour cela, on utilise comme état initial du système un état mixte : moitié de l'échantillon remplie avec la phase ordonnée, et l'autre avec la phase désordonnée.

Par exemple,

$\sigma_i = +1$ sur la moitié des sites (phase ordonnée)

$= \quad 1$ (avec probabilité 1/2) sur l'autre moitié (phase désordonnée)

dans le cas de la transition à T_c d'un ferromagnétique.

On étudie par la suite l'évolution d'un tel état, à différentes valeurs de T, dans l'intervalle du cycle (fig. 55).

Cas (a) : transition du premier ordre

Très vite, le système entre dans l'un des deux états où la phase stable occupe tout le réseau. Si $T = T_c$, le temps de relaxation augmente et les deux phases coexistent. La valeur de e(T) reste voisine de sa valeur initiale, ce qui permet de déterminer T_c.

Cas (b) : le temps de relaxation dépend peu de T

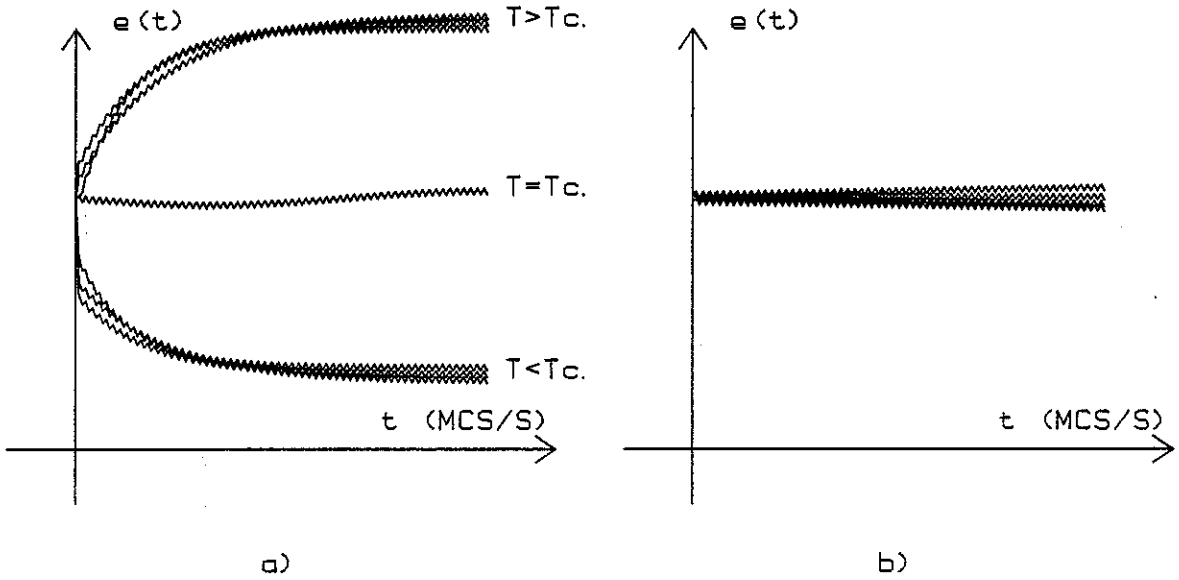
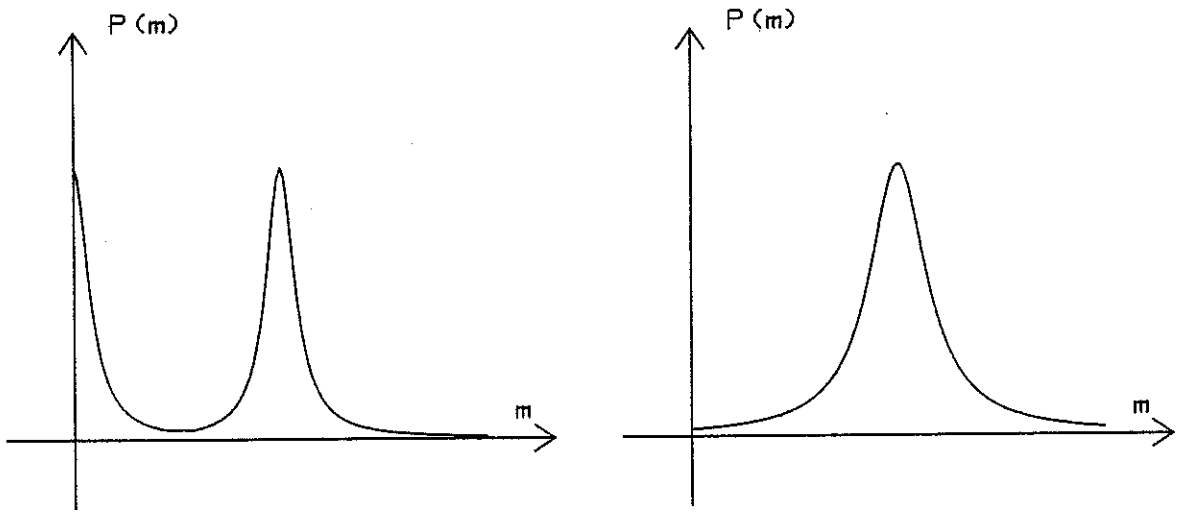


FIGURE 55

3. Distribution de m et e :

Dans tous les cas, il est plus avantageux de calculer P(m) ou P(e), où $m = < |\frac{1}{N} \sum_i \sigma_i| >$ désigne le paramètre d'ordre de la transition. Au voisinage de T_c, une transition du premier ordre se caractérise par l'apparition de deux maxima pour P(m), qui sont bien séparés. L'un correspond à l'état ordonné, l'autre à l'état désordonné (voir fig. 50. Il en est de même pour P(e)).



a) : Transition du 1er ordre b) : Transition du 2eme ordre

FIGURE 56

IV.2.c. Résultats numériques :

La mise en oeuvre des différentes méthodes présentées aux paragraphes précédents a été réalisée de la manière suivante. Les réseaux cubiques étudiés ont pour taille LxLxL, avec L = 8, 16 et 32 (voir l'appendice pour une description détaillée). La distribution choisie pour les champs aléatoires est binaire :

$$P(h_i) = 1/2\ \delta(h-h_i) + \frac{1}{2}\ \delta(h - h_i).$$

On construit d'abord une réalisation du désordre (un échantillon). Puis une configuration initiale aléatoire de spins est choisie (correspondant à $T = \infty$). La température est alors diminuée par paliers. Un palier à la température T consiste à effectuer d'abord un nombre $E_1(T)$ de pas Monte-Carlo par spins (MCS/spins) durant lequel rien n'est mesuré. Ce temps t_1 correspond à un temps transitoire au cours duquel le système relaxe depuis son état d'équilibre à l'ancienne température vers son état d'équilibre à la nouvelle température. $t_1(T)$ est en général choisi empiriquement et doit être supérieur au temps de relaxation $\tau(T)$.

Après ce régime transitoire, on mesure les principales quantités intéressantes pendant un intervalle de temps t_2 et ceci à des instants séparés de t MCS/spin. Un cycle thermique consiste à refroidir le système par paliers jusqu'à $T \simeq 0$, puis à le réchauffer de nouveau en sens inverse. Un cycle typique comprend un nombre de l'ordre de 75 paliers de refroidissement et un nombre de l'ordre de 75 paliers de réchauffement, sur un intervalle de variation de température entre $T_1 \sim 1J$ et $T_2 \sim 10$ J.

Les valeurs employées pour les différents paramètres t_1, t_2, Δt et ΔT sont prises entre les valeurs extrêmes indiquées dans le tableau ci-dessous.

t_1	t_2	Δt	ΔT	Situations
500 MCS/spin	qq 10^3 MCS/spin	5	0.25	L = 8 ; $T \sim 10$
qq 10^4MCS/spin	qq 10^4 MCS/spin	5	0.02	L = 32 ; $T \sim T_c$

Le cycle le plus long (L = 32) représente 10^{10} MCS/spin (et un temps de calcul de 10 jours sur un processeur M68000).

Différents cas ont été étudiés :

i) 8 x 8 x 8 spins : trois échantillons correspondent à $h = J$, $h = 1,5\ J$ et $h = 2\ J$.

ii) 16 x 16 x 16 spins : 7 échantillons correspondent à $h = 1J$, $h = 1,5J$, $h = 2J$, $h = 2,5J$, $h = 3J$, $h = 3,5J$ et $h = 4J$.

iii) 32 x 32 x 32 spins : trois échantillons différents correspondent à la même valeur $h = 1,5\ J$.

iv) afin de tester les méthodes d'analyse utilisées et pour fournir une référence, le cas pur ($h \equiv 0$) a été étudié ($L = 8,16,32$). L'étude de l'ordre de la transition a été effectuée avec des relaxations rapides depuis $T = \infty$ jusqu'à $T \lesssim T_c$. Ces relaxations étudiées sur trois échantillons : 16^3 à $h = 1,5$ et $T = 3,2 \lesssim T_c\ (h = 1,5) = 3,45$.

x Cas de référence $h = 0$:

A titre de référence le cas pur a été analysé, et les résultats comparés à ceux de la littérature la plus récente (Bar),(Ad1). T_c=4.5116±0.0001 ; α=0.125±0.005 ; β=0.313±0.001 ; γ=1.231±0.001 ; ν=0.625±0.005.
Six cycles thermiques différents pour chaque taille ont été réalisés sur des échantillons comportant L^3 spins ($L = 8,16$ et 32).

Pour chaque taille, ces cycles se comparent très bien entre eux. Il est donc possible de les moyenner. Deux critères ont été utilisés pour vérifier que, à chaque température, l'équilibre thermique a bien été atteint (un temps transitoire $t_1(T)$ assez grand). Le premier critère consiste à comparer l'énergie interne moyenne obtenue en refroidissant $\langle e \rangle_{ref}$ avec l'énergie interne obtenue en réchauffant : $\langle e \rangle_{rec}$. La figure 57 représente les variations relatives $\rho(T) \equiv (\langle e \rangle_{rec} - \langle e \rangle_{ref})/(\langle e \rangle_{rec} + \langle e \rangle_{ref})$ en fonction de la température pour une taille de 32^3.

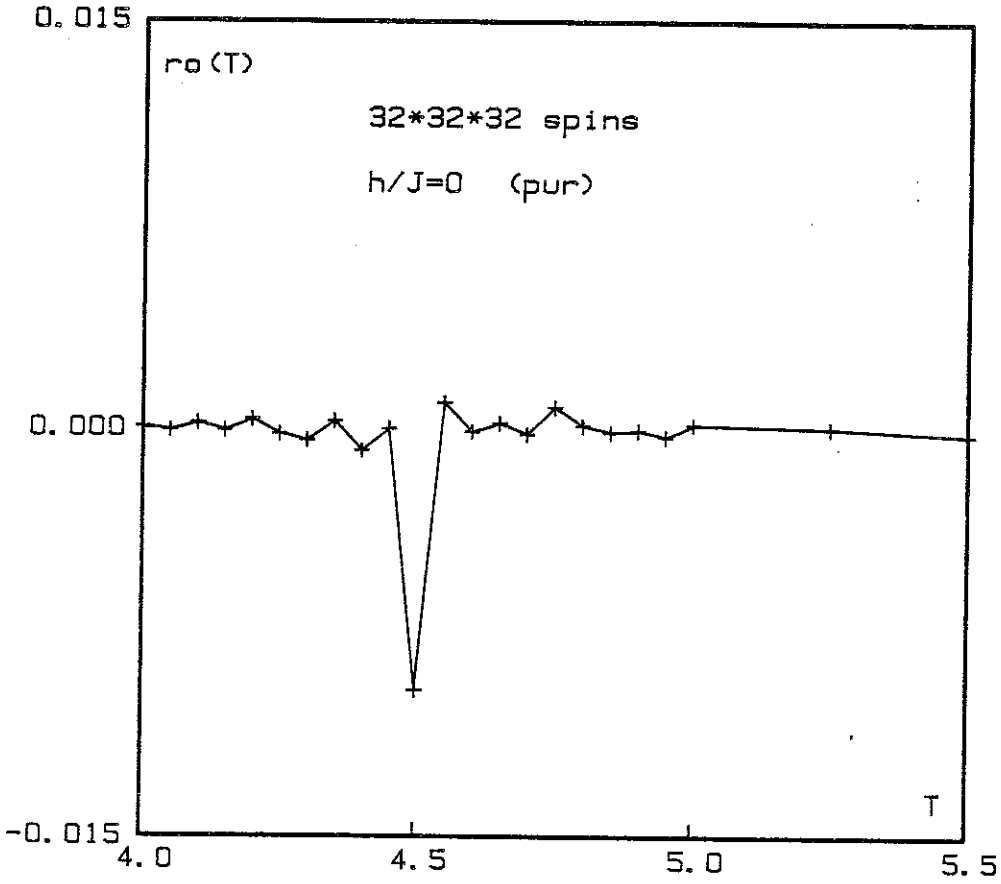


FIGURE 57

On observe qu'à la température $T = T_c = 4{,}50$, il existe une déviation notable entre $< e >_{ref}$ et $< e >_{rec}$, et ceci en contraste avec les autres températures. Ceci signifie que la valeur $t_1(T_c)$ utilisée n'est pas suffisamment grande. Cette déviation n'existe pas pour les autres tailles 8^3 et 10^3. Ceci est en parfait accord avec le ralentissement critique à $T = T_c$ et ne doit pas être confondu avec un éventuel hystérésis à T_c.

Le deuxième critère employé pour vérifier que l'équilibre a bien été atteint consiste à comparer les deux déterminations de la chaleur spécifique C(T) par spin : $c_1(T) = \frac{d}{dT} < e >$ et $c_2(T) = \frac{N}{T^2}(< e^2 > - < e >^2)$

où e(T) représente l'énergie interne par spin. Ces deux quantités $c_1(T)$ et $c_2(T)$ doivent être égales si l'on est à l'équilibre (théorème fluctuation-dissipation). La figure 58 représente la comparaison de $c_1(T)$ et $c_2(T)$. On retrouve que pour $T = T_c = 4{,}50$ le système n'est pas à l'équilibre (L = 32). En revanche pour les autres valeurs de L (L = 8 et L = 16) on constate un parfait accord entre ces deux déterminations $c_1(T)$ et $c_2(T)$ pourtant calculées de deux manières indépendantes.

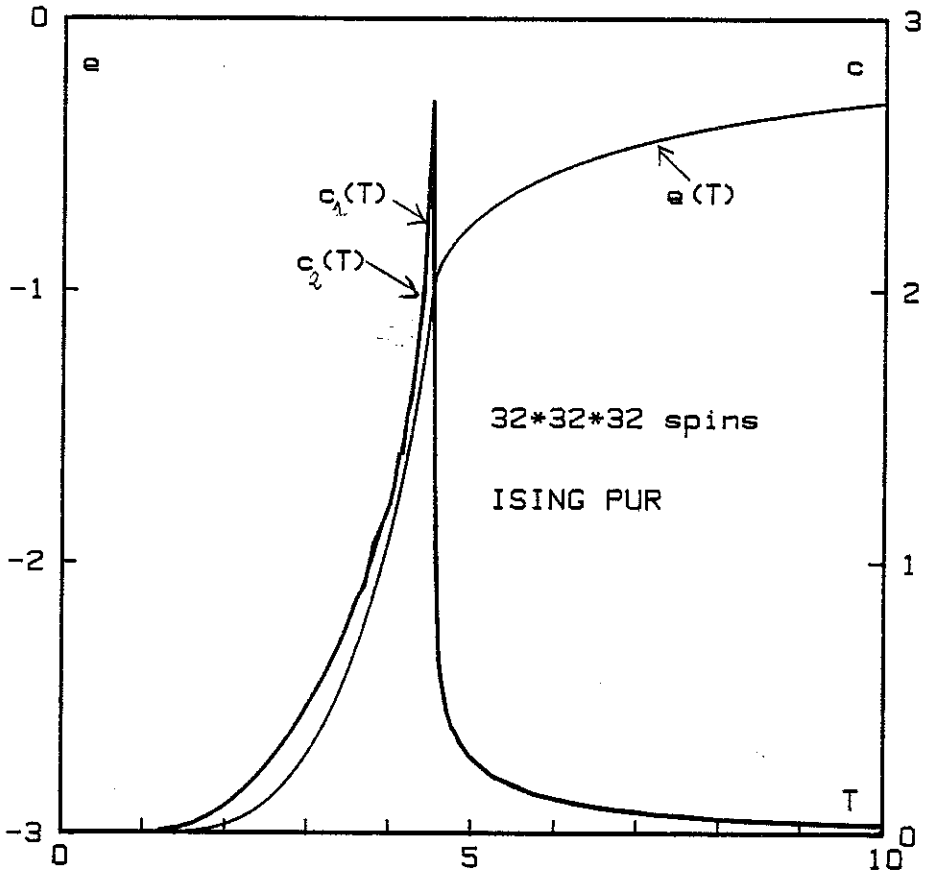


FIGURE 58

Dans la suite, la valeur retenue pour les quantités mesurées représente la moyenne entre la valeur obtenue en réchauffant celle obtenue en refroidissant. Le faisceau de courbe d'aimantation $<|m_L(T)|>$ est représenté sur la figure 59. Ce comportement en fonction de L est caractéristique d'une transition continue.

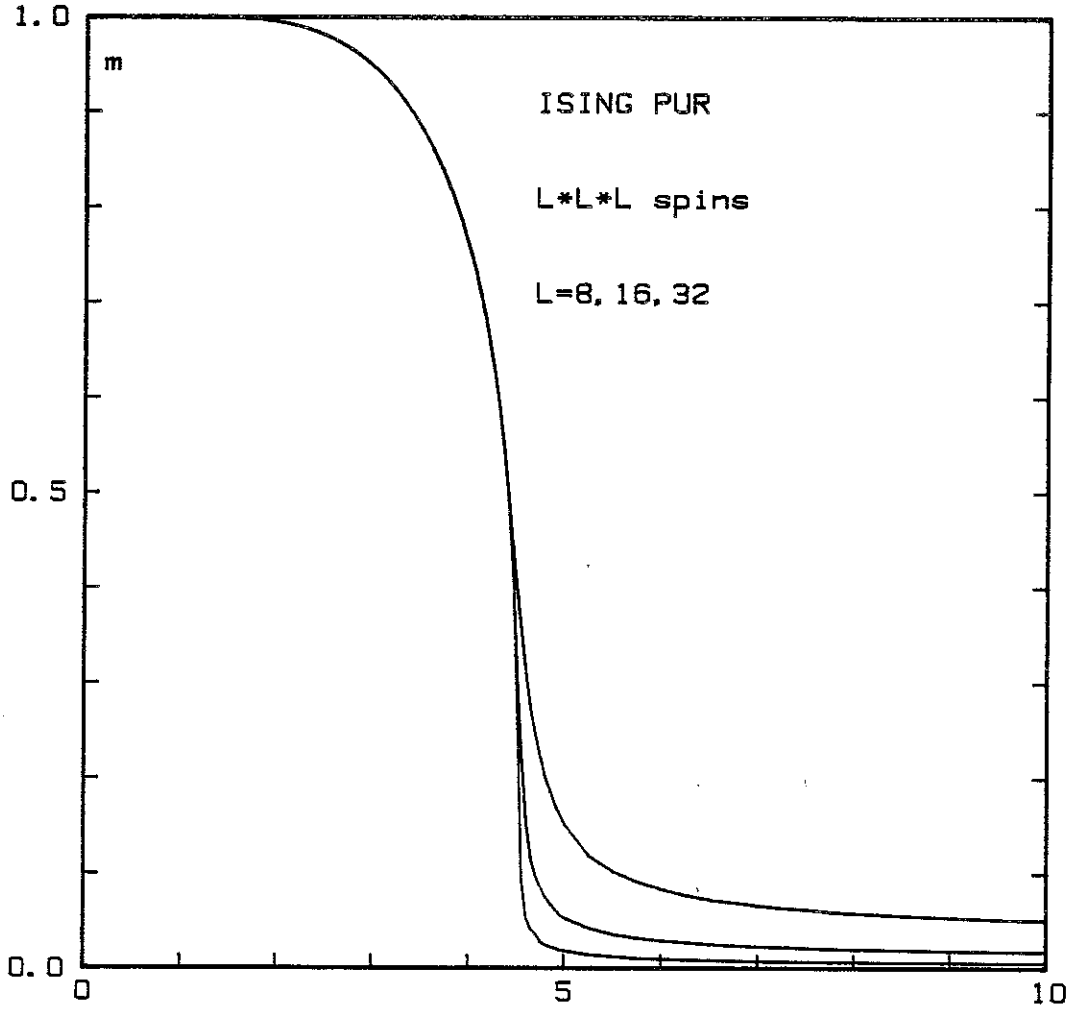


FIGURE 59

La susceptibilité $\chi = \frac{N}{T}(< m^2 > - < m >^2)$ est représentée sur la figure 60a pour les mêmes valeurs de L (L = 8, L = 16, L = 32). Le jeu d'exposants qui permet la meilleure représentation en variables réduites pour $<|m_L(T)|>$ et $\chi(T)$ est le suivant :
$T_c = 4{,}50 \pm 0{,}03$, $1/\nu = 1{,}60 \pm 0{,}05$, $\gamma/\nu = 2{,}00 \pm 0{,}08$.
La représentation de la susceptibilité en variable d'échelle est donnée sur la figure 60.b.

Une détermination indépendante de T_c et de ν peut être obtenue à l'aide de la constante de couplage renormalisée U_L. La figure 61.a représente $U_L(T)$ pour différentes valeurs de L. Le comportement de $U_L(T)$ est caractéristique d'une quantité présentant un saut à $T = T_c$. La figure 61.b représente les 3 courbes U_{32} vs U_{16}, U_{16} vs U_8 et U_{32} vs U_8. Le point d'intersection U^* de ces courbes avec la première bissectrice donne T_c tandis que la pente p à $U = U^*$ donne ν par la relation : $\frac{\ell n p}{\ell n b} = 1/\nu$.

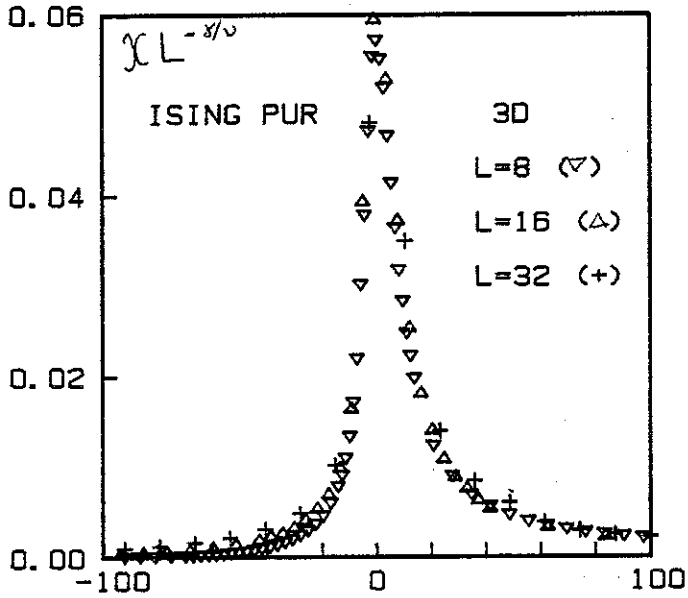


FIGURE 60 a)

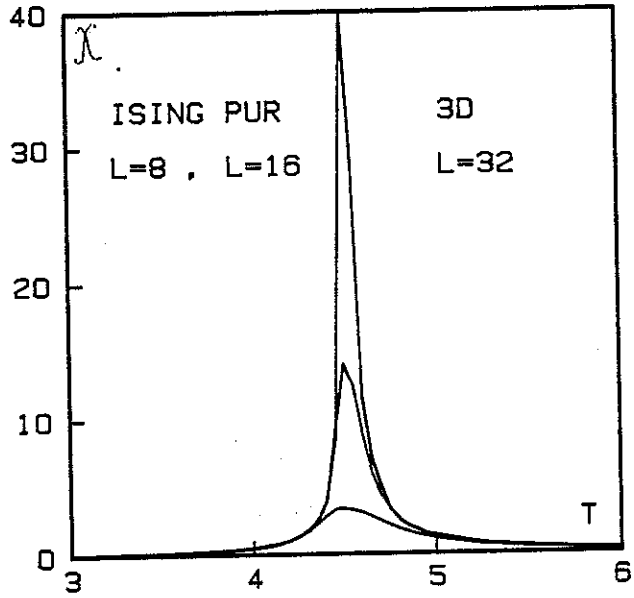


FIGURE 60 b)

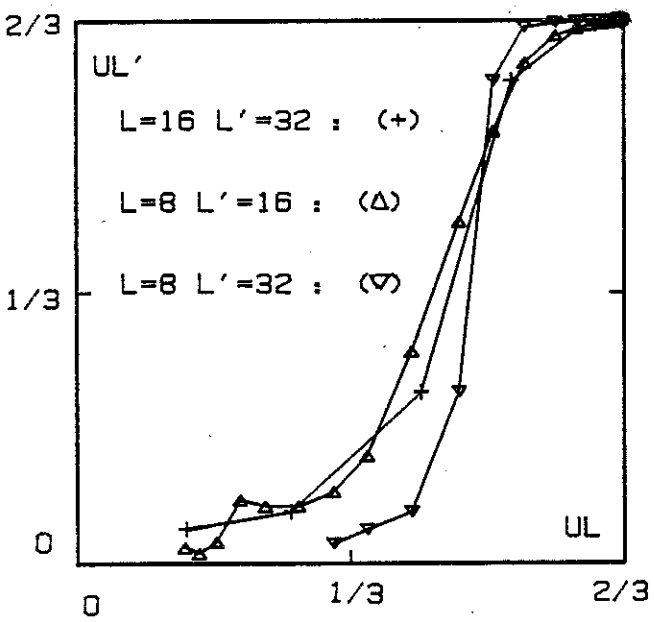


FIGURE 61 a)

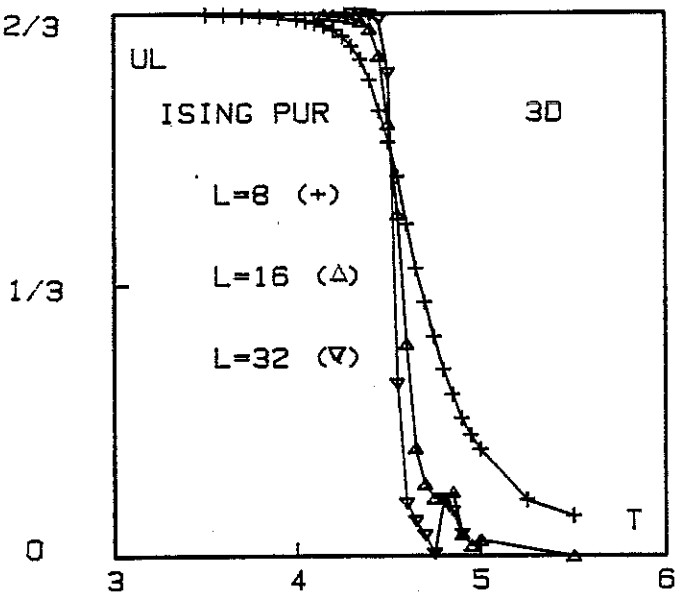
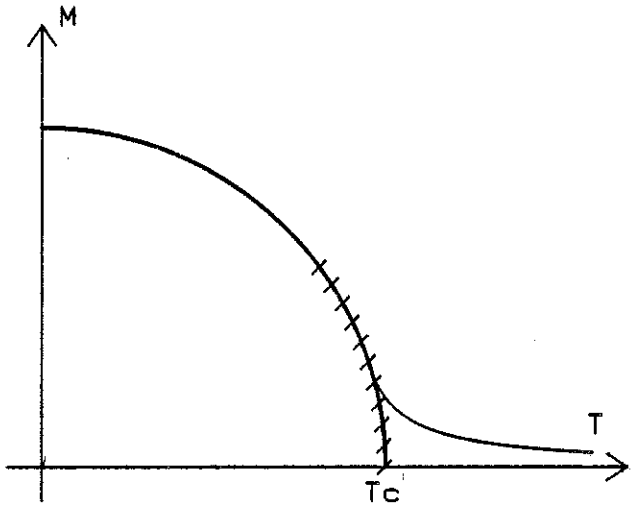


FIGURE 61 b)

Ceci donne : $\nu = 0{,}63$ et $T_c = 4{,}51$.

L'utilisation des lois d'échelle en taille finies permet, comme on l'a vu ci-dessus, une détermination assez précise des exposants critiques, avec un nombre de spins inférieurs à 32^3. Cependant dans certaines situations, comme celle du paragraphe suivant, une telle analyse des effets de taille n'est pas aussi facile. On doit donc tenter d'extraire directement les différents exposants critiques. La figure ci-dessus montre schématiquement un cas typique.



La courbe en trait épais représente la moyenne de la valeur absolue de l'aimantation $m(T)$ en fonction de la température dans la limite thermodynamique ($L \to \infty$). La courbe en trait fin est l'aimantation mesurée $m_L(T)$ sur une taille finie (dans le cas pur). Le régime où dans la limite thermodynamique $m(T)$ se comporte effectivement comme $(T-T_c)^\beta$ est hachuré. Ce régime se retrouve sur une taille finie L à condition que celle-ci soit assez grande pour que la courbe $m_L(T)$ se confonde avec la courbe $m(T)$ pour des températures suffisamment proches de T_c. Ainsi, si L est assez grand, et pour T de l'ordre de T_c mais pas très proches on aura : $m_L(T) \sim (T-T_c)^\beta$. L'exposant β pourra alors être déterminé par une régression linéaire sur la courbe $\ell n(m_L)$ en fonction de $\ell n(T_c-T)$ dans la région où $m_L \sim m_{L=\infty}$.

Cette analyse est beaucoup moins précise que celle utilisée plus haut et peut s'appliquer à d'autres quantités comme la susceptibilité ou la chaleur spécifique. Nous l'avons utilisée sur les données déjà discutées plus haut. Comme on pouvait s'y attendre, les résultats ne sont pas très précis. Le meilleur accord est obtenu pour la susceptibilité au-dessus de T_c. On trouve $\gamma = 1{,}21 \pm 0{,}06$ (à comparer à la valeur admise $\gamma = 1{,}231$). Les autres exposants trouvés $\beta = 0{,}27 \pm 0{,}05$ (à comparer à $\beta = 0{,}31$) et $\alpha = 0{,}4 \pm 0{,}3$ (à comparer à $\alpha = 0{,}125$) sont beaucoup moins précises. Il est toutefois possible de trouver une estimation de γ/β en représentant directement χ en fonction de m : $\chi \sim m^{-\gamma/\beta}$ pour $T < T_c$. Cette dernière détermination a l'avantage de ne pas faire intervenir T_c. On a trouvé ainsi : $\frac{\gamma}{\beta} = 4{,}0 \pm 0{,}1$ en bon accord avec la valeur attendue $3{,}92 \pm 0{,}08$.

En conclusion l'étude des cycles thermiques conjointement avec les méthodes de loi d'échelle en taille finie, produit des résultats assez précis dans le cas pur.Cette méthode a été testée au chapitre I dans l'étude du modèle d'Ising sur un fractal (tapis de Sierpinski). Les limites d'une analyse directe ne faisant pas intervenir les effets de taille finis ont aussi été dégagées. Enfin, le critère de la comparaison des fluctuations d'énergie avec la chaleur spécifique calculée comme $\frac{d}{dT} < e >$, associé au critère du comportement avec la température de $< e>_{rec} - < e >_{ref}$ permet de décider si l'hysteresis observé est un"artefact", ou la signature d'une transition du 1er ordre.

* $h \neq 0$: cas du champ aléatoire

L'objectif, ici, est double :

i) préciser le diagramme de phase complet (h-T)

ii) étudier la transition elle-même : ordre, exposants,..., etc.

i) Diagramme de phase :

Pour différentes valeurs du champ aléatoire h la température de transition $T_c(h)$ a été déterminée. En appliquant des cycles thermiques sur des réseaux 16^3 on détermine $T_c(h)$ comme la valeur de T pour laquelle la chaleur spécifique ou la susceptibilité présente un maximum. Les deux critères utilisés dans le cas $h = 0$ montrent que l'on est bien à l'équilibre. Les différents cycles effectués sur un même échantillon se comparent très bien entre eux. Une seule réalisation du désordre pour chaque valeur de h/J a été utilisée. Pour illustrer ceci, la figure 62 présente l'énergie interne e(T) en fonction de la température pour $L = 16$ et $\frac{h}{J} = 1$. Sur cette même figure, les deux déterminations de C(T) : $c_1(T) \equiv \frac{d}{dT} < e >$ et $c_2(T) \equiv \frac{N}{T^2} (< e^2> - <e>^2)$ ont été portées. La concordance de $c_1(T)$ et $c_2(T)$ nous montre que l'on est bien à l'équilibre.

La figure 63 représente, pour $\frac{h}{J} = 2$, l'aimantation m(T) et la susceptibilité χ en fonction de la température. Le pic de susceptibilité est très marqué et permet de définir la température critique T_c. Pour chaque valeur de h/J, le pic de chaleur spécifique C et celui de susceptibilité χ fournissent deux déterminations cohérentes de T_c, qui se comparent bien à celles pour des tailles plus petites ($L = 8$).

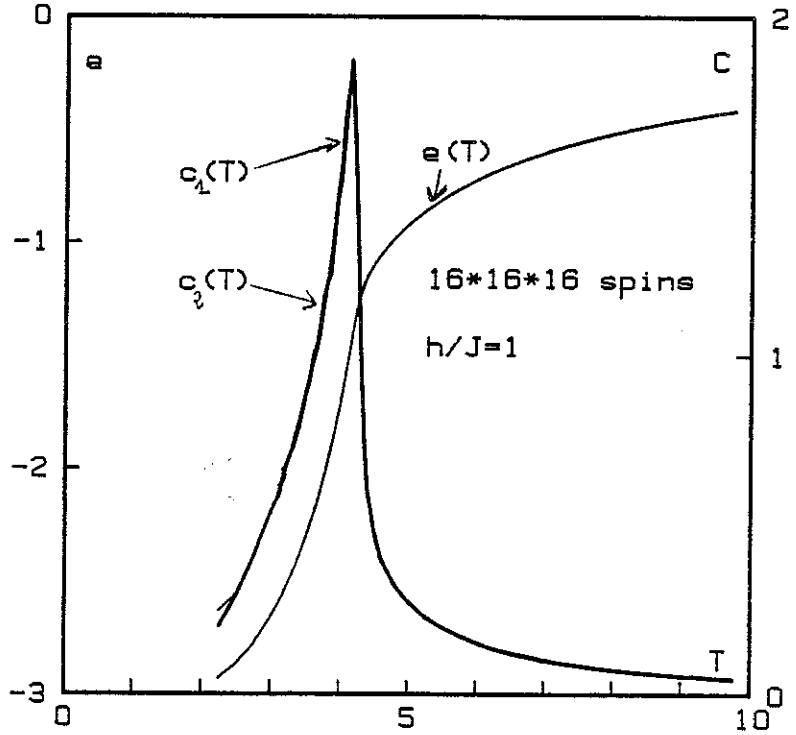


FIGURE 62

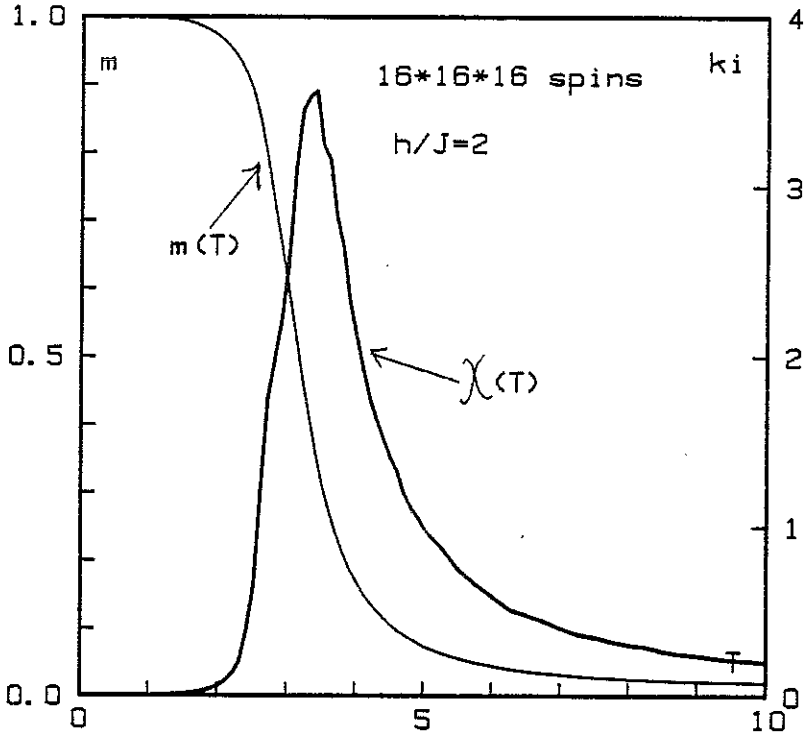


FIGURE 63

En portant les trois valeurs de $T_c(h)$ obtenues pour $\frac{h}{J} = 0.1$, 1.5 et 2, ainsi que la valeur de $x_c \equiv (h/J)_c$ à $T = 0$, on obtient le diagramme de phase suivant :

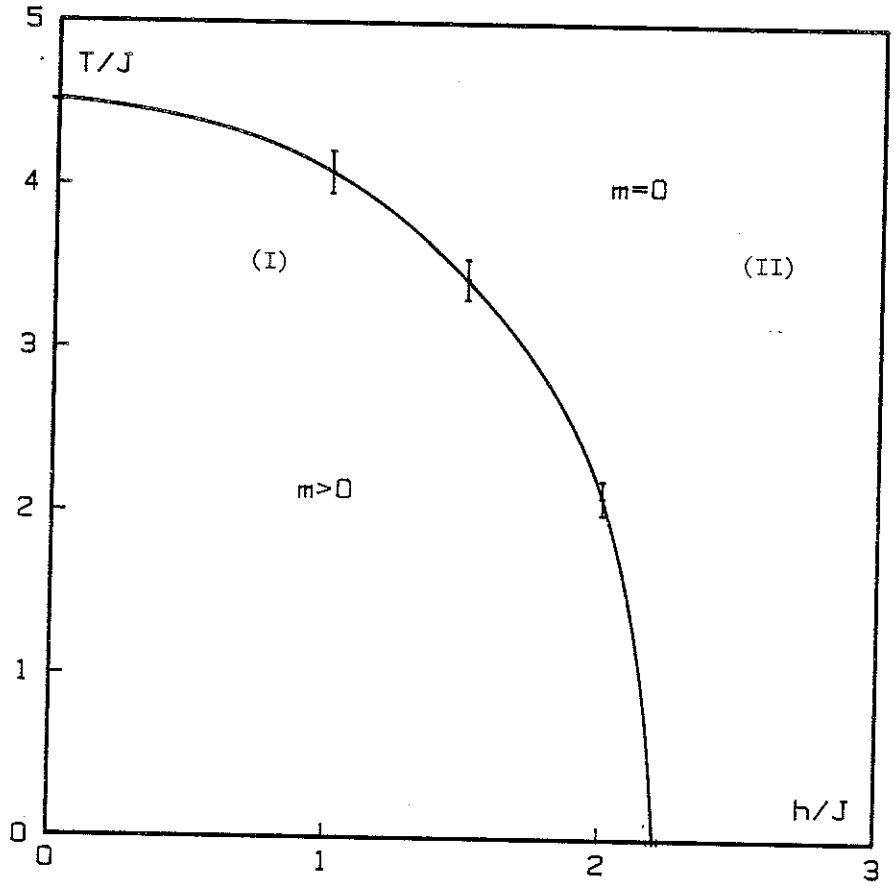


FIGURE 64

Ce diagramme est compatible avec les résultats numériques de (You(b)) et (Jac(a)). Notons toutefois que les tailles inférieures dans (Jac(a)) conduisent à des valeurs de $T_c(h)$ légèrement supérieures :
(You(b)) : $T_c/J = 3,91 \pm 0,03$ pour $h/J = 1$
(Jac(a)) : $T_c/J = 4,3 \pm 0,1$ pour $h/J = 0,5$.

La ligne ainsi définie ne semble pas présenter de singularités. Les deux points extrêmes de cette ligne sont des points de transition du 2ème ordre, mais associé à deux jeux d'exposants critiques différents : $\alpha = 0,125$; $\beta = 0,3125$; $\gamma = 1,2312$; $\nu = 0,625$ pour le point $T_c = 4,51$, $h = 0$ et $\alpha = 0$, $\beta = 0$ $\gamma = 2$ et $\nu = 2$ pour le point $T_c = 0$ et $h_c = 2,2$. Il est naturel alors de se demander ce qu'il en est sur la ligne elle-même.

ii) Etude de la ligne de transition :

a. Hystérésis et fluctuations d'échantillon à échantillon :

Une étude plus approfondie a été effectuée pour la valeur particulière $\frac{h}{J} = 1,5$. Cette valeur a été choisie car elle est suffisamment grande pour que le comportement du système ne soit pas contrôlé par celui du cas pur ($h \equiv 0$) et suffisamment petite pour être voisine de $h_c/2$. Comme on l'a décrit au paragraphe précédent des trempes rapides ont été effectuées sur des échantillons 16^3 à une valeur $T \leqslant T_c(h)$. La figure 65 présente l'enregistrement de l'énergie lors d'une telle trempe. Les premiers pas correspondent à des valeurs de e hors d'échelle.

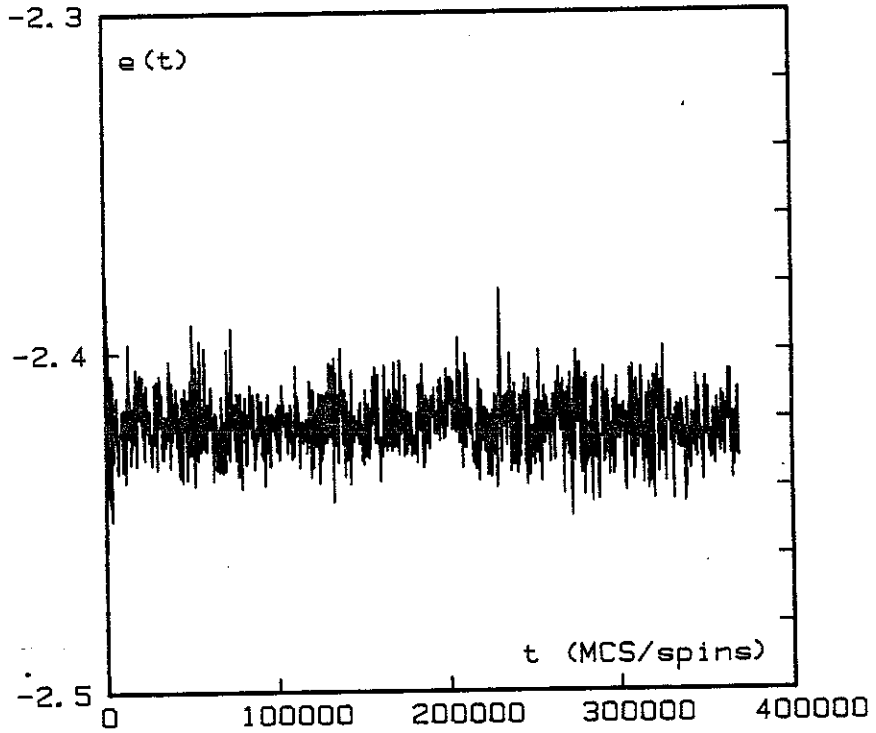
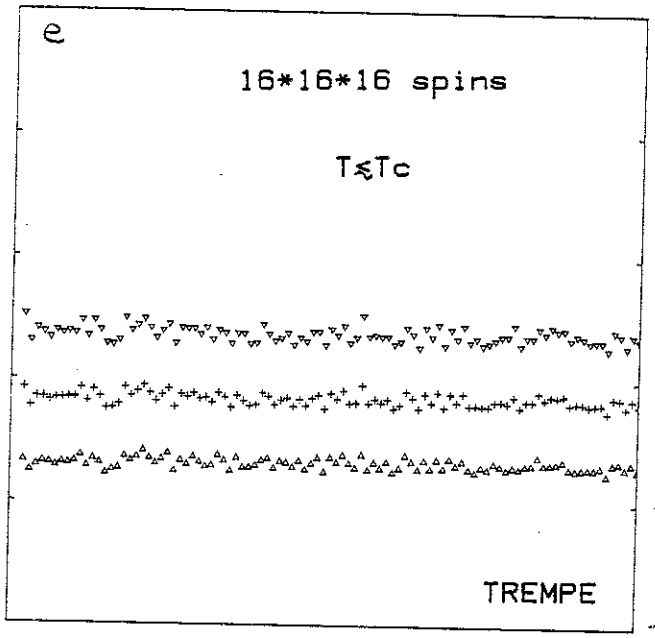


FIGURE 65

Il est clair qu'après 10^4 MCS/spins, le régime asymptotique est atteint. Nous avons alors effectué l'opération suivante sur chaque échantillon (16^3 spins). On se place à $T \lesssim T_c(h)$ et effectue une trempe rapide depuis $T = \infty$. On mesure par la suite la moyenne de l'énergie $\langle e \rangle$.

Les moyennes sont prises entre l'instant $t_i = 10^4$ MCS/spins et l'instant $t_f = 10^6$ MCS/spins. Cette opération est recommencée un grand nombre de fois, à partir de configurations initiales différentes. Les figures 66 et 67 présentent les résultats pour deux échantillons différents. En abscisse est porté le numéro de la trempe (de 1 jusqu'à 250). En ordonné, la croix représente $< e >$, les triangles représentent $< e > + \Delta$ et $< e > - \Delta$ où $\Delta^2 = < e^2 > - < e >^2$.



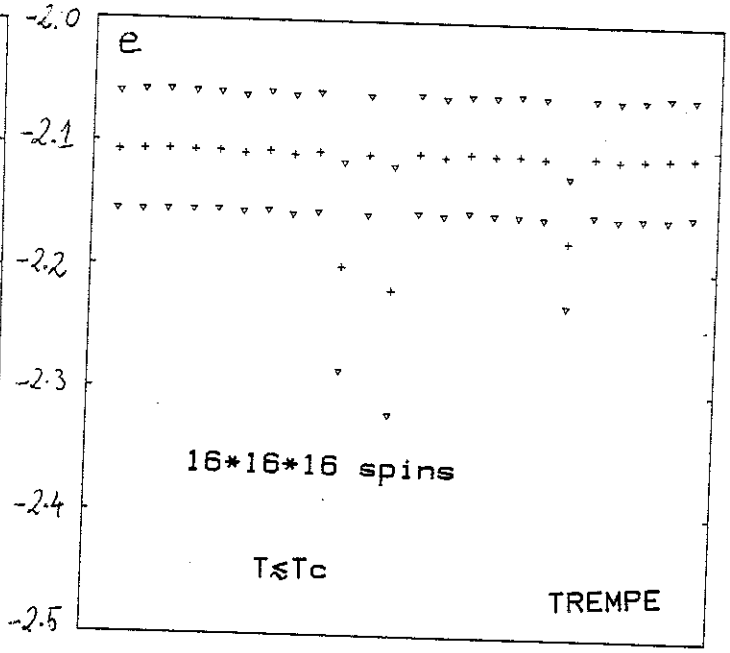


FIGURE 66

FIGURE 67

Sur la figure 66 il est clair que l'on converge toujours vers la même valeur de < e >, quelque soit la condition initiale.Ceci constitue une preuve que la transition est du deuxième ordre. Sur la figure 67, des données analogues correspondant à un autre échantillon sont montrées.Mis à part 3 trempes anormales, on a un comportement identique au cas précédent.

La conclusion de cette étude de l'hystérésis indique qu'il s'agit d'une transition du deuxième ordre, en contradiction avec la suggestion de (You(b)).

Afin d'apporter d'autres arguments pour clarifier l'ordre de la transition, les critères présentés dans le paragraphe A ont été utilisés. Trois échantillons différents, correspondant à une valeur $h/J = 1.5$, et comportant 32^3 spins ont été étudiés.

La première observation que l'on peut faire est que sur le même échantillon, les différents cycles thermiques ne se comparent pas entre eux (deux à deux) aussi bien, comme ce fut le cas à $h = 0$. On peut relier ce fait simplement à une valeur faible de $t_2(T)$. Cette fluctuation entre différentes histoires sur le même échantillon est très petite par rapport à la fluctuation que l'on obtient en comparant différents échantillons (voir plus loin). La moyenne des différents cycles représentent une moyenne sur un plus grand nombre de points et sera retenue comme donnée à analyser par la suite. La deuxième observation se réfère à la comparaison des trois échantillons entre eux.Il apparaît en effet,comme cela va être développé dans la suite, que les trois échantillons étudiés présentent des comportements <u>très différents les uns des autres</u> bien que subissant exactement le même cycle thermique. Cette remarque a déjà été faite dans(You(b))et(Jac(a)) et est à la base de toutes les difficultés rencontrées dans l'analyse des résultats. Pour les plus grandes tailles accessibles à la simulation numérique (jusqu'à 64^3 spins chez(You(b)),il y a des grandes fluctuations d'échantillon à échantillon, même pour les quantités auto-moyennantes comme par exemple l'aimantation. La figure 68 montre $\rho(T) \equiv (\langle e \rangle_{ref} - \langle e \rangle_{rec})/(\langle e \rangle_{ref} + \langle e \rangle_{rec})$ en fonction de la température T pour trois échantillons différents.

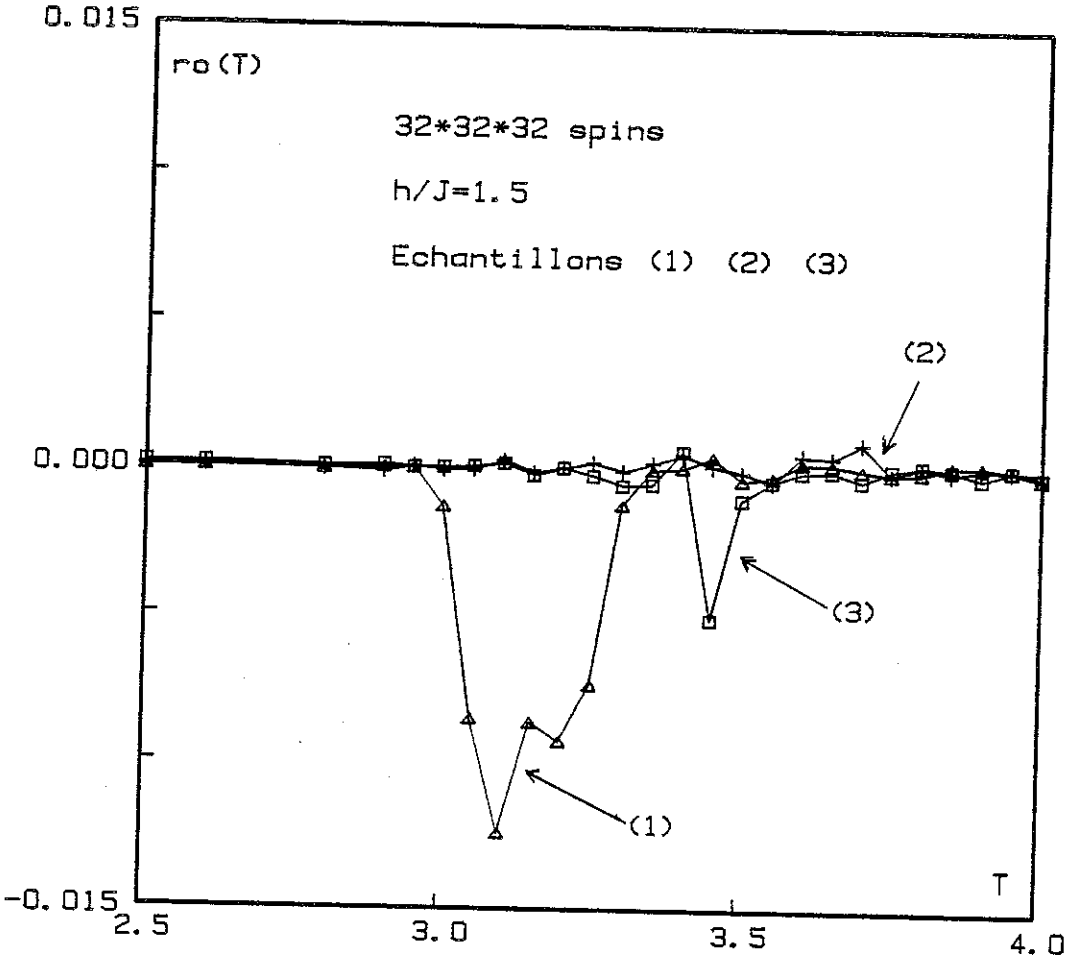


FIGURE 68

L'échantillon (1) représenté par des triangles montre clairement que l'énergie, dans la région de la transition, est plus basse en réchauffant qu'en refroidissant. En revanche l'échantillon (3), représenté par des croix, n'exhibe pas ce comportement. L'échantillon (2), représenté par des carrés, présente un comportement similaire à celui de l'échantillon (1),mais avec un plus petit $\rho(T)$. Pour décider si l'hystérésis constaté sur l'échantillon (1) correspond à une transition de phase au premier ordre, ou si cet effet est dû au fait que l'on se trouve hors équilibre, le deuxième critère défini au paragraphe précédent a été appliqué. La figure 69.a présente la comparaison de $c_1(T) \equiv \frac{d}{dT} < e >$ et $c_2(T) = \frac{N}{T^2} (< e^2> - <e>^2)$ pour l'échantillon (1). La figure 69.b présente les mêmes quantités pour l'échantillon (2).

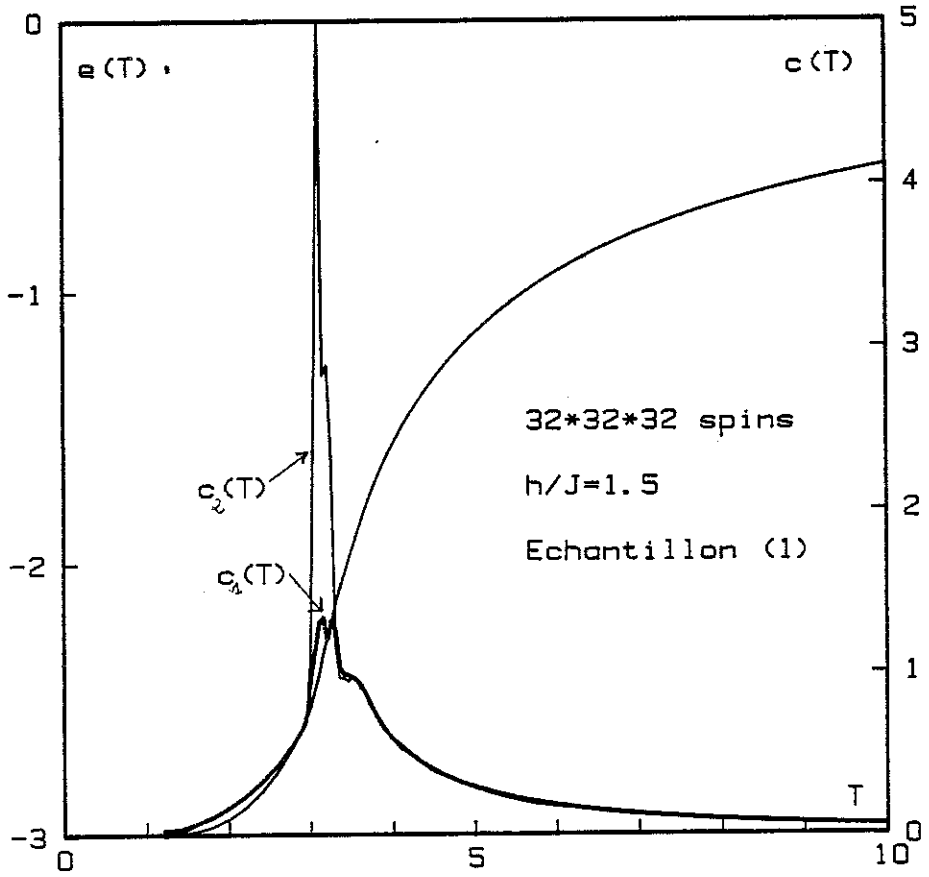


FIGURE 69 a)

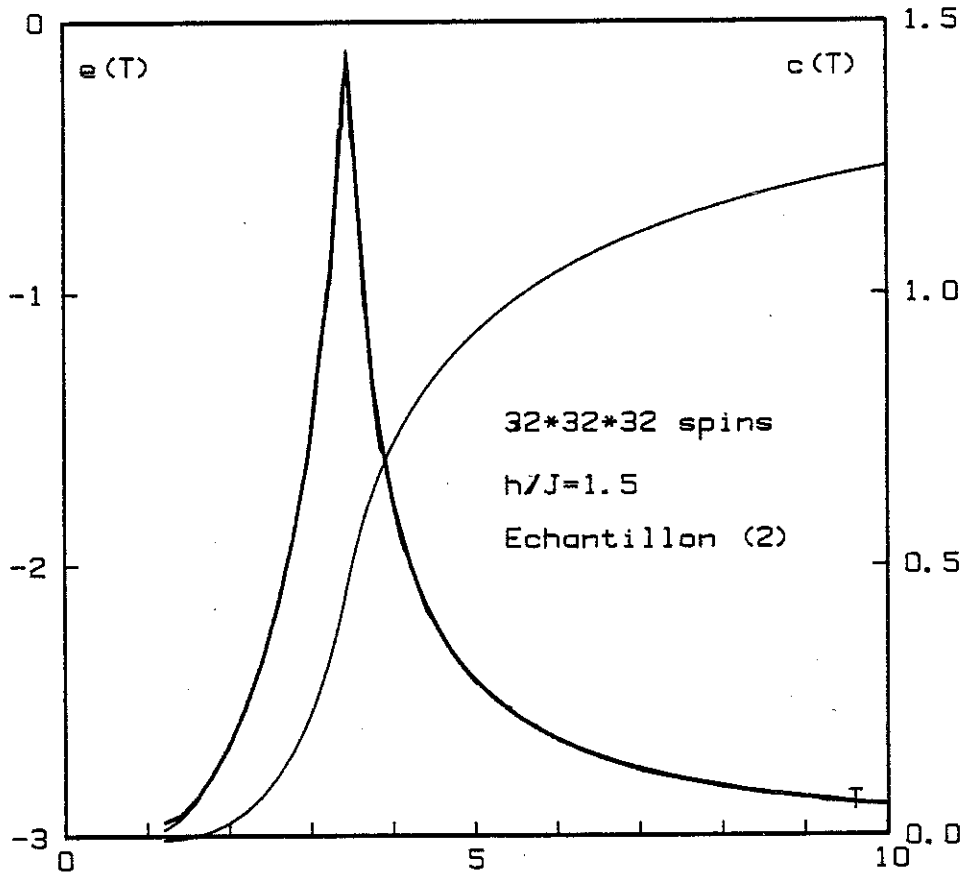


FIGURE 69 b)

Il apparaît clairement que l'échantillon (1) est hors équilibre et que l'effet observé sur $\rho(T)$ n'est pas la signature d'une éventuelle transition du premier ordre. Par contre l'échantillon (3) est bien à l'équilibre. Il est à noter que les trois échantillons, dans l'ordre croissant du temps de thermalisation, sont (1), (3) et (2). Les valeurs correspondantes de la somme des champs aléatoires $\sum_i h_i$ sont : - 28,114 et 298. Il s'ensuit donc que les échantillons sont d'autant plus difficiles à thermaliser que la somme des champs locaux $\sum_i h_i$ est faible. Ceci explique la raison pour laquelle (Jaco) observe de l'hystérésis sur des petites tailles ($L \leqslant 12$) car il impose une contrainte artificielle : $\sum_i h_i = 0$. Notons que cet effet d'"hystérésis" se retrouve aussi sur l'échantillon (1) (fig. 70.a) pour l'aimantation, et est absent sur l'échantillon (2) (fig. 70.b).

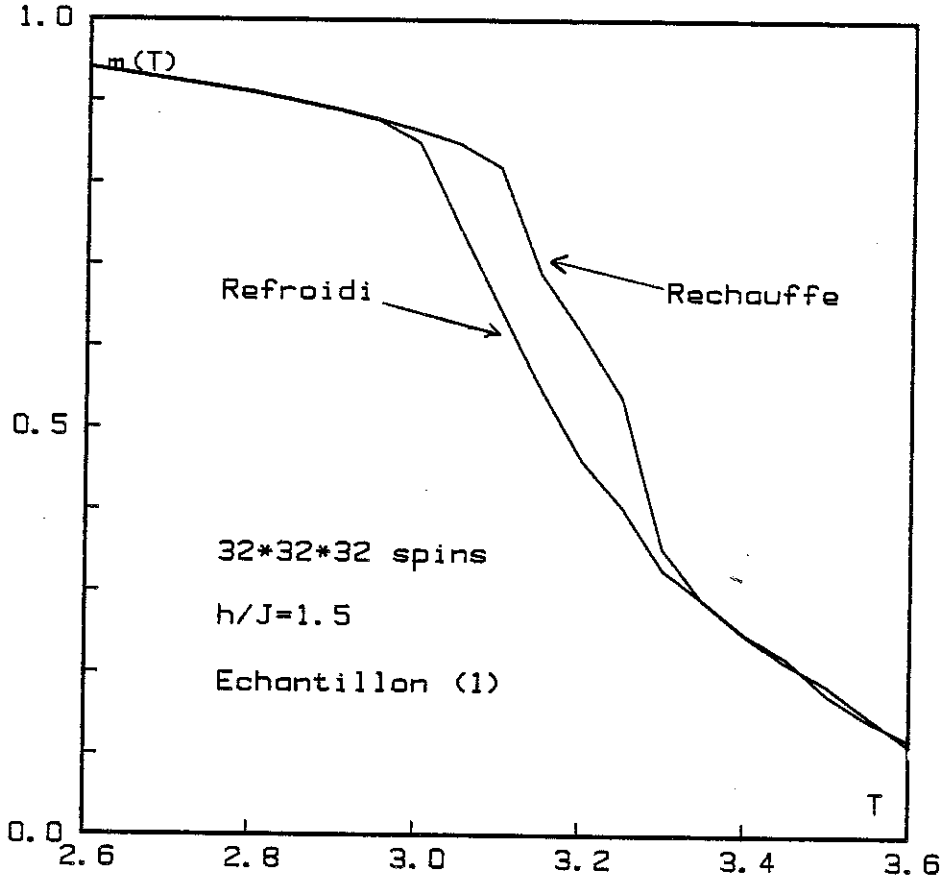


FIGURE 70 a)

Noter les échelles différentes pour les figures 70a) et 70b). La figure 70a) rappelle le comportement observé dans (You(a)) où ces auteurs l'ont interprété comme de l'hystérésis associé à une transition de premier ordre.

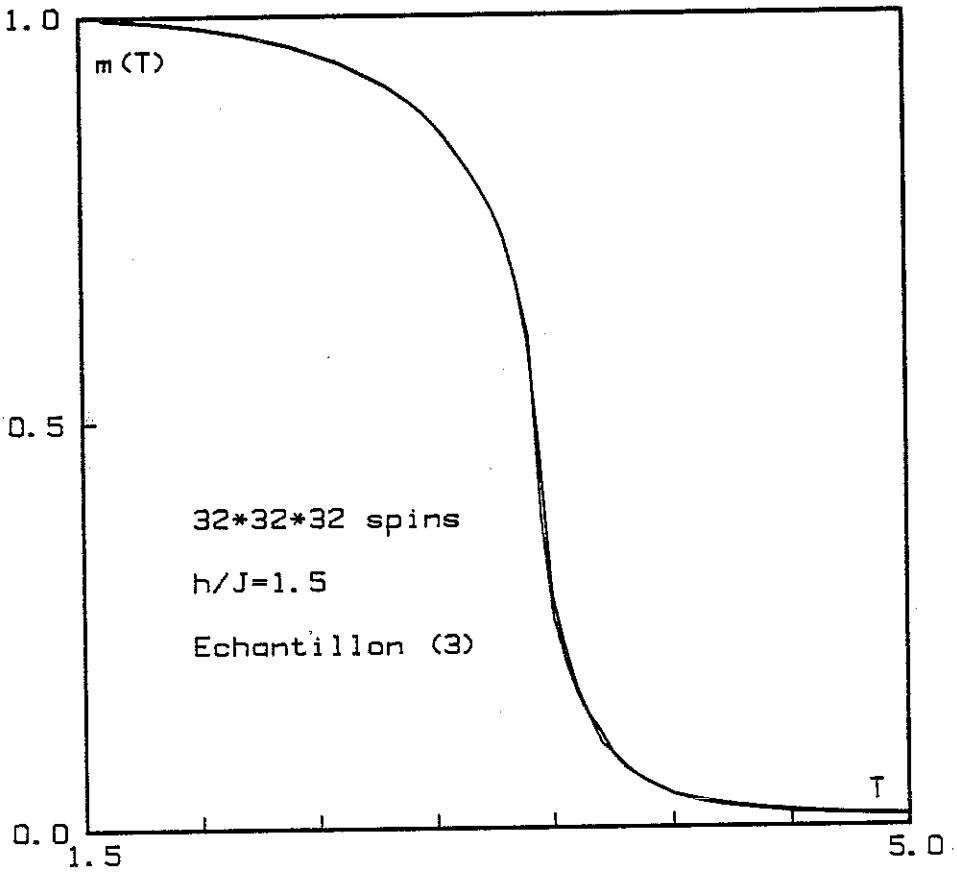


FIGURE 70 b)

La conclusion principale de cette section est donc la suivante. Pour h = 1,5, la transition est continue et du deuxième ordre. En particulier, les températures critiques déterminées par le maximum de la chaleur spécifique ou de la susceptibilité sont respectivement : 3,15 ± 0,05 ; 3,45 ± 0,05 et 3,50 ± 0,05. Il est donc tout à fait naturel de conjecturer que la ligne de transition est toute entière du deuxième ordre.

Une remarque importante est la suivante (You(b))La contrainte artificielle $\sum_i h_i=0$ (exactement), que certains auteurs imposent afin d'améliorer la statistique est périlleuse. Dans notre étude nous n'avons pas imposé une telle contrainte. Le ralentissement des relaxations à $T \sim T_c$, est très sensible à ce facteur, qui apparaît comme un ingrédient essentiel du problème.

b. Estimation des exposants critiques :

Ayant déterminé la ligne critique (T,h), il est naturel de chercher les exposants critiques associés. On sait que pour une transition du second ordre (ex : h = 0), où la relation d'hyperscaling est vérifiée : $d\nu = 2 - \alpha$, il suffit de calculer seulement deux des exposants de la transition. Cependant, si la relation d'hyperscaling est violée (ex : T = 0 à $h = h_c$), alors il est nécessaire d'introduire un nouvel exposant θ, comme on l'a fait à T = 0. Sur la ligne du second ordre (T,h), on a calculé dans les sections précédentes, les exposants associés aux extrémités :

. cas pur h = 0, $T = T_c$: α=0.125 , β=0.313 , γ=1.231 , ν=0.625

. transition à T = 0, $h = h_c$: α= 0 , β= 0 , γ= 2, ν= 2 et θ=2

La question naturelle qui se pose est alors la suivante : quelles sont les valeurs des exposants critiques sur la ligne (T,h) ? Malgré les difficultés que l'on a rencontrées pour le calcul de ces exposants, deux conclusions peuvent être faites :

1) il s'agit d'exposants différents de ceux du cas pur (h = 0)

2) l'exposant β est très petit, comparé à celui du cas pur, ce qui va dans le sens d'une ligne de transition contrôlée par le point critique à T = 0, $h = h_c$.

Une étude plus approfondie est nécessaire pour affirmer davantage cette conclusion.

Dans l'analyse de nos données, nous avons utilisé la même méthodologie que celle adoptée dans le cas pur. En présence d'un champ aléatoire, plusieurs complications ont été rencontrées. La plus significative est probablement la fluctuation d'échantillon à échantillon, comme on peut le voir sur la courbe de susceptibilité $\chi(T)$, montrée sur la figure 71. En effet, pour les trois échantillons (1), (2) et (3) décrits plus haut (L = 32, h = 1,5), à la fois la position T^* du maximum de χ, ainsi que sa valeur varient appréciablement en passant

d'un échantillon à l'autre (T^{*} = 3,15 ± 0,05 pour (1), 3,34 ± 0,05 pour (2) et 3,50 ± 0,05 pour (3)).Il est donc illusoire d'effectuer une moyenne d'échantillonspour extraire la singularité de χ .

A cette difficulté vient s'ajouter l'impossibilité d'utiliser des variables réduites pour comparer des tailles différentes (même h, L = 8, 16 et 32). Cette remarque est valable pour : l'aimantation, la susceptibilité et la chaleur spécifique. Ceci nous empêche d'utiliser la méthode de la constante de couplage renormalisée U_L, qui en principe doit fournir, à la fois ν et T_c avec une grande précision. Une estimation grossière de ν, obtenue avec cette méthode est : ν = 1,0 ± 0,5 (voir figures 72 et 73). Notons que la valeur ν = 1,3 ± 0,3 a été proposée récemment par (Ogi), à partir de l'analyse d'un seul échantillon sur un antiferromagnétique dilué. Cette difficulté d'avoir ν avec une précision raisonnable, nous indique qu'il sera difficile d'avoir des précisions analogues à celles du cas pur.

Ne pouvant pas utiliser les lois d'échelle en taille finie, nous avons utilisé un seul échantillon pour avoir la meilleure détermination de β et γ . La comparaison entre différents échantillons nous donne les incertitudes sur nos valeurs. La détermination directe de β et γ a été effectuée dans un diagramme en χ vs ℓn m et ℓn χvs $\ell n(T-T_c)$. Pour les trois échantillons, on a trouvé(h = 1,5, L = 32).

échantillon (1) : γ = 1,6 ± 0,4
échantillon (2) : γ = 1,25 ± 0,25
échantillon (3) : γ = 1,35 ± 0,35

Ainsi une estimation possible de γ pourrait être γ = 1,4 ± 0,3. De même, pour γ/β on trouve γ/β = 7,5 ± 2,5.

Ces valeurs indiquent que γ augmente et β diminue (pratiquement nulle) lorsque h prend une valeur finie.

Rappelons que les valeurs suggérées par (Ogi) sont ν = 1,3 ± 0,3, γ = 2,0 ± 0,5, β = 0,10 ± 0,10 et θ = 1,5 ± 0,4, et sont donc comparables aux nôtres.

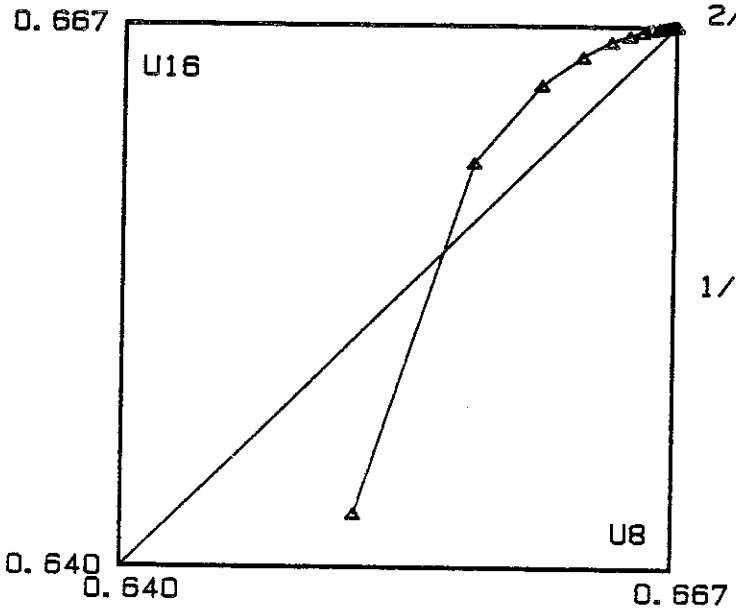


FIGURE 72

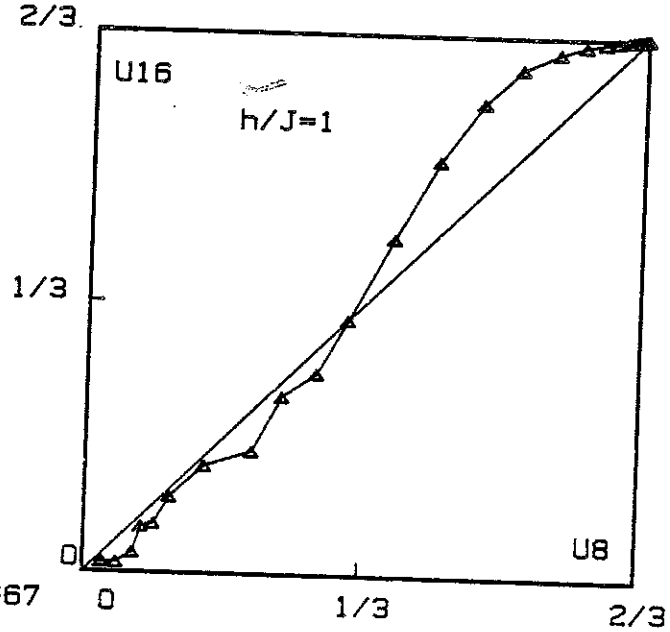


FIGURE 73

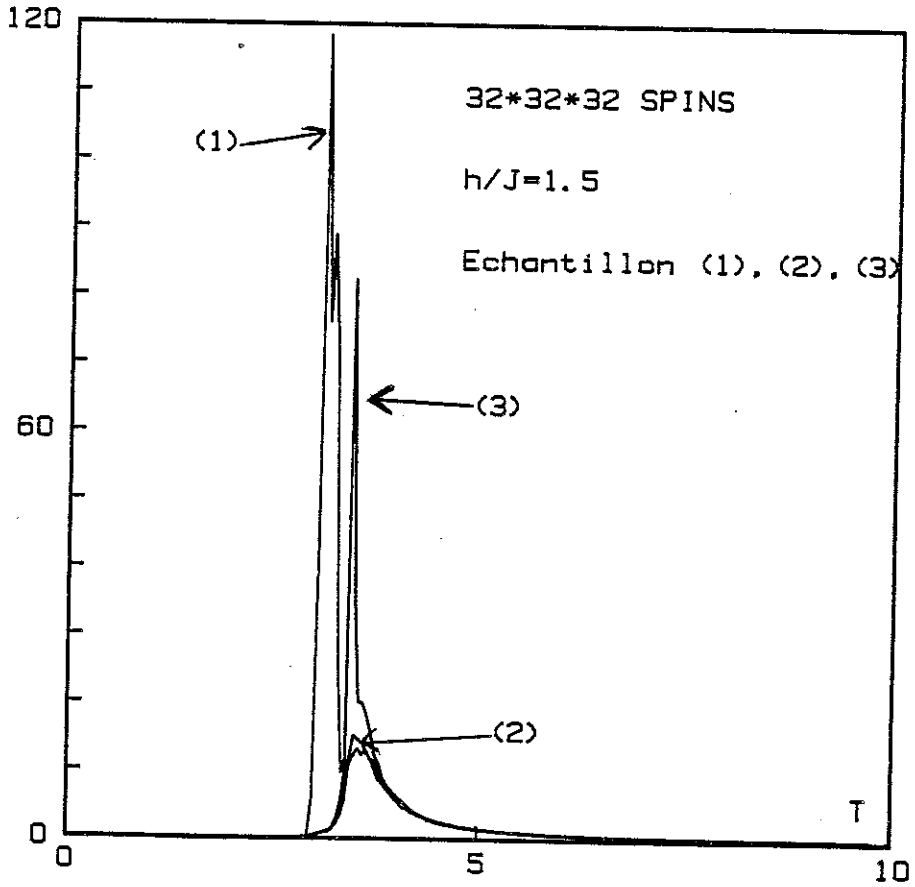


FIGURE 71

c. Limite d'un fort champ aléatoire :

Afin d'étudier la limite $h > h_c$, nous avons effectué des calculs analogues pour 6 échantillons (16^3 spins) : deux à $h/J = 3$, deux à $h/J = 3,5$ et deux à $h/J = 4$. On s'est limité à $h/J < 6$, puisque pour des champs plus élevés, l'état à $T = 0$ est trivial (chaque spin est aligné dans son champ local). Pour les échantillons étudiés, deux remarques sont à noter :

i) Même jusqu'à $T = 0$, $m(T)$ reste voisin de zéro et ceci pour h/J et tous les échantillons. De plus la susceptibilité $\chi(T)$ n'exhibe aucune singularité, comme ce fut le cas à $h < h_c$. Ces comportements sont illustrés sur la figure 74 où l'on a montré $m(T)$ et $\chi(T)$ en fonction de la température pour un échantillon à $h/J = 3,5$. En plus, il faut noter l'absence de fluctuations notables d'échantillon à échantillon.

ii) La même remarque subsiste pour l'énergie interne, $e(T)$, ainsi que la chaleur spécifique $C(T)$. Nous avons testé au passage l'équilibre dans nos mesures, en comparant $C_1(T) = \frac{d}{dT} e(T)$ avec $C_2(T) = \frac{N}{T^2} (< e^2 > - < e >^2)$(figure 75 pour $h/J = 3$, $L = 16$).

Pour comparer la nature de l'état du système à $h < h_c$ et $h > h_c$, nous avons analysé le comportement de $C(T)$ à basse température. Pour $h < h_c$, $C(T)$ augmente depuis $C(T = 0) = 0$, comme une loi exponentielle $C(T) \sim e^{-\Delta/T}$, où $\Delta(h)$ indique l'existence d'un "gap" d'excitations de basse énergie. $\Delta(h)$ décroît en fonction de h lorsque h augmente depuis $h = 0$ jusqu'à $h = h_c$. Ce régime est modifié pour $h \geqslant h_c$, où $C(T) \sim T^a$ à $T \sim 0$ K où a est voisin de 1 pour les échantillons étudiés. $a(h)$ décroît de façon monotone lorsque h augmente, pour rejoindre la valeur 1 à $h > 4$ ($a(h) = 1.5$ pour $h/J = 3$, $a(h) = 1.4$ pour $h/J = 3.5$ et $a(h) = 1.1$ pour $h/J = 4.0$).

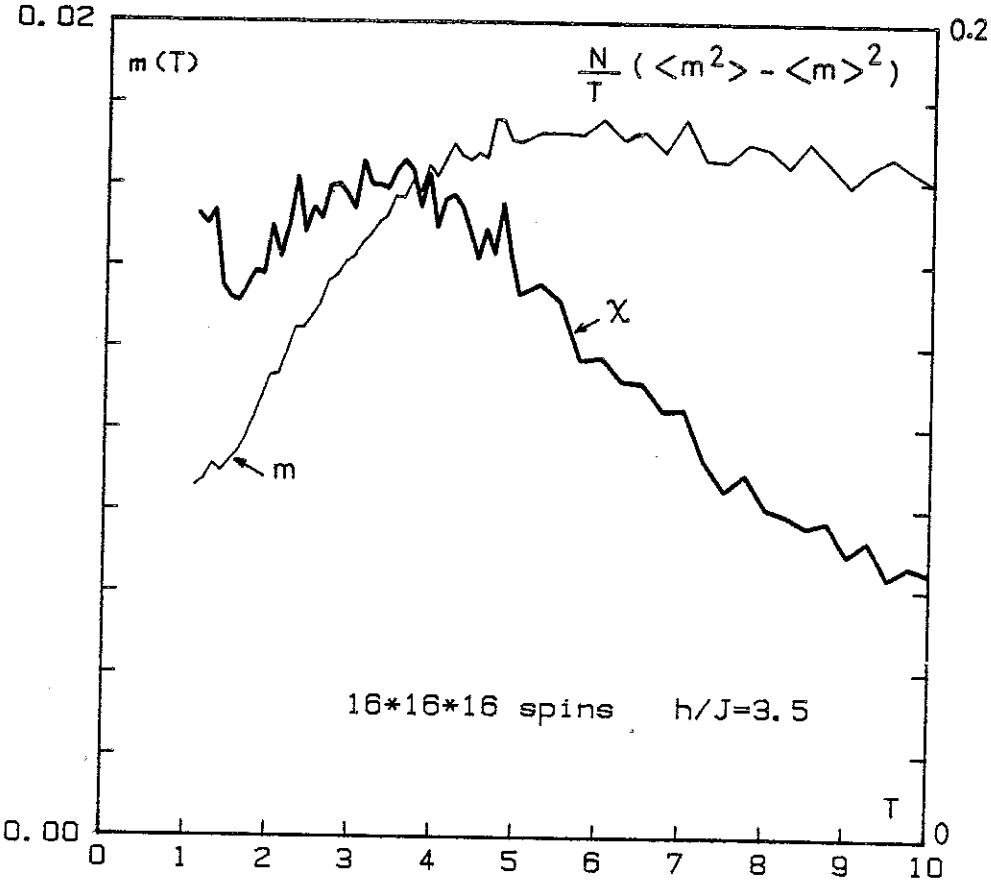


FIGURE 74

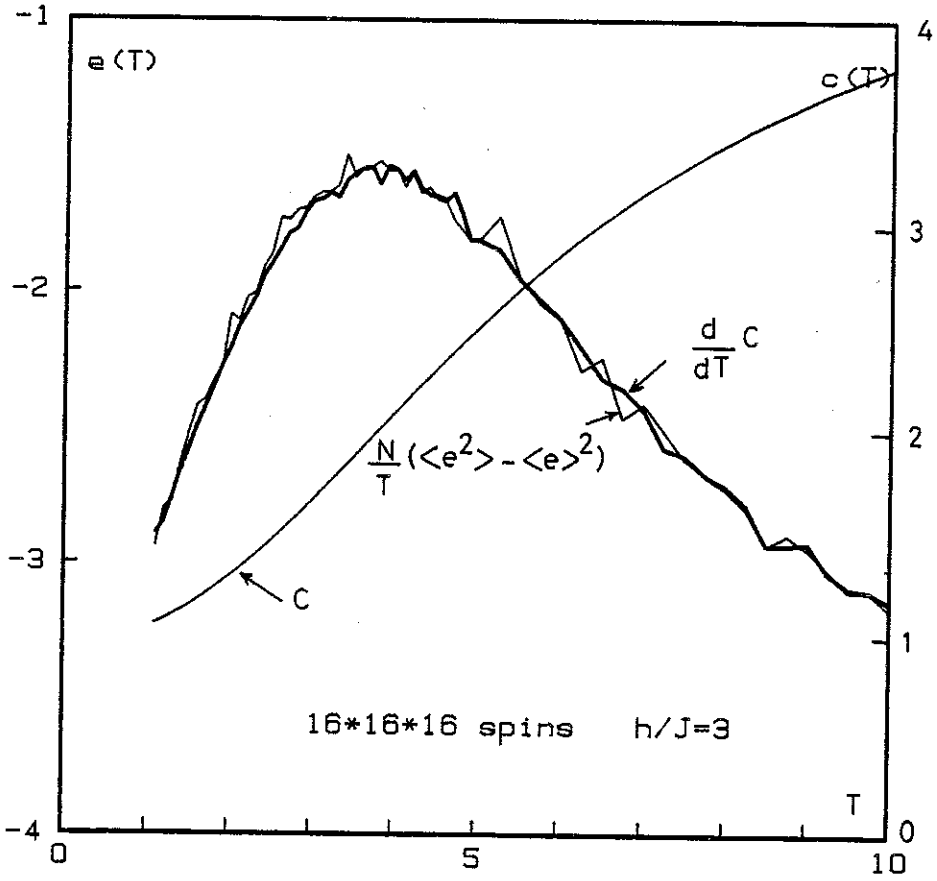


FIGURE 75

CONCLUSIONS

Les conclusions de ce chapitre sont les suivantes. La dimension critique inférieure du modèle d'Ising sous champ aléatoire est deux. Donc en deux dimensions un champ aléatoire aussi petit soit-il déstabilise l'ordre ferromagnétique. En trois dimensions au contraire, il faut un champ aléatoire critique $h_c \neq 0$, pour détruire l'ordre ferromagnétique. Par exemple, pour une distribution binaire de champ aléatoire $P(h_i) = \frac{1}{2}[\delta(h+h_i) + \delta(h-h_i)]$, nous avons obtenu $h_c/J = 2,2$. A température nulle et en fonction de h/J, il existe une transition de phase analogue à celle de la transition de phase de la chaîne d'Ising. Le diagramme de phase à trois dimensions est donné sur la figure 64. La ligne est du deuxième ordre et les exposants critiques ne sont pas ceux du cas pur. La transition n'est donc pas contrôlée par les fluctuations thermiques seules mais aussi par les fluctuations dues au champ aléatoire. L'écriture du bilan d'énergie libre des amas qui fluctuent près de T_c conduit à une violation de la relation d'hyperscaling, et à la nécessité d'introduire un nouvel exposant critique. Cette transition semble être contrôlée par le point critique à T = 0. Nous pensons qu'une détermination plus précise des exposants nécessite une étude plus approfondie.

Il reste néanmoins plusieurs points intéressants possibles à préciser avec les techniques actuelles :

i) quelle est la nature en trois dimensions et à température nulle de la transition de phase en fonction du champ aléatoire h/J pour une distribution gaussienne des champs ?

ii) lorsque h/J est supérieur à la valeur critique de h/J et à température nulle, comment l'aimantation projetée m'(T) passe-t-elle de $m'(\infty) = 0$ pour T infinie à m'(0) = 1 pour T nulle ? Son comportement est-il de type paramètre d'ordre et y a-t-il finalement dans la région II du diagramme de phase de la figure 64 une phase type verre de spins ?

C O M P L E M E N T

ETUDE NUMERIQUE DES ZEROS DE LA FONCTION DE PARTITION D'UN MODELE D'ISING SOUS CHAMP ALEATOIRE

Il s'agit de chercher les zéros de la fonction de partition du modèle d'Ising sous champ aléatoire.

Il est d'usage de se limiter dans l'étude de l'énergie libre à des valeurs réelles de la température et du champ. En prenant des valeurs complexes pour ces variables, la fonction de partition devient une fonction complexe à variables complexes, et peut donc révéler avec ses zéros une transition de phase éventuelle (Lee), (Yan).

Nous avons appliqué cette méthode au cas suivant, d'un réseau cubique 3 x 3 x 3, avec des conditions de bords "twistées". La distribution de champ aléatoire étant binaire : $P(h_i) = \frac{1}{2}[\delta(h+h_i) + \delta(h-h_i)]$, avec $h = J$ ($x \equiv h/J = 1$).

Sur un tel modèle la fonction de partition Z s'écrit :

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} \exp -\beta \mathcal{H} \{\sigma\}$$

où

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=0}^{26} \sigma_i(\sigma_{i-9} + \sigma_{i-3} + \sigma_{i-1} + \sigma_{i+1} + \sigma_{i+3} + \sigma_{i+9} + \varepsilon_i)$$

($\varepsilon_i = \pm 1$; $\sigma_i = \pm 1$; les sommes et les différences des indices sont modulo 27).

Une réalisation du désordre consiste en un choix des ε_i. Les champs ε_i étant choisis, la fonction de partition Z est calculée par énumération. Une technique voisine du "Multispin Coding" (Jac(b)) a été utilisée. Cette méthode est efficace pour un nombre de spins de l'ordre de 27 mais pratiquement inutilisable pour des tailles supérieures.

La figure 1a) représente la valeur absolue de l'aimantation m(T) obtenue pour différentes réalisations du désordre. La figure 1b) représente l'énergie interne e(T) pour les mêmes réalisations du désordre. Le cas pur ($h \equiv 0$) est représenté en trait épais. On observe :

i) des courbes très différentes pour des réalisations différentes. La même observation persiste sur les fluctuations $< e^2 > - < e^2 >$ et $< m^2 > - < m >^2$.

ii) le cas pur ($h \equiv 0$) ne se distingue pas du faisceau des courbes correspondant aux différentes réalisations du désordre.

Cependant la méthode des zéros est plus fine pour distinguer le cas pur du cas désordonné.

Il est facile de voir que la fonction de partition Z peut s'exprimer comme un polynôme en fonction de la variable $z = \exp(-2/T)$. A chaque réalisation du désordre correspond un polynôme de degré 2N et donc 2N zéros dans le plan complexe z (N = nombre de spins). Suivant l'approche de Lee et Yang ., on s'intéresse au comportement des zéros proches de l'axe réel et en particulier aux questions suivantes (Lee)(Yan) :

i) les zéros sont-ils distribués sur une courbe (1d) ou sur une surface (2d) lorsque le nombre de spins N tend vers l'infini.

ii) quelle est la position du point d'intersection (s'il existe) de la courbe limite avec l'axe réel ?
Quel est le comportement de la densité des zéros au voisinage de ce point ?

La question i) n'a pas pu être abordée. La réponse à ii) se résume ainsi.

La figure 2a) présente la carte des zéros de 19 réalisations différentes du désordre. Cette figure est à comparer à la figure 2b) qui représente le cas pur ($h \equiv 0$). La région critique est aggrandie sur la figure 3, où les carrés représentent le cas pur, et les croix les cas désordonnés. Il est clair que dans le cas désordonné, les zéros s'organisent,dans cette région en "nuages", détachés des croix représentant le cas pur ($h \equiv 0$).

La figure 4 représente la "moyenne" des 19 réalisations du désordre prise au sens suivant : les moyennes des abscisses (resp. ordonnée) des points d'un même nuage de point est prise comme abscisse (resp. ordonnée) du point moyen. Le cas pur ($h \equiv 0$) est représenté aussi

(triangles) sur la même figure. Il est intéressant d'envisager différents schémas d'extrapolation de ces points pour déterminer une valeur de T_c. La valeur obtenue de T_c pour le cas pur ($h \equiv 0$) étant considéré comme un critère pour choisir la meilleure interpolation. L'interpolation bicarrée $Re(z) = 9{,}90868\ (Imz)^4 - 1{,}86743\ (Imz)^2 + 0{,}64207$ donne pour T_c une valeur pratiquement confondue avec la valeur admise $T_c = 4{,}51162$ (Bar). Cette interpolation est présentée en trait plein sur la figure C4. Un accord aussi bon est étonnant. En effet on peut montrer (Ram) que l'angle $\emptyset$ de la courbe diminue avec l'axe réel est relié à la dissymétrie de la chaleur spécifique $C(T) \equiv \frac{d\overline{E}}{dT}$ à gauche et à droite de T_c. On ne s'attend donc pas à $\emptyset = \frac{\pi}{2}$ pour le cas pur. Néanmoins cette même interpolation pour le cas désordonné conduit à

$$Re(z) = 8{,}57588\ (Imz)^4 - 1{,}7242\ (Imz)^2 + 0{,}63555\ .$$

Ce qui donne $\exp - \frac{2}{T_c} = 0{,}63555$, soit $T_c = 4{,}41$. Cette valeur de T_c est plus grande que les autres déterminations que l'on peut obtenir avec d'autres méthodes (Monte-Carlo): $T_c = 4{,}15 \pm 0{,}10$. Ceci reflète probablement les effets de taille finie.

En conclusion, on peut dire que cette méthode des zéros révèle bien les différences entre le cas pur ($h \equiv 0$) et le cas désordonné ($h = \pm J$). Il serait intéressant de trouver une méthode efficace pour calculer Z afin d'envisager des tailles plus grandes, qui pourront servir à une meilleure détermination de T_c (méthodes des lois d'échelles en taille finie), ainsi que les exposants critiques.

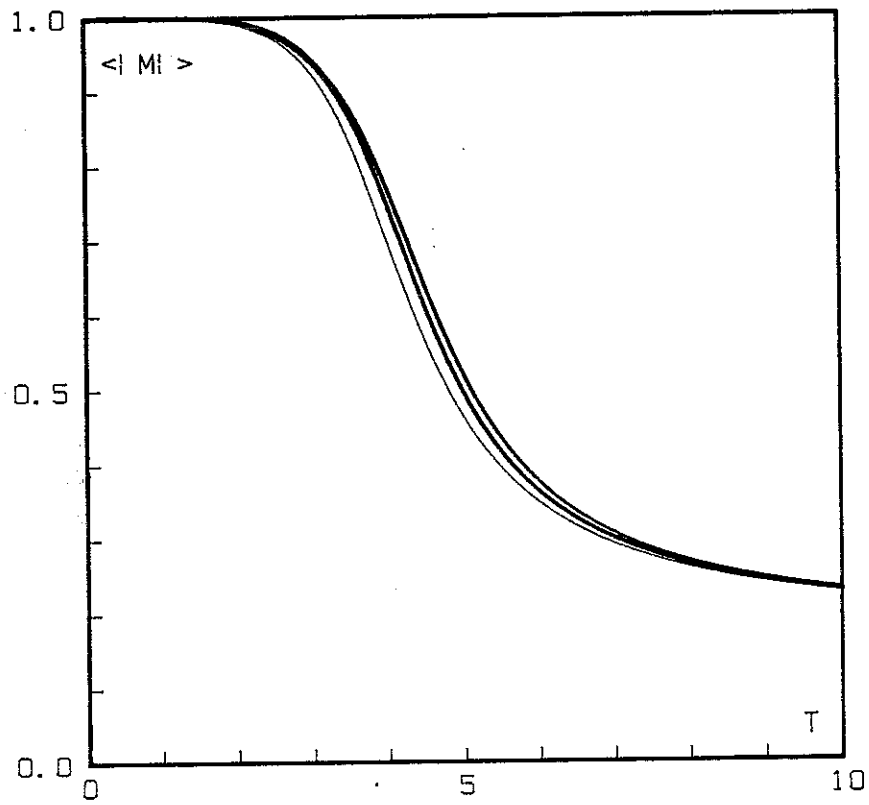


FIGURE 1 a)

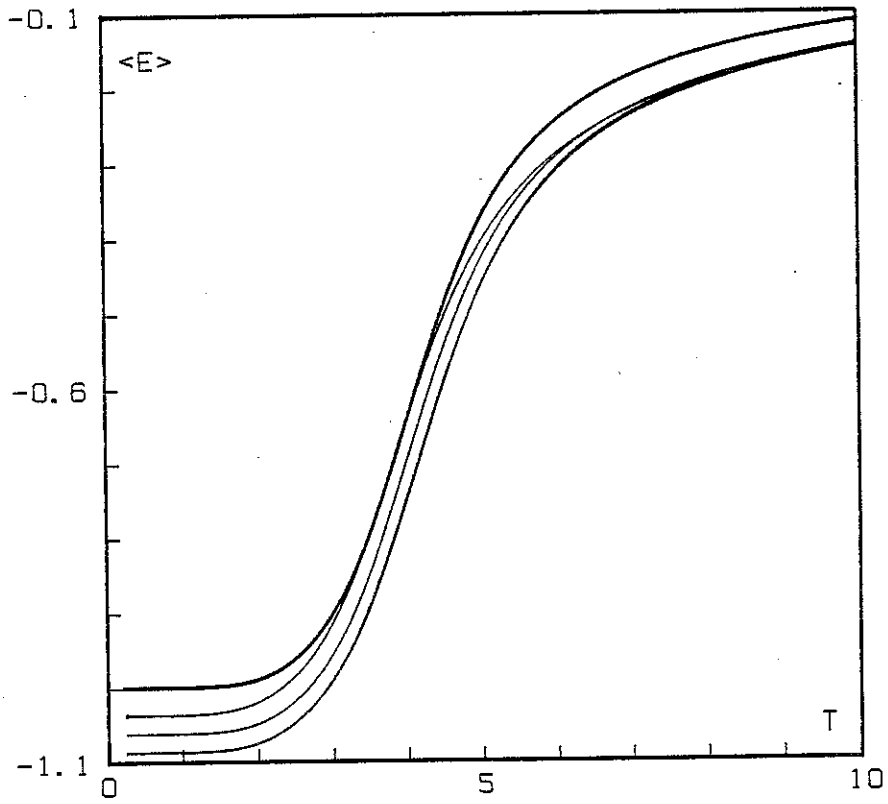


FIGURE 1 b)

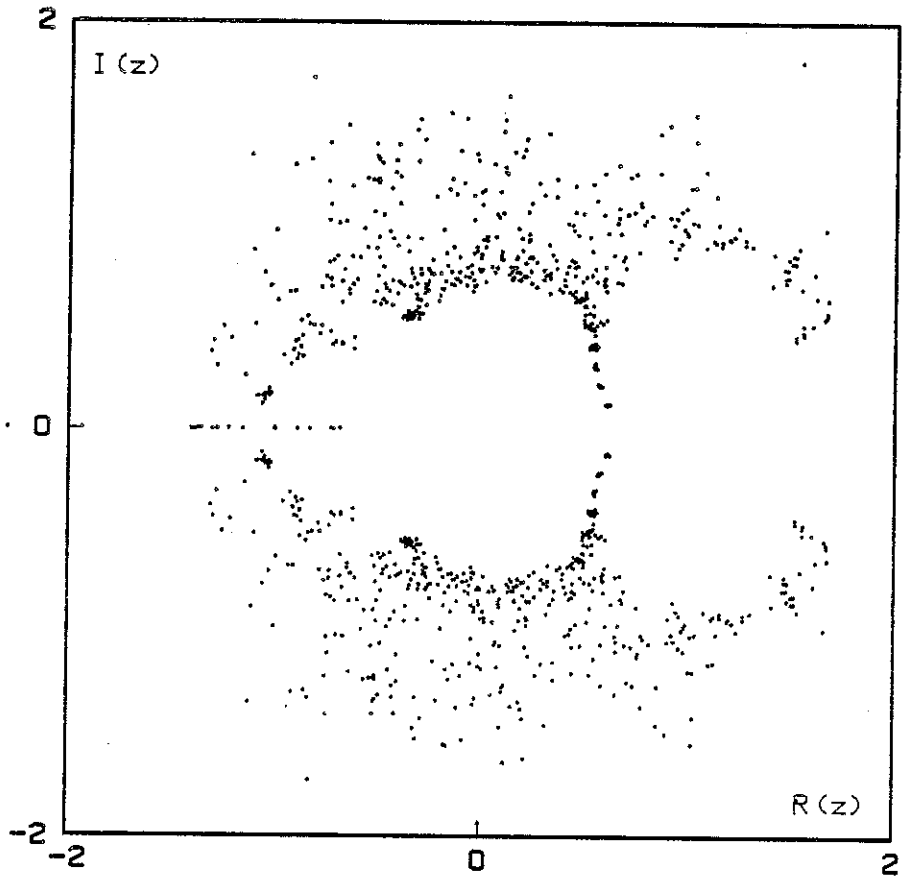


FIGURE 2 a)

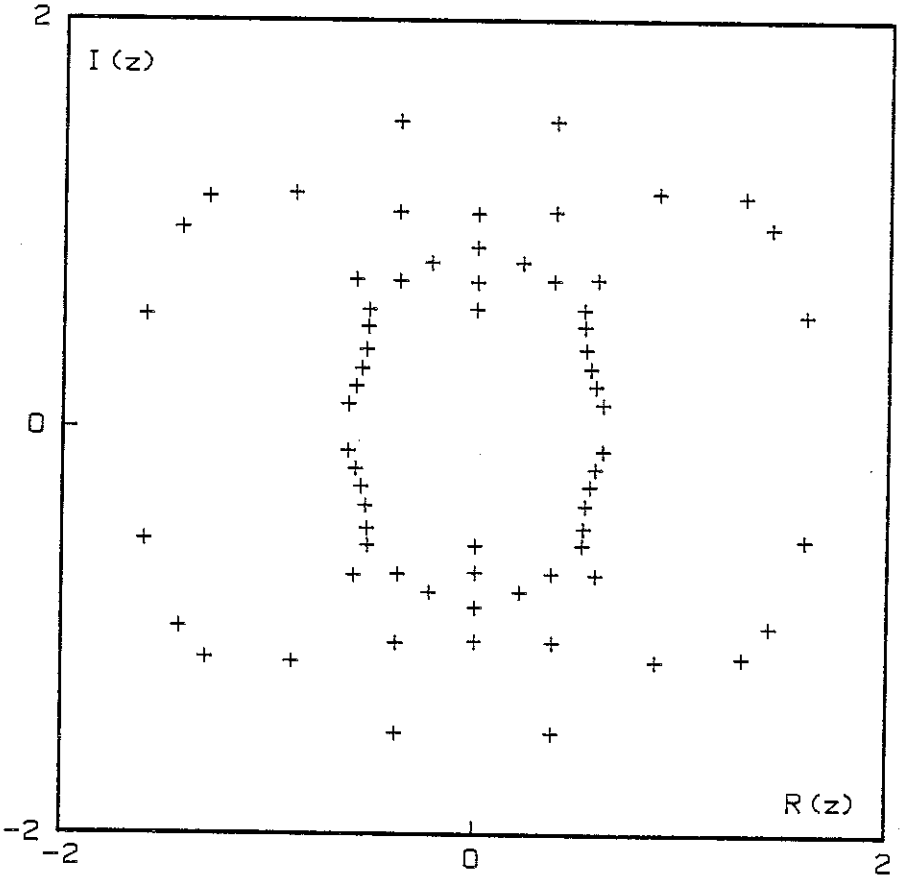


FIGURE 2 b)

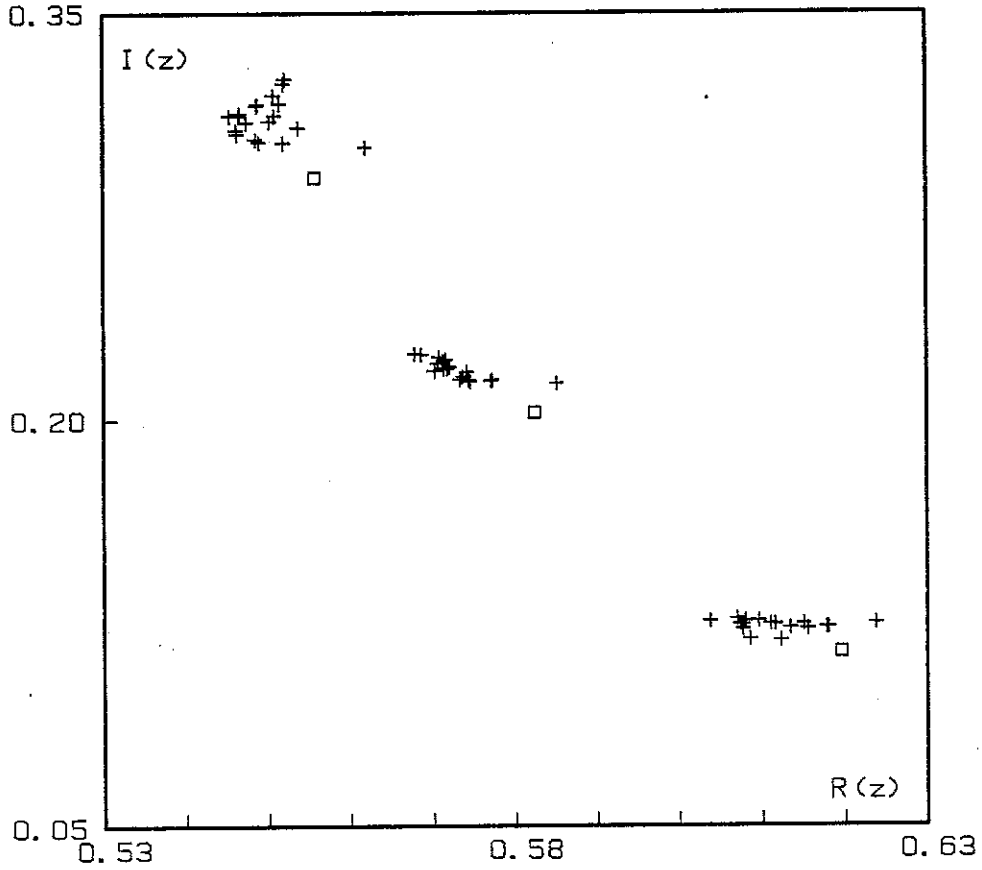


FIGURE 3

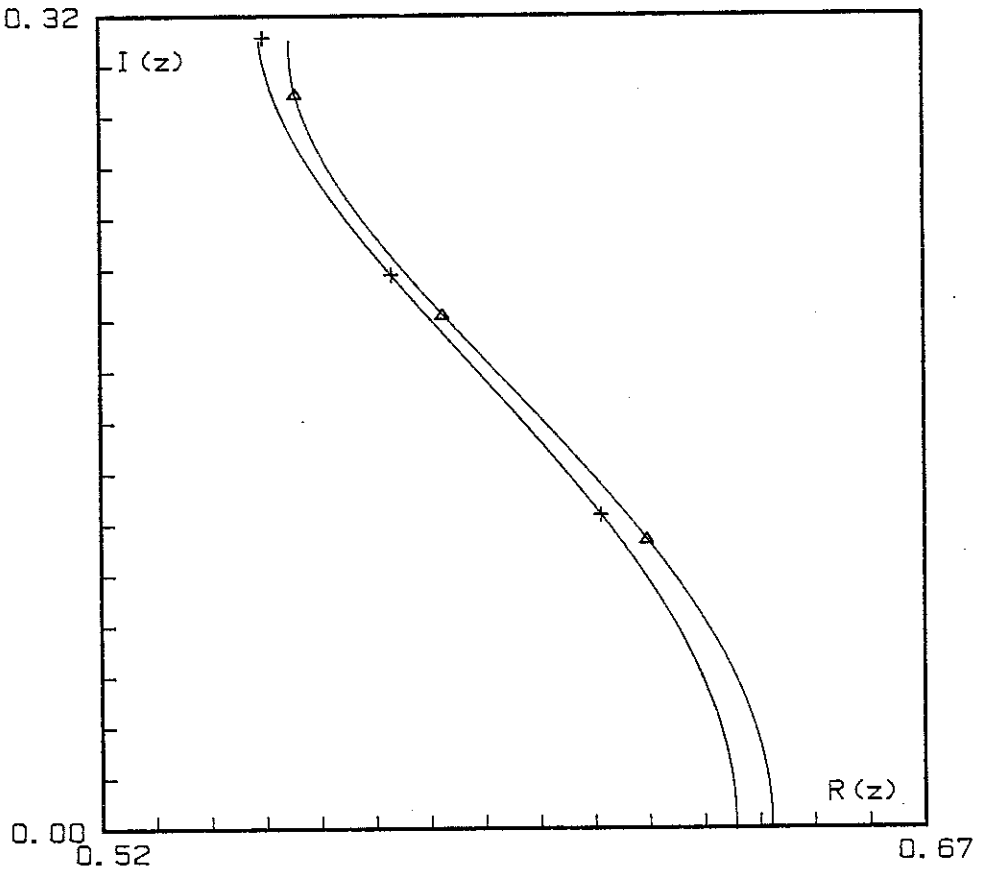


FIGURE 4

A P P E N D I C E

EXEMPLE DETAILLE D'UN ALGORITHME DE MONTE-CARLO ECRIT EN ASSEMBLEUR

Toute l'efficacité d'un programme très simple comme celui que nous allons décrire ici réside dans le mode d'adressage utilisé. Le choix du meilleur mode d'adressage dépend beaucoup de l'ordinateur utilisé. Nous présentons un exemple pour assembleur 68000.

Le choix du modèle suivant est bien adapté à une programmation efficace :

i) un nombre de spin $N = L^3$ de la forme $N = 2^n$ $n \leqslant 16$.

ii) les voisins du spin i sont les spins $i-L^2$, $i-L$, $i-1$, $i+1$, $i+L$, $i+L^2$. Ceci correspond à des conditions de bords "twistées" (les sites 0 à L-1 et L^3-L^2 à L^3-1 sont représentés deux fois).

iii) les champs locaux aléatoires sont +H ou -H.

Une première procédure, appelée seulement une fois, et donc écrite en langage évolué calcule le tableau des probabilités de 32 entiers non signés.Ce tableau est pointé par un registre d'adresses que l'on appellera APR. Un deuxième tableau de N octets pointé par un registre d'adresses appelé ASPI contient les spins et les champs. La représentation (champs et spins) est la suivante. Le bit numéro un (le bit le moins signifiant ayant pour numéro zéro) représente le spin S. Le bit numéro quatre représente le champ H et les autres bits sont mis à zéro. Un octet sera donc de la forme 00H000S0. La macro appelée HAS charge le registre de données, appelé DHAS, avec un nombre de 32 bits. Les 16 bits de poids forts représentent un entier non signé entre 0 et $2^{16}-1$ pour décider du retournement. Par contre, les 16 autres bits de poids faibles représentent <u>directement</u> un entier entre 0 et N-1 pour choisir au hasard le spin à envisager. Il y aura donc un <u>seul</u> appel à cette macro par pas d'algorithme, et l'on n'a pas besoin d'un masque. Un registre d'adresses dit AAUX ainsi qu'un registre de données dit DAUX sont aussi nécessaires. Un pas d'algorithme est alors :

	Instruction			Nombre de cycles	Commentaires
	HAS		, AAUX	24	Macro de nombre au hasard
	movea·ℓ	ASPI	, DAUX	4	
	move·ℓ	DHAS	, AAUX	4	
	Adda·W	DAUX	, DAUX	8	AAUX pointé sur le spin traité
	move·b	(AAUX)	, DAUX	8	
	ror·b	# 1	, DAUX	8	
	add·b	-1(AAUX)	, DAUX	4+4	
	add.b	1(AAUX)	, DAUX	4+4	
	add.b	-L(AAUX)	, DAUX	4+4	
	add.b	L(AAUX)	, DAUX	4+4	
	add.b	$-L^2$(AAUX)	, DAUX	4+4	
	add.b	L^2(AAUX)	, DAUX	8	DAUX = offset pour le tableau PR
	andi.W	# SOOME		4	
	Swap	DHAS		4+10	comparaison pour décision
	Cmp.w	0(APR,DAUX.W),	DHAS	10	
	Bcc.s	SPINUP		10	
	Bset	# 1	, (AAUX)	10	
	Bra.s	FIN		10	
SPINUP	BTCLR	# 1	, (AAUX)	10	
FIN				170 cycles de base	

Un pas d'algorithme dure en moyenne 170 cycles de base. Donc avec une horloge à 12,5 MHz un pas d'algorithme dure

170 x 80 = 13 600 nanosecondes = 13,6 µs.

REFERENCES du CHAPITRE III

ADL : J. ADLER
J. PHYS. A 16 3565 (1983)

AHA(a) : A. AHARONY Y. IMRY S.K. MA
PHYS. REV. LETT. 37 1367 (1976)

AHA(b) : A. AHARONY
PHYS. REV. B 18 7 3318 (1978)

AZB : G. AZBEL
PHYS. REV. A 20 1671 (1979)

BAR : M.BARBER R. PEARSON D. TOUSSAINT J. RICHARDSON
PHYS. REV. B 32 3 P17 (1985)

BAX : R.J. BAXTER
EXACTLY SOLVED MODELS IN STATISTICAL MECHANICS
ACADEMIC PRESS (1982)

BEL : D.P. BELANGER S.M. REZENDE A.R. KING V. JACCARINO
J. APPL. PHYS. 57 (1) 3294 (1985)

BIN(a) : K. BINDER
Z. PHYS. B 50 343 (1983)

BIN(b) : K. BINDER
Z. PHYS. B 43 119 (1981)

BIN(c) : K. BINDER
J. OF COMP. PHYS. 59 1 (1985)

BIN(d) : K. BINDER
MOTE-CARLO METHODS IN STATISTICALS PHYSICS
SPRINGER-VERLAG BERLIN HEIDELBERG NEW-YORK (1979)

BIR : R.J. BIRGENEAU R.A. COWLEY G. SHIRANE H. YOSHIZAWA
JOURNAL OF STAT. PHYS. 34 5/6 (1984)

BRA : A.J. BRAY M.A. MOORE
J. PHYS. C 18 927 (1985)

BRG : U. BRANDT W. GROSS
Z. PHYSIK B 31 237 (1978)

BRU : R. BRUINSMA G. AEPPLI
PHYS. REV. LETT. 50 19 1494 (1983)

CHA : CHALKER
J. PHYS. C 16 6615 (1983)

DER(a) : B. DERRIDA Y. SHNIDMAN
J. PHYS. LETT. PARIS 45 L577 (1984)

DER(b) : B. DERRIDA J. VANIMENUS Y. POMEAU
J. PHYS. C 11 4749 (1978)

FER : J.F. FERNANDEZ G. GRINSTEIN Y. IMRY S. KIRKPATRICK
PHYS. REV. LETT. 51 3 203 (1983)

FIS(a) : M.E. FISHER N. BARBER
PHYS. REV. LETT. 28 1516 (1972)

FIS(b) : M.E. FISHER
IN "CRITICAL PHENOMENA" (M.S. GREEN ED)
ACADEMIC PRES NEW-YORK (1971)

FIS(c) : D.S. FISHER J. FROHLICH T. SPENCER
J. STAT. PHYS. 34 5/6 863 (1984)

FIS(d) : D. S. FISHER
PREPRINT

FIS1 : S. FISHMAN A. AHARONY
J. PHYS. C 12 L729 (1979)

GLA : R.J. GLAUBER
J. MATH. PHYS. 4 294 (1963)

GRI(a) : G. GRINSTEIN S.K. MA
PHYS. REV. LETT. 49 9 685 (1982)

GRI(b) : G. GREINSTEIN S.K. MA
PHYS. REV. B 28 2588 (1983)

GRI(c) : G. GRINSTEIN
PHYS. REV. LETT. 37 944 (1976)

GRI(d) : G. GRINSTEIN
J. APPL. PHYS. 55 6 2371 (1984)

GRI(e) : G. GRINSTEIN D. MUKAMEL
PHYS. REV. B 27 7 4503 (1983)

HAL : C.K. HALLL A.I. SHIRLEY P.S. SAHNI
PHYS. REV. LETT. 53 13 1236 (1984)

IMB : J. Z. IMBRIE
PHY. REV. LETT. 53 18 1747 (1984)

IMR(a) : Y. IMRY S.K. MA
PHYS. REV. LETT. 35 1399 (1975)

IMR(b) : Y. IMRY
JOURNAL OF STAT. PHYS. 34 5/6 849 (1984)

ISI : E. ISING
Z. PHYSIK 31 235 (1925)

JAC(a) : L. JACOBS M. NAUENBERG
PHYSICA 128 A 529 (1984)

JAC(b) : L. JACOBS N. REBBI
J. OF COMP. PHYS. 41 203 (1981)

JACC : V. JACCARINO A.R. KING D.P. BELANGER
J. APPL. PHYS. 57 (1) (1985)

KIN : A.R. KING V. JACCARINO M. MOTOKAWA K. SUGIYAMA M. DATE
J.APPL. PHYS. 57 (1) (1985)

KLE : M.W. KLEIN
J. PHYS. F 7 9 267 (1977)

KOG : H.S. KOGON D.J. WALLACE
J. PHYS. A : MATH. GEN. 14 527 (1981)

LAC : P. LACOUR-GAYET G. TOULOUSE
J. PHYS. PARIS 35 425 (1974)

LAN : D.P. LANDAU H.H. LEE W. KAO
J. APPL. PHYS. 49 (3) 1356 (1978)

LAR : A.I. LARKIN
SOV. PHYS. JETP 31 784 (1970)

LEE : T.D. LEE C.N. YANG
PHYS. REV. 87 410 (1952)

MAH : J,V. MAHER W.I. GOLDBURG D.W.POHL M. LANZ
PHYS. REV. LETT. 53 1 60 (1984)

MAT : D.C. MATTIS
PHYS. LETT. 56 A 421 (1976)

MET : N. METROPOLIS A.W. ROSENBLUTH M.N. ROSENBLUTH
A.H. TELLER E.TELLER
J. CHEM. PHYS. 21 1087 (1953)

MOR : J. MORGERNSTERN K. BINDER R.N. HORNREICH
PHYS. REV. B 23 1 287 (1981)

MUK : D. MUKAMEL E. PYTTE
PHYS. REV. B 25 7 4779 (1982)

NAT : T. NATTERMANN
Z. PHYS. B 54 247 (1984)

OGI : A.T. OGIELSKI D.A. HUSE
PREPRINT (1985)

ONS : L. ONSAGER
PHYS. REV 65 117 (1944)

PAR : G. PARISI N. SOURLAS
PHYS. REV. LETT. 43 11 744 (1979)

PUM : M. PUMA J.F. FERNANDEZ
PHYS. REV. B 18 3 1391 (1978)

PYT : E. PYTTE Y. IMRY D.MUKAMEL
PHYS. REV LETT. 46 18 1173 (1981)

RAM : R. RAMMAL
THESE GRENOBLE (1981)

SAX : V. SAXENA
PHYS. REV. B 30 7 4034 (1984)

SCH : T. SCHNEIDER E. PYTTE
PHYS. REV. B 15 3 1519 (1977)

SWE : R.H. SWENDSEN
PHYS. REV. B 20 5 2080 (1979)

TOU : G. TOULOUSE
COMM. ON PHYSICS 2 115 (1977)

VIL(a) : J. VILLAIN
J. PHYS. PARIS 43 L551 (1982)

VIL(b) : J. VILLAIN B. SEMERIA F. LANCON L. BILLARD
J. PHYS. C 16 6153 (1983)

VIL(c) : J. VILLAIN
A PARAITRE IN "SCALING PHENOMENA IN DISORDERED SYSTEM"
PLENUM (1985)

VIL(d) : J. VILLAIN
J. PHYS. LETT. PARIS 46 1843 (1985)

YAN : C.N. YANG T.D. LEE
PHYS. REV. 87 404 (1952)

YOU(a) : A.P. YOUNG
J. PHYS. C 10 257 (1977)

YOU(b) : A.P. YOUNG M. NAUENBERG
PHYS. REV. LETT. 54 22 2429 (1985)

ARTICLES SUPPLEMENTAIRES

Tome 46 N° 20 15 OCTOBRE 1985

LE JOURNAL DE PHYSIQUE - LETTRES

J. Physique Lett. **46** (1985) L-945-L-952 15 OCTOBRE 1985, PAGE L-945

Classification
Physics Abstracts
02.70 — 05.20 — 05.50

On the degree of ultrametricity

R. Rammal, J. C. Angles d'Auriac and B. Doucot

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS,
B.P. 166 X, 38042 Grenoble Cedex, France

(*Reçu le 17 juillet 1985, accepté le 30 août 1985*)

Résumé. — La notion de degré d'ultramétricité $\mathfrak{D}$ d'un espace métrique donné est introduite à partir de l'ultramétrique sous-dominante. On décrit une procédure simple et efficace pour le calcul de $\mathfrak{D}$. On montre que $\mathfrak{D}$ fournit une mesure quantitative simple de la déviation par rapport à l'ultramétricité exacte. Cette notion est illustrée pour des exemples explicites et nous suggérons son intérêt dans les modèles de mécanique statistique ainsi que les problèmes d'optimisation combinatoire.

Abstract. — Using the notion of the subdominant ultrametric, the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}$ of a given metric space (e.g. phase space) is introduced. A simple and efficient method for the calculation of $\mathfrak{D}$ is outlined. $\mathfrak{D}$ is shown to provide a simple quantitative measure of the deviation from exact ultrametricity. Explicit examples are used to illustrate this notion which is argued to be of some interest in statistical-mechanical models and combinatorial optimization problems.

1. Introduction.

During the past few years, a considerable amount of work has been done in the study of spin glass models. In particular, it has been suggested [1] that configuration space of pure states is endowed with a non-trivial ultrametric structure [2]. This suggestion has been checked numerically by various authors [3] for different spin glass models. The same kind of configuration space analysis has also been carried out for some combinatorial optimization problems [4]. In both cases, the direct method of the statistics of triangles has been used in order to check the ultrametricity of configuration spaces. In finite spin models for instance, a finite set of representative configurations is used to perform such an analysis usually. A further step in that direction would be a quantitative measure of the degree of ultrametricity of a given configuration space. The control of finite size effects is just an example of a practical use of such notion. Actually, the ultrametric inequality [5] is so stringent (all triangles are either isosceles with a small base or equilateral) that the modification of one spin configuration only may result in the loss of this property.

This may occur for instance in spin models because of thermal fluctuations which lead to fluctuating distances. Whereas at zero temperature the search for ultrametricity in the whole set of ground states is actually altered by finite size effects.

In this paper, we present a new method for the measurement of the degree of ultrametricity of a given configuration space. This method is a very general one and can be used in various contexts. The basic ingredient is the notion of the subdominant ultrametric. This concept, widely used in Taxonomy [6] is recalled in the next section. In order to be self-contained, the main properties of subdominant ultrametrics will be summarized in that section. A simple and efficient method for the calculation of the degree of ultrametricity, for a given metric space, is outlined. Illustrative examples are the object of the remaining part of the paper.

2. The subdominant ultrametric.

First we define the problem and recall some basic results. Let us consider a finite metric space (Ω, d), where the distance between $x \in \Omega$ and $y \in \Omega$ is denoted by $d(x, y)$. In order to measure the degree of ultrametricity of (Ω, d) one asks for an ultrametric denoted (UM hereafter) d', defined on Ω such as d' is the closest UM to d. This naturally defines an optimization problem on the set U of ultrametrics defined on Ω. The pertinent formulation of such a problem suffers actually from two intrinsic difficulties. The first one is the choice of the measure of proximity of two metrics d and d' on Ω. The second one is the problem of unicity of d'. An elegant and simple solution, but still a partial one, is provided by the notion of the subdominant ultrametric.

Formally, the subdominant UM associated with d can be defined as follows. Note first that the whole set of metrics, defined on Ω, can actually be ordered in a natural way, as :

$$d' \leqslant d \Leftrightarrow d'(x, y) \leqslant d(x, y) \quad \text{for all} \quad (x, y) \in \Omega \times \Omega .$$

Consider now the set $U^< = \{ d' \in U \mid d' \leqslant d \}$ of the ultrametrics on Ω which are smaller than d. The maximal element $d^<$ of $U^<$ exists and can be shown to be unique [6]. The ultrametric $d^<$ so defined is called the subdominant UM associated with d. Note that the restriction $d' \leqslant d$ in the search for $d^<$ is a very important condition, insuring the unicity of $d^<$. In this respect, it is important to notice that the minimal element of $U^< = \{ d' \in U \mid d' \geqslant d \}$ is not uniquely defined. Before describing a simple method for the construction of $d^<$, let us mention two important properties of $d^<$.

i) *Optimality.* — Assume that the proximity Δ of two metrics d and d' is measured by the Minkowski distance :

$$\Delta_\infty(d, d') = \operatorname*{Max}_{x, y \in \Omega} | d(x, y) - d'(x, y) |$$

or

$$\Delta_\alpha(d, d') = \left[\sum_{x, y \in \Omega} | d(x, y) - d'(x, y) |^\alpha \right]^{1/\alpha}, \qquad \alpha > 0 .$$

Then, among all the elements of $U^<$, $d^<$ is the only ultrametric for which $\Delta_\infty(d, d')$ and more generally $\Delta_\alpha(d, d')$ assume their minimal values [7].

ii) *Stability.* — If d is transformed into λd $(\lambda > 0)$, i.e. : $d(x, y) \to \lambda d(x, y)$, $x \in \Omega$, $y \in \Omega$, then $\lambda d^<$ is the subdominant ultrametric associated with λd. More generally, this stability property remains true when d is transformed into $\varphi(d)$ where φ denotes a positive non-decreasing function such that $\varphi(a + b) \leqslant \varphi(a) + \varphi(b)$, $a \geqslant 0$, $b \geqslant 0$.

Given the metric d on Ω, there are different methods [8] for the construction of $d^<$. In what follows, we shall describe a simple procedure giving $d^<$ in a very transparent way : the minimal

spanning tree construction method. We shall outline briefly the main step of this construction using a graph theoretic language. To a given metric space (Ω, d) corresponds a simple, undirected graph whose vertices are the elements of Ω. A length $d(x, y)$ is assigned to each edge (x, y). The basic step for obtaining $d^<$ is the construction of a minimal spanning tree (MST) on the connected graph structure so obtained. Recall [9] that MST refers to a tree A, having the same vertices as Ω, but of minimal total length. Note that A may not be uniquely defined and more than one MST can be constructed on Ω. However, despite this possible non unicity of A, $d^<$ as obtained below, is unique and does not depend on the particular choice of A. Having a MST on Ω, the distance $d^<(x, y)$ between two elements x and y in Ω is given by :

$$d^<(x, y) = \text{Max} \{ d(w_i, w_{i+1}), 1 \leqslant i \leqslant n - 1 \}$$

where $(w_1 = x, w_2), (w_2, w_3), \ldots, (w_{n-1}, w_n = y)$ are the $n - 1$ successive edges of the unique chain between x and y on the tree. This defines precisely the subdominant ultrametric $d^<$.

A very simple procedure for constructing a MST on Ω is provided by Kruskal's algorithm [9] which can be summarized as follows. Start with $A = \varnothing$ (the empty set) and order the set of distances $d(w_i, w_j)$ of Ω in increasing order. Each distance $d(w_i, w_j)$ is associated with an edge (w_i, w_j) on the graph of Ω. Put in A the first edge of the list. Next edges in the list are then added successively to A, such as to avoid the formation of cycles with edges already present in A. This procedure will stop after $|\Omega| - 1$ steps, giving a MST on Ω and then $d^<$. Schematic examples are shown in figures 1 and 2.

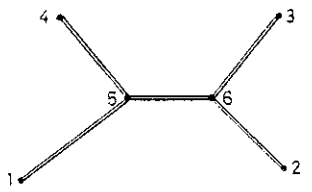


Fig. 1. — A schematic example of $\Omega = \{ 1, 2, 3, 4, 5, 6 \}$ showing a minimal spanning tree (MST), represented by double lines, used in the construction of the subdominant ultrametric $d^<$. For instance, $d^<(1, 2) = \text{Max} \{ d(1,5), d(5,6), d(6,2) \}$, $d^<(2,3) = \text{Max} \{ d(2,6), d(6,3) \}$.

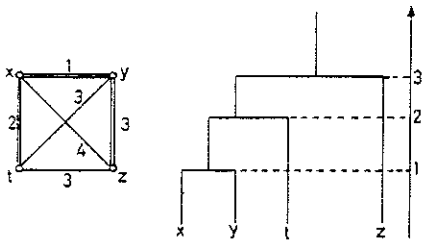


Fig. 2. — Example of a metric space (Ω, d), $\Omega = \{ x, y, z, t \}$ with the associated hierarchy defined by $d^<$. Double lines denote the edges of a MST on Ω. In this example, the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}$ of (Ω, d) is given by $\mathfrak{D} = 1 - \frac{14}{16} = \frac{1}{8}$.

3. Degree of ultrametricity. Example.

How can we define and measure a degree of ultrametricity for a metric space (Ω, d) which is not exactly ultrametric ? What is the « minimal distortion » of d in order to become an ultrametric ? One possible answer to these questions is actually provided by the direct comparison of d with $d^<$. A measure of the proximity of d and $d^<$ will be given for instance by one of the Minkowski's distances Δ_α defined above. For the sake of simplicity, the following expression for the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}$, or relative distortion, will be used :

$$\mathfrak{D} = \sum_{x,y \in \Omega} (d(x, y) - d^<(x, y))/ \sum_{x,y \in \Omega} d(x, y) . \tag{1}$$

Here d is the input metric on Ω and $d^<$ is the ultrametric characterizing the output hierarchy on Ω. In general, $\mathfrak{D}$ is such that $0 \leqslant \mathfrak{D} \leqslant 1$, and vanishes if d is initially an ultrametric ($d^< = d$). $\mathfrak{D}$ as defined by equation (1) provides actually a quantitative measure of the degree of ultrametricity of (Ω, d). Small values of $\mathfrak{D}$ indicate that d is not very far from being ultrametric, this being realized through a slight distortion of d. Whereas values of $\mathfrak{D}$ close to one tell us that large distortions of d are actually needed in order to transform d into an ultrametric.

EXAMPLE. — A simple class of examples, where the construction of a MST is trivial, is provided by $\Omega = \{ x_1, x_2, ..., x_n \}$ where x_i denotes n points on the real line. The distance $d(x_i, x_j) = | x_i - x_j |$ is the Euclidean distance. In the particular case, where $x_i = i$ $(1 \leqslant i \leqslant n)$, the subdominant ultrametric $d^<$ reduces to the trivial ultrametric $d^<(x_i, x_j) = 1$: all triangles are equilateral. For this example, $\mathfrak{D} = 1 - 3/(n + 1) \sim 1$ at large n, in perfect agreement with the intuitive expectation : Euclidean spaces are far from being ultrametric spaces. This conclusion is not modified when $\Omega = \{ x_1, x_2, ..., x_{n+1} \}$ corresponds to $(n + 1)$ randomly chosen points on the real line. Indeed, let us denote by $X_1 \leqslant X_2 \leqslant \cdots \leqslant X_{n+1}$ the corresponding ordered sequence and let $L_k = X_{k+1} - X_k$, $k = 1, 2, ..., n$, be the length of the interval $[X_k, X_{k+1}]$. Then a simple calculation leads to the following expression for $\mathfrak{D}$: $\mathfrak{D} = 1 - S'/S$, where $S = \sum_{k=1}^{n} k(n + 1 - k) L_k$ and $S' = \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=k}^{n} \mathrm{Max}(L_k, ..., L_l)$ respectively. Assuming that the L_k s are n independent random variables having a probability density $p(L) = \mathrm{d}F/\mathrm{d}L$, then the average deviation from d to $d^<$ takes the following form : $\langle S - S' \rangle = \sum_k (n + 1 - k)(k \langle L \rangle - \mu_k)$. Here $\langle L \rangle = \int L \, \mathrm{d}F(L)$ and μ_k is the average value of $\mathrm{Max}(L_1, ..., L_k)$. For non-singular $p(L)$, $\langle S \rangle \sim n^3$ $(n \gg 1)$ and $\langle S' \rangle$ can also be calculated : $\langle S' \rangle \sim n^2$ for uniform $p(L)$, $\langle S' \rangle \sim n^2 \ln(n)$ for exponential $p(L)$, etc. In all these cases, as well as for other variants (e.g. different probability distribution for $\{ x_i \}$) of this example, one has $\mathfrak{D} \sim 1$ at large n, as anticipated above.

4. Explicit example.

A more suggestive example is given by the set of B-bit words. As a space Ω we shall consider a subset consisting of M words, randomly taken among the whole set of $V \equiv 2^B$ possible B-bit words. The elements of Ω can be viewed as spin configurations of a system consisting of B Ising spins. The set of 2^B words represents the vertices of the elementary Euclidean hypercube in B dimensions. The distance (Hamming) between two words will be defined by : $d(x, y) = \sum_{i=1}^{B} | x_i - y_i |$, for $x = (x_1, x_2, ..., x_B)$, $y = (y_1, y_2, ..., y_B)$ in Ω, $x_i \in \{ 0, 1 \}$, $y_i \in \{ 0, 1 \}$. The relevant questions are the following : How does the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}_B(x)$ behave as a function of B and the filling factor $x = M/2^B$? What is the asymptotic behaviour $(B \gg 1)$ of $\mathfrak{D}_B(x)$?

4.1 General features. — The following two limits are easy to understand. The first one corresponds to $x = 1$, i.e. $M = 2^B$. In this limit, $d^<$ is trivially given by $d^<(x, y) = 1$ and $\mathfrak{D}_B(1) = 1 - 2/B$. The second limit corresponds to a small number of words : $x \ll 1$. For instance, at $M = 3$, the probability distribution of the triangle sides is binomial, with an average $d(x, y) \sim B/2$ and a variance $\sigma \sim B$. This leads to $\mathfrak{D}_B(x \ll 1) \sim B^{-1/2}$ showing that, in spaces with large B, almost all triangles are equilateral and ultrametricity is obtained in a rather natural way.

For a fixed B, the function $\mathfrak{D}_B(x)$ is expected to increase uniformly with x, in order to interpolate between these two limits. The limiting behaviour at $B = \infty$ is a trivial one, with $\mathfrak{D}_\infty(x) = 0$ for $x = 0$ and $\mathfrak{D}_\infty(x) = 1$ for $x \neq 0$. This is easily understood because, for a given $x = M/2^B$, $\mathfrak{D}_B(x)$ must be an increasing function of B. In fact assume that $B \to B + 1$ and M is doubled. The new $2M$ words, having each one more bit (the last one) can be obtained from the previous M ones, by adding 0 or 1 as a new bit. This is not so restrictive an assumption, and the new hierarchy can be deduced from the one previously known. Indeed, one can show :

$$\mathfrak{D}_{B+1}(x) = 1 - [4 \sum d^<(i, j) + M]/[4 \sum d(i, j) + M^2]$$

which implies $\mathfrak{D}_{B+1}(x) > \mathfrak{D}_B(x)$, at least for large M. Here the sums are taken over the set of couples (i, j) in Ω.

4.2 Numerical study. — The degree $\mathfrak{D}_B(x)$ has been calculated numerically, in the whole interval $0 \leqslant x \leqslant 1$, for different values of B : $8 \leqslant B \leqslant 160$. Typical results are shown in figures 3 and 4. Instead of a smoothly behaved function, $\mathfrak{D}_B(x)$ actually exhibits a staircase behaviour. Already for small B ($B \sim 10$), $\mathfrak{D}_B(x)$ is characterized by jumps between « quantized » values : $1 - 2\,k/B\,(k \geqslant 1)$, the stairs are stable (small fluctuations from sample to sample) and the jumps become sharper and sharper when B increases and appear at very precise values of x. For small

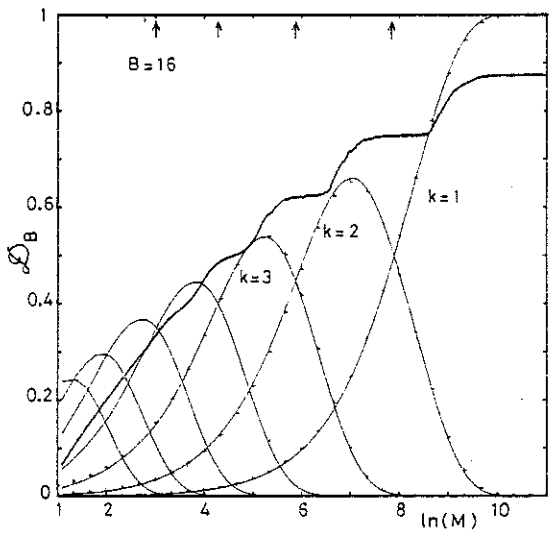


Fig. 3. — Step-like behaviour (heavy solid line) of the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}_B(x)$, calculated for 500 samples of M words ($B = 16$). The probability distribution P_k for the nearest-neighbour distances is shown for different values of k. Solid lines represent the calculated distributions whereas points (+) reproduce the expression given in the text (Eq. (2)). Arrows indicate the centres of stairs defined by $P_k = P_{k-1}$.

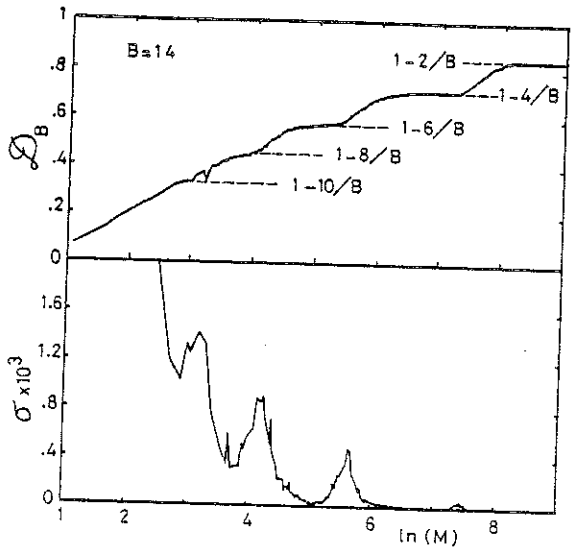


Fig. 4. — The same $\mathcal{D}_B(x)$ as in figure 3, for $B = 14$. The lowest part shows the variance σ of the same quantity calculated for 500 samples.

values of x, $\mathcal{D}_B(x)$ becomes smooth, due to finite size effects and for large x, $\mathcal{D}_B(x)$ ends with a stair corresponding to the expected value $\mathcal{D}_B(x) = 1 - 2/B$. Each jump between two stairs is actually accompanied with a large increase of the magnitude of sample to sample fluctuations. This is clearly shown in figure 4, where the calculated variance σ is shown together with $\mathcal{D}_B(x)$ for $B = 14$.

This behaviour is actually obtained for larger values of B, where an increasing number of robust stairs and sharp jumps appear. This picture becomes clearer for increasing B with the appearance of successive plateaus. These jumps are reminiscent of instability phenomena and, as will be shown below, the robust stairs can be viewed as coexistence regions.

4.3 GEOMETRICAL PICTURE. — The obtained behaviour of $\mathcal{D}_B(x)$ can be understood by keeping in mind the MST construction method and the sphere coverage problem [10]. Using the representation of Ω as a part of the B-dimensional hypercube, it is useful to consider each element of Ω as the centre of a k-sphere, having a radius equal to an integer k ($1 \leqslant k \leqslant B/2$). This defines a neighbour for each point in Ω, containing $w_k = \sum_{i=0}^{k} \binom{B}{i}$ points of the hypercube. The coverage problem of the hypercube is the following. For M randomly chosen centres and a given value of k, find the probability p_M for a complete coverage with the Mk-spheres. Clearly, $p_M \leqslant 1 - (1 - w_k/2^B)^M$, and for large M but small $w_k/2^B$, $p_M \lesssim 1 - \exp(-x.w_k)$. As will be shown below, the particular values of x, $x_k \sim 1/w_k$ are called to play a key role in the behaviour of $\mathcal{D}_B(x)$.

Now consider the probability distribution of the nearest-neighbour distances in Ω, as a function of M and B. In fact, the structure exhibited by $\mathcal{D}_B(x)$ turns out to be intimately related to that probability distribution. Given a point in Ω, the probability that all the $M - 1$ other points are at a distance strictly larger than k is given by : $\pi_k \sim (1 - w_k/2^B)^{M-1}$. This expression becomes accurate when the overlap between the k-spheres is negligible. Therefore, the probability distri-

bution for the nearest-neighbour distances is given by

$$P_k \equiv \pi_{k-1} - \pi_k = (1 - w_{k-1}/2^B)^{M-1} - (1 - w_k/2^B)^{M-1} . \tag{2}$$

This expression is shown in figure 3, for different values of k ($k \geqslant 1$). The numerical results, for different values of k, M and B follow equation (2) and small deviations are obtained for large k and small x.

The first stair at $1 - 2/B$ actually corresponds to a close packing configuration, where the hypercube is covered, with a probability ~ 1, by 1-spheres. Indeed, a simple calculation, giving the corresponding MST, leads to $\mathfrak{D}_B(x) = 1 - 2/B$ in that region. This stair ends up at a value of M (see below) given by $M/2^B \sim 1/w_1$, i.e. $x \sim 1/(B + 1)$.

For each value $k \geqslant 2$, P_k assumes its maximal value at $x = \alpha_k$, where almost all nearest-neighbour distances are equal and the hypercube is almost surely covered by k-spheres. These values of the filling factor are associated with the unstability of regular hierarchies and give the positions of the jumps. Indeed, adding (or removing) few points in Ω results in a strong modification of the hierarchy, making $\mathfrak{D}_B(x)$ have a sharp jump. Large fluctuations occur in the neighbourhood of $x = \alpha_k$, because of this unstability in the hierarchy associated with subdominant ultrametrics.

The centres of stairs can also be calculated from the condition : $P_k = P_{k-1}$. Indeed, for such values x_k defined by this condition, the two distances k and $k - 1$ are equiprobable and are the most probable ones. A simple calculation leads to $x_k \sim 1/w_k$ which becomes an exact expression at $2 \leqslant k \ll B/2$, ang gives the centres of the first stairs. For these values of x, one can show that $\mathfrak{D}_B$ is given by : $1 - 2\,k/B$, $k \geqslant 2$, in perfect agreement with numerical calculations. A simple parametrization of $\mathfrak{D}_B(x)$ is then given by

$$\begin{aligned} x_k &= 1/\sum_{i=0}^{k-1} \binom{B}{i}, \qquad k = 2, 3, \ldots \quad \text{(centres of the stairs)} \\ \mathfrak{D}_B(x_k) &= 1 - 2\,k/B \qquad\qquad\qquad \text{(height of the stairs)} . \end{aligned} \tag{3}$$

Note that, close to x_k, adding or removing a few points in Ω does not modify the hierarchy in an appreciable way, leading to the appearance of robust stairs. The result of equation (3) becomes more and more accurate at large B and for $k \ll B/2$. For $x \ll 1$, however, some deviations occur for various reasons. Beside trivial finite size effects, the most important source of deviations is the broadening of the probability distribution of nearest-neighbour distances. Indeed, at $x \ll 1$, different values of these distances (Fig. 3) become equiprobable, and lead to a fluctuation of distances of order $B^{1/2}$. Such fluctuations result in an overestimation of $\mathfrak{D}_B(x)$ at small x, as given by equation (3).

5. Conclusion.

Our main conclusions are summarized in the introduction of this paper. The degree of ultrametricity $\mathfrak{D}$, as introduced in this paper, may provide some insight in the geometrical structure of phase spaces. This is clearly shown in the worked example of section 4. It would be useful to extend such an analysis of the subdominant ultrametric, and the measure of the degree of ultrametricity $\mathfrak{D}$ to specific statistical-mechanical models or combinatorial optimization problems.

References

[1] MÉZARD, M., PARISI, G., SOURLAS, N., TOULOUSE, G., VIRASORO, M. A., *J. Physique* **45** (1984) 843.
TOULOUSE, G., *Helv. Phys. Acta* **57** (1984) 459.

[2] See for instance BOURBAKI, N. : « Eléments de Mathématique », chap. 9, *Topologie générale*, p. 91. Nouvelle édition 1974 (Diffusion CCLS, Paris).

[3] PARGA, N., PARISI, G., VIRASORO, M. A., *J. Physique Lett.* **45** (1984) 1063.
SOURLAS, N., *J. Physique Lett.* **45** (1984) 969.
LALLEMAND, P., DIEP, H. T., GHAZALI, A., TOULOUSE, G. (1985) Preprint.

[4] BACHAS, C. P., *Phys. Rev. Lett.* **54** (1985) 53.
KIRKPATRICK, S., TOULOUSE, G., *J. Physique* **46** (1985) 1227.

[5] Recall that ultrametrics refer to metric spaces where the known triangle inequality : $d(x, y) \leqslant d(x, z) + d(z, y)$ is replaced by the strongest condition $d(x, y) \leqslant \text{Max}\,(d(x, z), d(z, y))$. Note that these two inequalities are actually particular cases of the generalized triangle inequality : $d(x, y) \leqslant [d(x, z)^r + d(z, y)^r]^{1/r}$, where $r > 0$ denotes a real number. Metric spaces correspond to $r = 1$ and $r = \infty$ reproduces the ultrametric inequality.

[6] BENZECRI, J. P., *L'analyse des données : la taxonomie*, tome 1 (Dunod, Paris) 1980, 3e édition.
JARDINE, N. and SIBSON, R., *Mathematical Taxonomy* (J. Wiley and Sons Ltd, London, New York) 1971.

[7] JARDINE, C. J., JARDINE, N. and SIBSON, R., *Math. Biosci.* **1** (1967) 173.
JARDINE, N. and SIBSON, R., *Math. Biosci.* **2** (1968) 465 ; *Comput. J.* **11** (1968) 177.

[8] For an excellent review, see MARTAGH, F., *Comput. J.* **26** (1983) 354.

[9] PAPADIMITRIOU, C. H. and STEIGLITZ, K., *Combinatorial Optimization* (Prentice Hall) 1982.

[10] See for instance SOLOMON, H., *Geometric probability* (Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia 1978.

J. Phys. C: Solid State Phys., 16 (1983) 3933–3946. Printed in Great Britain

Superconducting diamagnetism near the percolation threshold: numerical study

R Rammal†‡ and J C Angles d'Auriac‡

† Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale Supérieure, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France

‡ Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, CNRS, BP 166 X, 38042 Grenoble, France

Received 4 January 1983, in final form 15 February 1983

Abstract. We investigate numerically the magnetic properties of a random superconducting network, which models random superconductor–insulator mixtures. Bonds between nearest-neighbour sites on a square lattice are chosen to be independently superconducting with probability p, and insulating with probability $1-p$. A new numerical method is used to investigate loop statistics in these percolating networks. The diamagnetic susceptibility $\tilde{\chi}$ as a function of the superconducting fraction p is calculated. Close to the percolation threshold p_c, $\tilde{\chi}$ shows a singular behaviour as a function of $(p_c - p)$. The numerical results exhibit a finite-size scaling which enables us to deduce the critical exponent of $\tilde{\chi}$ from calculations on relatively small samples. Our numerical results are in good agreement with the predictions of recent scaling theory and differ from those made by previous workers.

1. Introduction

One important application of the percolation problem (see Stauffer 1979) has been the description of conductivity in random conductor–insulator and conductor–superconductor mixtures (Deutscher 1981). Recently, the diamagnetism of percolating clusters composed of superconducting grains has been discussed by many authors. The diamagnetic susceptibility of a cluster is related to the fraction of grains in connected loops and the effective area of these loops. Close to the percolation threshold, clusters are known to be ramified, and previous studies of the degree of compactness or ramification was limited to the site percolation problem (Domb and Stoll 1977). From this viewpoint, the diamagnetic susceptibility $\tilde{\chi}$ per grain provides a direct measurement of the topological features of the percolation clusters. In addition to $\tilde{\chi}$, an analogue to diamagnetism exists for normal clusters (Stephen 1981), when a time-varying magnetic field is applied. The total dissipation in a given cluster can be expressed in the same terms as $\tilde{\chi}$, which also provides another measurement of the geometrical features of the percolation clusters. The recent revival of interest in the magnetic properties of superconducting networks was inspired by the experiments of Deutscher *et al* (1982). The diamagnetic superconducting currents are viewed as a sensitive tool for studying the topology of network structures. The networks considered fall into three categories: simple finite geometry (Fink *et al* 1982), infinite regular arrays (Rammal *et al* 1983a, b, Alexander 1983) and disordered structures. In the last case, a natural question, first formulated by de Gennes

© 1983 The Institute of Physics

(1981), arises: does $\bar{\chi}$ diverge at the percolation threshold p_c? In this paper, we shall give a positive answer to this question, showing (numerically) that $\bar{\chi}$ diverges in the vicinity of p_c, with an exponent b: $\bar{\chi} \simeq (p_c - p)^{-b}$.

In the § 2, the problem is formulated in a self-contained manner and we give some examples for the calculation of $\bar{\chi}$ on simple geometries. In § 3, we present numerical results for the loop statistics on a percolating network and we compare our results with the available exact ones. Section 4 is devoted to the study of the diamagnetic susceptibility as a function of the concentration p of the superconducting component. In particular, we show that $\bar{\chi}$ exhibits a finite-size scaling law close to p_c, permitting us to find the numerical value of its critical exponent b. The behaviour of $\bar{\chi}$ on both sides of p_c: $p \lesssim p_c$, $p \gtrsim p_c$ and $p \lesssim 1$ are examined as well as the discrepancies with the de Gennes prediction for the value of the exponent b.

2. Diamagnetic susceptibility of a superconducting network

2.1. An illustrative example

In order to introduce our notation, we shall consider first the case of a ring made of superconducting wires of area S and perimeter L. Using the London (linear response) relation between the current density j and the vector potential A, in the London gauge:

$$j = -\frac{c}{4\pi\lambda^2}A$$

where λ is the London penetration length, the diamagnetic current I in a wire of cross sectional area σ is found to be:

$$I = -\frac{\sigma c}{4\pi\lambda^2}\frac{S}{L}H$$

in the presence of a magnetic field H, orthogonal to the plane of the ring. The ring with current I has a total magnetic moment M:

$$M = IS/c$$

and a total magnetic susceptibility:

$$\chi_t = -\frac{\sigma}{4\pi\lambda^2}\frac{S^2}{L}.$$

Defining an effective area

$$S^{\text{eff}} = 4\pi(S/L)^2$$

from the squared ratio of area over length which appears naturally in diamagnetic problems (Tinkham 1975), one obtains for the susceptibility per unit volume of superconducting matter $\bar{\chi}$:

$$-\bar{\chi} = S^{\text{eff}}/(16\pi^2\lambda^2).$$

Note that $\bar{\chi}$ is unitless, as it should be. The last formula shows that $\bar{\chi}$ and S^{eff} carry the same information about the geometry. For this reason, we shall hereafter study S^{eff} instead of $\bar{\chi}$.

2.2. *General expression for S^{eff}*

The above linear response result was generalised by de Gennes (1981) in order to obtain the effective area of a given network, with arbitrary geometry. The diamagnetic response due to finite networks comes only from the networks which contain closed loops. For simplicity, we can then assume that no tree-like 'dead' arms exist on the network (biconnected network). Considered as a planar graph, we choose a fundamental set $\{\alpha\}$ of cycles (elementary loops), denoting the length of the cycle α by l_α and the enclosed area inside this cycle by S_α. We also define the 'loop' matrix $(\mathcal{L})_{\alpha\beta}$ as follows:

$$\mathcal{L}_{\alpha\beta} = l_\alpha \qquad \text{if } \alpha = \beta$$
$$= l_{\alpha\beta} \qquad \text{if } \alpha \neq \beta$$

where $|l_{\alpha\beta}|$ is the length of any part common to cycles α and β. The Maxwell convention is adopted for the signs of the $\mathcal{L}_{\alpha\beta}$ matrix elements: $l_{\alpha\beta} > 0$ if currents in the loops α and β have the same sign on the common part, and $l_{\alpha\beta} < 0$ in the opposite case (see figure 1).

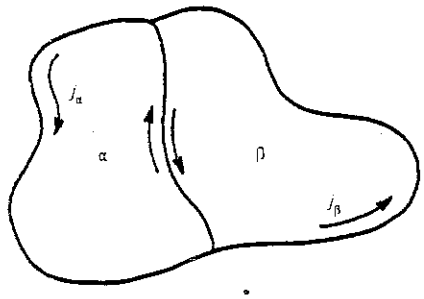


Figure 1. Current patterns in a network of two loops.

In the presence of a magnetic field H, orthogonal to the plane of the network, the total magnetic energy is expressed as

$$E(\{j\}) = \tfrac{1}{2}\sum_{\alpha,\beta} j_\alpha \mathcal{L}_{\alpha\beta} j_\beta - \sum_\alpha j_\alpha \phi_\alpha$$

where j_α is the current around the loop α, and $\phi_\alpha \equiv HS_\alpha$ is the magnetic flux through the same loop. The equilibrium state is given by the condition $\partial E/\partial j_\alpha = 0$ for all α, from which we deduce:

$$E(\{j\}) = -\frac{H^2}{2}\sum_{\alpha,\beta} S_\alpha (\mathcal{L}^{-1})_{\alpha\beta} S_\beta.$$

The expression of the effective area is given as above by:

$$-\tilde{\chi} \equiv \partial^2 E/\partial H^2 = S^{\text{eff}}/4\pi$$

i.e.

$$S^{\text{eff}} = (4\pi/L_{\text{tot}}) \sum_{\alpha,\beta} S_\alpha (\mathcal{L}^{-1})_{\alpha\beta} S_\beta$$

where L_{tot} is the total length of wires in the network, and $\mathcal{L}^{-1}$ is the inverse of the matrix $\mathcal{L}$. This formula, which is an obvious generalisation of that derived above for the ring

geometry expresses S^{eff} as a function of the network topology only. One should also note that S^{eff} is independent of the particular choice of the fundamental set of cycles, and is also valid for general topologies with or without tree-like arms.

2.3. Examples

2.3.1. Pair of plaquettes. Consider a pair of identical plaquettes, shearing a common edge of length l. If we choose these two plaquettes as elementary cycles (figure 2(a)), we obtain

$$S_1 = S_2 = s \equiv l^2$$

$$\mathscr{L}_{11} = \mathscr{L}_{22} = 4l$$

$$\mathscr{L}_{12} = \mathscr{L}_{21} = -l$$

and

$$\mathscr{L} = \begin{vmatrix} 4l & -l \\ -l & 4l \end{vmatrix} \qquad \mathscr{L}^{-1} = \frac{1}{15l^2}\begin{vmatrix} 4l & l \\ l & 4l \end{vmatrix}$$

leading to:

$$S^{\text{eff}}/4\pi = (2/21)\,(s/l)^2.$$

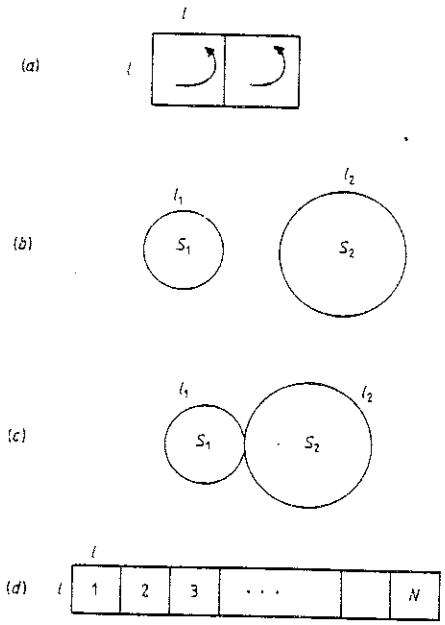


Figure 2. Examples of elementary networks: (a) a pair of identical plaquettes, (b) and (c) two networks with the same effective area, and (d) the ladder network with N identical plaquettes.

The same number is obtained with any other choice of elementary cycles.

2.3.2. Additive property of S^{eff}. The two networks (b) and (c) shown in figure 2 have the same effective area:

$$S^{\mathrm{eff}} = \frac{l_1}{l_1 + l_2} S_1^{\mathrm{eff}} + \frac{l_2}{l_1 + l_2} S_2^{\mathrm{eff}}$$

showing the additive property of the effective area, when weighted properly. This property is very useful when disconnected structures are considered.

2.3.3. Finite regular network. consider a ladder made with N identical plaquettes (figure 2(d)). With a fundamental set of cycles, analogous to that of the example (a) above, one easily obtains:

$$(\mathscr{L}^{-1})_{\alpha\beta} = [2/(N+1)] \sum_{s=1}^{N} (\sin \alpha\phi_s \sin \beta\phi_s)/\lambda_s \qquad 1 \leqslant \alpha, \beta \leqslant N$$

where

$$\phi_s = \pi s/(N+1)$$

and

$$\lambda_s = 4l - 2l \cos[\pi s/(N+1)]$$

denotes an eigenvalue of the matrix $\mathscr{L}$. We deduce:

$$S^{\mathrm{eff}}/4\pi l^2 = \frac{1}{3N+1}\left(\frac{2}{N+1} \sum_{i,j=1}^{N} \sum_{s=1}^{N} \frac{\sin i\phi_s - \sin j\phi_s}{4 - 2\cos\phi_s}\right).$$

The above result can be generalised for a $N \times M$ regular network:

$$S^{\mathrm{eff}}/4\pi l^2 = \frac{1}{2MN + M + N}\left(\frac{1}{(M+1)(N+1)} \times \sum_{s=1}^{N} \sum_{t=1}^{M} \frac{A_s A_t}{4\sin^2[\pi s/2(N+1)] + 4\sin^2[\pi t/2(M+1)]}\right)$$

where

$$A_s = [1 - (-1)^s] \cos^2 \frac{\pi s}{2(N+1)} \left(\sin \frac{\pi s}{2(N+1)}\right)^{-2}.$$

For instance, at $M = N = 2$: $S^{\mathrm{eff}}/4l^2 = 1/6$. Taking the asymptotic limit, with $N = M \to \infty$, one finds that the effective area diverges as

$$S^{\mathrm{eff}}/4l^2 \simeq 0.223\, N^2.$$

3. Loop statistics

We have chosen to treat the problem of two-dimensional square bond-percolation lattices with free boundaries, defined as a lattice of $N \times N$ sites and $2N(N-1)$ bonds. If we assume the bonds present have probability p of being superconducting, the resulting

lattices have, when all bonds are present, an effective area given by the expression obtained above (§ 2.3.3). Networks based on this lattice have the property of being self-dual; this latter leads to the exact critical percolation probability $p_c = 1/2$. The calculation of the effective area of the percolation networks can be reduced, as was shown above, to finding a fundamental set of cycles of an undirected graph. Such a set can be found on each cluster (connected component) using the efficient search algorithm of Syslo (1973). A spanning tree is grown and the vertices examined in turn, unexamined vertices being stored in a list to await examination. For a large number n of vertices on the graph, the store required increases as n^2 and the computation time as n^2. During the search procedure, we have used an appropriate labelling of sites in order to obtain at the same time the matrix elements $\mathcal{L}_{\alpha\beta}$ and the enclosed areas S_α for each cluster.

The preceeding procedure was used to calculate the effective area for each cluster and, as a by product, the loop statistics of the percolation clusters: the average number of cycles per site, the fraction of bonds belonging to cycles, etc. Previous work on loop statistics has only been performed for the Ising model clusters (Domb and Stoll 1977), which represent a correlated site percolation problem.

3.1. *Mean number of cycles per site*

The degree of ramification of the percolation cluster can be 'measured' with the number of cycles per site. For finite lattices, we define the average number of cycles per site as follows. $N_c(p)$ is the number of elementary cycles as a fraction of the total number of elementary cycles at $p = 1$. $N_c(p)$ was normalised such that $N_c(p) = 1$ at $p = 1$. Averages are taken over about 100 samples on $N \times N$ lattices, where $10 \leqslant N < 30$. The chosen definition is suitable for square lattices and provides a global statistics for loops. As can be seen in figure 3, $N_c(p)$ converges monotonically for all values of p, as N increases, toward a limiting curve, without any visible singularity at $p = p_c$. In the same figure, we have shown the corresponding behaviour at $p \ll 1$ and $p \sim 0$, which are extracted from series expansions (Gaunt and Ruskin 1978):

$$N_c(p) = p^4 + 2p^6 - 2p^7 + 7p^8 - 12p^9 + 28p^{10} - 54p^{11} + \dots \qquad \text{at } p \ll 1$$

$$N_c(p) = 1 - 2q + q^4 + 2q^6 - 2q^7 + 7q^8 - 12q^9 + 28q^{10} - 54q^{11} + \dots \qquad \text{at } q(=1-p) \ll 1.$$

The precise value of $N_c(p)$ at the threshold $p_c = 1/2$ is known exactly (Temperley and Lieb 1971): $N_c(p_c) = 0.098007$ at $N \gg 1$. This value is reproduced numerically with a correction of the order of N^{-1} due to finite sizes.

The results obtained for $N_c(p)$ are obviously related (via the Euler relation) to the mean number of clusters per site, as a function of p.

3.2. *Loop fraction $F(p)$*

The fraction of bonds belonging to elementary cycles is denoted by $F(p)$. This parameter which goes from zero for completely ramified clusters to one for completely compact clusters provides another measurement of the degree of ramification. $F(p)$ can be defined locally on each cluster. We have performed averages over the whole sample, because of the relative importance of $F(p)$ on the behaviour of diamagnetic susceptibility. The numerical results are shown in figure 4. As for $N_c(p)$, the loop fraction $F(p)$

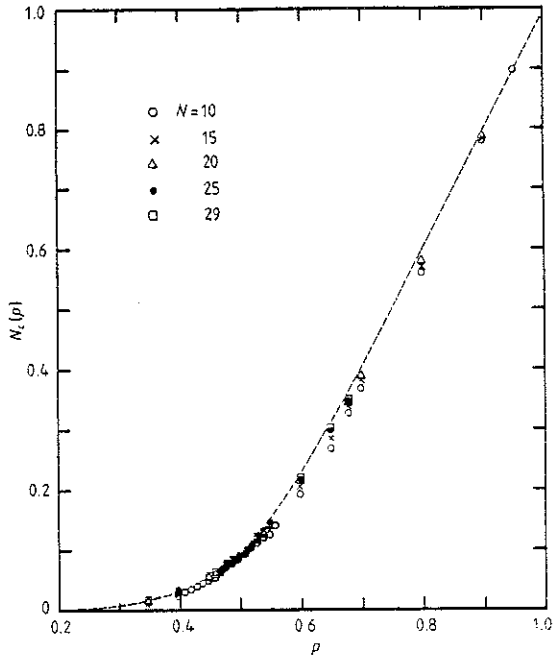


Figure 3. The mean number of cycles $N_c(p)$ per site plotted against the concentration of bonds p.

converges monotonically, throughout the entire p interval, as the lattice size increases, towards a limiting curve without any visible singularity.

4. Effective area $S^{\text{eff}}(p)$

The behaviour of the effective area $S^{\text{eff}}(p)$ as a function of p is the main subject of this work. We shall present below the results of our Monte Carlo calculations for lattices from 10×10 to 50×50; the general properties of the effective area $S^{\text{eff}}(p)$ of such a lattice, and the prediction of scaling theories and the resultant calculation of the critical exponents below and above p_c.

4.1. Exact results for small square lattices

Exact results for the effective area, $S_N^{\text{eff}}(p)$, on a $N \times N$ square lattice can be obtained for small values of N. In general, $S_N^{\text{eff}}(p)$ is a polynomial of order $k = 2N(N-1)$, k being the total number of bonds in the $N \times N$ lattice, with

$$S_N^{\text{eff}}/4\pi l^2 = \sum_{i=0}^{k} c_i p^i (1-p)^{k-i}$$

where the coefficient c_i corresponds to the total number of configurations on the $N \times N$

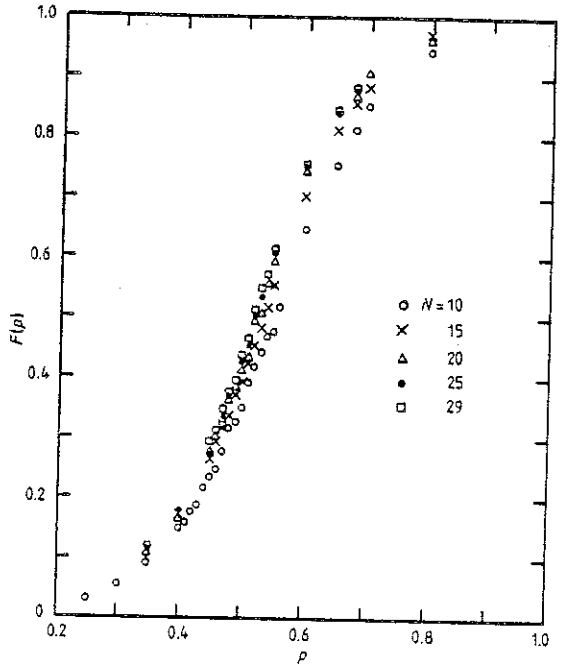


Figure 4. The loop fraction $F(p)$ in a percolation network.

lattice having i bonds present and $k - i$ broken bonds. For instance, we have trivially at $N = 2$:

$$\rho(p) \equiv S_2^{\mathrm{eff}}(p)/S_2^{\mathrm{eff}}(p = 1) = p^4.$$

For $N = 3$, the expression is less trivial. The result is expressed in terms of the effective areas σ_j $(1 \leqslant j \leqslant 12)$ corresponding to different non-trivial configurations of loops.

$$\begin{aligned}
S_3^{\mathrm{eff}}(p)/4\pi l^2 = {} & \tfrac{1}{12} p^{12}\sigma_{12} \\
& + \tfrac{1}{11} q p^{11}(4\sigma_{10} + 8\sigma_{11}) \\
& + \tfrac{1}{10} q^2 p^{10}(4\sigma_{11} + 24\sigma_5 + 16\sigma_7 + 4\sigma_6 + 2\sigma_8 + 16\sigma_9) \\
& + \tfrac{1}{9} q^3 p^9(4\sigma_4 + 40\sigma_2 + 8\sigma_3 + 112\sigma_1 + 8\sigma_9 + 8\sigma_7 + 40\sigma_5) \\
& + \tfrac{1}{8} q^4 p^8(2\sigma_7 + 20\sigma_5 + \sigma_4 + 40\sigma_2 + 4\sigma_3 + 236\sigma_1) \\
& + \tfrac{1}{7} q^5 p^7(4\sigma_5 + 20\sigma_2 + 216\sigma_1) \\
& + \tfrac{1}{6} q^6 p^6(4\sigma_2 + 112\sigma_1) \\
& + \tfrac{1}{5} q^7 p^5(32\sigma_1) + \tfrac{1}{4} q^8 p^4(4\sigma_1)
\end{aligned}$$

where:

$$\sigma_1 = 1/4,\ \sigma_2 = 2/3,\ \sigma_3 = 9/8,\ \sigma_4 = 2,\ \sigma_5 = 1,\ \sigma_6 = 2,$$

$$\sigma_7 = 1/2,\ \sigma_8 = 2,\ \sigma_9 = 26/23,\ \sigma_{10} = 2,\ \sigma_{11} = 1,\ \sigma_{12} = 2.$$

In particular

$$\rho_N(p) \simeq 1 - \tfrac{38}{11} q + \mathrm{O}(q^2)$$

close to $p = 1$. The slope of the function $\rho(p)$ at $p = 1$ can also be calculated for a finite lattice. By considering all configurations with one missing bond, we have calculated the exact value of the slope a_N:

$$\rho_N(p) = 1 - a_N(1-p) + O((1-p)^2) \qquad \text{for } N \leqslant 11.$$

If σ_0 denotes the effective area at $p = 1$ and σ_j the corresponding quantities associated with distinct configurations where only one bond is missed (n_j in number), we have:

$$a_N = k\left(1 - \frac{1}{k-1}\sum_j n_j \frac{\sigma_j}{\sigma_0}\right).$$

The values of a_N obtained are tabulated below for all lattices from 2×2 through to 11×11. As N increases, a_N decreases slowly (see figure 5) and seems to converge toward the asymptotic value $a_\infty = 1$. We have found that the slopes tabulated above are well approximated by the function:

$$a_N = 1 + \frac{6.4223}{N} - \frac{16.9412}{N^2} + \frac{24.4704}{N^3} + \ldots$$

which explains the slowing down of the convergence.

4.2. *Effective area as function of p*

Using the de Gennes matrix formulation for calculating the effective area, we have been able to obtain $S_N^{\text{eff}}(p)$ throughout the whole p interval. The sample sizes $N \times N$ used were between 4×4 and 50×50 up to $p = 0.55$ ($p_c = 0.5$). Such a limitation was due mainly

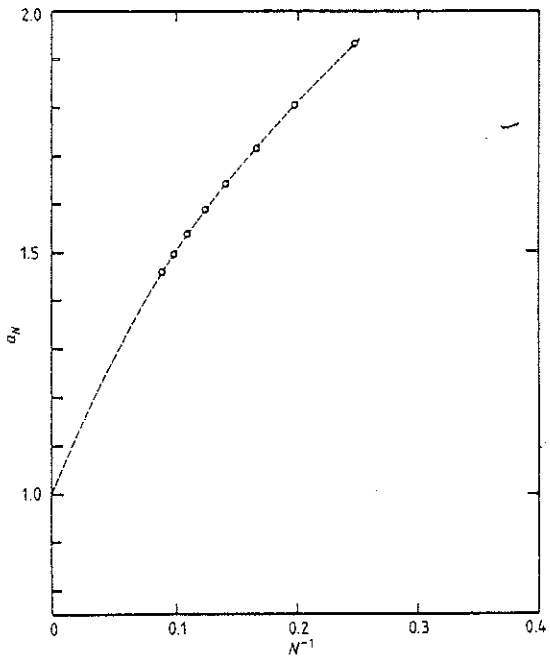


Figure 5. The slope of the effective area $S^{\text{eff}}(p)$ (a_N) at $p = 1$ for $N \times N$ lattices of increasing size $2 \leqslant N \leqslant 11$.

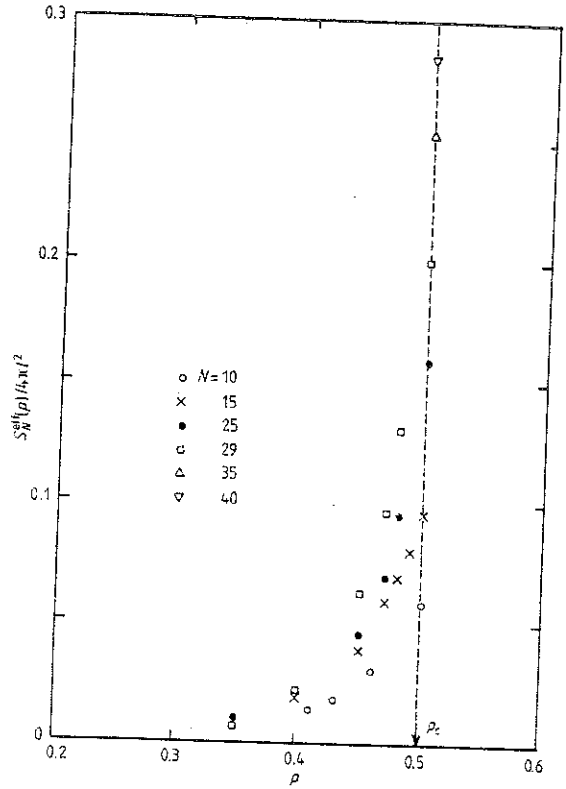


Figure 6. The effective area as a function of concentration p, for different lattice sizes.

to the growth of the $\mathscr{L}$ matrix dimensionality (to be inverted) with p and N. Below p_c, some simplifications were taken into account: clusters are small and $\mathscr{L}$ is reduced to a block matrix. Numerical results for $S_N^{eff}(p)$ are shown in figure 6 at $p < p_c$. In this region, $S_N^{eff}(p)$ grows monotonically with p and N. At $p = p_c$, $S_N^{eff}(p)$ grows without limitation, exhibiting the divergence of the diamagnetic susceptibility at the percolation threshold. At $p > p_c$, we have plotted the ratio

$$\rho_N(p) = S_N^{eff}(p)/S_N^{eff}(p = 1)$$

in figure 7. This reduced variable was chosen because $\hat{\chi}\ (p = 1) \sim N^2$ is ill defined at $N \to \infty$. As can be seen, $\rho_N(p)$ decreases with increasing N at $p < p_c$. On the contrary, $\rho_N(p)$ increases with N at $p > p_c$ and, for fixed N as function of p, exhibits an inflection point near $p \sim 0.7$.

4.3. *Finite-size scaling analysis*

A recent scaling theory was advanced to describe the behaviour of superconducting–insulator mixtures near the percolation threshold (Rammal *et al* 1983b). For finite samples $L \times L$, the main prediction of this theory can be cast as the finite scaling laws

$$\rho(p) = L^{-a/\nu}\varphi(L^{1/\nu}\Delta p) \qquad \text{at} \quad p \gtrsim p_c$$

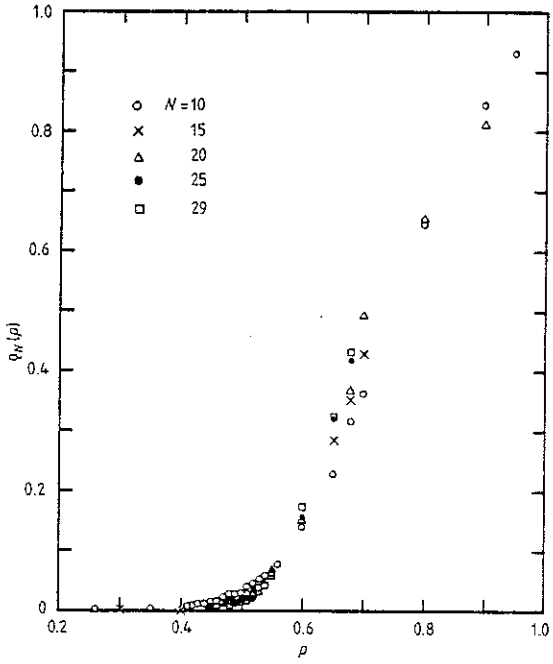


Figure 7. The ratio of $\rho_N(p) = S_N^{\rm eff}(p)/S_N^{\rm eff}(p = 1)$ as a function of p.

$$S^{\rm eff}(p) = L^{b/\nu}\psi(L^{1/\nu}\Delta p) \qquad \text{at} \quad p \leqslant p_c$$

with $a + b = 2\nu$, ν being the percolation critical exponent, and φ and ψ are finite scaling functions. From these scaling laws, one obtains (using $S^{\rm eff}(p = 1) \sim L^2$)

(i)

$S^{\rm eff}(p \leqslant p_c) \sim (p_c - p)^{-b}$ as $L \to \infty$

$S^{\rm eff}(p = p_c) \sim L^{b/\nu}$ at finite L

(ii)

$\rho(p \geqslant p_c) \sim (p - p_c)^a$ as $L \to \infty$

$\rho(p = p_c) \sim L^{-a/\nu}$ at finite L.

In addition, it was argued from the scaling analysis that exponent b is given by $b = 2\nu - (t - \beta)$ from which we deduce $a = t - \beta$. In these expressions, t is the critical exponent for conductivity $\Sigma \sim (\Delta p)^t$, β is the percolation exponent $P(p) \sim (\Delta p)^\beta$ and ν the correlation length exponent $\xi_p \sim (\Delta p)^{-\nu}$. From known values of different exponents: $t \sim 1.26$ (Derrida and Vannimenus 1982), $\beta \simeq 0.14$ and $\nu \simeq 4/3$ (Stauffer 1979) one obtains $a/\nu \simeq 0.84$ and $b \simeq 1.54$.

In figure 8, a log–log plot of $\rho(p = p_c)$ is shown as a function of L. The deduced value of the exponent a (using $\nu = 4/3$) is $a = 1.12 + 0.05$, in good agreement with the predicted value $a = t - \beta$ of the scaling theory. In figures 9 and 10, we have plotted our numerical

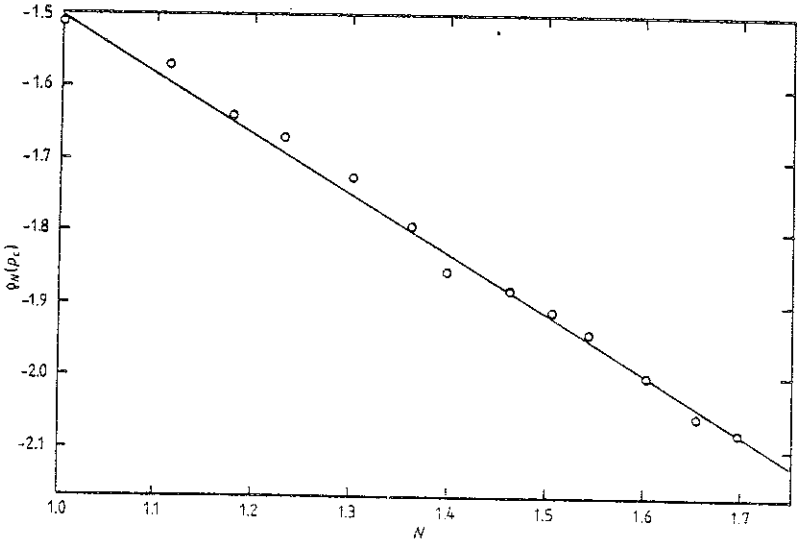


Figure 8. The log–log plot of $\rho_N(p = p_c)$ against the lattice length N. The slope gives a/ν (see text).

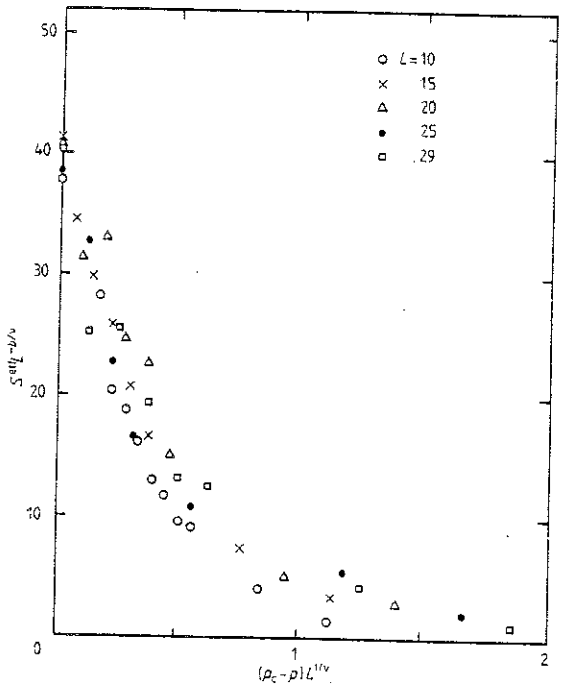


Figure 9. The plot of the reduced variable $S^{\mathrm{ed}}(p)L^{-\delta/\nu}$ against $L^{1/\nu}\Delta p$ at $p \leqslant p_c$ for different lattice sizes L ($\equiv N$).

results as a function of the corresponding reduced variables at $p < p_c$ and $p > p_c$. The finite-size scaling is relatively well reproduced, thus supporting the scaling theory. The numerical result for the exponent b shows that $\bar{\chi}$ is dominated, close to p_c, by the 'infinite' cluster in the percolation network.

4.4. *Comparison with other theories*

The divergence of $\bar{\chi}$ at $p \leqslant p_c$, with the exponent b contradicts the conclusion reached by Stephen (1981) who predicted $b < 0$. On the other hand, the numerical value of b obtained from our numerical simulations disagrees with the estimates of de Gennes (1981): $b = 2\nu - t$. This value was obtained through the analysis of the response of finite

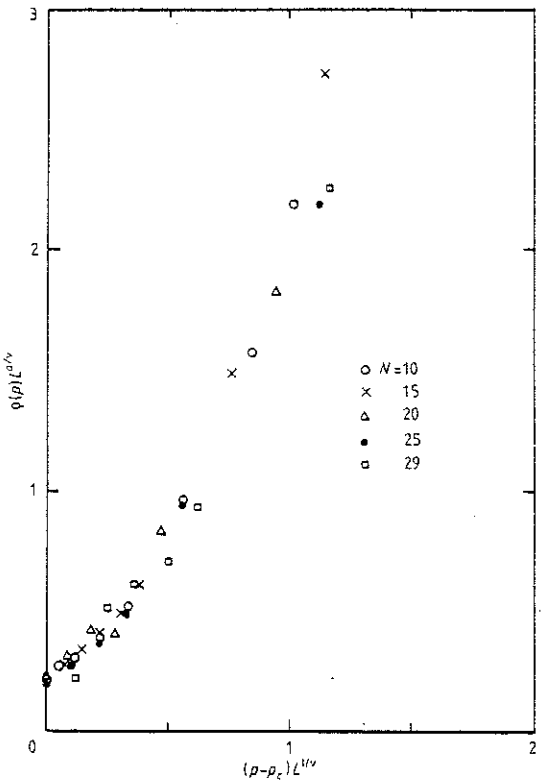


Figure 10. The same plot as figure 9, where $\rho(p)L^{a/\nu}$ is plotted as a function of the scaling variable $L^{1/\nu}\Delta p$.

clusters and scaling assumptions. The main difference lies in the role of the infinite cluster in the divergence of $\bar{\chi}$.

5. Conclusion

We have given in this paper new numerical results for the geometrical statistics of the percolation clusters. The loop statistics are relevant for the description of some physical

Table 1.

N	a_N
2	4.0000
3	3.27272
4	1.92823
5	1.80416
6	1.71348
7	1.64244
8	1.58495
9	1.53808
10	1.49700
11	1.46284

phenomena such as the diamagnetism of disordered materials. Our study was limited to $d = 2$ networks. It would be interesting to extend this work to three-dimensional lattices. Our results are in agreement with the prediction of the scaling theory of Rammal *et al* (1983b). However, the numerical values of critical exponents disagree with the previous estimates of Stephen and of de Gennes. More extensive numerical investigations are needed in order to clarify the discrepancy with de Gennes's prediction. Of particular interest are the calculations of the probability distribution of the loop fraction f_n, the effective area S_n, etc of finite n-clusters. Our global approach cannot give directly reliable results for these quantities. A comparison between the two lines of approach must give more insight into this problem.

Acknowledgments

We are grateful to Drs T Lubensky, R Maynard and G Toulouse for numerous stimulating discussions and helpful comments. We also thank Dr A Briggs for a critical reading of the manuscript and constructive suggestions. One of us (RR) would like to thank Dr G Toulouse and Ecole Normale Supérieure for their hospitality.

References

Alexander S 1983 *Phys. Rev.* B **27** 1541
Derrida B and Vannimenus J 1982 *J. Phys. A: Math. Gen.* **15** L557
Deutscher G 1981 *Lecture Notes in Physics* vol 149; *Disordered Systems and Localization* ed. C Castellani *et al* (Berlin: Springer) p 26
Deutscher G, Grave I and Alexander S 1982 *Phys. Rev. Lett.* **48** 1497
Domb C and Stoll E 1977 *J. Phys. A: Math. Gen.* **10** 1141–9
Fink H, Lopez A and Maynard R 1982 *Phys. Rev.* B **26** 5237
Gaunt D S and Ruskin H 1978 *J. Phys. A: Math. Gen.* **11** 1369–80
de Gennes P G 1981 *C.R. Acad. Sci., Paris* Series II **292** 9
Rammal R, Lubensky T C and Toulouse G 1983a *Phys. Rev.* B **27** 2820
—— 1983b *J. Physique Lett.* **44** L65–71
Stauffer D 1979 *Phys. Rep.* **54** 1
Stephen M J 1981 *Phys. Lett.* A **87** 67–8
Syslo M M 1973 *Commun. Assoc. Computer Machinery* **16** 632–3
Temperley H N V and Lieb E H 1971 *Proc. R. Soc.* A **322** 251–80
Tinkham M 1975 *Introduction to Superconductivity* (London: McGraw-Hill)

CONCLUSION GENERALE

Les conclusions relatives aux problèmes abordés dans ce mémoire se trouvent à la fin de chacun des trois chapitres. Nous allons conclure avec quelques remarques générales sur l'intérêt de l'expérimentation numérique dans l'étude des modèles désordonnés en mécanique statistique. Face aux difficultés rencontrées dans les approches usuelles, les méthodes numériques ont une double vocation, avec des avantages et des inconvénients.

La première vocation est d'ordre qualitatif et permet de répondre à des questions bien précises, telles que l'existence ou non d'une transition de phase. Un exemple simple est donné par la dimension critique inférieure ($d_c = 2$) du modèle de champ aléatoire décrit dans le troisième chapitre. D'autres exemples pourront être trouvés dans ce travail ou ailleurs.

La deuxième vocation est d'ordre quantitatif. Par exemple : $\tilde{d} = 4/3$ ou non (chap. 1), le diagramme de phase (h-T) à d = 3 (chap.3),..., etc. Il faut noter à ce propos que l'expérimentation numérique sur ordinateur n'est pas pour autant la "Méthode Universelle". Ses limitations inhérentes font que des réponses très précises sont parfois difficiles à avoir. Citons deux exemples rencontrés dans ce travail. Le premier est relatif à la valeur exacte $\tilde{d} = 4/3$ (?) de la dimension spectrale des amas de percolation. Dans ce cas il a été possible de donner la valeur de $\tilde{d}$ à toutes dimensions mais avec l'incertitude qui s'impose. Le deuxième exemple est donné par les valeurs numériques des exposants de la transition en température du modèle du champ aléatoire. Vue la complexité de ce problème, nous n'avons été capables que de donner des estimations qui montrent néanmoins qu'il s'agit d'une nouvelle classe d'universalité (exposants différents du cas pur).

Le travail présenté ici montre encore une fois l'importance, mais aussi les limitations, de l'expérimentation numérique dans l'étude du désordre. Il s'agit d'une technique puissante à mi-chemin entre la physique expérimentale et la physique théorique. C'est une discipline qui joue le rôle d'intermédiaire, en permettant de dégager de nouveaux concepts pour les théoriciens et de suggérer de nouvelles expériences pour les expérimentateurs.

dernière page de la thèse

AUTORISATION DE SOUTENANCE

VU les dispositions de l'article 5 de l'arrêté du 16 Avril 1974,

VU les rapports de M. J. Lajzerowicz

M. N. Sourlas

M. R. Rammal

M. ANGLES d'AURIAC est autorisé à présenter une thèse en soutenance pour l'obtention du grade de DOCTEUR D'ETAT ES SCIENCES.

Fait à GRENOBLE, le 2 FEV 1978

Le Président de l'U.S.M.G.

Le Président
M. TANCHE

Le Président de l'I.N.P.G.

D. BLOCH
Président
de l'Institut National Polytechnique
de Grenoble

P.O. le Vice-Président,