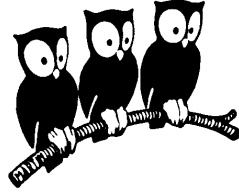


UNIVERSITÉ PARIS 6 – PIERRE ET MARIE CURIE

LABORATOIRE DE PHYSIQUE THÉORIQUE
DE L'ÉCOLE NORMALE SUPÉRIEURE



Thèse de doctorat de l'Université Paris 6

Spécialité : **Physique théorique**

présentée par

Christophe DEROULERS

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ PARIS 6

Sujet :

**Application de la mécanique statistique à trois problèmes hors
d'équilibre : algorithmes, épidémies, milieux granulaires**

Soutenue le 26 septembre 2006 devant le jury composé de

| | | |
|-----|----------------|--------------------|
| MM. | J.-P. BOUCHAUD | |
| | D. DEAN | rapporteur |
| | O. MARTIN | |
| | R. MONASSON | (invité) |
| | N. SOURLAS | directeur de thèse |
| | F. VAN WIJLAND | rapporteur |
| | J.-B. ZUBER | |

Table des matières

| | |
|--|-----------|
| Introduction | 9 |
| 0.1 La physique statistique : objets d'étude et démarche | 10 |
| 0.2 Objet de cette thèse | 12 |
| 0.3 Vocabulaire sur les graphes | 14 |
| 0.4 Modèles de mécanique statistique | 15 |
| 0.5 Quelques grandes familles de transitions de phases | 18 |
| 0.5.1 Transitions dans des systèmes physiques de dimension finie statiques ou à l'équilibre, avec interactions à courte portée. | 18 |
| 0.5.2 Autres transitions de phases | 22 |
| 0.6 Modèles à caractère de champ moyen et modèles solubles | 23 |
| | |
| I La classe d'universalité de la propagation unitaire | 27 |
| | |
| 1 L'analyse d'algorithmes | 28 |
| | |
| 2 Transitions de phases en combinatoire | 31 |
| 2.1 Phénomènes de seuil en combinatoire | 31 |
| 2.2 Transition de percolation dans les graphes aléatoires | 33 |
| 2.3 Champ moyen contre dimension finie | 36 |
| 2.4 Graphes aléatoires d'Erdős et Rényi... ou pas | 41 |
| | |
| 3 Problèmes de satisfaction de contraintes et problèmes d'optimisation combinatoire ; algorithmes de résolution | 44 |
| 3.1 Problèmes combinatoires | 44 |
| 3.1.1 Problèmes de satisfaction de contraintes (PSC) | 44 |
| 3.1.2 Exemples de PSC discrets | 47 |
| 3.2 Algorithmes de résolution | 49 |
| 3.3 Distributions d'instances | 52 |
| | |
| 4 Algorithmes complets de résolution du problème SAT : mise en évidence d'une classe d'universalité critique | 56 |
| 4.1 Algorithmes DPLL avec heuristique de la propagation unitaire (PU) | 56 |
| 4.2 Résultats | 60 |
| 4.3 Outils pour trouver ces résultats | 64 |
| 4.3.1 Le principe des décisions différées | 64 |
| 4.3.2 Un processus markovien pour les nombres de clauses | 65 |
| 4.3.3 Des fonctions génératrices | 67 |
| 4.3.4 La concentration de la mesure | 67 |
| 4.3.5 Les trajectoires de résolution | 68 |
| 4.3.6 Des équations de diffusion avec biais | 69 |
| 4.4 Interprétation du comportement critique | 72 |
| | |
| 5 Appendice : publication P1 | 76 |

| | | |
|------------|---|------------|
| 6 | Appendice : publication P2 | 84 |
| II | La durée de vie de l'état métastable du processus de contact | 117 |
| 7 | Processus stochastiques définis par des règles cinétiques | 118 |
| 7.1 | États d'équilibre de modèles définis par un hamiltonien : rappels | 118 |
| 7.2 | Processus définis par leur cinétique | 121 |
| 7.3 | Le processus de contact | 123 |
| 7.3.1 | Définition | 123 |
| 7.3.2 | Comportement qualitatif | 125 |
| 7.3.3 | La transition de phases du modèle sur réseau \mathbb{Z}^D | 129 |
| 8 | Formalisme | 134 |
| 8.1 | Construction d'une intégrale de chemins pour un processus stochastique markovien | 135 |
| 8.1.1 | Motivation | 135 |
| 8.1.2 | Des opérateurs « quantiques » pour représenter une équation maîtresse | 137 |
| 8.1.3 | Construction heuristique d'une intégrale de chemins à l'aide d'états cohérents | 142 |
| 8.2 | Préliminaire : développement à haute température et à magnétisation fixée de la fonction de partition du modèle d'Ising | 145 |
| 8.3 | Action pour un processus de variables à deux valeurs : partie cinétique | 150 |
| 8.3.1 | Calcul avec un premier jeu de contraintes | 151 |
| 8.3.2 | Calcul avec un deuxième jeu de contraintes | 155 |
| 8.4 | Partie cinétique de l'action pour d'autres variables | 155 |
| 8.4.1 | Variables stochastiques à nombre fini de valeurs | 156 |
| 8.4.2 | Cas des bosons (à cœur mou) | 158 |
| 8.5 | Action pour plusieurs variables | 159 |
| 8.5.1 | Action pour N objets identiques ; passage à l'ensemble grand-canonique | 160 |
| 8.5.2 | Remarque à propos de variables corrélées | 162 |
| 9 | Applications | 165 |
| 9.1 | Processus de désintégration radioactive | 165 |
| 9.2 | Processus de contact | 168 |
| 9.2.1 | Calcul en champ moyen | 168 |
| 9.2.2 | Développement en $1/z$ | 171 |
| 9.3 | Modèles oscillants de biologie des populations | 174 |
| 9.3.1 | Modèle papier-caillou-ciseaux | 174 |
| 9.3.2 | Un modèle d'interactions prédateur-proie oscillant | 176 |
| 10 | Appendice : publication P3 | 179 |
| III | Deux modèles exactement solubles pour la statique des milieux granulaires | 197 |
| 11 | Faits expérimentaux et approches théoriques des milieux granulaires secs | 198 |
| 11.1 | Généralités et observations expérimentales | 198 |
| 11.2 | Chaînes de forces et transmission des contraintes à l'équilibre statique | 204 |
| 11.2.1 | Relations effectives macroscopiques ou modèle de mécanique statistique ? | 204 |
| 11.2.2 | Le modèle q et ses perfectionnements | 207 |
| 11.2.3 | Des modèles directs pour les chaînes de forces | 208 |
| 11.3 | L'approche « thermodynamique » d'Edwards | 210 |

| | | |
|-----------|--|------------|
| 12 | Éléments d'introduction aux techniques de résolution de modèles intégrables sur réseaux bidimensionnels | 213 |
| 12.1 | Mise en situation | 213 |
| 12.1.1 | Définition, et commentaires sur la notion d'intégrabilité | 213 |
| 12.1.2 | Repères historiques | 217 |
| 12.1.3 | Quelques grands types de modèles exactement solubles sur réseaux bidimensionnels | 219 |
| 12.2 | Factorisation des matrices S , <i>Ansatz</i> de Bethe et équations de Yang-Baxter | 223 |
| 12.2.1 | La factorisation des matrices S , ou quand toute interaction se ramène à des interactions à deux corps | 223 |
| 12.2.2 | À propos de l' <i>Ansatz</i> de Bethe | 230 |
| 12.3 | Équations de Yang-Baxter | 247 |
| 12.3.1 | Annexe : les poids des vertex du modèle intégrable $A_2^{(1)}$ | 251 |
| 13 | Les modèles étudiés : construction et <i>Ansatz</i> de Bethe | 253 |
| 13.1 | Construction du modèle de chaînes de forces | 253 |
| 13.1.1 | Ingrédients | 253 |
| 13.1.2 | <i>Ansatz</i> de Bethe pour le modèle de chaînes de forces | 255 |
| 13.1.3 | Équations de l' <i>Ansatz</i> de Bethe (EAB) | 260 |
| 13.1.4 | Un schéma de résolution numérique itératif des EAB | 262 |
| 13.1.5 | Comptage des solutions et valeurs propres nulles | 263 |
| 13.1.6 | Modèles « bosoniques » et modèles « fermioniques » | 265 |
| 13.2 | Un modèle d'empilements | 265 |
| 13.2.1 | <i>Ansatz</i> de Bethe et définition du modèle | 265 |
| 13.2.2 | Comptage des solutions des EAB | 274 |
| 13.2.3 | Configurations fermioniques et configurations bosoniques ; tailles de cellules | 275 |
| 13.3 | Les modèles précédents et les équations de Yang-Baxter | 277 |
| 13.3.1 | Le modèle des chaînes de forces | 277 |
| 13.3.2 | Le modèle d'empilements | 279 |
| 13.3.3 | Discussion élémentaire sur les généralisations des poids statistiques | 281 |
| 13.4 | Résolution des EAB en cas de contact des courbes des solutions | 286 |
| 13.4.1 | Calcul | 286 |
| 13.4.2 | Interprétation en termes de symétries | 288 |
| 14 | Simulations Monte-Carlo | 291 |
| 14.1 | Principes généraux d'une simulation Monte Carlo | 291 |
| 14.2 | Simulations Monte Carlo pour le modèle d'empilements | 296 |
| 14.3 | Simulations Monte Carlo pour le modèle de chaînes de forces | 301 |
| 14.4 | D'autres manières de faire les simulations | 303 |
| 14.4.1 | Algorithme de Metropolis sur q pour le cas de forces continues. | 303 |
| 14.4.2 | Algorithme utilisant des mouvement locaux en « roue de chariot ». | 304 |
| 14.4.3 | Algorithme utilisant la diffusion de défauts. | 305 |
| 14.4.4 | Algorithme fondé sur la « respiration » de cellules hexagonales. | 306 |
| 15 | Résultats physiques | 308 |
| 15.1 | Lois de probabilité de l'intensité des forces | 309 |
| 15.2 | La transition de <i>jamming</i> | 313 |
| 15.2.1 | Distribution de probabilité des intensités des forces | 313 |
| 15.2.2 | Nombre de coordination | 313 |
| 15.2.3 | Maximum de l'entropie | 315 |
| 15.3 | <i>Jamming</i> et percolation | 318 |

| | | |
|--------------------------|--|----------------|
| 15.3.1 | Percolations des réseaux de forces « fermioniques », « bosoniques » et continues | 320 |
| 15.3.2 | L'hypothèse d'Edwards est ici fausse | 325 |
| 15.4 | Réponses statiques d'un empilement à une surpression | 328 |
| 15.4.1 | Définition d'une longueur mésoscopique | 328 |
| 15.4.2 | Tailles des cellules et réponses statiques d'un empilement | 328 |
| Conclusion | | 333 |
| Bibliographie | | 336 |

Remerciements

Je remercie tout d'abord les directeurs successifs du Laboratoire de Physique théorique de l'École normale supérieure (LPTENS) Jean Iliopoulos, Eugène Cremmer et Bernard Julia de m'y avoir accueilli pour la préparation de cette thèse de septembre 2001 à août 2005. À eux et aux secrétaires Véronique Brisset-Fontana, Mireille Jouette, Michelle Lelievre, Christelle Login, Marcelle Martin et Nicole Ribet j'adresse aussi un grand merci pour avoir fait en sorte que « l'intendance suivît », que les documents administratifs fussent traités avec compétence, rigueur... et patience, que les fournitures ne manquaient jamais, et pour avoir contribué à augmenter la qualité de vie du laboratoire. Merci également au Laboratoire de Physique Théorique de Strasbourg qui m'a accueilli à plusieurs reprises lors du séjour de Rémi Monasson dans ses murs, à Vladimir Kazakov qui a pris l'heureuse initiative, en mai 2002, d'organiser une « journée du (des) thésard(s) » au sein du LPTENS, et à Nicolas Sourlas pour avoir accepté d'être mon directeur officiel de thèse.

La personne à laquelle cette thèse doit le plus, et envers qui je suis profondément reconnaissant, est évidemment Rémi Monasson, qui a accepté de l'encadrer avec une patience et une rigueur remarquables. Il a fait preuve d'une imagination fertile dont ce mémoire n'est qu'en partie le reflet et il m'a maintes fois montré que les choses ne sont pas si compliquées que ce que je croyais quand il m'a prodigué son aide.

Je remercie également pour des conversations scientifiques souvent utiles et toujours intéressantes et encourageantes, ou encore des références précieuses, Jean-Philippe Bouchaud, Jérémie Bouttier, Édouard Brézin, Simona Cocco, Leticia Cugliandolo, Liat Ein-Dor, Philippe Di Francesco, Philippe Flajolet, Silvio Franz, Antoine Georges, Vladimir Kazakov, Werner Krauth, Jorge Kurchan, Enzo Marinari, James Martin, Roderich Moessner, Andrea Montanari, Marco Picco, Federico Ricci-Tersenghi, Bruno Salvy, Maoro Sellitto, Jacco Snoeijer, Cristina Toninelli, Brigitte Vallée, Samuel Wallon et Frédéric van Wijland (que celles et ceux que j'ai oubliés me pardonnent!). Merci également à Frédéric Chyzak et Véronique Maume de m'avoir invité comme auditeur à la conférence qu'ils ont organisé à Dijon en juin 2002, aux organisateurs des rencontres ALEA de m'avoir accueilli à bras ouverts en 2002 et 2004, et plus généralement aux organisateurs des conférences auxquelles j'ai assisté et parfois pris la parole.

Merci à Jean-Philippe Bouchaud, Olivier Martin et Jean-Bernard Zuber d'avoir accepté avec gentillesse et enthousiasme de faire partie du jury de cette thèse, et à David Dean et Frédéric van Wijland d'avoir de plus accepté la lourde tâche d'en être rapporteurs.

Je remercie aussi des contributeurs qui n'ont pas toujours conscience de leur contribution à ce travail et sont parfois anonymes, en la personne des instituteurs et professeurs de collège, lycée, classes préparatoires et au-delà qui ont su développer et nourrir mon intérêt pour les sciences et au-delà, des *referees* qui ont accepté, de manière gratuite, de porter après examen un jugement, qui a souvent été pour moi un encouragement précieux, sur les publications auxquelles cette thèse a donné lieu, et les innombrables personnes qui ont contribué, de façon quasiment toujours désintéressée, au développement de logiciels libres, auxquels cette thèse doit beaucoup et qui rendent l'informatique à la fois plus puissante et plus agréable à utiliser.

Merci aux enseignants de l'Université Pierre et Marie Curie (Paris 6) avec qui j'ai eu l'occasion de collaborer et en particulier à ceux de la licence d'informatique, où j'ai eu beaucoup de plaisir à enseigner, qui ont accueilli sans *a priori* un physicien parmi eux.

Merci également aux citoyens qui ont manifesté leur sympathie et leur soutien au mouvement de revendication des chercheurs français à partir de janvier 2004, et aux collègues qui se sont mobilisés, dans les manifestations ou ailleurs, à tous les niveaux, pour défendre l'idée que la recherche scientifique n'est pas un luxe, source inutile de gaspillage et variable commode d'ajustement budgétaire.

Je remercie les doctorants ou post-doctorants Serge Florens, Eytan Katzav, Steffen Metzger, Sébastien Ray, Grégory Schehr et Guilhem Semerjian ; nous avons partagé le bureau Dc13 dans une atmosphère internationale, studieuse et conviviale.

Enfin, je remercie mes amis (pardon de ne pas les citer nommément !) pour leurs encouragements, les discussions avec eux (parfois même sur des sujets connexes de cette thèse) et la distraction qu'ils ont permis, et tout particulièrement mes parents et Laure pour leur patience et leur soutien lors de ce long travail !

Introduction

0.1 La physique statistique : objets d'étude et démarche

Mais le lecteur vraiment instruit — c'est principalement pour son bénéfice que je veille quand les autres dorment, et dors quand les autres veillent — trouvera ici matière suffisante à occuper ses spéculations pour le restant de sa vie.

Jonathan Swift, *Le Conte du tonneau*

LA discipline principale à laquelle ce travail de thèse se rattache est la physique statistique. Cette branche de la physique, née avec les travaux de L. Boltzmann qui ont fondé la mécanique statistique dans les années 1870 à 1900, est consacrée à l'étude des systèmes physiques constitués d'un grand nombre d'éléments identiques ou tout au moins semblables. Historiquement, on envisageait un solide, un liquide ou un gaz (constitués d'un grand nombre d'atomes, d'ions ou de molécules d'une ou de quelques espèces), mais le champ d'application s'est étendu à des ensembles d'objets macroscopiques comme des grains (de sable, de blé, *etc.* — et auxquels la troisième partie de ce mémoire est consacrée), des bactéries, des animaux, des individus (la deuxième partie de ce mémoire étudie un modèle simple de propagation d'épidémies), des automobiles sur une autoroute, des astéroïdes, des étoiles, des galaxies, ou des objets abstraits : entreprises, actions en bourse, matrices en mathématique, graphes, systèmes linéaires de variables et d'inconnues (la première partie de ce mémoire étudie certains algorithmes de résolution de systèmes d'équations sur un grand nombre de variables booléennes en informatique).

L'approche de la physique statistique est pertinente quand le nombre de ces constituants (microscopiques ou non) est suffisamment grand pour que calculer des moyennes sur eux soit plus intéressant que de les étudier individuellement. « Intéressant » peut être pris dans un sens double : d'une part, dans un sens presque économique : quand les constituants sont trop nombreux, il devient très cher ou même humainement impossible de les étudier isolément (par exemple, dans un verre d'eau, il y a environ 10^{29} molécules — stocker les positions de chacune de ces molécules nécessiterait au moins cent milliards de milliards de disques durs d'ordinateurs, courants aujourd'hui, de 100 Go, c'est-à-dire bien plus que le nombre d'humains présents sur terre), donc on ne peut calculer que des propriétés moyennes ou typiques (calculer assez précisément la vitesse moyenne des molécules de la goutte d'eau connaissant sa température et sa pression est assez facile). D'autre part, l'évolution individuelle des constituants ne reflète que peu l'évolution de leur ensemble, alors que la plupart du temps c'est cette dernière que l'on cherche : toujours dans l'exemple du verre d'eau, les molécules d'eau à pression atmosphérique et environ 99°C vibrent (comme de petits ressorts) quasiment de la même façon que si on les chauffait à 101°C, et elles ont quasiment la même vitesse moyenne, mais, à 101°C, l'eau ne reste pas dans le verre : elle est sous forme de vapeur. Il importe donc plus, pour expliquer la physique de l'eau, de décrire le comportement de l'ensemble de molécules (se comporte-t-il comme un liquide ou comme un gaz ?) que celui des constituants (quelle est la vitesse des molécules d'eau ?). Pour être plus précis, il y a quand même des paramètres des constituants qu'il est intéressant de connaître : ce sont les *paramètres d'ordre*, qui prennent des valeurs caractéristiques du comportement global. Par exemple, dans l'eau liquide, la distance moyenne entre une molécule d'eau et ses voisines les plus proches est bien plus courte que dans l'eau gazeuse. Mais le calcul d'un tel paramètre ne peut se faire à partir de l'étude d'une ou de quelques molécules, sa valeur est fixée par l'ensemble.

L'exemple précédent met clairement en évidence un aspect spectaculaire des phénomènes qu'étudie la physique statistique : le comportement global de l'ensemble des constituants semble complètement détaché des lois qui les régissent. Les lois du mouvement microscopique des molécules d'eau sont strictement les mêmes à 99°C et à 101°C, mais on a l'impression d'avoir affaire à deux corps différents (un liquide et un gaz), régis par des lois différentes. Comment croire qu'un changement aussi faible de température ait une conséquence aussi grande sur le comportement macroscopique de la matière ?

On appelle traditionnellement un type de comportement macroscopique une « phase », et le passage de l'un à l'autre une « transition de phase ». Une partie de la tâche de la physique statistique est de recenser, caractériser et classer les phases. Chacun, depuis son enfance, a appris une classification, très pertinente dans la vie quotidienne, entre « états » (c'est-à-dire « phases ») solide, liquide et gazeux, et sait qu'en changeant la température d'un corps il peut le faire changer d'état (à condition que ce corps ne brûle pas ou ne soit pas le siège de réactions chimiques destructrices!). Nous savons d'expérience que les liquides se comportent tous en gros de la même façon : l'huile, l'eau, l'essence et le mercure du thermomètre sont fluides (avec plus ou moins de viscosité) mais forment des gouttes qui peuvent adhérer à une surface, restent dans le récipient où ils sont contenus s'ils n'en sont pas chassés par une force, ont en présence de pesanteur une surface *grosso modo* horizontale (mais incurvée dans un sens ou dans l'autre près des bords du récipient), peuvent geler à basse température et bouillir à haute température, *etc.* Mais comment se fait-il que des constituants aussi différents (le mercure est fait d'atomes, il est très dense, opaque, conduit l'électricité ; l'huile est faite de molécules très longues et massives, ne dissout pas le sel, contrairement à l'eau, peut brûler comme l'essence, mais est moins volatile) présentent des comportements macroscopiques si semblables et forment les mêmes phases, avec les mêmes changements d'état ?

Par ailleurs, davantage d'observation de la vie quotidienne nous conduit à remarquer davantage de phases et de transitions de phases : quand du blanc d'œuf cru est chauffé de 60 à 65°C, il devient gélatineux et blanc (il est en fait le siège de plusieurs transitions de phases car il est composé de plusieurs substances). Quand de l'huile chauffe dans une poêle, au dessus d'une température bien précise elle cesse de rester en gouttes et s'étale volontiers dans la poêle (on parle de « transition de mouillage »). Quand la vitesse moyenne des voitures sur l'autoroute tombe en deçà d'un certain seuil, elles freinent collectivement et il se forme brutalement un embouteillage. Les cristaux liquides transparents de l'écran d'une montre électronique deviennent soudain opaques quand on leur applique une tension électrique et ils forment le segment d'un chiffre que l'on peut lire. Un clou d'acier cesse brutalement d'être attiré par un aimant si on le chauffe à l'aide d'une flamme (transition de Curie du magnétisme). Tous ces états et tous ces changements d'états sont-ils de même nature ? Il semble que non, certains d'entre eux ne s'insèrent pas dans la classification solides-liquides-gaz. Mais peut-on cependant les classer autrement ?

Le mérite de la physique statistique est d'apporter des éléments de classification, d'explication et de calcul pour tous ces phénomènes. En particulier, elle a mis en évidence que beaucoup de détails « microscopiques » (c'est-à-dire qui concernent les constituants individuels même si ceux-ci sont visibles à l'œil nu, comme leur forme, leur masse, la façon précise dont ils interagissent avec leurs semblables, *etc.*) ne sont pas pertinents pour le calcul de certaines propriétés macroscopiques d'un ensemble de ces constituants (mais ils le sont pour d'autres). C'est ainsi que la taille et la masse différentes des molécules d'eau et d'huile ne les empêchent pas de former des liquides semblables. Encore plus remarquable, il existe pour chacune une température et une pression précises où la distinction entre liquide et gaz disparaît (on appelle cet état « point critique »), et à ce point la façon dont certains paramètres physiques (comme la capacité calorifique) divergent est exactement la même. On parle d'« universalité critique » car la grandeur qui régit cette divergence (mathématiquement, il s'agit d'un exposant) est « universelle », c'est-à-dire commune à de nombreux systèmes (on dit que ces systèmes forment une « classe d'universalité »). L'adjectif « critique » est là pour rappeler que cette universalité n'existe qu'au point exact où la transition de phase a lieu (c'est-à-dire où plusieurs phases peuvent coexister). On sait d'expérience que les classes d'universalité sont caractérisées essentiellement par la géométrie de l'espace où sont situés les constituants et la géométrie de leurs interactions (un constituant interagit-il de façon significative uniquement avec les autres constituants situés dans son voisinage, ou au contraire peut-il interagir avec d'autres constituants situés à une distance arbitraire de lui ?), ainsi que par la nature mathématique (scalaire, vecteur, tenseur) et les propriétés de symétrie du paramètre d'ordre (un paramètre dont la valeur moyenne est caractéristique de la phase, par exemple la densité de l'eau et de l'huile

pour leur transition liquide-vapeur). Sachant cela, on comprend que la physique statistique s'attache à étudier (avec des outils mathématiques) des modèles aussi simples que possible : à partir du moment où un tel modèle, même caricaturalement simple, possède les propriétés de géométrie et de symétrie suffisante pour qu'il fasse partie d'une classe d'universalité, il prédit qualitativement la nature des phases et quantitativement les grandeurs universelles de cette classe — inutile de rajouter des complications qui rendent les calculs plus difficiles (et souvent impossibles), gênent la compréhension et empêchent d'établir une image physique claire.

Bien entendu, tous les paramètres relatifs à une transition de phase ne sont pas universels, loin s'en faut, à commencer par ceux qui localisent une transition de phase : par exemple, les températures d'ébullition de l'eau et de l'huile (100°C et 180°C respectivement à la pression atmosphérique) ne sont pas les mêmes. Et les paramètres qui caractérisent une phase loin de sa transition ne sont pas non plus universels. Pour de tels paramètres, utiliser un modèle simplifié n'est pas directement utile. Cependant, la valeur qu'un tel modèle prédit pour eux peut être une approximation de leur vraie valeur. De plus, l'image physique que le modèle simplifié fournit est souvent essentielle pour savoir comment mener le calcul de leur vraie valeur ; en particulier, elle permet de faire le tri entre détails microscopiques importants et moins importants et donc de savoir comment complexifier le modèle pour qu'il rende mieux compte de la réalité de la façon la plus économique possible (on écarte d'emblée un grand nombre de détails microscopiques dont on sait qu'ils jouent un rôle mineur).

0.2 Objet de cette thèse

C'est dans cet esprit que cette thèse a étudié trois problèmes, sujets chacun d'une partie de ce mémoire. Ces trois problèmes ont en commun l'étude de propriétés hors d'équilibre ou issues d'une dynamique irréversible ; la mécanique statistique s'est historiquement intéressée depuis sa naissance jusqu'aux dernières décennies du vingtième siècle à des systèmes à l'équilibre — en particulier quand elle a étudié les transitions de phases physiques comme dans les exemples ci-dessus — mais depuis quelques années le nombre d'études de systèmes hors d'équilibre augmente fortement, à mesure que l'intérêt d'étudier ces systèmes se révèle et que des techniques d'étude deviennent disponibles. Dans la première partie du mémoire, nous montrons comment la notion d'universalité critique se rencontre aussi en informatique : des algorithmes de résolution d'un problème combinatoire très important pour les informaticiens subissent une transition de phase dynamique que nous étudions et dont nous donnons les éléments universels (exposants critiques et fonctions d'échelle). Ces algorithmes induisent une dynamique hors d'équilibre sur les données qu'ils manipulent. Dans la deuxième partie, nous développons un formalisme utile pour étudier la cinétique des processus stochastiques hors d'équilibre (ces termes y sont définis) et nous l'appliquons au calcul de la durée d'une épidémie selon un modèle simpliste (mais qui prédit des phénomènes non triviaux). Ce formalisme pourrait aussi être employé pour étudier des algorithmes informatiques. La troisième partie, enfin, étudie dans quelle mesure on peut développer une mécanique statistique des chaînes de forces dans les milieux granulaires à l'équilibre statique (ces termes sont définis dans cette partie), par analogie avec la mécanique statistique habituelle. Même si nous nous limitons aux milieux granulaires à l'équilibre statique des forces et moments, les réseaux de forces que l'on y observe sont le résultat de la dynamique hors d'équilibre non hamiltonienne (fortement dissipative) qui a constitué l'empilement, et ils dépendent fortement de cette dynamique ; si ce système était à l'équilibre thermodynamique, il suffirait d'utiliser la mesure de Gibbs et l'on ne se poserait pas la question de la construction d'une mécanique statistique.

Schématiquement, les techniques de calcul employées dans ces trois parties nous mènent graduellement des grands vers les petits nombres de dimensions : les systèmes étudiés dans la première partie relèvent de l'approche dite du champ moyen (définie plus loin). Cette approche a l'avantage de permettre le calcul analytique exact de nombreuses quantités. Elle se conçoit aussi comme une approximation valable quand un problème physique prend place dans un

espace de grande dimension (les problèmes physiques « concrets » sont bien sûr cantonnés à des espaces de dimensions inférieures ou égales à trois ou quatre). La deuxième partie du mémoire prend justement cette technique de calcul comme point de départ d'un développement perturbatif systématique, qui donne des résultats approchés pour les systèmes de dimension finie qui nous y intéressent (mais aussi proches du résultat exact qu'on le souhaite à condition de poursuivre le développement). La troisième partie utilise une technique de calcul très différente, qui donne un accès direct aux résultats exacts en dimension finie (deux pour nous) pour des systèmes possédant la remarquable propriété dite d'intégrabilité.

Par ailleurs, bien que ces trois problèmes soient indépendants, ils nous semblent reliés à maints égards (outre l'importance commune d'une dynamique hors d'équilibre), et nous aimerions faire partager au lecteur le plaisir que nous avons eu d'y découvrir des liens parfois surprenants. Il nous semble que c'est en partie ce genre de liens qui fait l'unité, l'intérêt et la pertinence de la physique statistique.

- Dans la première et la troisième parties, on rencontre des systèmes d'un grand nombre d'équations linéaires pour un grand nombre d'inconnues, et ils sont le siège d'un phénomène de seuil : le nombre de solutions passe de zéro à une valeur très grande (qui grandit avec le nombre d'équations) quand le rapport du nombre d'équations au nombre de variables varie très peu en proportion. (Dans la première partie, il s'agit du problème appelé XOR-SAT, où les variables sont booléennes, tandis que dans la troisième partie il s'agit de la transition dite de *jamming* et les variables y sont réelles positives). D'ailleurs, dans la troisième partie, on utilise l'algorithme dit du simplexe pour étudier la transition de *jamming*, et cet algorithme aurait pu être le sujet de la première partie, puisqu'il a une complexité dans le pire cas exponentielle mais vraisemblablement une complexité moyenne linéaire sur certaines distributions des données d'entrée. Dans cette même partie, un solveur SAT comme ceux de la première partie nous permet d'étudier la transition de percolation du modèle d'empilements fermionique.
- Dans les trois parties, nous traitons de problèmes non hamiltoniens (voir la section 7.1 pour une définition) où la cinétique joue un rôle important. Dans les deux premières parties, nous étudions la cinétique elle-même et calculons sa durée. Plus précisément, dans la deuxième partie, nous cherchons le temps que met la cinétique à atteindre un état stable unique (mais l'on pourrait aussi bien étudier un processus où les états stables sont nombreux), tandis que dans la troisième partie on raisonne directement sur les états stables atteints à l'issue d'une cinétique.
- Dans la première et la deuxième partie, la cinétique du phénomène étudié peut être résumée par un processus stochastique de diffusion (ou marche aléatoire) biaisée : respectivement marche aléatoire du nombre de clauses unitaires, le biais étant la règle de propagation unitaire des algorithmes étudiés, avec bord impénétrable à l'origine des absences et disparition des marcheurs avec un taux proportionnel à leur distance à l'origine, et marche aléatoire du nombre de sites contaminés dans le processus de contact, le biais étant la règle de guérison spontanée, avec bord absorbant (disparition des marcheurs qui atteignent l'origine). Dans le cas des algorithmes, cette vision est traduite mathématiquement et exactement en une équation aux dérivées partielles dont la résolution et les propriétés donnent accès aux principaux résultats de notre travail. Dans le cas du processus de contact, une telle traduction n'est exacte que dans le cadre du champ moyen (c'est-à-dire sur un réseau complet ou peut-être sur graphes aléatoires) et nous ne l'avons pas formulée explicitement ni exploitée.
- Dans la troisième partie, il est question d'un phénomène de percolation à transition discontinue (pour le modèle d'empilement) très semblable à la transition de percolation du cœur- k ou percolation *bootstrap* évoquée dans la deuxième partie et dont nous aurions pu (ou pourrions dans l'avenir) étudier l'algorithme de décimation à l'aide des techniques développées dans la deuxième partie.

- Les modèles géométriques rencontrés dans la première et la troisième parties sont des limites singulières de familles de modèles possédant des propriétés plus étendues et donc, en un sens, plus faciles à étudier : la percolation, dont l'énergie libre est identiquement nulle, est la limite $q \rightarrow 1$ des modèles de Potts qui possèdent une énergie libre non triviale avec non-analyticité au point critique (voir p. 32), et le modèle des pavages carrés-triangles est une limite singulière d'une famille de modèles intégrables dont les matrices R sont solutions des équations de Yang-Baxter sans faire partie lui-même de cette famille (voir p. 248).
- Dans les trois parties, nous utilisons abondamment des transformations de Legendre.
- Dans les trois parties, des simulations Monte Carlo de modèles discrets interviennent et sont sources d'intuition et de confirmation pour les calculs analytiques.

Dans ce mémoire, nous avons pris le parti de limiter autant que possible les développements techniques de nos recherches quand ceux-ci se trouvent déjà dans les publications reproduites en annexes, et nous y renvoyons à l'occasion le lecteur. Les deuxième et troisième parties contiennent des résultats originaux (non publiés) que nous nous sommes au contraire efforcés de détailler.

Le reste de cette introduction est dévolu à des rappels sur les transitions de phases, sur ce à quoi ressemble habituellement à un modèle de physique statistique et sur quelques techniques fréquentes de calcul des propriétés d'un tel modèle. C'est pour nous aussi l'occasion de définir un certain nombre de termes et de notions (en revanche nous ne définirons pas de termes mathématiques : les notations \mathbb{Z} , \mathbb{R} , les notions de limite, de développement de Taylor, de développement asymptotique, de fonction analytique, de singularité essentielle, voire d'algèbre de Lie *etc.* sont supposées connues ; $\binom{n}{p}$ désignera le coefficient binomial C_n^p). Le lecteur familier de la physique statistique et familiarisé avec la théorie des graphes peut se rendre directement au chapitre 1.

0.3 Vocabulaire sur les graphes

Un *graphe* est, mathématiquement, un couple d'ensembles (S, A) , où A est un sous-ensemble de l'ensemble des paires ou des couples d'éléments de S . S est appelé ensemble des *sommets* du graphe, et A ensemble de ses *arêtes*. Si les éléments de S sont des paires, le graphe est dit *non orienté* ; si ce sont des couples, il est dit orienté. Les sommets d'une arête sont appelés ses *extrémités*. On dit que l'arête orientée (s_1, s_2) part du sommet s_1 et arrive au sommet s_2 , et que l'arête (orientée ou non) $\{s_1, s_2\}$ relie les sommets s_1 et s_2 . Le *degré* d'un sommet est le nombre d'arêtes dont il est une extrémité (si le graphe est orienté, on peut distinguer degré sortant, degré entrant et degré total selon que les arêtes partent, arrivent ou partent ou arrivent au sommet). Il nous arrivera fréquemment de parler de *site* ou de *nœud* à la place de *sommet* ; pour nous, ces termes sont équivalents. On peut définir une distance sur un graphe (ce qui en fait un espace topologique) : la distance entre deux sommets est le plus petit nombre d'arêtes nécessaire pour former une suite finie d'arêtes telle que deux arêtes successives dans la suite ont en commun au moins un sommet et telle que le premier sommet est une extrémité de la première arête et le deuxième sommet une extrémité de la dernière arête. C'est moralement le nombre d'arêtes qu'il faut « franchir » pour aller d'un sommet à un autre (on peut distinguer une distance qui suit l'orientation des arêtes et une distance qui ne la suit pas si le graphe est orienté). La distance vaut par convention $+\infty$ si on ne peut pas relier les deux sommets par une suite d'arêtes et zéro si les deux sommets sont un seul et même sommet.

On représente commodément un graphe à nombre fini de sommets par un diagramme plan où des lignes (munies de flèches si le graphe est orienté) représentant les arêtes relient des points représentant les sommets. S'il existe un tel diagramme pour lequel aucune arête n'en croise aucune autre, le graphe est dit planaire. Si aucune arête d'un graphe ne relie un sommet

à lui-même, le graphe est dit *simple*. Si tous les sommets ont le même degré (resp. les mêmes degrés entrants et sortants), le graphe est dit régulier. Un graphe dont toutes les distances entre sommets sont finies est *connexe* (il y a plusieurs définitions de la connexité, comme il y a plusieurs distances, pour les graphes orientés). Une *composante connexe* d'un graphe est un couple (S', A') où S' est un sous-ensemble non vide de l'ensemble des sommets S du graphe tel que la distance entre toute paire de sommets de ce sous-ensemble soit finie et que le graphe de départ n'ait aucune arête qui relie un sommet du sous-ensemble à un sommet qui n'en fait pas partie; A' est le sous-ensemble de l'ensemble A des arêtes du graphe de départ qui contient toutes les arêtes contenant au moins un sommet de S' (et en fait les arêtes de A' ne contiennent que des sommets de S' par définition). Un graphe est la réunion de ses composantes connexes : si $(S_1, A_1), (S_2, A_2), \dots$ sont les composantes connexes de (S, A) , S est la réunion des S_i et A celle des A_i . Un graphe complet (ou réseau complet) non orienté est un graphe (S, A) où A est exactement l'ensemble des paires de S .

Une *boucle* est une suite non vide d'arêtes toutes distinctes telle que deux arêtes successives dans la suite ont en commun au moins un sommet et dont le premier sommet de la première arête est le même que le deuxième sommet de la dernière arête. Une boucle décrit donc un chemin sur les arêtes qui n'emprunte jamais deux fois la même arête mais qui revient à son sommet de départ après au moins un pas. Un *arbre* est un graphe sans boucle (il compte donc $N - 1$ arêtes s'il a N sommets et qu'il est connexe). Un *arbre de Cayley* ou *réseau de Bethe* est un arbre régulier (*i.e.* dont tous les sommets ont le même degré); il est forcément infini s'il n'est pas vide.

Un *réseau* est un graphe pour lequel on peut définir une fonction qui, à chaque sommet, associe un point d'un sous-ensemble discret invariant par toutes les composées de D translations linéairement indépendantes d'un espace vectoriel \mathbb{R}^D de dimension D . Par exemple, le réseau *hypercubique* infini de dimension D a pour ensemble de sommets l'ensemble des points de \mathbb{R}^D de coordonnées entières (positives ou négatives) et pour ensemble d'arêtes les paires de sommets telles que les deux sommets ont exactement les mêmes coordonnées, sauf une qui diffère exactement d'une unité. On note aussi un tel réseau \mathbb{Z}^D pour des raisons évidentes. Quand $D = 2$, le réseau hypercubique est appelé réseau carré. Des exemples de réseaux sont dessinés au chapitre 12.

0.4 Modèles de mécanique statistique

Dans un tel modèle, on cherche à prédire ou calculer les valeurs moyennes (voire les distributions statistiques) de paramètres dits *macroscopiques* à partir d'une distribution statistique connue de *configurations microscopiques*. Définissons ces notions à travers un exemple : soit un gaz, c'est-à-dire un ensemble de molécules qui n'interagissent pas ou très faiblement, contenu dans un récipient indéformable (les molécules interagissent fortement avec les parois du récipient quand elles les touchent et rebondissent sur elles de façon élastique, c'est-à-dire sans perte d'énergie). Le système est ici l'ensemble des molécules, ses constituants microscopiques sont les molécules. Les paramètres microscopiques du système sont les positions et les vitesses de chacune des molécules. Une configuration est la donnée de tous ces paramètres (il y en a $2DN$ si le gaz contient N molécules et que l'espace a D dimensions). Un paramètre macroscopique est un paramètre que l'on peut définir pour toutes les configurations, indépendamment du nombre N de constituants du système, qui, en principe, est observable avec un appareil de mesure, et dont la valeur dépend d'un nombre de paramètres microscopiques qui augmente avec N — si bien que la distribution statistique de ses mesures fluctue d'autant moins que le système compte beaucoup de constituants. Par exemple, la pression des molécules est un paramètre macroscopique : on peut la mesurer en mesurant la force moyenne subie par l'une des parois du récipient. Bien entendu, cette force fluctue car le nombre de molécules qui frappent la paroi en une unité de temps varie au cours du temps. Mais, quand N est très grand, ce nombre de chocs par unité de temps est très probablement voisin du nombre de chocs moyen (de même

qu'il n'est pas impossible, mais très peu probable, de trouver un wagon de métro propre, ouvert et entièrement vide de voyageurs à Paris un mardi matin à huit heures trente). Si bien que les différentes mesures de la pression par un capteur se groupent de façon compacte autour de la pression moyenne. Un autre paramètre macroscopique est le nombre moyen de molécules dans la moitié gauche du récipient, ou encore la vitesse moyenne des molécules. La mécanique statistique s'est attachée à calculer les valeurs moyennes de ces paramètres (pression, vitesse moyenne, *etc.*) dès ses débuts avec les travaux de J. C. Maxwell dans les années 1860-1870. Les paramètres « vitesse de la molécule située le plus près du centre du récipient », ou « distance entre les deux molécules situées les plus près du centre du récipient », au contraire, ne sont *pas* des paramètres macroscopiques : outre qu'il est quasiment impossible de mesurer ces quantités, elles fluctuent beaucoup dans le temps. On peut aussi calculer la distribution de probabilité de telles quantités, mais c'est en général moins pertinent.

Extensivité, intensivité. Un paramètre macroscopique *extensif* est un paramètre macroscopique dont la valeur est proportionnelle à la « taille » du système, c'est-à-dire au nombre N de constituants, ou au volume, ou à la masse, *etc.* : si un système est divisé en deux sous-systèmes identiques, la valeur d'un paramètre extensif pour chaque sous-système est la moitié de la valeur du paramètre pour le système entier. Si un paramètre macroscopique est *intensif*, sa valeur est la même pour les sous-systèmes et pour le système entier. Tout paramètre extensif peut être transformé en paramètre intensif en le divisant par le nombre de constituants. Remarque que certains paramètres ne sont ni extensifs ni intensifs (par exemple l'« aire » qui enveloppe les $N/2$ molécules les plus près du centre du récipient dans l'exemple précédent est proportionnelle à L^{D-1} en dimension D dans un récipient de diamètre L , alors que N est proportionnel au volume L^D), et qu'un paramètre n'est souvent extensif ou intensif que de manière approchée pour un système de taille finie (si les molécules du gaz interagissent faiblement, la pression du gaz sur une paroi n'est qu'approximativement indépendante de N , mais la correction relative pour N fini s'annule à la limite $N \rightarrow +\infty$).

Limite thermodynamique. Pour la définir, on considère (en pensée) des systèmes de plus en plus grands mais qui ont en commun les valeurs de paramètres *intensifs*. Par exemple, pour le gaz, on considère la suite des systèmes à N molécules placés dans des récipients homothétiques (de même forme) et de volumes proportionnels à N . À la limite thermodynamique, N et le récipient sont infinis donc tous les paramètres extensifs sont infinis, mais les valeurs des paramètres intensifs sont finies et leur distribution de probabilité est en général infiniment concentrée autour de leur moyenne. Cette limite est un outil théorique qui permet de définir mathématiquement ce qui nous intéresse : le comportement *typique* (le plus probable) d'un système très grand, et débarrassé des effets de taille finie.

Modèle d'Ising. Pour introduire une deuxième série de termes, définissons le *modèle d'Ising*, qui rend compte de la transition de phases du ferromagnétisme. Ce modèle est défini sur un graphe, disons pour fixer les idées un réseau hypercubique de dimension D . À chaque site (ou sommet) du graphe, noté i , on associe une variable S_i , appelée *spin*, qui peut prendre deux valeurs, $+1$ et -1 (ou « haut » et « bas »). S_i est comme la projection du moment magnétique d'une molécule située en i dans une direction fixe (commune à tous les i). Les paramètres microscopiques sont ici les valeurs des N variables, et une configuration est la donnée de toutes ces valeurs — il y a 2^N configurations. Un des paramètres intensifs intéressants est la valeur moyenne d'une variable (la moyenne est prise sur les N variables d'une configuration). Il est appelé « magnétisation ». On associe à chaque configuration \mathcal{C} un nombre $E(\mathcal{C})$ appelé « énergie » et défini comme suit :

$$E(\mathcal{C}) = - \sum_{\langle i,j \rangle} JS_i S_j. \quad (1)$$

J est un nombre constant. S_i et S_j désignent les valeurs dans la configuration \mathcal{C} des variables associées aux sites i et j . La notation $\langle i,j \rangle$ signifie que i et j sont reliés par une arête ;

nous noterons aussi $i \in j$ (cette dernière notation peut aussi servir au cas où les arêtes sont orientées). Les configurations sont munies d'une distribution statistique définie par un *poids statistique*, nombre réel positif ou nul : dans une telle distribution, la probabilité de chaque configuration est proportionnelle à son poids statistique (et donc égale à ce poids divisé par la somme des poids de toutes les configurations, qui ne doit pas être nulle). Ici, le poids statistique de \mathcal{C} est $\exp[-E(\mathcal{C})/(kT)]$ où k est une constante définie plus loin et T un paramètre positif ou nul appelé la température (mathématiquement, il est possible de prendre $J = k = 1$). La somme des poids de toutes les configurations, que l'on peut voir comme une fonction de T , est appelée *fonction de partition* et notée Z . La *moyenne* d'un paramètre (*i.e.* d'une fonction des configurations \mathcal{C}) est la somme de la valeur de ce paramètre pour toutes les configurations, pondérée par la probabilité des configurations. Par exemple, la moyenne de la magnétisation $m(\mathcal{C})$ vaut

$$\langle m \rangle = Z^{-1} \sum_{\mathcal{C}} m(\mathcal{C}) e^{-E(\mathcal{C})/(kT)}. \quad (2)$$

m permet de quantifier le caractère plus ou moins ordonné des configurations (on l'appelle pour cela *paramètre d'ordre*) : nous considérons qu'une configuration est d'autant plus ordonnée que le nombre de spins S_i qui prennent la même valeur est grand. Plus m est proche de $+1$ ou de -1 , plus la configuration est ordonnée. Remarquer qu'une configuration ordonnée a souvent une énergie basse : il est probable que, si m est proche de ± 1 , la plupart des spins ont la même valeur que leurs voisins et que les termes $S_i S_j$ dans l'expression de E soient égaux à 1 plutôt que -1 . Les valeurs de T proches de zéro favorisent les configurations ayant une énergie basse (« proche de $-\infty$ »), donc celles qui sont ordonnées. En fait, on peut calculer de façon exacte et rigoureuse la valeur moyenne de m au moins dans les cas d'un réseau carré à une ou deux dimensions et d'un graphe complet, et l'on trouve que m est strictement positif quand la température T est inférieure à une *valeur critique* T_c (nulle en dimension un) et nulle quand $T \geq T_c$. Ceci reproduit, d'une certaine manière, la transition de Curie du ferromagnétisme.

Désordre gelé. Le désordre des configurations est un « désordre fluctuant », car il varie d'une configuration à l'autre. On distingue aussi, en mécanique statistique, un *désordre gelé*, qui est commun à toutes les configurations. Par exemple, si nous remplaçons l'unique paramètre J du modèle d'Ising par une famille de paramètres J_{ij} , un sur chaque arête reliant les sommets i et j , et que ces paramètres prennent des valeurs différentes (par exemple, nous pouvons tirer chaque J_{ij} à pile ou face entre deux valeurs $+J$ et $-J$), le modèle d'Ising est transformé en modèle de *verre de spins*. Même si T est proche de zéro, les configurations les plus probables ne sont pas forcément celles qui ont une magnétisation proche de 1 ou de -1 , à cause du désordre gelé. Dans un *modèle désordonné*, il ne s'agit pas de calculer simplement l'énergie libre moyennée sur les configurations (elle dépend de la *réalisation* du désordre, autrement dit du nombre astronomique de valeurs des J_{ij} , donc ne donne pas un renseignement facilement exploitable), mais de calculer la moyenne sur les réalisations du désordre des moyennes sur les configurations de l'énergie libre (ou d'autres quantités).

Le cas particulier important où le réseau est le réseau complet à N sites et où les J_{ij} sont tirés équiprobablement au sort entre $+J/\sqrt{N}$ et $-J/\sqrt{N}$ (avec J constant à la limite $N \rightarrow +\infty$) est appelé modèle Sherrington-Kirkpatrick (SK) du nom des personnes qui l'ont introduites. Nous en reparlerons plus loin.

Plus généralement, un modèle de mécanique statistique se donnera un ensemble de configurations et les munira de poids statistiques ; il cherchera à calculer la fonction de partition et les moyennes ou les distributions de divers paramètres.

Longueur de corrélation. Dans un système défini sur un réseau, un graphe ou un espace de dimension D , on peut étudier la manière dont les corrélations décroissent. Si A_i désigne un degré de liberté microscopique du site i et $\langle A_i \rangle$ sa valeur moyenne, on peut définir la corrélation entre les sites i et j comme la moyenne (sur les configurations) de $(A_i - \langle A_i \rangle)(A_j - \langle A_j \rangle)$: si A_i et A_j sont des variables aléatoires indépendantes, la moyenne du produit ci-dessus est égale au produit des moyennes, et chacune est nulle. Donc une valeur non nulle de la moyenne

du produit indique une corrélation statistique. En particulier, quand $i = j$, il y a corrélation maximale. Intuitivement, un site est plus corrélé avec les sites voisins qu'avec d'autres ; pour quantifier cela, on peut calculer la fonction de corrélation $f(r)$ définie comme la somme sur les paires de sites i et j à distance r des corrélations de i et j , divisée par le nombre de paires de sites à distance r . On observe souvent que $f(r)$ est une fonction décroissante de r (parfois, cette « décroissance » n'est pas monotone : $f(r)$ a des oscillations autour de zéro dont l'amplitude diminue avec r). Quand cette décroissance permet de définir une échelle de longueur (par exemple quand $f(r)$ est proportionnelle, asymptotiquement, à $\exp(-r/\xi)$), on appelle cette échelle de longueur la *longueur de corrélation* (souvent notée ξ). Quand la décroissance est algébrique : $f(r) \propto r^{-\alpha}$, on dit parfois que la longueur de corrélation est infinie (dans un système de diamètre fini L , elle est alors d'ordre L).

0.5 Quelques grandes familles de transitions de phases

Présentons, pour situer les travaux de cette thèse, quelques « familles » de transitions de phases. Au passage, notons que la plupart des paramètres, phénomènes, valeurs, mécanismes *etc.* relatifs à une transition de phases sont qualifiés de *critiques* (mais la réciproque est fausse!).

0.5.1 Transitions dans des systèmes physiques de dimension finie statiques ou à l'équilibre, avec interactions à courte portée.

Ces transitions, étudiées par la thermodynamique puis par la physique statistique dès le dix-neuvième siècle, comprennent les exemples donnés plus haut : changements d'état solide-liquide et liquide-gaz, transitions des cristaux liquides, transition de mouillage, transition de Curie pour le magnétisme, ainsi que les transitions des supraconducteurs, métal-isolant, *etc.*

Comme ces systèmes sont issus de la physique, ils possèdent tous une fonction d'énergie (un *hamiltonien*) qui, à chaque configuration des degrés de liberté microscopiques du système (positions et vitesses des molécules, orientations des moments magnétiques, *etc.*), associe un nombre réel appelé l'*énergie (interne)* du système — nous reviendrons plus en détail sur les notions que nous effleurons ici à la section 7.1). Quand un système est isolé (qu'il n'a pas d'interaction du tout avec le reste de l'univers), l'énergie est conservée au cours du temps : l'état microscopique du système fluctue sans cesse (les molécules se déplacent, par exemple), donc la configuration microscopique du système change au cours du temps, mais toutes les configurations visitées ont en commun la valeur de l'énergie interne. Par ailleurs, ces systèmes possèdent un *état d'équilibre* (pour la dynamique physique microscopique qui les fait évoluer, qu'elle soit classique ou quantique), vers lequel leur état converge spontanément si on les laisse évoluer de façon spontanée. Quand un système est en interaction avec un système beaucoup plus gros que lui et que l'ensemble (petit et gros système) est à l'équilibre, l'énergie du petit système n'est pas conservée mais il est possible de décrire la distribution de probabilité des configurations du petit système à l'aide de quelques paramètres macroscopiques (c'est-à-dire commun à toutes les configurations, toutes les valeurs des degrés de liberté microscopiques, tant que l'on ne modifie ni le petit ni le gros système), notamment la température T et le potentiel chimique μ . Sous certaines conditions (voir la section 7.1), la probabilité de visiter chacune des configurations microscopique au cours du temps est commune à toutes les configurations si le système est isolé, ou proportionnelle à $\exp[-(E - \mu N)/(kT)]$ où E est l'énergie interne de la configuration considérée, N son nombre de particules et k la constante de Boltzmann ($k \approx 1,38 \cdot 10^{-23}$ J) si le système est au contact d'un grand système, l'ensemble étant à l'équilibre. Il est alors utile de considérer la *fonction de partition* Z définie comme la somme sur les configurations visitées par le (petit) système de ces facteurs exponentiels, et l'*énergie libre* F définie comme $-kT \ln Z$. Les différentes situations (système isolé ou en contact avec un réservoir) sont modélisées, en mécanique statistique, par différents *ensemble statistiques*, c'est-à-dire différents ensembles de paires (configuration, poids statistique de cette configuration).

Le cas d'un système isolé à l'équilibre est modélisé par des configurations de même énergie et équiprobables (donc de même poids) — on parle d'ensemble (statistique) *microcanonique*. Si le système interagit avec un système beaucoup plus grand que lui (appelé *thermostat*), l'ensemble étant à l'équilibre, et échange de l'énergie avec lui mais *pas* de particules, la situation est modélisée par l'ensemble *canonique* où chaque configuration a le même nombre N de particules et le poids (dit *poids de Boltzmann*) $\exp[-E/(kT)]$ où E est l'énergie de la configuration. Enfin, si le système peut aussi échanger des particules avec le thermostat, la modélisation est celle de l'ensemble *grand-canonique* où le poids statistique est $\exp[-(E - \mu N)/(kT)]$. Remarquer que la notion d'échange de particules n'est pas toujours définie : dans le modèle d'Ising, il n'est pas question de particules, que d'énergie. En cas cas, on ne considère que les ensembles microcanonique (l'énergie est conservée) ou canonique (l'énergie fluctue, sa valeur moyenne est fixée par la température T).

Les différents ensembles sont reliés par des *transformations de Legendre*, que nous allons définir. À la limite thermodynamique, comme nous l'avons dit, les paramètres macroscopiques ont des distributions de probabilité concentrées autour de leur moyenne. Considérons le cas de l'énergie interne dans la distribution canonique. Sa valeur moyenne $\langle E \rangle$ vaut, au coefficient de normalisation Z^{-1} près,

$$\sum_{\mathcal{C}} E(\mathcal{C}) e^{-E(\mathcal{C})/(kT)}. \quad (3)$$

On peut regrouper les termes de cette somme suivant la valeur de leur énergie :

$$\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_E e^{-E/(kT)} \sum_{\mathcal{C} \text{ ayant } E(\mathcal{C})=E} 1. \quad (4)$$

L'*entropie* S de E est définie comme l'opposé du logarithme népérien du nombre de configurations ayant l'énergie E (et multiplié par k), donc nous pouvons aussi écrire

$$\langle E \rangle = Z^{-1} \sum_E e^{-\frac{E-TS(E)}{kT}}. \quad (5)$$

On peut grouper grossièrement les configurations en trois catégories : celles qui ont un poids de Boltzmann important (donc une énergie basse) mais qui ne contribuent pas beaucoup à la somme ci-dessus car il y a peu de configurations à cette énergie. Celles qui ont un poids de Boltzmann éventuellement plus faible mais qui sont suffisamment nombreuses pour maximiser la valeur de $-E + TS(E)$. Enfin, celles qui ont un poids de Boltzmann trop faible pour influencer sur la somme, même si elles sont très nombreuses. Cette distinction, et le fait que $-E + TS(E)$ ait un maximum en fonction de E , n'a aucune raison d'être valable en général. Il se trouve qu'elle est pertinente pour un très grand nombre des systèmes rencontrés en physique, à cause du phénomène de concentration de la mesure discuté ci-dessous. Par conséquent, la valeur de l'énergie moyenne est bien approximée par la contribution unique des configurations d'énergie voisine de l'énergie E^* qui maximise $-E + TS(E)$ — cette énergie E^* est en fait égale, à la limite thermodynamique, à l'énergie moyenne. Or l'emplacement du maximum E^* peut, comme on le voit bien, être choisi continûment en faisant varier T : E^* est telle que

$$1 = T \frac{dS}{dE}(E^*). \quad (6)$$

Donc les paramètres E^* et T sont conjugués, par une opération appelée transformation de Legendre (fixer T revient à fixer la pente de la tangente à la courbe $S(E)$ au voisinage du point E^* qui contribue le plus à la somme sur E , et réciproquement). Si T est connu, cette température fixe une énergie E^* , et les moyennes des paramètres macroscopiques prises dans l'ensemble canonique à T sont, à cause de la concentration de la mesure et à la limite thermodynamique, les mêmes que les moyennes prises dans l'ensemble microcanonique à l'énergie E^* . Dans les deux cas, le logarithme de Z , qui vaut par définition de l'énergie libre $F = -F/(kT)$, peut être approximé par $-[E^* - TS(E^*)]/(kT)$. De même, N et μ sont des paramètres conjugués par

une transformation de Legendre entre les ensembles canonique et grand-canonique. Plus généralement, si le poids statistique d'une configuration s'écrit $\exp[\alpha A(\mathcal{C})]$ et si la distribution des valeurs de A se groupe, pour ce poids statistique, autour de la valeur moyenne A^* de A , le calcul des valeurs moyennes des autres paramètres macroscopiques donne le même résultat, à la limite thermodynamique, dans l'ensemble statistique où A fluctue et dans celui où toutes les configurations ont la même valeur A^* du paramètre A . On peut définir une entropie comme l'opposé du logarithme népérien du nombre de configurations ayant une valeur donnée de A . L'approximation qui remplace, dans l'ensemble où A fluctue, la valeur de la somme sur les configurations par la seule contribution des configurations de valeur A^* est une *approximation de point-col* (ou méthode de Laplace). Elle devient exacte à la limite thermodynamique.

Dans tous les exemples de transitions de phases cités au début de ce paragraphe, les constituants élémentaires sont situés dans un espace de dimension finie (dimension un, deux ou trois), et ils n'interagissent notablement qu'avec les autres constituants situés dans leur voisinage : on parle d'interaction à courte portée. Même dans les cas où l'interaction entre deux constituants situés loin l'un de l'autre dans le système n'est pas nulle ou exponentiellement faible (cas des interactions de van der Waals dont la force ne décroît avec la distance r que comme $1/r^6$), on peut considérer que les interactions sont à courte portée : l'important est que si l'on coupe un système macroscopique en deux, la différence entre l'énergie interne de l'ensemble intact et la somme des énergies des sous-ensembles supposés isolés tend vers zéro quand la taille du système entier tend vers l'infini (propriété d'additivité de l'énergie). Plus généralement, même quand le système est en interaction avec un gros système (mais toujours à l'équilibre), l'énergie libre F est additive (la somme des énergies libres de deux sous-systèmes grands est quasiment égale à l'énergie libre du système entier). On peut donc définir une énergie libre par unité de volume (ou de masse, ou par particule, *etc.*) comme la limite de l'énergie libre du système divisée par son volume (ou sa masse *etc.*) quand ce volume tend vers l'infini. En pratique, on observe que la convergence vers cette limite est assez rapide, à cause de la propriété d'additivité (l'écart-type relatif entre la valeur du rapport énergie libre/volume pour un système de N constituants et la limite à grand N décroît comme $1/\sqrt{N}$ selon le théorème de la limite centrale, soit $L^{-D/2}$ pour un système de dimension D et de diamètre L). Plus généralement, le théorème de la limite centrale permet, la plupart du temps, de montrer que les distributions statistiques des valeurs des différents paramètres se concentrent autour de leur moyenne, ce qui permet d'utiliser une approximation de point-col et des transformations de Legendre. Toujours à cause de l'additivité (du découpage possible du système en sous-systèmes quasiment indépendants), les fonctions de corrélation décroissent la plupart du temps exponentiellement avec la distance et la longueur de corrélation est finie.

Une transition de phases, dans ce contexte, est un point de l'espace des paramètres macroscopiques qui caractérisent l'état du système (par exemple, la température T et le potentiel chimique μ) où l'énergie libre par unité de volume f (ou de masse *etc.*), prise à la limite thermodynamique, n'est *pas* une fonction analytique des paramètres macroscopiques (pour un système de taille finie, l'énergie libre est toujours une fonction analytique). Cet espace est appelé *espace des phases*.

Transitions de phases du premier ordre. On distingue des transitions de phases du premier et du deuxième ordre selon qu'elles sont *continues* ou *discontinues*. Soit un paramètre intensif dont la valeur permet de faire franchir la transition de phases au système considéré (par exemple, la température pour le changement d'état liquide-gaz de l'eau). Au point d'une transition du premier ordre, il existe au moins deux mesures de probabilité pour les configurations à la limite thermodynamique (*stricto sensu*, au moins deux éléments extrémaux de l'ensemble convexe des mesures de probabilité à la limite thermodynamique : au lieu de converger vers une mesure univoque comme elle le ferait hors d'une transition de phases, une suite de mesures de probabilité d'équilibre pour des systèmes de plus en plus grands au point d'une transition de phases peut « osciller » ; l'adhérence de l'ensemble de ces suites est un ensemble convexe). Physiquement, une de ces mesures de probabilité est ce que l'on appelle

une *phase* et caractérise un comportement du système. Par simplicité nous nous restreignons ici au cas de deux mesures seulement ; on peut généraliser facilement. Chacune des mesures de probabilité est paramétrée continûment par le paramètre intensif, et l'une a une énergie libre plus basse que celle de l'autre d'un côté de la transition, et plus haute que celle de l'autre de l'autre côté. Dans l'exemple de l'eau, la première mesure est caractérisée par une densité élevée et une non-occupation de tout le volume disponible (l'état liquide), tandis que l'autre a une densité basse et occupe tout le volume (l'état gazeux). La loi de probabilité $P(d)$ de la densité est bimodale : elle a deux parties concentrées autour d'une valeur la plus probable, séparées par une région où la probabilité $P(d)$ est exponentiellement faible en le volume V du système et négligeable devant les probabilités dans chacune des deux parties. Les mesures de probabilités des deux parties ne sont en général pas égales : sauf au point de transition, où elles sont du même ordre, l'une est proche de un et l'autre est exponentiellement faible en V . Si le paramètre intensif n'est pas à sa valeur critique, le système est caractérisé, à l'équilibre, par la mesure de probabilité qui a l'énergie libre la plus basse. En revanche, à la valeur critique, le système peut être dans un état mixte, où il y a coexistence des deux mesures de probabilité : certaines régions sont dans un état bien décrit par une mesure, et d'autres dans un état bien décrit par l'autre. Dans le cas de l'eau, le système est dans un état où coexistent gouttes d'eau et bulles de vapeur. Entre les régions dans les deux états existent des *interfaces*. Le mécanisme de la transition de phase est le suivant : lorsque le paramètre intensif franchit sa valeur critique, le système reste, pendant un certain instant, dans l'ancien état. Cet état est dit *métastable* car il est stable vis-à-vis de petites fluctuations mais instable vis-à-vis de grandes fluctuations. Des « gouttelettes » de l'autre état sont sans cesse engendrées par les fluctuations thermiques, mais si leur taille est inférieure à une taille critique l'énergie libre de l'ensemble gouttelette et interface est supérieure à l'énergie libre sans gouttelette. Quand une gouttelette assez grande pour faire baisser globalement l'énergie libre du système apparaît, elle croît jusqu'à occuper tout le système et celui-ci se retrouve dans la phase stable. La taille critique des gouttelettes est d'autant plus petite que le paramètre intensif est loin de sa valeur critique ; elle devient nulle en un certain point (où la moindre fluctuation thermique suffit à faire basculer le système dans l'état stable). Nous reverrons ce mécanisme au paragraphe 7.3.2. Lors du changement d'état, le système échange une énergie finie (proportionnelle à son volume), la *chaleur latente* : il est bien connu qu'il faut chauffer de l'eau pour la faire évaporer, même après qu'elle a atteint cent degrés. Ceci peut être vu comme une indication de la non-analyticité de l'énergie libre : la dérivée première de l'énergie libre F par rapport à T est liée à la valeur moyenne de l'énergie interne E , et cette énergie interne n'est pas la même dans les deux phases (la différence doit être fournie ou absorbée par l'environnement du système pendant la transition de phases), autrement dit la dérivée première de l'énergie libre (par unité de volume) est une fonction discontinue d'un paramètre intensif (la température pour l'eau). La longueur de corrélation est finie dans les deux états (avant et après la transition) aussi bien qu'à la transition.

Transitions du deuxième ordre. Elles ont un mécanisme différent : la longueur de corrélation, finie en dehors du point de transition, diverge quand le paramètre intensif approche de sa valeur critique et, au point de la transition, les fonctions de corrélation décroissent algébriquement. L'exposant de cette loi de puissance est appelé *exposant critique* et il est *universel* ; ces notions seront définies et commentées au chapitre 2. Le passage d'une phase à l'autre se fait sans chaleur latente (il suffit d'échanger avec le système la chaleur suffisante pour le réchauffer ; même si la capacité calorifique du système peut diverger au point de transition, faire changer sa température d'une valeur infinitésimale demande d'échanger une énergie infinitésimale et non finie comme pour une transition du premier ordre). Le point de la transition correspond non pas à une lutte d'influence avec coexistence de deux phases (ou deux mesures de probabilité) ou plus, chacune ayant ses régions du système aux frontières (interfaces) mouvantes, comme dans le cas d'une transition discontinue, mais à un état d'extrême sensibilité du système aux fluctuations et sollicitations, où le changement sur un degré de liberté microscopique localisé peut se répercuter à des distances relativement grandes. Un certain nombre de

paramètres macroscopiques divergent selon des lois de puissance au voisinage de la transition avec des exposants critiques universels. Les propriétés de symétrie (d'invariance) du système, après moyenne sur les fluctuations, c'est-à-dire la symétrie des distributions de probabilité du système, et non pas la symétrie des configurations individuelles, sont souvent plus nombreuses au point de transition qu'en dehors. En particulier, les systèmes bidimensionnels au milieu d'une transition de phases du deuxième ordre sont souvent invariants sous les transformations conformes (à la limite thermodynamique où l'espace est quasiment continu car le pas du réseau s'annule).

Effet du désordre (gelé). On sait enfin que le désordre gelé (défini plus haut), s'il est présent avec une amplitude suffisamment faible, ne fait pas disparaître une transition de phases mais altère ses propriétés. Pour préciser ce que nous entendons par faible, donnons un exemple : si, dans le modèle d'Ising défini plus haut, la constante J commune à toutes les paires de sites voisins est remplacée par un nombre $J + \epsilon_{ij}K$ qui dépend de la paire de sites i et j , où K est fixé et où ϵ_{ij} vaut ± 1 selon les paires de sites, le cas du « désordre faible » est le cas de valeurs de K infinitésimales — et en pratique il s'étend souvent à des valeurs de K finies mais par souci de généralité nous appelons « faible » les amplitudes infinitésimales. Si l'amplitude K est grande, les propriétés du modèle peuvent être changées : par exemple, si $K > J$, la transition de phases en T_c du modèle d'Ising disparaît car la phase de basse température ($T < T_c$) a une magnétisation moyenne nulle (après moyenne sur le désordre). Un désordre faible a un effet quantitatif faible sur une transition de phase (par exemple, il peut décaler faiblement les valeurs des paramètres intensifs qui situent la transition), mais peut avoir un effet qualitatif très important : si la transition de phases est du deuxième ordre, il peut changer (d'une valeur finie) les valeurs des exposants critiques, et si elle est du premier ordre et si le système a deux dimensions, il est démontré rigoureusement que le désordre, en amplitude si faible soit elle, la transforme en transition du deuxième ordre [1, 2]. Le mécanisme de ce dernier effet est le suivant : à cause des fluctuations des paramètres du modèle, chaque région a, en quelque sorte, son propre point de transition du premier ordre, et les points des différentes régions sont disposés aléatoirement. Par conséquent, l'apparition d'une gouttelette de taille critique de l'autre phase quand le système est majoritairement dans une phase n'est plus un problème : il existe avec grande probabilité dans un système infini une région où l'autre phase est thermodynamiquement favorisée ; la gouttelette couvre donc au moins une telle région. On peut s'étonner qu'un désordre d'amplitude infinitésimale suffise à changer les propriétés qualitatives des transitions ; le paradoxe disparaît si l'on remarque que ces propriétés qualitatives sont définies à la limite thermodynamique, pour des systèmes arbitrairement grands. On peut associer une distance typique à une distribution du désordre (que l'on peut voir, par exemple, comme le diamètre minimal d'une région où la probabilité d'observer une valeur critique des paramètres intensifs au moins différente d'un pourcent de la valeur critique du système pur dépasse 1/2). Cette distance diverge quand l'amplitude du désordre tend vers zéro. Pour des systèmes de taille finie nettement plus petite que cette distance, le comportement qualitatif sera très proche de celui du système pur, avec une transition progressive (*cross-over* en anglais) vers le comportement à la limite thermodynamique quand la taille du système est comparable à la distance typique du désordre.

0.5.2 Autres transitions de phases

Transitions de phases quantiques. Il s'agit de transitions de phases qui concernent l'état fondamental d'un modèle, le plus souvent quantique, c'est-à-dire de transitions de phases à l'équilibre et à température nulle. On dit qu'un système a une transition de phase quantique en un point où l'énergie de son état fondamental est non analytique (à la limite thermodynamique) [3]. Le modèle est défini par un hamiltonien (quantique le cas échéant) à un ou plusieurs paramètres, et la transition se produit quand l'un de ces paramètres est varié. Historiquement, les systèmes considérés étaient surtout issus de la physique des solides, et le

paramètre était la concentration d'un des composants (le *dopage*), comme dans le cas des transitions superconducteur-semiconducteur, ferromagnétique-verre de spins-antiferromagnétique, *etc.* Donc on ne pouvait pas réellement observer la transition pour un échantillon donné, mais seulement comparer les comportements d'échantillons préparés avec des taux de dopage différents. Récemment, une observation directe est devenue possible dans les systèmes de gaz ultrafroids dont les interactions peuvent être changées continûment à l'aide de résonances de Feshbach [4].

Transitions pour des systèmes de dimension finie hors d'équilibre.

Toutes les transitions ci-dessus concernent des systèmes à l'équilibre : il y a un changement qualitatif entre les mesures de probabilité qui caractérisent l'équilibre d'un système, prises à la limite thermodynamique, de part et d'autre du point critique. Mais certaines transitions ne peuvent être définies sans référence à la dynamique ou à la cinétique d'un système et ont traités à des systèmes hors d'équilibre. Par exemple, dans le cas du processus de contact vu à la section 7.3, la transition a lieu entre deux comportements hors d'équilibre de la densité : dans un cas elle décroît rapidement vers zéro, dans l'autre elle reste finie pour une durée moyenne exponentiellement grande en la taille du système. Mais, dans les deux cas, l'état d'équilibre finalement atteint est trivial : la densité y vaut zéro. Un autre exemple concerne les embouteillages de la circulation automobile, où une transition entre deux états hors d'équilibre (un état fluide, peu dense, de vitesse élevée, et un état embouteillé, dense, de vitesse faible) peut être déclenchée par un changement infime de la densité de voitures arrivantes ou sortantes de la route.

Un nombre important de transitions de phases hors d'équilibre (ceux où il existe un nombre fini d'états absorbants, comme le processus de contact et des variantes) ont les mêmes exposants critique que la transition de la percolation dirigée. Dans ce modèle géométrique, que nous ne définirons pas ici, en dimension D , l'une des dimensions d'espace est distinguée des autres et l'on peut aussi le voir comme un modèle hors d'équilibre en dimension $D - 1$ (les configurations en dimension D indiquent la succession dans le temps de configurations en dimension $D - 1$).

Transitions dans des systèmes statiques non physiques, sans géométrie de dimension finie, en combinatoire. Le travail pionnier d'Erdős et Rényi en 1960 [5, 6] a mis en évidence une transition de percolation dans les graphes aléatoires qui portent désormais leur nom. Nous qualifions ce contexte de géométrie de type champ moyen, car elle ne peut pas être plongée dans un espace de dimension finie indépendante de la taille N du problème, et tous les composants du problème peuvent en principe interagir avec tous les autres (alors que, dans un système physique de matière condensée, un composant (spin, atome, molécule, *etc.*) interagit de façon non négligeable avec les seuls autres composants situés dans son voisinage immédiat). D'autres transitions dans de tels systèmes ont ensuite été découvertes, et nous y reviendrons longuement au chapitre 2.

0.6 Modèles à caractère de champ moyen et modèles solubles

Les modèles de mécanique statistique où l'on peut mener des calculs (d'énergie libre, *etc.*) *exacts* à la limite thermodynamique jouent un rôle important dans le développement de cette discipline car, bien trop souvent, l'impossibilité d'obtenir des résultats exacts (sans parler de résultats rigoureux) ravale la physique au rang de discipline argumentative, où des résultats contradictoires et difficilement vérifiables s'accumulent pendant des lustres, voire des décennies. Les modèles dits « de champ moyen » sont justement souvent solubles de façon exacte et peuvent apporter un éclairage important ; ils constituent souvent des cas limites plus simples d'autres modèles (notamment des cas limites où la dimension d'espace tend vers l'infini), même s'il faut garder à l'esprit qu'ils ne représentent pas directement les vrais systèmes (de dimension finie, avec interactions à courte portée, *etc.*).

Comme nous l'avons évoqué, un système est dit de champ moyen quand tout constituant peut interagir avec chacun des autres. C'est le cas du modèle d'Ising sur réseau complet : chaque spin a tous les autres spins pour voisins, ou des graphes aléatoires d'Erdős et Rényi définis à la section 2.2 p. 33 : chaque sommet a la même probabilité d'être relié à chaque autre par une arête (et les présences des différentes arêtes sont des événements statistiquement indépendants). Ce n'est pas le cas du modèle d'Ising sur réseau hypercubique de dimension D : chaque spin a $2D$ voisins et n'interagit pas directement avec les spins placés au-delà de ses voisins. Un tel système peut être étudié assez facilement car les fluctuations y sont faibles : l'effet qu'un spin du modèle d'Ising sur réseau complet reçoit de l'ensemble de ses voisins est concentré autour de sa moyenne, car cet effet est la somme d'un grand nombre ($N - 1$) de variables la plupart du temps peu corrélées. De même, la loi de probabilité du degré d'un sommet d'un graphe d'Erdős et Rényi est concentrée autour du degré moyen.

Dans les cas favorables, on peut écrire des équations exactes pour les fonctions génératrices sur les réseaux ou les graphes de champ moyen et s'efforcer de résoudre ces équations ; c'est exactement le fondement de l'étude qui fait l'objet de la première partie de ce mémoire. Pour donner une idée plus précise de ce que peut être un « cas favorable », détaillons deux modèles de spins d'Ising (± 1) sur réseaux complets. Soit N le nombre de sommets (ou de spins) sur un tel réseau. Le modèle de Curie et Weiss (CW) de matériau ferromagnétique postule des couplages ferromagnétiques (c'est-à-dire qui favorisent énergétiquement l'alignement des spins voisins) identiques entre toutes les paires de spins, et d'énergies d'ordre $1/N$ de sorte que l'énergie totale mise en jeu par les liens soit extensive (proportionnelle à N). Le modèle, déjà cité, de verre de spins de Sherrington et Kirkpatrick (SK) prend des couplages d'énergies d'ordre $1/\sqrt{N}$ et de signes (± 1) aléatoires et équiprobables. Pour le modèle CW (années 1890-1900), le calcul est très facile et prédit une transition de phase entre un état, atteint à basse température, ferromagnétique (avec aimantation spontanée, c'est-à-dire qu'à chaque instant le spin moyen des N sommets du réseau est non nul, même si son signe n'est pas fixé, car une majorité de spins pointent dans la même direction) et un état de haute température paramagnétique (à chaque instant, le spin moyen est nul car $N/2 \pm \sqrt{N}$ spins pointent vers le haut et les autres vers le bas, sauf s'ils sont mis d'accord par un champ magnétique externe, sur lequel la majorité s'aligne). Le calcul est facile car, à la limite $N \rightarrow +\infty$, l'approximation qui consiste à remplacer la somme des valeurs des spins des $N - 1$ voisins d'un site par la moyenne de tous les spins (multipliée $N - 1$) devient exacte. C'est de ce modèle que vient le nom de « champ moyen » : on remplace le champ local exercé par ses voisins sur un spin par le « champ moyen » exercé par tous les spins, ce qui n'est bien sûr exact (pour N grand) que dans le cas du réseau complet. Pour le modèle SK, la situation est beaucoup plus complexe, du fait d'une part de la *frustration* (comme les couplages entre spins peuvent avoir des signes quelconques, il n'est en général pas possible de les satisfaire tous donc, à température très basse, de nombreux états thermodynamiques coexistent : dans certains, tels liens sont satisfaits alors que dans d'autres ils sont frustrés — un système ferromagnétique, en comparaison, n'a que deux états à température nulle, distingués par l'orientation commune de tous les spins), et d'autre part du *désordre gelé* : les couplages entre spins ont un signe aléatoire, donc la fonction de partition, qui est une somme sur les degrés de liberté thermiques, à savoir les orientations des spins, doit à son tour être moyennée sur ces signes. Les techniques de calcul qui ont permis l'étude quantitative du modèle SK sont assez élaborées ; il s'agit de la méthode des répliques et de celle de la cavité [7]. Ces méthodes ne sont pas rigoureuses mais, dans certains cas, exactes. Récemment, il a été montré rigoureusement par F. Guerra, F. Toninelli et M. Talagrand que leurs résultats sont corrects. Nous n'utiliserons pas la méthode des répliques ni celle de la cavité dans ce mémoire, mais il nous arrivera d'y faire allusion.

Un autre cas de modèle soluble (mais pas de champ moyen) est celui des réseaux hiérarchiques, que l'on obtient en remplaçant chaque sommet d'un arbre de Cayley par un graphe fini (le même pour tous les sommets). Comme les différentes « branches » d'un tel réseau sont découplées, on peut factoriser la fonction de partition sur ces branches pour la calculer exactement. Cependant, un tel réseau pose la difficulté de ses conditions aux bords : même

s'il est infini et sans bord, moralement la plupart des sites sont sur le bord, comme on peut le voir en prenant une suite de troncatures finies d'un réseau hiérarchique, où les branches sont de plus en plus longues, qui « converge » vers le réseau hiérarchique infini.

Par extension, ces techniques de calcul exact peuvent permettre d'étudier des systèmes de dimension finie, mais très grande : chaque nœud est connecté à un nombre élevé de voisins, donc, dans certaines circonstances par toujours bien maîtrisées, la loi des grands nombres semble valable et la valeur des propriétés physiques d'un nœud a une distribution très concentrée autour de sa moyenne. Il s'agit seulement d'une approximation (dénommée approximation de Curie-Weiss dans le cas du ferromagnétisme) mais elle est commode et peut constituer le point de départ d'un développement systématique, en puissances inverses de la dimension d'espace par exemple, comme nous le verrons dans la deuxième partie de ce mémoire (attention cependant aux cas où un tel développement n'a pas de sens parce que la fonction développée a une singularité essentielle au point autour duquel on développe !). Dans le même ordre d'idées, après avoir exprimé une fonction de partition sous la forme d'une intégrale de chemins, on peut évaluer cette intégrale par la méthode du col (ou méthode de Laplace), qui est exacte à la limite thermodynamique pour un système de grande taille, et peut constituer le point de départ d'un développement systématique.

Une autre famille de techniques de résolution exacte est celle des modèles de matrices [8]. Leur fonction de partition est définie comme l'intégrale d'une *action* sur toutes les matrices d'un certain ensemble (muni d'une structure permettant l'intégration). Elle correspond dans certains cas à une somme sur tous les graphes planaires d'un *genre* donné (le genre d'un graphe planaire resp. d'une surface est lié au nombre de trous qu'il faut faire dans une sphère — ce qui la transforme en tore à un, deux, trois,... trous — pour que ce graphe puisse être dessiné sans croisement d'arêtes sur la sphère trouée resp. pour que la surface puisse être déformée continûment en la sphère trouée). Le caractère planaire des graphes qui correspondent aux termes de la fonction de partition vient de ce que les matrices sont des objets bidimensionnels, à *deux* indices : si l'on définissait une action de nombres plutôt qu'une action de matrices, les graphes engendrés seraient des graphes aléatoires sans propriétés particulières. Les modèles de matrices permettent donc d'une certaine manière de se rapprocher des modèles physiques, de dimension finie. Ils permettent aussi de déduire les propriétés critiques d'un modèle bidimensionnel sur réseau plus simplement que par calcul direct : on fait le calcul pour le modèle de matrices puis on utilise un principe de correspondance [8]. Nous ne les utiliserons cependant pas dans ce mémoire de thèse.



Première partie

La classe d'universalité de la propagation unitaire

Résumé. Après avoir présenté brièvement le domaine de l'analyse d'algorithmes dans lequel le travail de cette première partie peut s'inscrire, nous rappelons des faits connus sur les transitions de phases en combinatoire, puis nous présentons les problèmes de satisfaction de contraintes et d'optimisation combinatoire et quelques algorithmes utilisés pour les résoudre où nous mettons finalement en évidence, dans le cas particulier des algorithmes complets de résolution du problème de décision de la satisfaisabilité aléatoire avec heuristique dite de la propagation unitaire, l'existence d'une classe d'universalité critique. Nous donnons les valeurs exactes de ses exposants critiques et, quand c'est possible, une forme analytique de la fonction d'échelle.

Chapitre 1

L'analyse d'algorithmes

Nous savons tous qu'un ordinateur est un amplificateur d'intelligence. Apparemment, il crée aussi du sens à partir du n'importe quoi.

Thomas M. Cover et Joy A. Thomas, *Elements of information theory*

LE travail central de ce chapitre peut être considéré comme une analyse d'algorithmes. Ce type d'études a été initié par le célèbre informaticien D. E. Knuth dans les années 1960 et s'est ensuite largement développé dans la communauté des informaticiens théoriciens et des mathématiciens combinatoriciens. Un algorithme est un procédé, déterministe ou en partie aléatoire, qui produit un résultat à partir de données d'entrée — quand l'algorithme est déterministe, il se déroule toujours de la même manière, donc prend le même temps et produit le même résultat ; quand il est aléatoire, il questionne un générateur de nombres aléatoires ou pseudo-aléatoires pour faire des choix lors de son exécution, donc le temps pris et le résultat produit peuvent varier. Un algorithme est souvent destiné à être exécuté par un ordinateur (mais l'algorithme de la division euclidienne, par exemple, est connu et pratiqué par de nombreux humains dès l'école primaire !). Il s'agit de calculer, par une analyse reposant sur des calculs de probabilités, certaines grandeurs caractéristiques du déroulement de l'algorithme (ou plus précisément leur moyenne ou leur distribution de probabilité), par exemple le nombre d'opérations qu'il nécessite pour se terminer (en supposant qu'il se termine en une durée finie) ou la taille maximale des données intermédiaires qu'il doit stocker. Les probabilités interviennent car les données d'entrée sont diverses (il est peu intéressant en pratique d'utiliser le même algorithme déterministe sur les mêmes données plusieurs fois de suite !), et par commodité on les modélise par des données tirées au sort avec une certaine *distribution statistique* (postulée). Les probabilités interviennent aussi quand l'algorithme lui-même effectue des choix aléatoires pendant son déroulement.

Un exemple simple d'analyse d'algorithme importante en pratique concerne l'algorithme de tri nommé « Quicksort ». Soit N données munies d'une fonction de comparaison (par exemple N mots du dictionnaire ou N nombres entiers) qu'il s'agit de ranger dans l'ordre croissant. « Quicksort » procède selon le principe courant de la subdivision récursive, dit aussi « diviser pour mieux régner » : si les données d'entrée contiennent plusieurs éléments, cet algorithme choisit un *pivot* parmi elles puis forme deux ensembles, celui des données à ranger avant le pivot et celui des données à ranger après (ce qui nécessite *grosso modo* N opérations). Il s'applique ensuite lui-même à chacun de ces ensembles, puis renvoie la concaténation du premier résultat, du pivot et du deuxième résultat. Si au contraire les données d'entrée contiennent un élément au plus, le résultat est immédiat. Ici, l'aléa vient des données d'entrée et éventuellement du choix du pivot.

Pour quantifier l'efficacité d'un algorithme, on calcule sa *complexité algorithmique* (en temps), qui est le nombre d'opérations élémentaires que l'algorithme effectue pour des données contenant N éléments (en général, par commodité, on donne seulement un équivalent asymptotique à ce nombre quand $N \rightarrow +\infty$, et encore, à un facteur numérique constant près). Ce nombre prédit un ordre de grandeur du temps que prend le déroulement de l'algorithme (après une étape d'« étalonnage » qui consiste à mesurer cette durée pour des données de petite taille N et sur l'ordinateur qui nous intéresse). Il ne prend pas toujours en compte les

« coûts occultes », par exemple le temps nécessaire à gérer la mémoire si l'algorithme utilise des données intermédiaires de grande taille (outre la gestion de la mémoire proprement dite, le temps d'accès aux données peut varier fortement en fonction de leur taille : de grandes données doivent être stockées sur une mémoire de grande capacité plus lente que la mémoire de travail — sur les ordinateurs de bureau contemporains, on distingue ainsi la mémoire cache du microprocesseur (deux niveaux), la mémoire vive et le disque dur, avec des rapports de vitesses successifs de 10 à 50 environ puis 1000). On peut aussi considérer la complexité en *espace* d'un algorithme, c'est-à-dire le nombre de bits (chiffres binaires) de mémoire dont il a besoin pour s'exécuter. Dans toute la suite, nous entendrons toujours « complexité en temps » quand nous écrirons « complexité » sans autre précision.

Dans le cas de Quicksort, on peut choisir les comparaisons de deux éléments à trier comme opérations élémentaires et donc comme indication du temps de calcul de l'algorithme (à un facteur d'étalonnage et aux coûts occultes près). On montre que la moyenne du nombre de comparaisons, prise sur les $N!$ permutations possibles de N données, est de l'ordre de $N \ln N$ (ce que l'on note $\Theta(N \ln N)$ pour indiquer qu'asymptotiquement pour N grand, le nombre est compris entre $aN \ln N$ et $bN \ln N$ avec a et b positifs strictement et indépendants de N). L'on peut montrer qu'aucun algorithme réalisant la même tâche ne peut faire moins de comparaisons (à un coefficient multiplicatif constant près), donc Quicksort est optimal en moyenne pour des données « parfaitement » aléatoires. En revanche, le résultat n'est pas forcément le même pour la complexité *dans le pire des cas*, par opposition à la complexité *moyenne*. Prenons un exemple : l'algorithme Quicksort où le choix du pivot se porte toujours sur la première donnée à trier (ce qui est naturel, plus simple et au moins aussi rapide qu'aucun autre choix). Si les données sont déjà rangées, la subdivision récursive est complètement inefficace (les n données restantes sont à chaque fois réparties entre un pivot, un ensemble vide et un ensemble de $n - 1$ données au lieu de deux ensembles de $(n - 1)/2$ données), et l'algorithme effectue $N(N - 1)/2$ comparaisons entre les éléments à trier, soit, en raccourci, $\Theta(N^2)$. Quicksort avec ce choix de pivot n'est donc pas optimal dans le pire des cas, ni, plus généralement, si les données à trier ont en fait une distribution biaisée où les séquences déjà triées (ou partiellement triées) sont sur-représentées (ce qui est souvent le cas en pratique). Pour une telle distribution, un meilleur choix du pivot serait de prendre la donnée située au milieu de la séquence (mais il y aura toujours des entrées catastrophiques nécessitant $\Theta(N^2)$ comparaisons), ou encore une donnée au hasard. Notons que, dans le cas du tri de N données, il existe des algorithmes dits stables pour lesquels toutes les données d'entrée mènent à des nombres d'opérations du même ordre de grandeur (par exemple le tri par fusion où l'on sépare les données en deux ensembles, celles initialement en positions paires resp. impaires, l'on trie les deux ensembles puis l'on interclasse le reste). « Quicksort » est en revanche le plus rapide en moyenne (non biaisée) quand on prend en compte les « préfacteurs » devant $N \ln N$ dans la complexité.

On devine à travers cet exemple que l'analyse d'algorithmes a pour sujet d'étude des phénomènes que le physicien qualifie de *hors d'équilibre* : l'algorithme impose en général un sens au déroulement du temps, c'est-à-dire que, si l'on prend des « instantanés » des données manipulées par l'algorithme après qu'il a fait 0, 1, 2, *etc.* opérations et si l'on forme un film en enfilant ces instantanés du dernier au premier, on peut dire avec certitude (ou avec quasi-certitude pour des algorithmes aléatoires) que ce film est à l'envers. De plus, les données manipulées sont très souvent discrètes (un ordinateur ne manipule que des chiffres binaires 0 ou 1), et l'on a en fait affaire à un ensemble de spins d'Ising ou de variables du même type. On ne sera donc pas surpris que les outils et concepts de la physique statistique des phénomènes hors d'équilibre se révèlent utiles dans ce contexte. Cependant, la cinétique de ces données est sauf exception non physique, c'est-à-dire que l'on ne peut lui associer de hamiltonien, de condition d'équilibre détaillé (ces notions sont discutées en détail au chapitre 7), ou encore de notion d'interactions à courte portée (la plupart du temps, les changements faits sur une variable peuvent se propager en très peu d'étapes à l'ensemble du système, alors que dans un système physique où les interactions sont à courte portée il faut un temps qui diverge

avec la taille du système). On verra néanmoins brièvement que de telles études d'informatique théorique ont eu et auront probablement encore un impact sur la physique statistique.

Les algorithmes que nous étudions dans cette partie sont présentés plus loin. Ils s'attachent à résoudre des problèmes considérés comme difficiles en informatique théorique, c'est-à-dire pour lesquels on ne connaît pas (et vraisemblablement pour lesquels il n'existe pas) d'algorithme substantiellement meilleur que celui qui consiste à essayer toutes les combinaisons possibles — en tout cas, pour des données d'entrée de taille N , il faut pour certaines d'entre elles un nombre exponentiel en N d'opérations : on dit que la complexité de ces algorithmes *dans le pire des cas* est exponentielle. En pratique, pour certaines distributions d'entrées, paramétrées par un nombre réel α , on constate que le nombre moyen d'opérations (ou le temps moyen de calcul sur ordinateur) nécessaire pour traiter les données se comporte très différemment pour grand N suivant que α est plus petit ou plus grand qu'un certain seuil. Dans le premier cas, le temps moyen est proportionnel à N (même si le temps dans le pire des cas est exponentiel), dans l'autre il est exponentiel en N . Ce phénomène est en fait, comme on le sait depuis une dizaine d'années, une transition de phase, et le propos de notre étude était de voir si l'analogie pouvait être poussée au point qu'il existe, pour ce problème d'informatique, des fonctions d'échelle, des exposants critiques et une ou des classes d'universalité.

Chapitre 2

Transitions de phases en combinatoire

COMME nous l'avons mentionné dans l'introduction, les systèmes étudiés dans la branche des mathématiques (et de l'informatique théorique) appelée la combinatoire peuvent présenter des transitions de phases. Ces systèmes sont la plupart du temps de type champ moyen, c'est-à-dire que leurs constituants ne sont pas placés dans un espace de dimension finie et qu'ils peuvent interagir avec la même intensité avec n'importe quel autre constituant (« interaction » et « intensité » sont pris ici dans un sens large ; par exemple, si le système est un ensemble d'équations faisant intervenir des variables tirées au sort dans un ensemble donné, on peut dire que deux variables interagissent si elles apparaissent dans une même équation). Ils se prêtent donc bien à des calculs analytiques et l'on peut en calculer beaucoup de propriétés (et même en démontrer mathématiquement). Après avoir introduit un peu de vocabulaire utilisé par les mathématiciens et informaticiens et quelques-uns de leurs outils, nous présentons l'une des transitions de phases les plus étudiées et les plus simples dans ce domaine, la transition de percolation des graphes aléatoires. Nous la verrons apparaître dans les systèmes que nous avons étudiés.

2.1 Phénomènes de seuil en combinatoire

Schématiquement, un *phénomène de seuil abrupt* (*sharp threshold* en anglais) en théorie des probabilités ou en combinatoire est une situation où, à la limite où la taille du problème combinatoire N (souvent égale au nombre de variables impliquées, et que l'on appellerait en physique *taille du système*) tend vers l'infini, la probabilité qu'un événement se réalise, vue comme fonction d'un poids statistique ou d'une probabilité d'événements microscopiques, devient discontinue [9, 10] — ceci rappelle les transitions de phases de la physique statistique. De même qu'en mécanique statistique, il faut préciser à la fois la propriété étudiée et l'ensemble d'objets *muni d'une distribution statistique* (ou d'une mesure de probabilité) sur lequel on l'étudie pour définir un phénomène de seuil. Précisons un point de vocabulaire : on dit qu'un événement est *presque sûr* ou se produit *presque sûrement* (p. s.) si sa probabilité tend vers un quand $N \rightarrow +\infty$.

Donnons une définition précise de « phénomène de seuil abrupt » dans le cas où les variables qui définissent le problème sont bivaluées et prennent, disons, les valeurs 0 et 1. L'espace des configurations de ces variables est $\mathcal{E} := \{0, 1\}^N$ s'il y a N variables. On le munit d'une famille de mesures de probabilité produits paramétrées par un nombre réel p pris dans $[0, 1]$: si le vecteur $\vec{x} \in \mathcal{E}$ décrit les valeurs x_1, x_2, \dots, x_N prises par les N variables dans une certaine configuration, la probabilité de cette configuration est

$$\mu(p, \vec{x}) := p^{\sum_i x_i} (1-p)^{N-\sum_i x_i}. \quad (2.1)$$

Le physicien reconnaît là un poids statistique ; en changeant la valeur de p nous pouvons faire en sorte que les configurations les plus probables aient telle ou telle valeur du nombre moyen de variables à 1 (quantité macroscopique conjuguée de p), de même que la température sélectionne l'énergie moyenne des configurations d'un ensemble d'atomes en interaction.

Soit W une *propriété (booléenne)* des configurations, c'est-à-dire une fonction qui, à toute configuration, associe la valeur vrai ou faux, ou encore 1 ou 0 (par exemple, W peut être la propriété « contenir au moins cinq variables à 0 »). Nous identifions W avec l'ensemble des configurations de \mathcal{E} où W est vraie (vaut 1). La probabilité de W (avec la valeur p du paramètre) est alors la mesure de probabilité $\mu(p, W)$ de cet ensemble. Les phénomènes de seuils se produisent à la limite thermodynamique : soit une suite $(W_N)_N$ de propriétés, définies sur les espaces $\mathcal{E}_N := \{0, 1\}^N$; nous disons qu'il existe un seuil abrupt pour cette suite de propriétés s'il existe une suite p_N^* de $[0, 1]$ telle que, pour tout $\epsilon > 0$ et toute suite p_N de $[0, 1]$,

$$\lim_{N \rightarrow +\infty} \mu(p_N, W_N) = \begin{cases} 1 & \text{si } \forall N \ p_N > (1 + \epsilon)p_N^* \\ 0 & \text{si } \forall N \ p_N < (1 - \epsilon)p_N^* \end{cases} \quad (2.2)$$

Dans le cas simple de la transition de percolation de liens sur réseau carré, où chaque lien d'un réseau carré de taille $N = L \times L$ (à bords ouverts) est présent avec probabilité p et absent avec probabilité $1 - p$, on sait que, si p est strictement supérieur à la valeur $p_c = 1/2$, presque sûrement (à la limite $N \rightarrow +\infty$) il existe un chemin qui relie le bord gauche du réseau à son bord droit en n'empruntant que des liens présents (on dit que le réseau *percole*), c'est-à-dire que la probabilité que le réseau (conditionné à p) percole tend vers un quand N tend vers $+\infty$, tandis que, si p est strictement inférieur à $p_c = 1/2$, presque sûrement le réseau ne percole pas (la limite de la probabilité que le réseau percole tend vers zéro) [11]. Nous pouvons donc dire qu'il existe un phénomène de seuil abrupt pour la propriété « le réseau percole », c'est-à-dire *stricto sensu* la suite de propriétés « le réseau de taille $N = L \times L$ percole ». Il suffit de prendre la suite p_N^* constante égale à $1/2$. Quand N est fini, la probabilité que le réseau percole est une fonction continue (et monotone) de p ; ce n'est qu'à la limite thermodynamique $N \rightarrow +\infty$ que cette fonction acquiert une discontinuité en $p_c = 1/2$. Remarquer que la suite p_N^* ne converge pas nécessairement vers une valeur finie ; elle peut très bien converger vers zéro (ou ne pas converger dans un cas pathologique).

Phénomènes de seuil grossiers (*coarse thresholds*). Les combinatoriciens appellent ainsi une situation où la probabilité d'une propriété W_N passe de zéro à un (ou de un à zéro) quand p_N décrit (à N fixé) l'intervalle $[0, 1]$ mais où la plage de valeurs où le changement a lieu ne se concentre pas autour du seuil p^* , c'est-à-dire que, si cette plage est l'intervalle $[a_N, b_N]$, $b_N - a_N$ ne devient pas infiniment petit devant p_N^* , contrairement à ce qui se passe pour un seuil abrupt. Une fois les probabilités renormalisées pour que p_N^* soit fini à la limite $N \rightarrow +\infty$, la courbe de la probabilité de W_N est régulière même à la limite $N \rightarrow +\infty$. Moralement, le genre de propriétés qui possèdent un seuil grossier et non abrupt sont des propriétés « locales », par exemple posséder un carré de quatre liens dans la percolation de liens sur réseau carré ou posséder un triangle pour les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi (définis ci-dessous), que l'on peut confirmer en examinant un petit nombre de variables (si quelqu'un nous indique lesquelles), par opposition aux propriétés globales comme la percolation, dont la vérification nécessite l'examen d'un grand nombre de variables (un chemin percolant par exemple). Voir [9, 10] pour une discussion dans le cas des propriétés monotones des graphes aléatoires.

Phénomènes de seuil et transitions de phases. Pour la physique statistique, il y a transition de phases quand le logarithme de la fonction de partition Z , c'est-à-dire la fonction génératrice des configurations, vu comme fonction des poids statistiques, est non analytique en un point (au moins). Pour mettre en œuvre cette définition, il est parfois nécessaire de voir un modèle comme cas limite d'une famille de modèles. Par exemple, pour les problèmes définis ci-dessus, en particulier la percolation sur réseau carré, la fonction de partition peut être la fonction qui, à p , associe la somme sur les configurations \vec{x} de $p^{\sum_i x_i} (1 - p)^{N - \sum_i x_i}$. Mais cette fonction vaut uniformément un par conservation de la probabilité, donc elle est analytique ! En revanche, on peut voir le modèle de percolation comme le cas limite du modèle de Potts [12] quand le paramètre q de ce modèle tend vers un. Si l'on prend d'abord la limite thermodynamique pour la propriété qui nous intéresse (par exemple l'aimantation spontanée) puis la limite $q \rightarrow 1$, on trouve un résultat non trivial pour la limite de cette quantité (dans

l'exemple, la limite de l'aimantation spontanée est liée à la probabilité de percolation). Les définitions d'une transition de phases et d'un phénomène de seuil abrupt ne sont donc pas strictement équivalentes *a priori*, mais elles sont intimement reliées, et il nous arrivera dans la suite de confondre les deux appellations. Les problèmes combinatoires sont souvent des cas limites de température T nulle de modèles de physique statistique ; en anticipant sur des exemples définis plus loin, le problème du coloriage de graphe est la limite $T \rightarrow 0$ du modèle de Potts antiferromagnétique, le problème de partitionnement de nombres celle d'un verre de spins de Mattis en champ moyen, le problème Max- K -SAT revient à chercher l'énergie du niveau fondamental d'un verre de spins dilué en champ moyen, *etc.*

Propriétés monotones. On peut définir un ordre sur l'ensemble des configurations \mathcal{E} de la façon suivante : la configuration \vec{x} est dite inférieure à \vec{y} si $x_i \leq y_i$ pour tout i . Une propriété \hat{W} est dite monotone [croissante] quand toutes les configurations supérieures à une configuration de W sont aussi dans W (nous nous limitons à un sens de l'inégalité, mais l'on peut très bien considérer aussi les propriétés monotones décroissantes). Pour ces propriétés, il existe des théorèmes remarquables. En particulier, pour les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi, on sait que toute propriété monotone possède un phénomène de seuil, et que « toutes les propriétés monotones dont le seuil est grossier peuvent être approximées par une propriété locale » [10], c'est-à-dire une propriété qui se ramène au fait de contenir une liste donnée de sous-graphes. E. Friedgut donne dans [10] des théorèmes précis et des critères empiriques pour identifier les seuils abrupts et les seuils grossiers pour de telles propriétés. Nous en donnons un exemple ci-dessous.

2.2 Transition de percolation dans les graphes aléatoires

L'archétype de phénomène de seuil abrupt est la transition de percolation dans les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi [5, 6]. Un graphe est, comme nous l'avons vu dans l'introduction de ce mémoire, section 0.3, un couple d'ensembles : un ensemble de sommets S et un ensemble d'arêtes A dont les éléments sont des paires ou des couples d'éléments de S (si ces éléments sont des couples, le graphe est dit orienté).

Les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi viennent en familles, paramétrées par le nombre N de sommets et un nombre réel c dans $[0, 1]$. Une famille $G(N, p)$ est constituée de tous les $2^{N(N-1)/2}$ graphes simples sans arêtes multiples (chaque paire de sommets est reliée par au plus une arête) auxquels on associe un poids (une probabilité) fonction de leur nombre d'arêtes $M : p^M$, divisé par la somme des poids de la famille pour la normalisation. Si p est petit, un graphe typique de $G(N, p)$, c'est-à-dire un graphe qui a une probabilité maximale, a peu d'arêtes, tandis que si p est proche de 1 il est presque complet (nombre maximal d'arêtes). Le phénomène intéressant est observé à la limite $N \rightarrow +\infty$ avec le choix d'échelle $p = c/N$, de sorte que les graphes de $G(N, p)$ aient en moyenne le nombre fini $c/2$ d'arêtes par sommet. Un phénomène de seuil abrupt se produit en $c = 1$ pour la probabilité que les graphes pondérés de $G(N, p)$ aient une composante connexe contenant un nombre de sommets proportionnel à N : si $c < 1$ resp. $c > 1$, presque sûrement une telle composante n'existe pas resp. existe. Donnons une image des graphes typiques [13, 14].

- Pour $c < 1$ fixé et $N \rightarrow +\infty$, la plus grande composante connexe est (presque sûrement) de taille $\ln(N)/(c - 1 - \ln c)$. Les composantes connexes sont (p. s.) *simples*, au sens où elles sont des arbres ou contiennent une boucle, mais pas plus. Les (deux, trois, ...) plus grandes composantes ont asymptotiquement la même taille. La somme des limites à $N \rightarrow +\infty$ des probabilités qu'un site donné appartienne à une composante connexe de tailles 1, 2, 3, *etc.* vaut un, donc presque sûrement toutes les composantes connexes sont de taille finie.
- Pour $c > 1$ fixé et $N \rightarrow +\infty$, il existe presque sûrement une unique composante connexe, de taille $f(c)N$ où $1 - f(c) = \exp[-cf(c)]$, qui n'est pas *simple* (elle contient de nom-

breuses boucles). La somme des limites à $N \rightarrow +\infty$ des probabilités qu'un site donné appartienne à une composante connexe de tailles 1, 2, 3, *etc.* vaut $1 - f(c)$. Une fois la composante dite géante retirée, il reste un graphe à M sommets. La distribution de probabilité de ce graphe est la même que celle des graphes de l'ensemble $G(M, d/M)$ où d est le dual de c , défini par $d \exp(-d) = c \exp(-c)$. En particulier, les plus grandes composantes y sont de tailles de l'ordre de $\ln N$.

- Entre ces deux extrêmes, les valeurs pertinentes de p sont les valeurs $1/N + \lambda/N^{4/3}$ (elles correspondent toutes à $c = 1$, dont on a fait un grossissement). Pour λ fini, les (première, deuxième, troisième, ..., k^e avec k fixé) plus grandes composantes ont une taille en $\Theta(N^{2/3})$, la constante multiplicative ayant une distribution continue sur les réels positifs, et leur nombre de boucles (zéro pour un arbre) a une probabilité finie d'être n'importe quel entier donné. Le rapport des tailles des deux premières composantes, W_1/W_2 , a une distribution de probabilité continue à support $w[1, +\infty[$ et qui varie continûment avec λ . La probabilité qu'un sommet donné soit dans une composante de taille T , c'est-à-dire la proportion des N sommets qui sont dans une telle composante, est $\Theta(T^{-3/2})$, pour les valeurs de T inférieures à la taille maximale T_{\max} des composantes, à savoir $\Theta(N^{2/3})$, d'où l'on tire la probabilité qu'une composante tirée au sort uniformément parmi toutes les composantes ait la taille T , $\Theta(T^{-5/2})$ (car la probabilité de tirer au sort un sommet dans une composante de taille T est proportionnelle à T). On peut retrouver la valeur de T_{\max} à partir de la loi $P(T) = \Theta(T^{-3/2})$: la plus grande taille T_{\max} de composante observable dans un graphe de N sommets est celle pour laquelle le nombre moyen de sites $T_{\max}^{-3/2} N$ est fini (si ce nombre tend vers zéro à la limite $N \rightarrow +\infty$, presque sûrement il n'y a pas de composante de cette taille dans le graphe, et s'il est non nul (ou *a fortiori* infini) presque sûrement il y en a, donc nous cherchons à nous placer entre les deux cas), donc $T_{\max} = \Theta(N^{2/3})$. La limite $\lambda \rightarrow -\infty$ se raccorde au régime $c < 1$: les deux plus grandes composantes connexes ont, dans cette limite ¹, les tailles $W_1 \sim W_2 \sim N^{2/3} |\lambda|^{-2} \ln |\lambda|$, soit $\ln N$ quand $1/N + \lambda/N^{4/3}$ est de l'ordre de c/N avec $c < 1$, *i.e.* quand λ est de l'ordre de $(c-1)N^{1/3}$. De même, la limite $\lambda \rightarrow +\infty$ se raccorde au régime $c > 1$: la plus grande composante a la taille $W_1 \sim 2\lambda N^{2/3}$, soit $2(c-1)N$ quand λ est de l'ordre de $(c-1)N^{1/3}$, ce qui se compare avec $f(c)N$ puisque $f(c) \sim_{c \rightarrow 1} 2(c-1)$. La deuxième plus grande composante a la taille $W_2 \sim N^{2/3} \lambda^{-2} \ln \lambda$, comme pour un graphe de paramètre $-\lambda$. Entre les deux extrêmes, pour λ fini, les (première, deuxième, troisième, ..., k^e avec k fixé) plus grandes composantes ont une taille en $\Theta(N^{2/3})$, la constante multiplicative ayant une distribution continue sur les réels positifs, et leur nombre de boucles (zéro pour un arbre) a une probabilité finie d'être n'importe quel entier donné. Le rapport des tailles des deux premières composantes, W_1/W_2 , a une distribution de probabilité continue à support $[1, +\infty[$ et qui varie continûment avec λ .

Ensembles statistiques conjugués. La construction des graphes $G(n, p)$ ci-dessus peut être qualifiée de *grand canonique* par analogie avec la situation en mécanique statistique où le paramètre c — grandeur intensive — qui pondère les objets, ici les arêtes, est fixé, tandis que le nombre d'objets (d'arêtes) — grandeur extensive conjuguée à c — fluctue. Ces deux grandeurs sont dites conjuguées car il existe une relation monotone (au moins sur un certain intervalle) entre l'une et la moyenne de l'autre à la limite $N \rightarrow +\infty$; elles sont reliées par une transformation de Legendre. Dans l'autre construction possible, également rencontrée dans les articles de théorie des probabilités, c'est le nombre total d'arêtes qui est fixé et le nombre moyen d'arêtes par sommet c qui fluctue. Il s'agit d'un analogue de la situation *canonique* en physique. (Ici il n'y a qu'une seule grandeur extensive (le nombre d'arêtes) alors qu'en mécanique statistique il y en a typiquement deux : le nombre d'objets, mais aussi l'énergie — voir l'introduction de ce mémoire. Nous aurions aussi pu qualifier les deux situations concernant le graphe aléatoire de

¹Nous notons dans ce mémoire $a \sim b$ quand a et b sont asymptotiquement équivalents, c'est-à-dire $a/b \rightarrow 1$ (quand $b \neq 0$), conformément à l'usage des mathématiciens. Pour indiquer que a et b sont du même ordre, nous écrivons $a = \Theta(b)$ comme défini au chapitre 1.

micro-canonique et canonique en traitant le nombre d'arêtes comme l'analogie de l'énergie.) On observe la même transition de phase dans les deux descriptions.

Propriétés critiques. Le phénomène de seuil des graphes d'Erdős et Rényi rappelle la transition de phases de percolation : sur réseau hypercubique \mathbb{Z}^D , au fur et à mesure que la proportion d'arêtes présentes dans le graphe augmente, les amas connexes de sites augmentent de taille par fusions successives (jusque là, rien d'étonnant), et, pour une valeur p_c bien précise de la proportion p d'arêtes présentes, il apparaît (presque sûrement à la limite où le nombre de sites N tend vers l'infini) un amas connexe d'un nombre infini de sites, alors que jusque là ils étaient (presque sûrement) tous finis. De même, quand le paramètre c des graphes aléatoires augmente, les plus grandes composantes connexes, d'abord de tailles au plus $\ln N$, grandissent par fusion et prennent des tailles de l'ordre de $N^{2/3}$ quand c atteint un. Sur réseau hypercubique de dimension D , la proportion $P_\infty(p)$ de sites dans le (ou les quelques) plus grands amas connexes, c'est-à-dire encore la probabilité qu'un site donné soit dans ce plus grand amas connexe, est, à la limite où le nombre de sites N croît vers $+\infty$, une fonction non régulière de p (identiquement nulle pour $p \leq p_c$, régulière, strictement positive pour $p > p_c$, et continue mais non continûment dérivable en p_c). Bien sûr, les proportions correspondantes sur réseaux finis de $N = L^D$ sites, $P_L(p)$ ou $P_N(p)$, sont des fonctions régulières de p . Elles convergent vers $P_\infty(p)$ uniformément sur les compacts $[0, p]$ avec $p < p_c$ et $[p, 1]$ avec $p > p_c$, mais pas au voisinage de p_c ; en p_c , $P_L(p_c)$ converge vers zéro algébriquement : $\ln P_L(p_c) \sim -\beta/\nu \ln L$. On peut caractériser la convergence non uniforme autour de p_c à l'aide d'une fonction dite *d'échelle* et d'exposants critiques : il existe [15] une fonction régulière f telle que

$$P_L(p) \sim L^{-\beta/\nu} f \left[L^{1/\nu} (p - p_c) \right] \quad \text{soit} \quad P_N(p) \sim N^{-\frac{\beta}{\nu D}} f \left[N^{\frac{1}{\nu D}} (p - p_c) \right] \quad (2.3)$$

au premier ordre en L resp. en N à p fixé (on sait qu'en dimension $D \geq 6$ et en champ moyen (*i.e.* sur réseau complet par exemple), $\beta_\infty = 1$ et $\nu_\infty = 1/2$ exactement; en dimensions $D = 2$ et 3 respectivement, $\beta_2 \approx 0,14$ et $\beta_3 \approx 0,40$ tandis que $\nu_2 \approx 1,35$ et $\nu_3 \approx 0,85$). Autrement dit, la singularité de $P_\infty(p)$ en $p = p_c$ disparaît si l'on fait un grossissement de la région autour de p_c en posant $p = p_c + \epsilon L^{-1/\nu}$. Le raccord entre les trois régimes $c < 1$, $c > 1$ et critique $c = 1 + \epsilon L^{-1/\nu}$ se fait si, à N fixé, l'on fait tendre ϵ vers $\pm\infty$: par exemple, $\ln f(x) \sim \beta \ln x$ quand $x \rightarrow +\infty$. On peut définir d'autres exposants que β et ν ; en particulier, la probabilité qu'un site donné soit dans un amas connexe de taille T est $\Theta(T^{1-\tau})$ avec $\tau_2 \approx 2,05$, $\tau_3 \approx 2,18$, $\tau_\infty = 5/2$. En dimension $D \leq 6$, ces exposants sont liés par la relation (appelée en anglais *hyperscaling*)

$$D\nu = \beta [1 + (\tau - 2)^{-1}]. \quad (2.4)$$

Plus généralement, les autres exposants que l'on peut définir pour la transition de percolation s'expriment en fonction de deux exposants seulement (et de D). L'*universalité critique* mentionnée dans l'introduction se manifeste ici dans le fait que les exposants β , ν , τ , *etc.* et les fonctions d'échelle f , *etc.* restent les mêmes si l'on change légèrement le modèle (pour être précis, les exposants critiques restent les mêmes si l'on remplace le réseau carré par un réseau triangulaire (à $D = 2$) ou le réseau cubique par un réseau hexagonal compact (à $D = 3$), ou encore si ce ne sont pas les arêtes qui sont présentes ou absentes, mais les sommets; en revanche, la fonction d'échelle f est moins robuste et il faut prendre davantage de précautions : par exemple, elle reste la même si l'on remplace le réseau carré par un réseau triangulaire dont le rapport d'aspect est égal au rapport d'aspect du réseau carré multiplié par $\sqrt{3}$ [16]). Ces quantités sont donc qualifiées d'*universelles*. Toutes les quantités relatives à une transition ne sont pas universelles; notamment le seuil p_c de la transition ne l'est pas et il peut être nécessaire d'ajouter des facteurs multiplicatifs en abscisses et en ordonnées pour faire se raccorder les fonctions d'échelle de deux modèles qui appartiennent à la même classe d'universalité. Pour les graphes d'Erdős et Rényi, la situation a l'air semblable : le hiatus entre les valeurs $\ln N$ pour $c < 1$ et N pour $c > 1$ pour les ordres de grandeur de la taille de la plus grande composante disparaît si l'on fait un grossissement de la région autour de $c = 1$ en posant $c = 1 + \lambda N^{-1/3}$,

et les différents régimes se raccordent grâce aux comportements asymptotiques de cette taille en $\lambda \rightarrow \pm\infty$ à N fixé comme on l'a vu : $g(x) \sim 6x^{-2} \ln|x|$ quand $x \rightarrow -\infty$, $g(x) \sim 2x$ quand $x \rightarrow +\infty$. Le physicien est donc enclin à prédire l'existence d'une fonction d'échelle régulière g telle que la taille moyenne T en nombre de sites de la plus grande composante connexe des graphes de $G(N, c/N)$ soit donné, à la limite $N \rightarrow +\infty$ à c fixé, par

$$T_N(c) \sim N^{2/3} g \left[N^{1/3}(c-1) \right], \quad (2.5)$$

et il s'attend à ce que g et les exposants critiques $2/3$ et $1/3$ soient inchangés lorsque la distribution des graphes aléatoires est légèrement perturbée. De fait, on sait par exemple que si l'on conditionne les graphes aléatoires à avoir une certaine proportion de sommets de chaque degré (nombre d'arêtes) au lieu de laisser cette proportion prendre la forme spontanée d'une loi de Poisson (voir ci-dessous), ces exposants sont inchangés [17]. Le seuil $c = 1$ de la transition n'est pas universel.

Autres transitions. De nombreux autres phénomènes de seuil abrupts sont connus ; selon les propos d'E. Friedgut rapportés plus haut, moralement toutes les propriétés monotones sur les graphes aléatoires que l'on ne peut approximer par une suite de propriétés locales donnent lieu à un tel phénomène. Pour les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi, par exemple, on peut étudier la propriété « être planaire » (c'est-à-dire « pouvoir être dessiné dans le plan sans croisement d'arêtes », voir l'introduction) — elle donne lieu à un phénomène de seuil abrupt au même point que la transition de connexité que nous avons vue, en $c = 1$ (soit $p = 1/N$). La propriété « être connexe » a un phénomène de seuil abrupt en $p = \ln N/N$ [10]. Une autre propriété beaucoup étudiée des graphes est la *coloriabilité à k couleurs*. On dit qu'un graphe simple (sans arête qui relie un sommet à lui-même) est coloriable à k couleurs (où k est un entier supérieur ou égal à deux) s'il existe une fonction qui, à chaque sommet du graphe, associe un élément de l'ensemble $\{1, 2, \dots, k\}$ (une *couleur*) et telle qu'à deux sommets reliés par une arête ne soit jamais associée la même couleur. Le *nombre chromatique* d'un graphe est le nombre minimal k de couleurs tel que ce graphe soit coloriable à k couleurs (ce nombre est bien défini car un graphe non vide de N sommets est toujours coloriable à N couleurs). La coloriabilité à k couleurs est une propriété monotone décroissante car, si un graphe est coloriable à k couleurs, tous les graphes obtenus à partir de ce graphe en retirant des arêtes le sont aussi, donc on peut s'attendre à ce qu'elle donne lieu à des seuils abrupts. En fait, le seuil de la coloriabilité des graphes d'Erdős et Rényi à deux couleurs est grossier et non abrupt, car cette propriété est équivalente à une suite de propriétés locales (qui l'approximent) : ne pas contenir de cycle de longueur impaire inférieure ou égale à trois, inférieure ou égale à cinq, *etc.* (De fait, la limite de cette suite, « ne pas contenir de cycle de longueur impaire quelconque », est équivalente à la propriété « être coloriable à deux couleurs » — on dit aussi « être bipartite »). Mais le seuil de la coloriabilité à k couleurs avec $k > 2$ est abrupt sur les graphes d'Erdős et Rényi [18]. Sur les *hypergraphes*, c'est-à-dire sur la généralisation des graphes où l'ensemble A des arêtes (qui sont des couples de sommets) est remplacé par un ensemble H d'*hyperarêtes*, qui sont des K -uplets de sommets (avec K entier fixé ou variable), on peut aussi étudier la propriété de coloriabilité : on dit qu'un hypergraphe est coloriable avec k couleurs s'il existe une fonction qui, à chaque sommet de l'hypergraphe, associe une couleur et telle qu'aucune hyperarête n'ait tous ses sommets de la même couleur (il existe des variantes intéressantes, comme celle où l'on ajoute des anti-hyperarêtes qui doivent avoir au moins deux sommets de la même couleur). La coloriabilité à k couleurs présente un phénomène de seuil abrupt pour la distribution uniforme des hypergraphes aléatoires dont les hyperarêtes joignent $K > 2$ sommets [10].

2.3 Champ moyen contre dimension finie

Les résultats rigoureux (c'est-à-dire prouvés mathématiquement) cités ci-dessus pour la transition de percolation d'Erdős et Rényi sont admirablement précis, au regard de ce que l'on

sait (et sait démontrer) sur les transitions de phases en dimension finie. Ceci est dû au fait que les graphes aléatoires sont un système de champ moyen, comme nous l'avons discuté dans l'introduction, qui ressemblent localement à des arbres (les boucles sont de taille typique $\ln N$) : le calcul de beaucoup des probabilités et propriétés ci-dessus peut se faire à partir de calculs simples sur un processus de ramification de Poisson (en anglais *branching Poisson process*, et en français processus de *branchement* de Poisson, alors que bien évidemment on cherchera ici vainement une quelconque prise de courant), c'est-à-dire un processus stochastique qui construit un arbre où chaque nœud engendre un nombre de fils tiré au sort dans une distribution fixée — on observe en particulier que l'arbre est fini presque sûrement (p. s.) si la moyenne du nombre de fils par nœud est < 1 et infini p. s. si elle est > 1 . Le cas critique, entre deux, correspond justement à la transition de percolation des graphes aléatoires, quand chaque sommet du graphe a en moyenne $c = 1$ arêtes. Les ingrédients clefs sont que les présences des différentes arêtes sont des événements statistiquement indépendants et que chaque sommet peut être lié à tout autre; aucun ne joue un rôle spécial. Par exemple, on peut facilement montrer que la composante géante est unique. Imaginons que le graphe est construit par ajouts successifs d'arêtes. Si, à un certain point, deux composantes géantes contenant respectivement aN et bN sommets existent (avec bien sûr $a + b \leq 1$) et que l'on ajoute une arête, cette arête reliera les deux composantes connexes avec une probabilité d'ordre $2ab$ finie. Que les deux composantes ne soient toujours par reliées après l'ajout d'un nombre extensif, c'est-à-dire d'ordre mN avec $m > 0$, d'arêtes, est exponentiellement peu probable : vu l'indépendance statistique, la probabilité de cet événement est de l'ordre de $(1 - 2ab)^{mN} \rightarrow 0$ quand $N \rightarrow +\infty$. Bref, grâce au caractère « de champ moyen » des graphes aléatoires d'Erdős et Rényi, des méthodes de calcul direct (de fonctions génératrices notamment [19, 20, 17]) suffisent souvent — ce sera également le cas quand nous établirons les résultats originaux de cette partie du mémoire, au chapitre 4. Il y a souvent concentration de la mesure (ou auto-moyennance) en dehors des transitions de phases, et l'on peut en général le montrer simplement avec la propriété d'indépendance statistique des arêtes constitutive des graphes. Pour étudier certaines propriétés plus complexes des graphes aléatoires (ou encore des graphes tirés au sort selon une distribution autre que la distribution uniforme d'Erdős et Rényi avec probabilité $p = c/N$ de placer chaque arête, par exemple les graphes de L. Viana et A. Bray où le degré (nombre d'arêtes) de chaque sommet est fixé [21]), la méthode (un peu plus élaborée) de la cavité, d'une certaine manière équivalente à celle des répliques [7], est utile. Elle fonctionne bien quand un graphe aléatoire de l'ensemble statistique étudié ressemble, localement et statistiquement, à un arbre, et qu'il y a une sorte d'indépendance statistique entre les branches issues d'un sommet (la présence de boucles de grande longueur $\ln N$ entre ces branches ne se manifeste que comme une sorte de condition aux bords qui impose de sélectionner une seule solution aux équations locales). Cette méthode n'est malheureusement pas rigoureuse et il n'existe pas encore, à notre connaissance, de critère permettant de prévoir et de comprendre quand les résultats qu'elle donne sont exacts, mais elle donne lieu à des développements nombreux et intéressants et inspire parfois des preuves rigoureuses [22, 23].

En dimension finie, c'est-à-dire quand le modèle statistique étudié est défini sur un graphe que l'on peut plonger dans un espace \mathbb{R}^D , il en va autrement. Il y a en général concentration de la mesure pour les quantités intensives (telles que l'énergie libre, l'aimantation, *etc.*) en dehors des transitions de phases quand les interactions sont à courte portée. Pour le montrer, on peut découper mentalement le système en un grand nombre de sous-systèmes eux-mêmes de grande taille (tout ceci à la limite thermodynamique), et appliquer le théorème de la limite centrale à ces (nombreux) sous-systèmes qui sont quasiment indépendants statistiquement car, comme les interactions sont à courte portée, la perturbation induite dans un de ces grands sous-systèmes pour la quantité intensive qui nous intéresse par les sous-systèmes voisins est négligeable (en dimension D , le rapport « aire/volume » d'un hypercube de côté a vaut $2D a^{D-1}/a^D = 2D/a$ et tend vers zéro quand $a \rightarrow +\infty$). En revanche, la quasi-indépendance statistique des branches d'un arbre local dans un graphe aléatoire n'a pas d'équivalent car un réseau de dimension finie a beaucoup de boucles. Il faut alors faire appel à des techniques de calcul plus sophistiquées,

comme celles du « groupe de renormalisation », se restreindre à des modèles exactement solubles (voir la troisième partie de ce mémoire), utiliser des méthodes perturbatives (voir la deuxième partie de ce mémoire), ou se contenter de simulations numériques.

Groupe de renormalisation. En particulier, pour l'étude des propriétés critiques des transitions de phases dites du deuxième ordre en dimension finie (voir l'introduction — rappelons juste qu'en une telle transition le paramètre d'ordre varie continûment et que l'on observe un certain nombre de divergences en lois de puissances), l'approche du groupe de renormalisation [24, 25] permet de « comprendre » l'origine du phénomène d'universalité critique qui nous occupe dans cette partie du mémoire. Cette approche (due entre autres à Kenneth G. Wilson, Michael Fisher et Leo P. Kadanoff) consiste à construire une suite de versions macroscopiques d'un modèle microscopique en « renormalisant » d'une étape à l'autre le modèle, c'est-à-dire en regroupant les degrés de liberté microscopiques voisins par paquets d'une certaine taille et en les remplaçant par des degrés de liberté effectifs (la façon la plus efficace de faire ces calculs est de raisonner « dans l'espace des moments », c'est-à-dire sur la transformée de Fourier du modèle étudié, et de regrouper à chaque étape les coefficients de Fourier de rang les plus élevés). Cette suite de modèles effectifs peut être vue comme un système dynamique (elle est caractérisée par quelques nombres scalaires et indicée par l'*échelle*, c'est-à-dire par le nombre d'étapes de renormalisation faites). En pratique ce système dynamique converge vers un point fixe qui encode le comportement macroscopique du modèle de départ. Deux modèles différents du point de vue microscopique (par exemple les modèles d'Ising ferromagnétiques sur réseaux carré et triangulaire) sont envoyés sur le même point fixe si les différences microscopiques ne suffisent pas à faire que ces modèles n'aient pas le même comportement macroscopique.

Pour donner un aperçu de ce phénomène de convergence, faisons une « renormalisation dans l'espace réel » des configurations du modèle d'Ising sur réseau carré, en regroupant itérativement les spins (de valeurs $+1$ ou -1 dans la configuration de départ) par carrés de quatre selon la règle suivante : on fait la somme des quatre spins du carré et on les remplace par un unique spin qui vaut $+1$, -1 ou 0 suivant que cette somme est strictement positive, strictement négative ou nulle. La figure 2.1 montre ce qui se passe à partir d'une configuration tirée uniformément au sort dans l'ensemble des configurations où chaque spin a la probabilité p d'être dans l'état $+$ et $1-p$ d'être dans l'état $-$ (indépendamment des autres spins), pour trois valeurs de p , $0,501$, $0,499$ et $1/2$. Quand $p = 0,501$ ou $0,499$, bien que l'aimantation initiale (la somme des spins divisée par leur nombre) soit très faible (elle vaut en moyenne $2p - 1 = 0,002$ resp. $-0,002$), la procédure de renormalisation converge de façon monotone vers le point fixe $+1$ ou -1 suivant le signe de l'aimantation initiale. Autrement dit, le comportement macroscopique du système est, selon l'approche de la renormalisation, qualitativement le même que celui d'un système complètement aimanté ; peu importe la valeur initiale de l'aimantation et où se trouvaient les spins $+1$ au départ (les détails microscopiques ont été gommés). Les points fixes $+1$ et -1 sont stables et le point fixe 0 est instable comme on s'en rend facilement compte (retourner par la pensée quelques spins dans les configurations où tous les spins valent $+1$, -1 ou 0 et imaginer l'effet de la procédure). En revanche, pour $p = 1/2$, l'aimantation oscille autour de zéro lors des premières étapes de la renormalisation, avant de se décider tardivement à converger vers $+1$ (mais cela aurait pu être -1 avec la même probabilité). C'est qu'en fait le point fixe 0 , qui gouverne le comportement qualitatif macroscopique du système, est instable. Mais si nous prenons la moyenne de l'aimantation renormalisée sur toutes les configurations initiales à $p = 1/2$, nous verrions qu'elle est nulle.

Une transition de phases est toujours un phénomène collectif macroscopique qui met en jeu les interactions microscopiques individuelles d'un grand nombre de constituants. Pour une transition du deuxième ordre, ce caractère collectif prend un relief particulier dans la mesure où la *longueur de corrélation* du système devient infinie (c'est-à-dire, en pratique, de l'ordre de la taille du système) — cela signifie qu'agir (avec un champ extérieur) sur un objet du système en un point donné a des répercussions partout dans le système ; on dit que la *susceptibilité* est très grande, voire infinie (et, conformément au théorème dit « fluctuation-dissipation », les

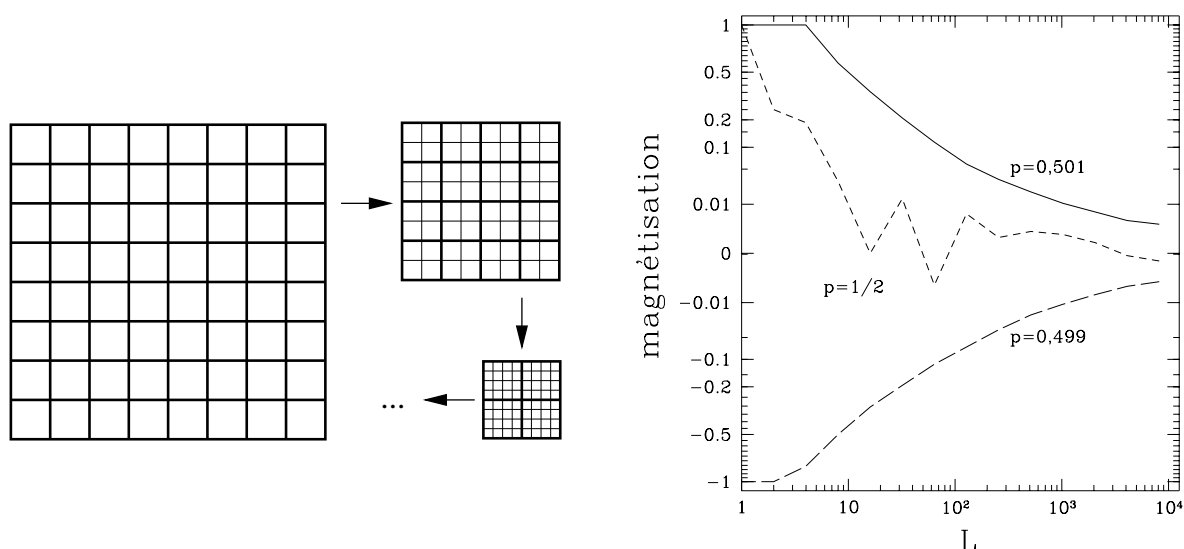


FIG. 2.1 – **À gauche** : Schéma illustrant le principe de la décimation d'un réseau carré (bidimensionnel). À chaque étape, on regroupe quatre sommets du réseau qui forment un carré en un seul sommet effectif, ce qui divise le nombre total de sommets par quatre. L'aspect microscopique du réseau est ainsi vu « de plus en plus loin ». **À droite** : courbes de l'aimantation (somme des spins divisés par leur nombre) des réseaux successifs engendrés par la procédure de renormalisation dans l'espace réel (voir texte) à partir de configurations de 8192×8192 spins d'Ising tirées uniformément au sort parmi les configurations où chaque spin a la probabilité (respectivement) $p = 0,501$, $p = 1/2$ et $p = 0,499$ de valoir $+1$. Ces courbes se lisent de droite à gauche : au début de la procédure le réseau contient encore le nombre initial L^2 de spins, puis ce nombre diminue jusqu'à $L = 1$. Quand $p \neq 1/2$, l'aimantation initiale est très faible mais presque sûrement non nulle, et elle se renforce de façon monotone pour atteindre finalement l'un des points fixes stables ± 1 . En ce point, la valeur initiale de l'aimantation et la répartition microscopique des spins $+1$ et -1 ont été « oubliées », seul reste le signe de la magnétisation totale. Quand $p = 1/2$, l'aimantation oscille autour du point fixe instable 0 avant de rejoindre l'un des points fixes stables, mais si nous avons tracé la moyenne de l'aimantation sur un grand nombre de configurations initiales nous aurions trouvé une courbe uniformément nulle.

fluctuations sont elles aussi à très longue portée, ce qui se manifeste expérimentalement par exemple par le spectaculaire effet de l'opalescence critique). Notre argument utilisant le théorème de la limite centrale pour « prouver » la concentration de la mesure ne tient plus (et, de fait, il n'y a plus concentration de la mesure) : on ne peut considérer les sous-systèmes issus du découpage du système étudié comme (quasiment) statistiquement indépendants que s'ils sont nettement plus grands que la longueur de corrélation, c'est-à-dire que la longueur sur laquelle l'influence de leurs sous-systèmes voisins se fait sentir à l'intérieur d'eux-mêmes. Or, lors d'une transition du deuxième ordre, on aura beau considérer des sous-systèmes aussi grands que l'on voudra, ils seront toujours corrélés car la longueur de corrélation est infinie. Une transition de phase du deuxième ordre constitue, à cause de cela, un point fixe du flot de renormalisation. Or nous avons dit qu'un tel point fixe correspond à un comportement macroscopique unique pour de nombreux modèles microscopiques suffisamment peu différents pour être dans le bassin d'attraction de ce point fixe : tous ces modèles microscopiques forment une *classe d'universalité*. Si l'on paramètre le système dynamique construit par la procédure de renormalisation par l'échelle, qui correspond physiquement à la longueur de corrélation et, pour un système de taille finie exactement au point critique, à la taille de ce système, on peut exprimer la façon dont les différentes grandeurs thermodynamiques (ou géométriques) divergent avec la taille du système critique, c'est-à-dire calculer leurs exposants critiques (puisque'il s'avère que la divergence est en loi de puissance). Si le système n'est pas exactement au point critique, on peut tout de même exprimer la dépendance des grandeurs thermodynamiques en la longueur de corrélation et la divergence de celle-ci quand la distance entre l'état du système et le point critique tend vers zéro (par exemple, si le point critique correspond à une température bien précise T_c , cette distance est $T - T_c$). Les points fixes des transitions de phases du deuxième ordre sont souvent instables, mais cela ne retire pas sa validité au raisonnement précédent, car un système physique est toujours fini, même s'il est grand : le flot du système dynamique de la renormalisation n'a plus de sens au-delà de l'échelle égale à la taille du système considéré, donc, du moment que le système dynamique n'a pas encore quitté le voisinage du point fixe instable quand il arrive à cette échelle, le comportement macroscopique du système physique étudié est toujours dicté par ce point fixe. Simplement, plus le système physique est grand (plus il y a de constituants élémentaires), plus il faut que la configuration initiale soit proche du point critique (c'est-à-dire, plus il faut que $T - T_c$ soit petit dans l'exemple précédent) pour que, même après une longue renormalisation, le système dynamique soit encore au voisinage du point fixe instable. Autrement dit, la « fenêtre critique » rétrécit quand la taille du système physique étudié augmente. Nous avons rencontré le même phénomène pour la fenêtre critique (sur le paramètre c) des graphes d'Erdős et Rényi : sa taille est de l'ordre de $N^{-1/3}$. Mais, encore une fois, nous n'avons cité la conception de la théorie du groupe de renormalisation du phénomène d'universalité critique qu'à titre de comparaison avec ce que l'on observe pour les systèmes de champ moyen ; nous n'en aurons pas besoin lors de notre étude de l'universalité dans les algorithmes de résolution de problèmes combinatoires du chapitre 4, seules les deuxième et troisième parties de ce mémoire étudiant des modèles en dimension finie.

Dimension critique supérieure. Une dernière remarque pour clore ce paragraphe sur les systèmes de dimension finie, dont il ne sera plus question dans cette partie du mémoire : la limite $D \rightarrow +\infty$ des modèles définis sur réseau de dimension D (c'est-à-dire : la limite $D \rightarrow +\infty$ des valeurs moyennes des observables de ces modèles, à la limite thermodynamique d'un réseau infini) correspond souvent à une version de champ moyen de ces modèles (définie sur un réseau complet, un arbre de Cayley ou un graphe d'Erdős et Rényi) — ce n'est cependant pas automatique (par exemple, la question est ouverte pour les verres de spins, dont le comportement est relativement bien compris en champ moyen mais pas en dimension finie, et certains auteurs essaient d'utiliser la construction de Kac pour trancher cette question). Les quantités non universelles comme le seuil p_c de la transition de percolation convergent continûment, quand $D \rightarrow +\infty$, vers leur valeur de champ moyen. Remarquablement, on observe souvent que les quantités universelles atteignent leur limite dès une valeur finie de la dimension : par

exemple, les exposants critiques de la percolation β , ν et τ ci-dessus sont les mêmes pour tout réseau de dimension $D \geq 6$. Quand ce phénomène se produit, on appelle la dimension à partir de laquelle les exposants ont leur valeur de champ moyen la *dimension critique supérieure*, ici six (le terme de *dimension critique inférieure* est parfois employé pour désigner la dimension à partir de laquelle une transition de phase est observée pour des valeurs non triviales des paramètres; par exemple, la transition du modèle d'Ising a lieu à une température critique finie en toute dimension $D \geq 2$ mais, à une dimension, le réseau a une aimantation nulle à toute température strictement positive [comme il est pleinement aimanté à température nulle, on dit par extrapolation que sa température critique est $T_c = 0$], donc sa dimension critique inférieure est 2). Les relations d'échelle où la dimension apparaît restent valables en dimensions $D > D_c$; simplement, il faut remplacer D par D_c . Vérifions ceci sur l'exemple de la transition de percolation : en dimension $D \leq D_c = 6$, les fonctions d'échelle ci-dessus ont pour variable $N^{\frac{1}{\nu D}}(p - p_c)$, donc la taille de la fenêtre critique est $\Delta p = \Theta\left(N^{-\frac{1}{\nu D}}\right)$. Si l'on remplace ν par $\nu_\infty = 1/2$ et D par $D_c = 6$, il vient la taille de la fenêtre critique en champ moyen $\Delta p = \Theta\left(N^{-1/3}\right)$, qui coïncide bien avec la taille de la fenêtre critique de la transition de percolation sur les graphes d'Erdős et Rényi que nous avons citée. De même, la taille T_{\max} du plus grand amas dans un système de taille N est donnée par $T_{\max}^{1-\tau} N = \Theta(1)$, d'après notre argument heuristique, d'où $T_{\max} = \Theta\left(N^{1/(\tau-1)}\right)$ soit, en $D \geq 6$, $\Theta\left(N^{2/3}\right)$ comme sur les graphes. Si l'on connaît la relation d'*hyperscaling* (2.4) et la valeur des exposants en champ moyen, on peut calculer la valeur de D_c . On peut interpréter (2.4) à la lumière du critère de Ginzburg. D_c joue un rôle particulier dans les calculs du groupe de renormalisation : comme on ne sait en général pas faire ces calculs de façon exacte, on fait un développement perturbatif au voisinage du dernier point où les calculs exacts du champ moyen sont faisable, à savoir en D_c , si bien que les résultats obtenus prennent la forme d'un développement de Taylor en puissances de $\epsilon = D_c - D$. Par exemple, $\beta = 1 - \epsilon/7$, $\nu = 1/2 + 5\epsilon/84$ et $\tau = 5/2 - 3\epsilon/14$ au premier ordre en ϵ . Dans les relations d'échelle du cas limite $D = D_c$, des corrections logarithmiques sont souvent présentes (ailleurs elles sont masquées par les ordres dominants).

2.4 Graphes aléatoires d'Erdős et Rényi... ou pas

Historiquement, la mécanique statistique s'est surtout intéressée aux modèles en dimension finie de ses débuts à la fin du vingtième siècle, car elle avait pour but d'expliquer les propriétés de la matière, or celle-ci présente quasiment toujours un aspect de dimension finie, que ce soit unidimensionnel (fibres, polymères, molécules, intersection de deux plans, lignes de vorticit ), bidimensionnel (surfaces et interfaces), tridimensionnel (la plupart du reste), ou parfois quadridimensionnel (l'espace-temps). On peut consid rer que les g om tries irr guli res, et notamment fractales, tr s  tudi es dans les ann es 1980, ont constitu  une premi re excursion hors des mod les de dimension enti re. Mais les ann es 1980 et surtout 1990 ont vu se d velopper massivement l'int r t de la discipline pour des syst mes   g om trie tr s diff rente et qui ressemblent   des graphes al atoires. Bien entendu, il ne s'agit pas de mod les concrets de milieux ou de mat riaux, mais de mod les d'interactions abstraites entre  l ments ou agents, par exemple le r seau des g nes et des prot ines (sommets du graphe) d'un  tre vivant ou d'une cellule avec leurs interactions (ar tes orient es du graphe,  ventuellement de deux types pour indiquer les effets represseurs ou inhibiteurs et les effets stimulateurs), le r seau des  tres humains (sommets) et la relation de connaissance directe (ar tes), le r seau des entreprises (sommets) et leurs relations commerciales (ar tes), le r seau internet (les ordinateurs ou les routeurs sont les sommets et les connexions les ar tes), le r seau des pages web (les pages web sont les sommets et les ar tes les liens hypertexte d'une page vers une autre), le r seau des a roports (sommets) et des vols r guliers (ar tes), le r seau des articles scientifiques (sommets) et des citations (ar tes), *etc.* Dans toutes ces circonstances, issues pour la plupart des sciences socio- conomiques et de la biologie, l'on est confront    un syst me constitu  d'un grand nombre d' l ments, donc difficile   traiter par une approche classique, de m me

qu'un système thermodynamique, et où l'on observe souvent l'émergence de phénomènes macroscopiques d'ensemble — il est donc naturel de chercher ce que la mécanique statistique peut apporter pour leur compréhension. De plus, comme ces systèmes ont, pour certains, un caractère de champ moyen, leur étude rejoint certaines préoccupations de la physique mathématique, qui étudiait les systèmes de champ moyen (réseau complet, graphes aléatoires) faute de pouvoir étudier les modèles plus compliqués en dimension finie. Il y a donc interaction à double sens entre la mécanique statistique et ces nouveaux champs d'investigation.

Les graphes les plus simples à étudier par une approche statistique sont sans doute les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi car la mesure de probabilité uniforme et l'indépendance statistique des arêtes permettent de faire des calculs analytiques assez simplement comme nous l'avons vu (on peut aussi les généraliser à des hypergraphes où les présences des hyperarêtes sont statistiquement indépendantes [26]). Mais ce ne sont pas forcément les plus pertinents pour modéliser des phénomènes réels, et nous aurons à revenir là-dessus à propos du problème d'informatique que nous avons étudié. Dans les graphes de l'ensemble $G(N, p = c/N)$, la loi de probabilité du degré (nombre d'arêtes) d'un sommet est une loi de Poisson de moyenne c : la probabilité qu'un sommet donné ait le degré d vaut, à la limite $N \rightarrow +\infty$,

$$P(d) = \frac{e^{-c} c^d}{d!}. \quad (2.6)$$

Or la grande majorité des graphes observés dans la réalité ne satisfont pas à cette loi. M. E. J. Newman, S. H. Strogatz et D. J. Watts ont montré [17] qu'en remplaçant les ensembles statistiques $G(N, p)$ par l'ensemble des graphes conditionnés à avoir une certaine distribution des degrés, on pouvait mieux rendre compte des graphes réels (voir aussi les résultats antérieurs [20]). D. J. Watts et S. H. Strogatz ont également introduit un modèle différent, les graphes « comme le monde est petit ! » (*small world* en anglais) [27], qui réalisent une sorte d'interpolation entre réseaux de dimension finie et graphes d'Erdős et Rényi : un tel graphe ressemble à un réseau \mathbb{Z}^D , mais chaque sommet possède en plus un, quelques ou une fraction finie de liens à longue portée vers d'autres sommets, de façon à mimer des graphes d'interaction observés dans la réalité ; par exemple un réseau de relations humaines, où chaque individu entretient des relations avec ses voisins mais aussi avec des amis qui habitent à distance arbitrairement grande de chez lui, ce qui fait que le diamètre du graphe des relations humaines est remarquablement petit — on s'en rend compte dans la vie courante à chaque fois que l'on s'exclame « Vous connaissez aussi un(e) tel(le) ? Comme le monde est petit ! ».

Graphes sans échelle. Pour un grand nombre de graphes observés dans la réalité, la distribution de probabilité des degrés des sommets non seulement n'est pas poissonnienne, mais de plus elle est large, c'est-à-dire qu'elle ne présente pas un maximum en dehors duquel elle décroît exponentiellement comme à chaque fois qu'il y a concentration de la mesure. Au contraire, elle décroît selon une loi de puissance : $P(d) \propto d^{-\gamma}$, et les graphes qui présentent ce phénomène sont appelés « graphes sans échelle » (*scale free* en anglais) car l'analyse dimensionnelle n'associe pas de degré typique à une telle loi de probabilité — de même qu'elle ne peut associer d'échelle de longueur à la loi de la gravitation de Newton, selon laquelle la force d'attraction entre deux corps décroît comme l'inverse du carré de leur distance. *A contrario*, la loi de décroissance exponentielle du nombre d'atomes radioactifs dans un échantillon ou la force de répulsion entre deux particules colloïdales chargées écrantées par les ions en solution aqueuse, qui décroît comme l'exponentielle de la distance entre ces ions, définissent respectivement une échelle de durée et une échelle de distance (le « τ » dans $\exp(-t/\tau)$ et le « ξ » dans $\exp(-x/\xi)$). Cette situation rappelle aussi les transitions de phases du deuxième ordre, où les fonctions de corrélation ne décroissent pas exponentiellement comme la plupart du temps mais algébriquement. Une loi de probabilité qui décroît ainsi algébriquement a seulement un nombre fini de moments bien définis (à partir d'un certain rang, les moments sont infinis) — dans la réalité, un graphe est toujours fini, et une coupure est imposée sur les probabilités des degrés, qui ne peuvent être plus petites que l'inverse du nombre de sommets du graphe. Les graphes sans échelle ont fait l'objet d'une série de travaux initiée notamment par A.-L.

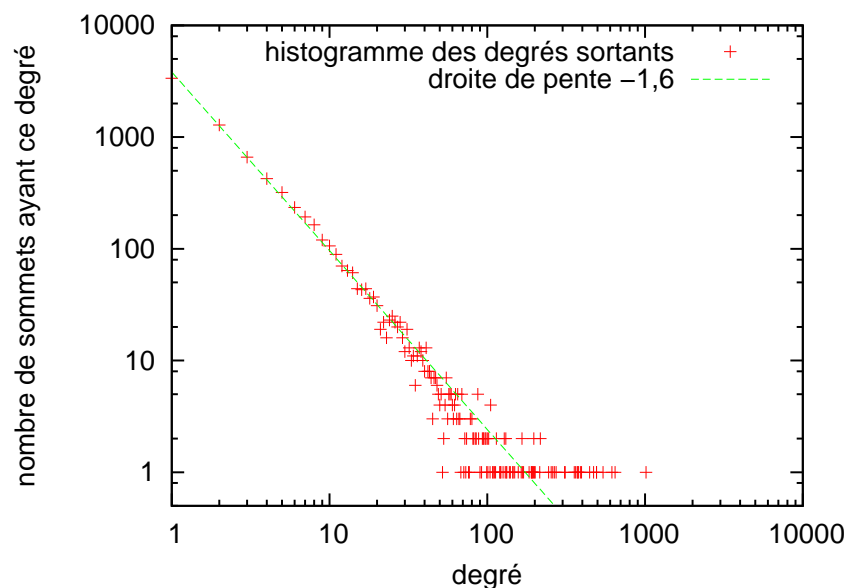


FIG. 2.2 – Un exemple de graphe sans échelle : le graphe des sept mille neuf cent cinquante cinq mots différents de ce mémoire (remarquer que comme nous avons écrit ce nombre en toutes lettres, ce mémoire est le point fixe de l'application qui le modifie pour y écrire le nombre correct de mots...). La courbe est l'histogramme des nombres d'arêtes sortantes des sommets du graphe des mots des fichiers sources informatiques de ce mémoire, où une arête orientée relie un mot à un deuxième mot si et seulement si le premier mot apparaît immédiatement avant le deuxième dans ces fichiers. On constate que l'on peut approximer la loi de probabilité empirique des nombres d'arêtes sortantes des sommets par une loi à décroissance algébrique de puissance $-1,6 \pm 0,1$, donc nous avons affaire à un graphe sans échelle. Le mot le plus fréquent est « de », suivi (dans l'ordre) de « et », « est », « les », « des ». Le premier nom commun, « modèle », apparaît en quarante-quatrième position, suivi immédiatement de « vertex », « avec » et « forces ».

Barabási et R. Albert [28, 29], et les exemples sont légion. Que le lecteur féru de cinéma nous pardonne de ne pas citer l'exemple habituel de la littérature et des séminaires où les sommets du graphe sont les acteurs de Hollywood et où l'on trace une arête entre deux acteurs si et seulement s'ils ont tourné dans le même film. Nous lui préférons un exemple aussi futile mais plus personnel : soit le graphe dont les sommets sont les mots (c'est-à-dire des suites contiguës de lettres accentuées ou non, converties en lettres minuscules) rencontrés dans les fichiers sources informatiques de ce mémoire et où l'on trace une arête orientée d'un mot à un deuxième mot si le premier mot précède immédiatement le deuxième dans ces fichiers. Le lecteur peut constater, sur la figure 2.2, que la loi de probabilité empirique des degrés des sommets de ce graphe est bien approximée par une loi de puissance d'exposant $-1,6 \pm 0,1$ (il s'agit ici du *degré sortant*, le nombre d'arêtes qui *partent* d'un sommet). Cet exemple prouve combien il est facile de trouver des graphes sans échelle dans la réalité. Le mécanisme couramment proposé pour expliquer l'apparition d'un graphe sans échelle est l'*attachement préférentiel* : si le graphe est construit par ajouts successifs de sommets et que chaque nouveau sommet noue des contacts (arêtes) avec un sommet déjà présent avec une probabilité proportionnelle au nombre d'arêtes de ce sommet déjà présent, le graphe est sans échelle. Voir par exemple [30, 31] pour quelques méthodes de génération de graphes sans échelle, ou encore [32] pour une interpolation entre graphes sans échelle et graphes d'Erdős et Rényi. P. L. Krapivsky and B. Derrida ont étudié la transition de percolation sur des graphes sans échelle engendrés par attachement préférentiel [33].

Chapitre 3

Problèmes de satisfaction de contraintes et problèmes d'optimisation combinatoire ; algorithmes de résolution

LES algorithmes que nous avons étudié dans cette partie du mémoire résolvent le problème dit de la satisfaisabilité ou « problème SAT ». Il fait partie de la grande famille des problèmes de satisfaction de contraintes et des problèmes d'optimisation combinatoire que nous présentons ici, avant de donner quelques informations sur les algorithmes que l'on peut utiliser pour les résoudre.

3.1 Problèmes combinatoires

3.1.1 Problèmes de satisfaction de contraintes (PSC)

Un problème de satisfaction de contraintes [34], en abrégé *PSC*, est la donnée d'un ensemble de variables, x_1, x_2, \dots, x_N et d'un ensemble de contraintes, C_1, C_2, \dots, C_M . Chaque variable x_i possède un domaine D_i de valeurs possibles non vide. Chaque contrainte C_i indique, pour un sous-ensemble des variables, les combinaisons de valeurs autorisées pour ces variables. Donnons tout de suite un exemple à la mode : on peut décrire une grille de sudoku (figure 3.1) comme un problème de satisfaction de contraintes où une variable est associée à chaque case vide, le domaine de valeurs possibles de chaque variable est l'ensemble des chiffres de 1 à 9, et les vingt-sept contraintes spécifient que les variables d'une même ligne, d'une même colonne ou d'une même *région* carrée (entourée de lignes grasses) sur la figure doivent prendre neuf valeurs distinctes.

Une *affectation* des variables est une spécification, pour tout ou partie des variables, d'une valeur possible pour chaque variable. Elle est dite *partielle* si elle ne spécifie pas les valeurs de toutes les variables, *complète* ou *totale* dans le cas contraire. Par commodité nous dirons simplement *affectation* pour *affectation totale*. Une *solution* est une affectation totale qui ne viole aucune des contraintes. Il peut y en avoir plusieurs, ou ne pas y en avoir du tout. Dans certains PSC, on ajoute une *fonction objectif* définie sur l'ensemble des affectations complètes des variables et à valeurs dans \mathbb{R} , et l'on cherche une solution (s'il en existe) qui rend cette fonction maximale (ou minimale). Une telle solution est dite optimale ; une solution non optimale satisfait les contraintes mais ne rend pas la fonction objectif maximale (resp. minimale). *Résoudre* un PSC signifie soit fournir une solution (optimale le cas échéant), soit donner la preuve qu'il n'a pas de solution. Dans l'exemple du Sudoku, une affectation des variables est une donnée d'un chiffre pour chaque case vide, et deux *solutions* pour les problèmes de la figure 3.1 sont montrées figure 3.2. Un autre exemple de PSC est celui du coloriage de graphe vu p. 36 : il s'agit d'affecter un élément (la couleur) d'un ensemble fini (par exemple {rouge, vert, bleu}) à chaque sommet d'un graphe simple de telle façon que deux sommets reliés par une arête n'aient pas la même couleur. On peut reformuler le problème qui se pose aux écoliers à qui

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|--|---|---|---|---|
| | 6 | 5 | 8 | | | 3 | 1 | |
| 7 | | 8 | 2 | | 3 | 6 | | 5 |
| 1 | | | 5 | | 6 | | 7 | 8 |
| 8 | 1 | | | | | | 5 | 6 |
| | | | | | | | | |
| 5 | 7 | 6 | | | | 4 | 2 | 3 |
| 3 | | | 7 | | 8 | | | 1 |
| 6 | | 7 | 1 | | 2 | 5 | | 4 |
| | 2 | 1 | 4 | | 5 | 8 | 6 | |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | | 8 | 3 | | | 4 | | |
| 4 | | | 9 | | 7 | 1 | | |
| | 3 | | 6 | 5 | 4 | | | 8 |
| | 4 | 3 | | | | 8 | | 9 |
| | | | | | | | 7 | |
| 5 | 7 | 6 | | | | | 4 | |
| | 8 | | | 1 | | | 5 | |
| 9 | | | 5 | 4 | 3 | 6 | | |
| | 5 | 4 | | | 6 | | | |

FIG. 3.1 – Deux exemples de problèmes de satisfaction de contraintes (des grilles de sudoku). Une variable est associée à chaque case vide ; elle peut prendre les valeurs de 1 à 9. Les vingt-sept contraintes sont les suivantes : sur chaque ligne, chaque colonne et dans chaque région carrée de 3×3 cases entourée de lignes grasses, chaque chiffre de 1 à 9 doit apparaître une fois exactement. Le but est de trouver quelles valeurs donner aux variables (quels chiffres écrire dans les cases vides) pour satisfaire les contraintes, en supposant que c'est possible. Des solutions de ces problèmes sont données un peu plus loin.

l'on a demandé de colorier une carte de l'Europe de façon abstraite en considérant le graphe dont les sommets représentent les pays d'Europe et où deux pays sont reliés par une arête s'ils partagent une frontière terrestre commune. Le lecteur a peut-être remarqué une ambiguïté dans notre discours : nous avons parlé *du* problème de coloriage de graphes, alors que d'après la définition nous aurions dû écrire *des* problèmes de coloriage. En fait, on appelle couramment *un* problème un ensemble de problèmes « de même nature » (par exemple, *le* problème du Sudoku est en fait l'ensemble des grilles de 9×9 cases partiellement remplies et telles qu'il existe au moins une solution), et un élément de cet ensemble est appelé une *instance* du problème. L'expression « de même nature » est quelque peu ambiguë : à première vue elle a un sens, mais à la réflexion il est difficile de la définir précisément. Par exemple, on se rend très vite compte que le problème du sudoku n'est qu'un problème de coloriage de graphe (un peu modifié) : soit le graphe à quatre-vingt-un sommets (qui correspondent aux cases) où deux sommets sont reliés si (et seulement si) ils sont sur la même ligne ou sur la même colonne ou dans la même région carrée, qu'il s'agit de colorier avec les couleurs 1 à 9. Les sommets correspondants aux cases initialement remplies sont initialement déjà coloriés de façon idoine. On peut montrer que cette instance du problème de coloriage de graphes est *équivalente* à la grille de sudoku, c'est-à-dire qu'il existe une bijection entre les affectations des deux problèmes dont la restriction à l'ensemble des solutions de l'un est une bijection entre les solutions des deux problèmes. Faisons-le : soit une solution de la grille de sudoku. Affectons aux sommets du graphe les couleurs de leurs cases dans cette solution. Toutes les contraintes sont satisfaites, puisque si deux sommets qui correspondent à deux cases dans la même ligne ou la même colonne ou la même région avaient la même couleur, le nombre de chiffres utilisés dans cette ligne ou colonne ou région serait strictement inférieur à neuf (une couleur étant utilisée deux fois). Donc le problème de coloriage de graphe est résolu. Réciproquement, soit une solution du problème de coloriage du graphe correspondant à la grille. Plaçons dans les cases vides les chiffres qui correspondent aux « couleurs » des sommets du graphe. Pour chaque ligne (resp. chaque colonne et chaque région), la première case a un chiffre différent de ceux de la deuxième, troisième, ..., neuvième case. De même, la deuxième case a un chiffre différent de ceux de la troisième, quatrième, ..., neuvième case, et ainsi de suite, donc les neuf cases ont neuf chiffres différents parmi $\{1, \dots, 9\}$, c'est-à-dire que chacun des neuf chiffres de 1 à 9 apparaît une et une seule fois :

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 4 | 6 | 5 | 8 | 7 | 9 | 3 | 1 | 2 |
| 7 | 9 | 8 | 2 | 1 | 3 | 6 | 4 | 5 |
| 1 | 3 | 2 | 5 | 4 | 6 | 9 | 7 | 8 |
| 8 | 1 | 9 | 3 | 2 | 4 | 7 | 5 | 6 |
| 2 | 4 | 3 | 6 | 5 | 7 | 1 | 8 | 9 |
| 5 | 7 | 6 | 9 | 8 | 1 | 4 | 2 | 3 |
| 3 | 5 | 4 | 7 | 6 | 8 | 2 | 9 | 1 |
| 6 | 8 | 7 | 1 | 9 | 2 | 5 | 3 | 4 |
| 9 | 2 | 1 | 4 | 3 | 5 | 8 | 6 | 7 |

| | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 7 | 9 | 8 | 3 | 2 | 1 | 4 | 6 | 5 |
| 4 | 6 | 5 | 9 | 8 | 7 | 1 | 3 | 2 |
| 1 | 3 | 2 | 6 | 5 | 4 | 7 | 9 | 8 |
| 2 | 4 | 3 | 7 | 6 | 5 | 8 | 1 | 9 |
| 8 | 1 | 9 | 4 | 3 | 2 | 5 | 7 | 6 |
| 5 | 7 | 6 | 1 | 9 | 8 | 2 | 4 | 3 |
| 6 | 8 | 7 | 2 | 1 | 9 | 3 | 5 | 4 |
| 9 | 2 | 1 | 5 | 4 | 3 | 6 | 8 | 7 |
| 3 | 5 | 4 | 8 | 7 | 6 | 9 | 2 | 1 |

FIG. 3.2 – Une solution (affectation totale qui satisfait toutes les contraintes) pour chacun des problèmes de la figure 3.1.

nous avons une solution de la grille de sudoku. Dans la suite, nous appellerons *un problème* un ensemble de PSC appelés instances, et cet ensemble sera décrit explicitement (souvent à l'aide d'une procédure de construction explicite et aléatoire d'une instance de cet ensemble). Un problème sera dit *réductible* en un autre si l'on peut *reformuler* une instance du premier problème en instance du deuxième, c'est-à-dire donner une procédure algorithmique qui crée une unique instance du deuxième problème à partir d'une instance du premier et qui met en bijection (par une même fonction) leurs affectations d'une part et leurs solutions d'autre part. Moralement, le premier problème sera donc plus facile que le deuxième, car savoir résoudre le deuxième problème sera suffisant pour résoudre le premier.

Variables continues et programmation linéaire. Dans les exemples précédents, les domaines D_i des variables étaient des ensembles finis, mais ce n'est pas toujours le cas. En particulier, le problème dit de *programmation linéaire*, les variables peuvent prendre des valeurs réelles quelconques et les contraintes sont des équations ou des inéquations où le membre de gauche est une forme linéaire et le membre de droite une constante. La fonction objectif est une forme linéaire. Il s'agit de trouver une affectation des variables qui satisfait toutes les contraintes et qui maximise la fonction objectif (ou la minimise, mais l'on peut se restreindre au cas de la maximisation quitte à changer les signes des coefficients de la fonction objectif). Par exemple : « chercher les valeurs de x , y et z qui maximisent $x + y - z$ sous les contraintes $x + 2z = 0$, $x \geq 0$, $y - z \leq 0$, $z \leq 3$ ». Nous verrons ce problème apparaître dans le contexte des milieux granulaires au chapitre 15. Il a fait l'objet de nombreuses études, initiées par George Dantzig dans les années 1940, et il peut en pratique être résolu efficacement par des variantes de l'algorithme (ou « méthode ») du simplexe inventé par G. Dantzig (voir par exemple [35] pour une introduction à cet algorithme). L'algorithme est appelé ainsi car les contraintes linéaires d'égalité et/ou d'inégalité qui définissent le problème délimitent pour les valeurs des variables une région vide ou convexe (en dimension N s'il y a N variables), délimitée par des hyperplans, ce qui est appelé un *simplexe* ou un *polytope*. « Résolu efficacement en pratique » peut prendre un sens précis : *en moyenne*, la complexité algorithmique (c'est-à-dire le nombre d'opérations élémentaires comptées en nombre de « pivotements ») de l'algorithme du simplexe est polynomiale [36]. Néanmoins, au moins pour certains choix de pivots, la complexité dans le pire cas est exponentielle [37], même si, dans un voisinage de chaque instance de complexité exponentielle, la complexité est presque sûrement polynomiale [38]. Dit grossièrement, le fait que les variables prennent des valeurs continues et que les contraintes soient linéaires en fait un PSC plus facile à résoudre que d'autres. Il existe des variantes plus compliquées où les contraintes sont quadratiques (*programmation non-linéaire*) ou où les variables prennent des valeurs entières (*mixed integer programming* en anglais). Dans toute la suite, nous nous

restreignons à des variables qui prennent un nombre fini de valeurs.

Problèmes de décision, problèmes d'optimisation. Quand un PSC ne fournit pas de fonction objectif, on dit que c'est un *problème de décision* : le but est de savoir s'il existe ou non des solutions (des affectations complètes qui satisfont toutes les contraintes). Quand il en fournit une, c'est un *problème d'optimisation* (on parle d'*optimisation combinatoire* quand les variables prennent des valeurs discrètes). Par exemple, dans le cas du coloriage d'un graphe, « est-il possible de colorier ce graphe avec trois couleurs ? » est un problème de décision, tandis que « quel est le nombre minimal de couleurs nécessaires pour colorier ce graphe ? » est un problème d'optimisation. Remarquer que les deux sont liés : d'une part, si l'on sait résoudre un problème d'optimisation, on peut résoudre les problèmes de décision associés. Dans notre exemple, il suffit de chercher d'abord le nombre minimal de couleurs nécessaire pour colorier le graphe, puis de voir si ce nombre est inférieur ou égal à trois. D'autre part, si l'on sait résoudre un problème de décision, et que l'on arrive encore à résoudre ce problème une fois ajoutées les contraintes qui traduisent la proposition « la fonction objectif prend une valeur inférieure à tel seuil », on peut résoudre une série de problèmes de décision avec ces contraintes pour trouver, par dichotomie, l'optimum de la fonction objectif. Ce processus est efficace car l'amplitude de l'intervalle de la recherche dichotomique converge vers zéro exponentiellement. Quand les variables sont à valeurs discrètes, il fournit l'optimum exact ; sinon, il fournit l'optimum à une certaine imprécision près.

3.1.2 Exemples de PSC discrets

On peut trouver des nombreux exemples de PSC où les variables prennent des valeurs discrètes ; voir par exemple les ouvrages de référence [39, 40] ou l'introduction [41]. Certains de ces problèmes sont assez académiques, mais plusieurs ont un intérêt pratique et même industriel tout à fait important. Cela explique le nombre d'études qui leur ont été (et sont encore) consacrées, en particulier de la part des informaticiens.

Problème du partitionnement de nombres. Ce problème a été appelé « le plus simple des problèmes difficiles » [42] car sa structure est très simple. Il s'agit de répartir des entiers strictement positifs i_1, i_2, \dots, i_N en deux ensembles de façon que les sommes des entiers de chaque ensemble soient aussi proches que possible. Il s'agit donc d'un problème d'optimisation (minimiser la différence des sommes). Si les nombres étaient bornés par A , on pourrait résoudre ce problème à l'aide d'un algorithme de complexité (dans le pire des cas) $\mathcal{O}(NA)$, mais, quand $A = 2^{\kappa N}$, l'algorithme doit manipuler des entiers ayant un nombre de chiffres qui diverge avec N et la complexité dans le pire des cas des algorithmes connus est exponentielle en N — c'est en cela que le problème est difficile. Il est plus simple que d'autres problèmes (par exemple que le problème de coloriage de graphes) car une instance est décrite par une structure de données très dépouillée : une liste de nombres. Cette structure ne fait pas apparaître de géométrie, contrairement à ce qui se passait sur le graphe ou pour le sudoku, au sens où chaque nombre de la liste peut « interagir » avec n'importe quel autre. De fait, on peut le reformuler comme un modèle de verre de spin antiferromagnétique sur réseau complet, c'est-à-dire de champ moyen. La simplicité de ce problème a pour corollaire un nombre relativement important de résultats (rigoureux ou exacts).

Problème de couverture de sommets. Étant donné un graphe non orienté, quel est la taille du plus petit ensemble de sommets qui contient au moins un sommet de chaque arête ? Contrairement au précédent, ce problème, comme celui du coloriage de graphe, possède une géométrie non triviale, celle du graphe de l'instance.

Problème du voyageur de commerce. Étant donné N villes (*i.e.* N points répartis dans le plan), on cherche le plus court chemin qui passe au moins une fois par chacune de ces villes. Ici encore, on ne connaît pas d'algorithme dont la complexité dans le pire des cas n'est pas exponentielle en N . En revanche, on connaît des algorithmes efficaces pour donner une réponse approximative (par exemple un chemin de longueur au plus le double du chemin optimal). Ce

problème aussi peut être traité comme un verre avec désordre gelé ; voir [43] pour une approche récente qui n'utilise pas la technique des répliques.

Problème de la satisfaisabilité. C'est ce problème de décision que résolvent les algorithmes étudiés au chapitre suivant. On l'appelle en abrégé problème SAT. Soit N variables booléennes (elles peuvent prendre les valeurs « vrai » et « faux ») et une formule booléenne écrite à l'aide de ces variables et des opérateurs de négation NON ou $\bar{\cdot}$, ET et OU. Existe-t-il une affectation des variables telle que la formule soit vraie (elle est alors dite *satisfaisable*) ? Par exemple, pour la formule \bar{x} ET y , qui fait intervenir les variables x et y , la réponse est oui : il suffit que x prenne la valeur « faux » et que y prenne la valeur « vrai ». Ce problème est voisin du problème K -SAT, où l'on se restreint à des formules booléennes de la forme

$$C_1 \text{ ET } C_2 \text{ ET } \dots \text{ ET } C_M \quad (3.1)$$

où chaque *clause* C_j est disjonction d'au plus K *littéraux*, c'est-à-dire :

$$C_j := x_{i_j,1}^{e_j,1} \text{ OU } x_{i_j,2}^{e_j,2} \text{ OU } \dots \text{ OU } x_{i_j,k_j}^{e_j,k_j} \quad (3.2)$$

avec $0 \leq k_j \leq K$, les $i_{j,l}$ pour $1 \leq l \leq k_j$ sont des indices qui désignent l'une des variables x_1, x_2, \dots, x_N et l'« exposant » $e_{j,l}$ indique si la variable d'indice $i_{j,l}$ doit être prise telle quelle ou s'il faut lui appliquer l'opérateur NON (x_{52} ou \bar{x}_{r2} ?). Les clauses sont les contraintes de ce problème vu comme un PSC (toutes doivent être satisfaites par les variables, c'est-à-dire prendre la valeur booléenne « vrai »). La combinaison d'une variable et, le cas échéant, de l'opérateur NON est appelée un *littéral* (dans la formule \bar{x} ET y , les littéraux sont \bar{x} et y). Pour les problèmes SAT et K -SAT avec $K \geq 3$, on ne connaît pas d'algorithme qui ne soit pas exponentiel (en $N+M$ par exemple) dans le pire des cas. Pour $K = 2$, comme pour le coloriage de graphes à deux couleurs, il en existe un [44] (nous l'avons utilisé dans la publication P2 pour évaluer numériquement la probabilité que les formules de la distribution 2-SAT aléatoire, définie ci-dessous, soient satisfaisable). Quitte à introduire des variables supplémentaires, toute instance du problème SAT peut être transformée en instance du problème 3-SAT équivalente (c'est-à-dire satisfaisable si et seulement si l'instance de départ l'est). Et le problème K -SAT peut être reformulé en un problème de physique statistique, à savoir trouver si l'énergie du fondamental d'un verre de spins avec interactions à K spins est nulle (la formule est satisfaisable) ou non [45].

Circuits eulériens, cycles hamiltoniens. Sur un graphe, un *circuit eulérien* est un chemin qui part d'un sommet, parcourt chacune des arêtes une fois exactement et revient à son point de départ, et un *cycle hamiltonien* est un chemin qui part d'un sommet, visite chacun des sommets une fois exactement et revient à son point de départ. Comme un graphe possède un circuit eulérien si et seulement si tous ses sommets sont de degré (nombre d'arêtes) pair, il est facile de répondre « oui » ou « non » au problème de décision des circuits eulériens. En revanche, aucun algorithme polynomial en temps (en le nombre de sommets) n'est connu pour le problème des cycles hamiltoniens pourtant très voisin.

Parmi les nombreux autres problèmes, on peut citer celui de trouver l'état fondamental d'un verre de spins d'Ising [46] et celui de l'ordonnancement de tâches. Le problème SAT est utilisé dans l'industrie lors des vérifications des plans d'une puce électronique avant de lancer sa fabrication ou encore pour résoudre des problèmes d'ordonnancement de tâches (grâce à une reformulation). Parmi tous ces problèmes, beaucoup peuvent être reformulés l'un en l'autre, et il est souvent commode de reformuler un problème en termes d'un problème SAT, ce qui explique l'effort particulier dévolu à son étude et à la recherche d'algorithmes efficaces pour le résoudre (voir les sites internet <http://www.satlib.org> et <http://www.satlive.org>). Donnons un exemple de reformulation : soit à colorier un graphe avec trois couleurs (disons R, V et B). On associe à chaque sommet i du graphe trois variables booléennes R_i, V_i et B_i et quatre clauses :

$$\overline{R_i} \text{ OU } \overline{V_i}, \quad \overline{V_i} \text{ OU } \overline{B_i}, \quad \overline{B_i} \text{ OU } \overline{R_i}, \quad R_i \text{ OU } V_i \text{ OU } B_i \quad (3.3)$$

qui sont satisfaites si, et seulement si, l'une des trois variables R_i , V_i et B_i est à « vrai », les deux autres étant à « faux » (de sorte qu'au sommet i soit attribuée une et une seule couleur). On associe de plus à chaque arête $i \leftrightarrow j$ du graphe trois clauses :

$$\overline{R_i} \text{ OU } \overline{R_j}, \quad \overline{V_i} \text{ OU } \overline{V_j}, \quad \overline{B_i} \text{ OU } \overline{B_j} \quad (3.4)$$

qui sont satisfaites si, et seulement si, l'on n'a pas attribué la même couleur aux sommets i et j situés aux extrémités de l'arête. Le graphe est coloriable à trois couleurs si et seulement si la formule booléenne (instance du problème 3-SAT que nous venons de construire) est satisfaisable. On dit que le problème du coloriage à trois couleurs est *réductible* au problème 3-SAT. La réciproque est vraie (mais nous ne le montrons pas).

3.2 Algorithmes de résolution

Algorithmes complets. Un algorithme de résolution qui fournit une réponse sûre à un problème de décision (soit « oui », soit « non ») après une durée de fonctionnement finie est dit complet. Pour un problème d'optimisation, il répond un nombre avec certitude. Pour chacun des problèmes ci-dessus, il est facile d'imaginer un algorithme complet : il suffit d'énumérer les combinaisons de valeurs possibles des variables et de tester pour chacune si les contraintes sont satisfaites. Chaque étape de test est rapide : il existe pour chaque problème un algorithme *polynomial en la taille de l'instance* qui indique si une combinaison de valeurs des variables satisfait toutes les contraintes d'une instance donnée (c'est-à-dire un algorithme de complexité en temps bornée par une fonction polynôme de la taille de l'instance à résoudre — mesurée par exemple en nombre de chiffres binaires nécessaire pour écrire cette instance, ou encore en nombre d'« éléments » : nombre total de chiffres binaires pour le problème de partitionnement de nombres, nombres de sommets et d'arêtes pour les problèmes sur les graphes, nombres de variables et de symboles dans la formule pour SAT, nombres de variables et des clauses pour K -SAT, nombre de villes pour le problème du voyageur de commerce, *etc.*) — il existe même souvent un algorithme linéaire pour faire ce test. En revanche, l'algorithme complet prend un temps exponentiel en raison du nombre exponentiel de combinaisons de valeurs possibles. Évidemment, on peut faire mieux que cet algorithme simpliste, par exemple avec un algorithme de type « ramifier et borner » (*branch and bound* en anglais) comme l'algorithme dit DPLL pour Davis, Putnam, Logemann et Loveland [47, 48] qui résout les instances du problème SAT. Son principe est bien connu des joueurs de sudoku, qui l'utilisent sans le savoir (sauf ceux qui auront lu ce chapitre du mémoire après avoir vu les grilles de sudoku!). Il s'agit d'énumérer les combinaisons de valeurs des variables sous forme d'un arbre, où les branches qui prennent naissance en chaque nœud correspondent aux valeurs possibles d'une variable. L'algorithme cherche une éventuelle solution en faisant un parcours *en profondeur d'abord* de l'arbre ; s'il a parcouru tout l'arbre sans trouver de solution, nous sommes certains qu'aucune affectation des variables ne satisfait la formule booléenne. Ce principe est plus efficace que l'énumération simple car il est possible de se rendre compte qu'une contrainte ne sera jamais satisfaite dès que certaines de ses variables (ou, au pire, toutes les variables qui apparaissent dans cette contrainte) ont été affectées, sans attendre que toutes les variables de l'instance le soient. Si un choix pour une valeur d'une variable conduit manifestement à une *contradiction*, c'est-à-dire au viol sans rémission d'une contrainte, l'algorithme cesse d'explorer la branche de l'arbre en cours et reprend l'exploration à un niveau supérieur pour une autre valeur d'une variable. La recherche peut être encore optimisée en choisissant dans quel ordre les valeurs des variables sont testées, selon un principe appelé *heuristique* — nous y reviendrons. Malgré tout, l'algorithme DPLL est exponentiel dans le pire cas, car il existe des instances qui le forcent à explorer un arbre qui contient un nombre exponentiel de nœuds. Pire : personne ne connaît d'algorithme qui ne soit pas exponentiel dans le pire cas. Et, d'après ce qui va suivre, il est peu vraisemblable qu'il existe un tel algorithme.

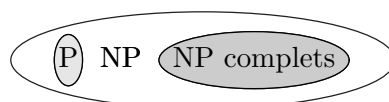
Classe NP. On appelle ainsi l'ensemble des problèmes (des tâches à accomplir) pour lesquels il existe un algorithme qui teste en temps polynomial si une combinaison de valeurs des variables (une affectation) est une solution ; cette définition englobe les problèmes de satisfaction de contraintes mais aussi beaucoup d'autres problèmes. NP est une abréviation de *non-deterministic polynomial* ; l'idée est qu'un algorithme programmé sur un ordinateur qui se démultiplie à la demande, chaque clone de l'ordinateur exécutant l'une des variantes d'une alternative, et qui exploite cette possibilité pour explorer *en même temps* les différentes branches de l'arbre de recherche, peut s'exécuter en temps polynomial car c'est le temps nécessaire pour tester une affectation complète des variables. Tous les problèmes précédents sont dans la classe NP. Un problème combinatoire qui n'y serait pas est considéré comme de peu d'intérêt (ce serait un problème où même la vérification d'une solution prendrait un temps astronomique), mais des problèmes plus complexes et néanmoins intéressants sont peut-être hors de cette classe, par exemple un « méta-problème » qui consiste à vérifier une stratégie ou un algorithme : si quelqu'un donne un algorithme pour gagner à tous les coups aux dames sur un damier de taille N , ou un algorithme pour résoudre un problème combinatoire de taille N , la vérification automatique de cet algorithme peut prendre une durée exponentielle en N , même si l'on peut considérer que la vérification prend un temps polynomial en le nombre d'instances du problème combinatoire. Un autre exemple est l'arithmétique de M. Presburger : cette arithmétique, définie par des axiomes qui ne comprennent pas la multiplication, est cohérente, complète et décidable, contrairement à l'arithmétique « usuelle » de Peano, qui n'est ni décidable, ni cohérente, ni complète (en particulier, le théorème d'incomplétude de Gödel s'applique à l'arithmétique de Peano mais pas à celle de Presburger), donc il existe un algorithme de preuve automatique de théorèmes pour elle, mais tout algorithme de décision pour un énoncé de taille n (en nombre de symboles) de cette arithmétique (qui renvoie vrai ou faux selon que l'énoncé est vrai ou faux) a un temps de calcul dans le pire cas de l'ordre de $2^{2^{cn}}$ pour une constante $c > 0$ [49], même si en pratique l'algorithme du simplexe de complexité moyenne bien inférieure peut être utilisé sur la plupart des instances (voir [50] qui traite le cas d'instances plus générales que celles de l'arithmétique de Presburger).

Classe P. Parmi les problèmes de la classe NP, certains admettent des algorithmes de complexité polynomiale (comme le problème qui consiste à trier N éléments munis d'un ordre total que nous avons vu au chapitre 1 — il est de complexité $\Theta(N \ln N)$ — ou le problème des circuits eulériens). On dit que ces problèmes sont dans la classe P. Si un problème de la classe NP n'est pas dans la classe P, cela signifie qu'aucun algorithme ne résout toute instance en temps polynomial dans le pire cas. Pour tous les problèmes dont nous avons dit plus haut qu'on ne connaît pas d'algorithme polynomial, on ne peut pas dire s'ils sont dans la classe P : personne ne connaît d'algorithme polynomial, mais personne ne peut prouver qu'il n'en existe pas. Il est conjecturé qu'ils ne sont pas dans la classe P. Pire : personne ne sait prouver que la classe NP n'est pas réduite à P, autrement dit qu'il existe au moins un problème pour lequel on est sûr que tous les algorithmes de résolution complets sont de complexité exponentielle ! Prouver ceci est un problème ouvert qui a été reconnu par le *Clay Mathematical Institute* comme l'un des problèmes majeurs en mathématiques pour le vingt-et-unième siècle.

Mettre tous les algorithmes polynomiaux « dans le même sac » peut paraître un peu grossier (par exemple, les gens qui pratiquent l'analyse numérique matricielle savent bien la différence concrète entre un algorithme de complexité cubique et un algorithme linéaire), mais la différence entre complexités exponentielles et polynomiale est réellement énorme. Qu'on en juge : pour un algorithme de complexité exponentielle, disons 2^N , doubler la puissance de l'ordinateur (ce qui est technologiquement possible sur une période de dix-huit mois d'après la loi de Moore) permet de résoudre des instances avec *un* élément de plus. Pour un algorithme de complexité cubique, disons, cela permet d'augmenter le nombre d'éléments dans les instances de 26%.

Problèmes NP-complets et NP-difficiles. Nous avons déjà vu que certains problèmes étaient réductibles en d'autres (une instance de l'un peut être reformulée en une instance de

l'autre qui est soluble si et seulement si la première l'est). Si cette reformulation peut être faite par un algorithme de complexité polynomiale, le premier problème est dit *réductible en temps polynomial* en le deuxième problème. D'après notre exemple, le problème de coloriage de graphes avec trois couleurs est réductible en temps polynomial en le problème 3-SAT, et nous avons admis que la réciproque est vraie. Donc s'il existe un algorithme de complexité dans le pire des cas polynomiale pour l'un de ces deux problèmes, il existe aussi un pour l'autre (il suffit de « concaténer » l'algorithme de reformulation avec l'algorithme de résolution, et l'ensemble a encore une complexité polynomiale) ; ils sont en quelque sorte de complexités équivalentes. Moralement, un problème qui peut être réduit en temps polynomial en un autre est au plus aussi difficile que celui-ci. Or S. Cook a démontré, en 1971, que *tout problème de la classe NP est réductible en temps polynomial au problème SAT*. Donc SAT est le problème le plus difficile de toute la classe NP (et il est *ex aequo* avec les problèmes « équivalents »). On appelle problèmes *NP-complets* ces problèmes *ex aequo*, réductibles en temps polynomial au problème SAT et auxquels le problème SAT est réductible en temps polynomial, par exemple le problème 3-SAT (3-SAT est un cas particulier de SAT, et SAT est réductible en temps polynomial à 3-SAT par mise de la formule sous forme normale conjonctive – clauses reliée par des opérateurs ET — puis ajout éventuel de variables supplémentaires pour raccourcir les clauses), le problème de coloriage à 3 couleurs ou à 3 couleurs au moins, mais aussi la version de décision du problème du voyageur de commerce ou le problème des cycles hamiltoniens. Pour les problèmes d'optimisation, on définit de manière analogue la classe des problèmes *NP-difficiles*. Ce théorème et l'existence de nombreux problèmes dans la « classe d'équivalence » des problèmes NP-complets laissent à penser qu'il n'existe pas d'algorithme polynomial pour cette classe (de nombreuses personnes ont étudié individuellement chaque membre de la classe en vain, et s'il existait un algorithme polynomial pour ne serait-ce que l'un d'entre eux cela signifierait que toutes ces personnes sont passées à côté d'un algorithme polynomial pour leur propre problème), et l'on conjecture donc que les classes P et NP-complète sont disjointes (à l'intérieur de la classe NP). Un théorème affirme que, si tel est le cas, il existe des problèmes NP qui ne sont ni dans la classe P, ni NP-complets. On ne connaît pas de façon sûre (démontrée) de tel problème ; un « bon candidat » est le problème des isomorphismes de graphes : étant donné deux graphes (voir la définition dans l'introduction de ce mémoire), existe-t-il une permutation des sommets du deuxième qui rende les deux graphes égaux (ils sont alors dits *isomorphes*) ? Personne n'a encore prouvé que ce problème, d'importance pratique comme on le conçoit bien, est dans la classe P, ni même dans les classes « RP » ou « BPP » (c'est-à-dire qu'il existe des algorithmes probabilistes (*i.e.* non déterministes, utilisant des générateurs de nombres aléatoires) de durée polynomiale en la taille du graphe et qui renvoient une réponse correcte avec probabilité p strictement supérieure à un demi), mais d'un autre côté personne n'a prouvé qu'il est NP-complet et, si tel était le cas, cela aurait des conséquences surprenantes sur la hiérarchie des classes de complexité des algorithmes fonctionnant sur une machine de Turing à oracle. *A contrario*, le problème du test de primalité (étant donné un entier $n > 1$, dire s'il est premier ou factorisable), qui figurait encore au printemps 2002 [41] comme exemple de problème dont on ne savait pas s'il était dans la classe P, NP-complet ou ni NP-complet ni dans la classe P, est en fait dans la classe P comme il a été démontré à l'été 2002 [51], et des « signes avant-coureurs » pouvaient laisser penser que c'est un problème facile (en tout cas plus facile que le problème d'isomorphisme de graphes) ; par exemple, on connaissait depuis les années 1970 un algorithme probabiliste qui résolvait ce problème en temps polynomial avec un taux de succès strictement supérieur à un demi. La conséquence des considérations précédentes est que l'image la plus probable, en l'état actuel de nos connaissances, de la classification des problèmes de décision est la suivante :



Autres classes. On peut aussi faire une classification des problèmes d'énumération (par exemple, « combien y a-t-il de façons de colorier ce graphe avec quatre couleurs ? ») ou encore prendre en compte la complexité spatiale (nombre de chiffres binaires de mémoire nécessaires au fonctionnement de l'algorithme) ou la ressource « nombre de chiffre binaires aléatoires consommés » si l'algorithme en fait usage (il s'agit alors d'un algorithme stochastique, non déterministe ; pour ces algorithmes on définit tout une variété de classes : RP, BPP, ZPP, ...). On peut aussi définir des classes de problèmes d'optimisation bien (ou mal) approximables, par exemple ceux pour lesquels il existe un algorithme polynomial en temps qui trouve une solution qui réalise un objectif inférieur à l'objectif optimal multiplié par une certaine constante.

Algorithmes non complets. Un tel algorithme soit fournit une réponse autre que « oui » et « non » pour un problème de décision ou qu'un nombre pour un problème d'optimisation (par exemple « je ne sais pas »), soit ne se termine pas en un temps fini. Un exemple important en pratique est la famille des algorithmes de recherche locale de solutions aux PSC. Dans le cas du problème 3-SAT, cela peut être par exemple : donner aux variables des valeurs aléatoires, puis, répétitivement, tant qu'il existe des clauses non satisfaites, choisir uniformément au hasard une clause dans l'ensemble des clauses non satisfaites (violées), choisir uniformément au hasard une variable qui, si l'on changeait sa valeur, rendrait la clause satisfaite, et faire ce changement (variante de l'algorithme WalkSAT [52, 53, 54, 55, 56]). Si l'instance soumise à cet algorithme n'a pas de solution, il va indéfiniment changer la valeur de variables sans jamais se terminer. Dans une version plus pratique, on peut lui demander de s'arrêter et de produire le résultat « je ne sais pas » s'il n'a pas trouvé de solution après un certain nombre de changements — on ne peut alors pas conclure : existe-t-il une solution que l'algorithme n'a pas trouvée, ou bien n'y en a-t-il pas ? De même que pour la preuve par les êtres humains de l'existence ou non d'un algorithme polynomial pour les problèmes NP-complets ! Un tel algorithme de recherche locale est plus utile qu'il n'y paraît, ne serait-ce que parce que, dans le cas où aucune solution n'est trouvée, on peut (sous certaines conditions) donner une borne supérieure exponentiellement petite en son temps d'exécution à la probabilité qu'une solution existe mais n'a pas été trouvée [57].

3.3 Distributions d'instances

Toute la classification précédente repose sur la notion de complexité dans le pire des cas, mais, comme nous l'avons vu sur l'exemple de l'algorithme de tri Quicksort au chapitre 1, cette complexité peut être fort différente de la complexité moyenne (beaucoup plus grande qu'elle) — l'approche de l'*analyse lissée*, *smoothed analysis* en anglais [38], dont nous ne parlerons pas dans ce mémoire, interpole continûment entre complexité moyenne et complexité dans le pire cas. De fait, en pratique, les informaticiens ont observé que, pour beaucoup d'instances du problème SAT qui se présentaient à eux dans les applications, le temps de calcul des algorithmes de résolution semblait polynomial — nous nous restreignons à partir de maintenant au problème SAT, mais la discussion qui suit est aussi pertinente pour d'autres problèmes. Pour expliquer ce phénomène, les informaticiens ont développé des approches probabilistes et calculé la complexité moyenne ou la distribution de probabilité des temps de calcul de certains algorithmes. Pour fonder cette approche, il faut définir une distribution de probabilité des instances. En fait, on peut distinguer deux sources de hasard : le hasard dû aux données d'entrée (les instances) elles-mêmes, et le hasard dû aux choix d'un algorithme s'il est probabiliste (ces deux distributions se recoupent parfois : le comportement d'un algorithme probabiliste peut parfois être étudié en prenant une version déterministe de cet algorithme et en changeant les données d'entrée, comme pour Quicksort où un choix fixe du pivot revient au même qu'un choix aléatoire uniforme si des permutations aléatoires uniformes des données sont soumises à l'algorithme). Nous ne considérerons que le hasard dû aux données d'entrée et pas aux choix de l'algorithme car cela rend l'étude plus facile (mais plus restreinte). On peut penser à deux buts lors du choix d'une distribution d'instances : représenter le plus fidèlement possible le

genre d'instances qui apparaît dans les problèmes pratiques, et choisir une distribution de probabilité suffisamment simple pour que son analyse soit possible. Il est difficile de concilier les deux buts et la plupart des travaux ont étudié des distributions d'instances simples, mais pas forcément représentatives des problèmes industriels. Parmi ces distributions simples, celle de la « K -satisfaisabilité aléatoire » se détache. Elle est paramétrée par le nombre de clauses M formulées à l'aide d'un ensemble de N variables. Tirer une instance de SAT dans cette distribution consiste à tirer au sort uniformément M K -uplets de variables distinctes puis à ajouter une négation (opérateur NON) à chaque variable de chaque K -uplet avec probabilité un demi (pour former des littéraux). En ajoutant des opérateurs OU entre ces littéraux au sein de chaque K -uplet, on forme des clauses de longueur K (nous dirons aussi clauses- K), et, en ajoutant des opérateurs ET entre les clauses, on forme une instance du problème K -SAT. Cette distribution est remarquable pour trois raisons. La première est sa simplicité ; en particulier, l'indépendance statistique des clauses facilite les études analytiques. La deuxième est que, pour cette distribution, on observe une transition de phases, ce qui a permis de jeter des ponts féconds entre physique statistique et informatique théorique. La troisième est que cette distribution produit, pour des valeurs bien choisies du nombre moyen $\alpha := M/N$ de clauses par variables, des instances qui nécessitent un temps de calcul typique ou moyen exponentiel en N (à la limite $N \rightarrow +\infty$ à α fixé) pour tous les algorithmes connus. Ceci est remarquable car, bien que la complexité dans le pire des cas du problème soit sans doute exponentielle, plusieurs distributions d'instances étudiées par les informaticiens se sont révélées « trop faciles » après quelques années, au sens où ils ont été capables d'inventer des algorithmes qui résolvent les instances tirées avec ces distributions presque sûrement en temps polynomial et avec un temps moyen polynomial. C'est par exemple le cas de la distribution \mathcal{R} , très semblable à celle de la K -satisfaisabilité aléatoire, où l'on tire les clauses (indépendamment) non pas en choisissant uniformément au hasard K littéraux, mais en faisant entrer, indépendamment, chacun des $2N$ littéraux dans la clause avec probabilité p fixée. D'une certaine manière, il s'agit d'une version « grand canonique » de la K -satisfaisabilité aléatoire, où l'on contrôle la longueur des clauses indirectement, *via* le paramètre p : la référence [58] recense qu'en presque tout point du « diagramme de phases » (le plan $(M/N, pN)$ à N fixé) un algorithme qui résout les instances presque sûrement en temps polynomial et dont le temps moyen de résolution des instances de cette distribution est polynomial est connu. Ce n'est pas le cas sur un certain sous-ensemble de segments du plan (donc un sous-ensemble d'intérieur vide), qui contient justement le point « $(M/N$ d'ordre un à la limite $N \rightarrow +\infty$, pN d'ordre un à cette limite) » qui correspond à la distribution « K -SAT aléatoire ».

La transition de phases statique satisfaisable/non satisfaisable. Restreignons-nous au problème 3-SAT. On constate numériquement que, si le rapport $\alpha = M/N$ est inférieur à un seuil α_c de l'ordre de 4,26, presque sûrement à la limite (que nous appellerons *thermodynamique*) $M, N \rightarrow +\infty$ à M/N fixé, les formules tirées selon la distribution « 3-SAT aléatoire » sont satisfaisables, tandis que si α est plus grand, presque sûrement elles ne le sont pas. Mieux : le nombre minimal de clauses violées, nul pour $\alpha < \alpha_c$, est strictement positif et augmente avec α pour $\alpha > \alpha_c$. Ceci rappelle les phénomènes de seuil et, de fait, E. Friedgut a prouvé que c'en est un [9]. On sait prouver rigoureusement que $3.52 < \alpha_c < 4.506$ [59, 60] et que l'intervalle de valeurs de α dans lequel la transition a lieu (la fenêtre critique) a une longueur de l'ordre de $\Theta(N^{-1/\nu})$ avec $\nu > 2$ [61]. Le temps d'exécution de l'algorithme DPLL est maximal au voisinage du seuil α_c , ce qui rappelle le phénomène de ralentissement critique observé pour les transitions de phases critiques. Plus précisément, ce temps d'exécution est polynomial en N pour les valeurs de α plus petites qu'un seuil $\alpha_H < \alpha_c$ qui dépend des détails de l'algorithme et exponentiel au-dessus, et le préfacteur de l'exponentielle augmente avec α jusqu'à la région de la transition puis rediminue ensuite. Ce comportement est illustré pour un algorithme particulier figure 3.3. Nous n'allons pas étudier la transition *statique* qui a lieu en α_c (voir par exemple [45]) ; en revanche, nos résultats, exposés au chapitre suivant, concernent la transition *dynamique* en α_H , car c'est aussi une transition de phases. Pour $\alpha < \alpha_H$, presque

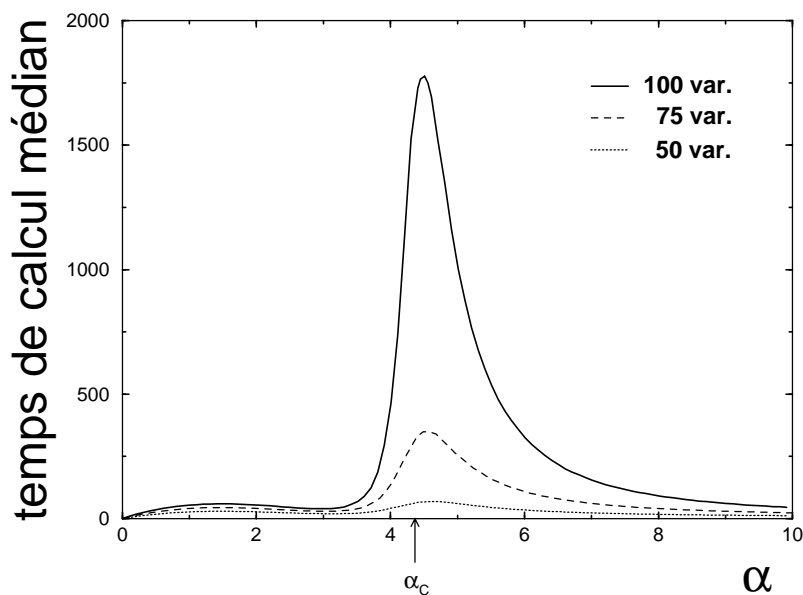


FIG. 3.3 – Le temps de calcul médian de l'algorithme DPLL avec heuristique GUC pour des distributions d'instances du problème 3-SAT aléatoire de 50, 75 et 100 variables. Ce temps est linéaire en le nombre de variables pour $\alpha \leq \alpha_{\text{GUC}} = 3,003$ et exponentiel au-dessus de ce seuil ; l'exposant dans l'exponentielle a un maximum dans la région de la transition de phases statique (qui a lieu en α_c).

sûrement l'algorithme trouve une solution en temps linéaire, donc nécessairement $\alpha_H < \alpha_c$ (s'il n'y a presque sûrement pas de solution, l'algorithme ne risque pas d'en trouver) ; la transition statique représente un cadre commun pour tous les algorithmes, même s'ils ont des transitions dynamiques différentes. La transition statique est aussi présente plus généralement pour les distributions K -SAT aléatoires et pour des « mélanges » de distributions où l'on tire au sort un certain nombre $\alpha_k N$ de clauses de longueur k (pour K assez grand, les résultats rigoureux sur cette transition sont plus nombreux et plus précis [22, 23]). Mentionnons que des algorithmes de recherche locale sont capables de résoudre les instances de 3-SAT aléatoires en temps moyen linéaire jusqu'à un seuil α_d très proche de α_c (4,21 pour ASAT [55]) et sont donc plus efficaces que DPLL dans cette région pour trouver les solutions (mais ils ne sont pas complets). Mais pour certaines applications industrielles (notamment la vérification), il est important de pouvoir *garantir* qu'une instance n'est pas satisfaisable, et ce n'est pas possible avec un algorithme non complet.

Autres transitions de phases statiques. De même que les graphes aléatoires d'Erdős et Rényi ont plusieurs transitions de phases (par exemple la transition en $p = 1/N$ pour l'apparition d'une composante connexe infinie et celle en $p = \ln N/N$ pour la connexité du graphe entier), ou encore qu'un même corps peut subir plusieurs changements d'états successifs (deux transitions, solide-liquide et liquide-gaz, ou plus encore dans le cas des solides cristallins ayant plusieurs formes allotropiques ou des cristaux liquides), la distribution K -SAT aléatoire est le siège d'autres transitions de phases statiques que la transition satisfaisable/non satisfaisable que nous venons de voir. Une autre transition particulièrement intéressante et importante est celle de la formation de grappes de solutions (*clustering* en anglais) : on constate que, lorsqu'un grand nombre de solutions existe presque sûrement, *i.e.* pour $\alpha < \alpha_c$, ces solutions se répartissent de différentes manières dans l'espace des combinaisons des valeurs des variables (l'hypercube $\{0, 1\}^N$) : il existe un autre seuil $\alpha'_c < \alpha_c$ en dessous duquel les solutions forment un amas compact et au-dessus duquel elles se répartissent en plusieurs grappes compactes mais bien séparées au sens de la distance de Hamming (qui compte le nombre minimal d'arêtes de l'hypercube à franchir, c'est-à-dire le nombre minimal de valeurs de variables à changer, pour

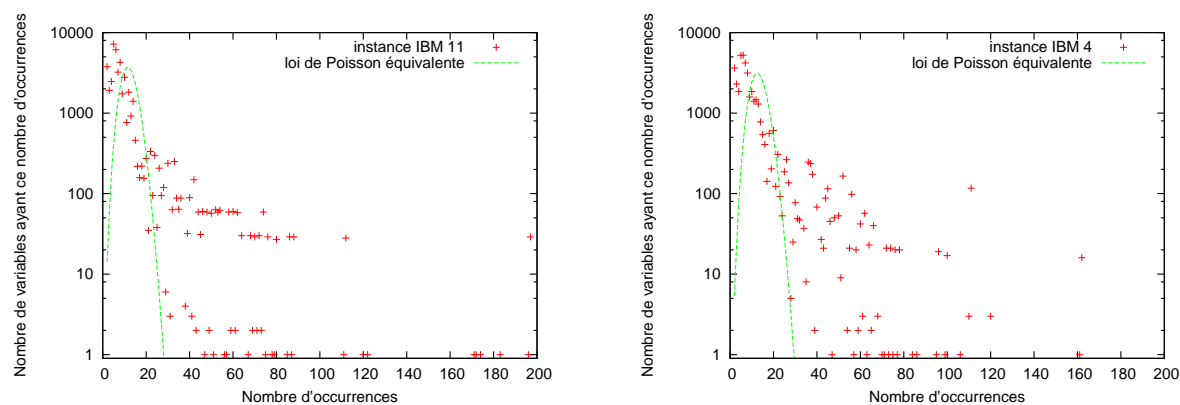


FIG. 3.4 – Les histogrammes des nombre d'occurrences dans les clauses des variables de deux instances industrielles du problème SAT (points), comparés aux lois de Poisson que l'on observerait si l'on avait tiré les clauses de ces instances indépendamment au sort (lignes continues). Ce sont les lois de Poisson normalisées qui ont pour moyenne la moyenne du nombre de clauses par variable dans chacune des deux instances réelles. La différence manifeste montre que la distribution « K -SAT aléatoire », intéressante à cause de sa transition de phase et plus facile à analyser que d'autres, ne modélise pas bien ce genre de problèmes industriels.

passer de l'une à l'autre). Ce résultat, démontré rigoureusement dans plusieurs cas [62, 22], en particulier K -SAT aléatoire avec $K \geq 8$, a une double importance : d'une part il peut influencer l'efficacité des algorithmes de recherche (locale ou complète), même si ce lien n'a pas été démontré rigoureusement jusqu'ici, d'autre part il est intéressant du point de vue de la physique statistique des verres de spins dilués.

Instances industrielles. Avant de clore cette discussion des distributions d'instances, montrons que des instances industrielles n'ont pas grand'chose à voir avec les instances typiques de la distribution K -SAT aléatoire : la figure 3.4 montre les histogrammes des nombres d'occurrences des variables dans les clauses pour deux instances fournies par l'entreprise IBM aux organisateurs de la compétition SAT (elles sont disponibles sur le site internet <http://www.satlib.org>). Ces deux instances servent lors d'une étape de vérification de la conception de microprocesseurs. Elles ont respectivement 32109 variables et 150027 clauses de longueurs 1 à 34, et 28161 variables et 139716 clauses de longueurs 1 à 43. Si les clauses de ces instances étaient tirées au sort uniformément, les lois de probabilité des nombres d'occurrences des variables seraient des lois de Poisson ; on peut voir sur la figure que les histogrammes réels en sont très loin.

Chapitre 4

Algorithmes complets de résolution du problème SAT : mise en évidence d'une classe d'universalité critique

APRÈS cette longue mise en situation, nous donnons dans ce chapitre nos résultats. Ces résultats, exacts mais non rigoureux, concernent une transition de phase dynamique d'une grande famille d'algorithmes complets de résolution du problème SAT dans le cas où les instances à résoudre sont tirées au sort suivant la distribution « K -SAT aléatoire » (définie à la section 3.3). Nous pensons qu'ils s'étendent à la famille équivalente d'algorithmes de résolution des problèmes de satisfaction de contraintes pour lesquels on peut définir une distribution d'instances semblable (c'est-à-dire une distribution dont les instances peuvent être vues comme des hypergraphes aléatoires, les variables étant les sommets et les contraintes les hyperarêtes, où la probabilité de présence de chaque hyperarête est indépendante de celle des autres hyperarêtes). Cette transition devrait peut-être être qualifiée de *cinétique*, selon la discussion du début du chapitre 7, car il n'y a pas vraiment de forces ni d'énergie dans notre problème, même si nous verrons apparaître une équation aux dérivées partielles semblable à l'équation de diffusion de particules dans un champ de forces. Après avoir défini les algorithmes que nous étudions, nous citons nos résultats puis nous donnons les ressorts de notre étude sans rentrer dans le détail des calculs, qui sont expliqués de façon quasi exhaustive dans les publications P1 et P2 reproduites en annexe. Enfin, nous donnons des arguments heuristiques très semblables à ceux de la section 2.2 pour interpréter nos résultats qualitativement sous le point de vue de la transition de percolation des graphes aléatoires.

4.1 Algorithmes DPLL avec heuristique de la propagation unitaire (PU)

Nous nous intéressons aux algorithmes complets de résolution d'instances SAT. Les meilleurs algorithmes connus à ce jour dans cette catégorie sont fondés sur le même principe que les tout premiers algorithmes (dits DPLL) proposés par M. Davis, H. Putnam, G. Lovemann and D. Loveland en 1960 et 1962, à savoir l'exploration en profondeur d'abord de l'arbre des combinaisons de valeurs des variables, avec remontée et changement de sous-branche (*backtracking*) dès qu'il devient manifeste que la sous-branche en cours d'exploration ne contient pas de solution, comme expliqué plus haut. Le choix de l'ordre des variables à affecter et de la première valeur qui leur est affectée se fait selon deux règles : la règle dite de *propagation unitaire* (PU), qui stipule que si une contrainte ne peut (compte tenu des variables déjà affectées) être satisfaite que si une certaine variable prend une certaine valeur, il faut affecter cette valeur à cette variable (s'il y a plusieurs telles contraintes, satisfaire la première, ou bien une de ces contraintes au hasard), et une autre règle, que nous appelons *heuristique*, qui spécifie quoi faire quand la règle PU ne s'applique pas — voir les exemples ci-dessous. Une grande amélioration apportée aux algorithmes DPLL apparue ces dernières années est l'*apprentissage*, qui consiste à rajouter des contraintes artificielles quand on rencontre une contradiction lors de l'exploration de l'arbre en vue de faire de meilleurs choix de variables et de valeurs ultérieurs [63].

À titre d'exemple, le programme MiniSAT [64] soumis par Niklas Een et Niklas Sorensson à la compétition SAT 2005 a été l'un des vainqueurs de cette compétition malgré sa simplicité (le but des auteurs était de fournir un programme minimaliste à but quasi pédagogique, qui incorpore les ingrédients essentiels donnés ci-dessus, mais sans fioritures).

Nous avons cantonné notre étude aux algorithmes *sans* apprentissage pour des raisons de simplicité. Cet ingrédient est essentiel aux performances des algorithmes, et il change probablement le seuil en α de la transition dynamique. Cependant, nous avons montré (non rigoureusement) que le comportement critique (fonction d'échelle et exposants critiques) des algorithmes au voisinage de ce seuil est universel et ne dépend pas de l'heuristique, et par conséquent il est très probable que ce comportement critique ne dépende pas non plus de la règle d'apprentissage utilisée.

Quelque différence qu'il y ait entre les bons et les mauvais exemples, on trouvera que les uns et les autres ont presque également produit de méchants effets.

La Rochefoucauld, *Réflexions*

Pour bien comprendre le fonctionnement des algorithmes, prenons un exemple où l'heuristique est la plus simple possible : « en l'absence de clause de longueur un (de *clause unitaire*), choisir une variable uniformément au hasard et l'affecter à « vrai » ou à « faux » au hasard avec probabilités $1/2$ et $1/2$ ». Soit à déterminer si l'instance du problème 3-SAT

$$(x \text{ OU } \bar{y} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } \bar{y} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } \bar{y} \text{ OU } t) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } y \text{ OU } \bar{t}) \quad (4.1)$$

pour les variables x, y, z, t . Ici, la règle PU ne s'applique pas — dans le problème K -SAT, une contrainte qui ne peut être satisfaite que si une variable bien précise est affectée avec une valeur bien précise ne peut être qu'une clause où seule une variable n'est pas affectée, c'est-à-dire une *clause unitaire*. Appliquons donc l'heuristique et tirons au sort une variable et une valeur — disons y et « vrai ». Après l'affectation de y à « vrai », l'instance devient :

$$(x \text{ OU } \text{faux} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } \text{faux} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } \text{faux} \text{ OU } t) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } \text{vrai} \text{ OU } \bar{t}). \quad (4.2)$$

Clairement, la quatrième clause est satisfaite, donc la formule ci-dessus est équivalente à la même formule sans cette clause. De même, on peut simplifier les trois premières clauses en en retirant le « faux ». Ces clauses, initialement de longueur trois (elles contenaient trois variables), deviennent des clauses de longueur deux ou *clauses-2*. Il s'agit maintenant de résoudre l'instance *réduite*

$$(x \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } t). \quad (4.3)$$

Cette instance ne fait manifestement *pas* partie de la distribution 3-SAT ; pour décrire les instances partiellement réduites produites par l'algorithme au cours de son déroulement, il nous faut préciser au moins le nombre de clauses de longueurs trois, deux, un et zéro — nous verrons plus loin que, statistiquement, cela suffit. Il n'y a toujours pas de clause de longueur un (*unitaire*) ici, donc tirons à nouveau une variable et une valeur au sort — disons z et « faux ». Après affectation de z à « faux » et simplifications, il nous reste

$$x \text{ ET } \bar{x} \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } t). \quad (4.4)$$

Cette fois, il y a deux clauses unitaires, x et \bar{x} . Si l'on traite la clause de longueur deux d'abord, il est possible que cela satisfasse aussi tout ou partie des clauses unitaires (par exemple, affecter x à « faux » satisfierait la clause de longueur deux et la deuxième clause unitaire), mais ce n'est pas automatique (affecter t à « vrai » satisfierait la clause-2 mais ne changerait rien aux clauses unitaires). De plus, ici nous voyons bien que l'instance n'est pas satisfaisable, car deux contraintes demandent que x soit affecté à deux valeurs différentes, donc tout traitement des clauses autres que les clauses unitaires risque de retarder la prise de conscience de ce problème

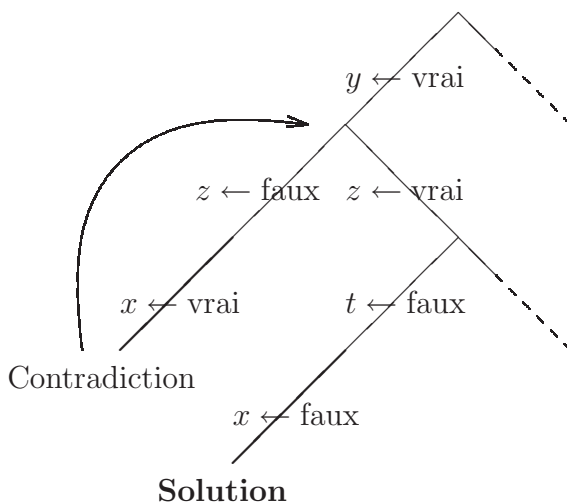
et son traitement. Inversement, si l'on choisit de traiter les clauses unitaires d'abord, d'une part nous nous apercevrons tout de suite d'une éventuelle contradiction comme ici, d'autre part l'affectation de variables pour satisfaire les clauses unitaires va simplifier les clauses de longueur deux et plus et nous aurons moins d'hésitation par la suite. Bref, ne pas traiter les clauses unitaires présentes, au mieux ne fait pas gagner de temps, au pire en fait perdre, et c'est pourquoi les algorithmes utilisés en pratique appliquent la règle de propagation unitaire en priorité. Ce nom vient du fait que la règle répercute (propage) les conséquences des choix faits pour certaines clauses dans les autres clauses. On comprend bien qu'une telle règle peut se généraliser à tous les PSC (par exemple, dans un problème de coloriage de graphe, si un sommet ne peut être manifestement colorié qu'avec une couleur, autant le colorier tout de suite avec cette couleur ; si une tâche d'un problème d'ordonnancement de tâche ne peut être exécutée qu'à un instant donné, autant la programmer pour cet instant, *etc.*). Satisfaisons la première clause unitaire de notre instance ; pour cela, on affecte x à « vrai ». Il reste :

$$\text{faux ET } t. \quad (4.5)$$

La première clause est appelée clause de longueur zéro ou *contradiction* car elle traduit l'existence passée de contraintes contradictoires (ici, x et \bar{x}). Donc notre instance partiellement réduite est non satisfaisable. Nous ne pouvons pas en déduire que l'instance de départ l'est, car nous avons fait plusieurs hypothèses à chaque fois que nous avons affecté une variable. À vrai dire, les affectations faites pour satisfaire les clauses unitaires sont incontestables : si nous ne les avons pas faites nous aurions fabriqué d'autres clauses de longueur zéro. Inutile donc de revenir dessus. En revanche, le dernier choix *non forcé*, à savoir affecter z à « faux », n'a rien d'évident. Remontons donc dans l'arbre des possibilités et faisons le choix contraire pour voir s'il conduit lui aussi à une contradiction — auquel cas nous aurons prouvé que l'instance partiellement réduite

$$(x \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } z) \text{ ET } (\bar{x} \text{ OU } t) \quad (4.6)$$

est non satisfaisable, et il nous faudra revenir sur le choix non forcé précédent (affecter y à « vrai », l'inverser et examiner ses conséquences pour savoir si l'instance de départ, non réduite, est vraiment non satisfaisable. Si nous utilisons l'*apprentissage*, ici nous ajouterions peut-être des clauses artificielles à l'instance de départ.



Après avoir annulé l'affectation de x , affectons z à « vrai ». Il vient :

$$\bar{x} \text{ OU } t. \quad (4.7)$$

Après un choix aléatoire parmi les quatre choix possibles (deux choix de variables et deux choix de valeurs pour la variable choisie), nous arrivons soit à une instance vide, sans clauses, donc satisfaisable (et l'une des quatre variables n'est même pas affectée, ce qui signifie que

nous avons trouvé d'un seul coup deux solutions), soit à une clause unitaire unique qu'il est facile de satisfaire. Bref, nous pouvons conclure que l'instance de départ est satisfaisable et donner une affectation des variables qui la satisfait. Cette recherche est résumée dans le schéma arborescent ci-dessus, où les lignes grasses indiquent les choix forcés par la règle de propagation unitaire, les lignes droites non grasses les choix non forcés, les lignes droites interrompues des parties de l'arbre que nous aurions pu explorer (ou dû explorer si nous avions voulu recenser toutes les solutions) et la ligne courbe l'étape de retour sur une hypothèse (*backtracking* en anglais).

Algorithme sans remontée. Dans toute la suite, nous étudierons la version sans remontée de l'algorithme DPLL, que l'on appelle algorithme glouton (*greedy* en anglais). Cette version n'est pas un algorithme complet : si elle trouve une solution, elle rapporte que l'instance est satisfaisable (nous parlerons alors de « succès » de l'algorithme), mais si elle trouve une contradiction, au lieu de revenir sur ses choix elle s'arrête et produit le résultat « je ne sais pas ». Nous la préférons à la version normale de DPLL car elle facilite grandement l'étude. Elle s'exécute en un temps borné par le nombre N de variables dans l'instance, et nous allons voir qu'il existe un seuil α_H , qui dépend de l'heuristique H , en dessous duquel la version gloutonne trouve (à la limite thermodynamique) une solution avec une probabilité P_{succ} finie, et au-dessus duquel elle trouve une solution avec une probabilité exponentiellement faible en N (donc nulle à la limite thermodynamique). Elle peut être transformée en algorithme complet par la procédure suivante : « exécuter la version gloutonne de DPLL successivement sur toutes les permutations des clauses et des variables » et, si l'heuristique est non déterministe, l'exécuter en plus, pour chaque permutation, sur toutes les séquences de nombres aléatoires (nous pouvons nous restreindre à des nombres aléatoires entiers car l'algorithme manipule uniquement des variables booléennes et des nombres entiers de clauses et de variables) utilisés par l'algorithme. Si la formule SAT a une solution, cet algorithme rendu complet la trouvera forcément, et, si elle est non satisfaisable, nous en aurons la certitude quand la version gloutonne aura répondu « je ne sais pas » pour toutes les permutations. Si les différentes exécutions de la version gloutonne dans cette procédure étaient statistiquement indépendantes, nous pourrions conclure que la durée totale d'exécution est, en moyenne, linéaire en N pour $\alpha < \alpha_H$ (car, si une exécution gloutonne trouve une solution avec probabilité P_{succ} , il faut en moyenne $1/P_{\text{succ}}$ exécutions gloutonnes pour trouver une solution, donc le temps moyen de calcul total est d'ordre N/P_{succ}), et exponentiel en N pour $\alpha > \alpha_H$. Mais il n'en est pas rigoureusement ainsi : les différentes exécutions de la version gloutonne sont corrélées car il s'agit de la même instance. Pour la même raison, nous pouvons dire que la probabilité que l'algorithme DPLL trouve une solution sans remontée (donc en temps linéaire) si $\alpha < \alpha_H$ est finie, mais nous ne pouvons pas conclure sur son temps moyen de recherche car les différentes branches de l'arbre d'exploration sont corrélées. En fait, en faisant une étude un peu plus générale que la nôtre, A. Frieze et S. Suen ont montré [65] que, quand $\alpha < \alpha_H$, l'algorithme DPLL avec heuristique GUC et une possibilité très limitée de remontée trouve une solution presque sûrement et que, presque sûrement, le nombre de remontées qu'il fait est inférieur à $(\ln N)^5$, donc son temps de calcul total est borné (p. s.) par $N(\ln N)^5$ qui est « quasiment » linéaire en N . La possibilité de remontée est la suivante : si une clause-0 est produite, l'algorithme inverse les affectations (« vrai » \leftrightarrow « faux ») de toutes variables qui ont été affectées selon la règle PU depuis la dernière fois que l'autre règle (l'heuristique) a été utilisée. Cela suffit pour contourner le problème (la création de clause-0) à condition d'une part que le jeu de clauses unitaires actuel ne mène qu'à une contradiction (si ce jeu contient, entre autres, les clauses x , \bar{x} , y et \bar{y} cette remontée limitée est impuissante à traiter la deuxième clause-0 inévitablement produite) et d'autre part que l'on ne crée pas de contradiction en inversant les affectations, donc en particulier que chacune de ces affectations était une conséquence d'une affectation précédente (si, à un moment donné, il y avait deux clauses unitaires, disons x et y , la règle PU a mené à affecter x et y (disons x puis y), et quand on inverse l'affectation de y la clause x demeure, non satisfaite, et elle se transforme en clause-0 quand on inverse l'affectation de x). En fait,

nous verrons plus loin que, au voisinage du seuil α_H , le nombre moyen de clauses unitaires produit par affectation de variable est un, donc le scénario « chaque clause unitaire produit *au plus une seule* clause unitaire en cascade » nécessaire au succès de cet algorithme à remontée limitée se produit, et c'est pourquoi il est efficace. Pour une étude non rigoureuse de DPLL avec remontées non limitées, voir par exemple [66] ; [67] donne un calcul rigoureux de la taille moyenne du nombre de nœuds visités par DPLL dans l'arbre de recherche). Le résultat d'A. Frieze et S. Suen montre que le seuil de la transition « durée d'exécution polynomiale (quasi linéaire)–durée d'exécution exponentielle » de l'algorithme DPLL avec heuristique GUC est supérieur ou égal au seuil α_{GUC} de la transition succès avec probabilité finie–échec presque sûr de l'algorithme DPLL glouton avec la même heuristique. Il est très vraisemblable que les deux seuils soient égaux et que les corrélations entre branches de l'arbre de recherche deviennent nulles à la limite thermodynamique à cause du caractère de champ moyen des instances — et ce pour toutes les heuristiques H. En particulier, qualitativement, comme nous verrons qu'au voisinage du seuil α_H le nombre de clauses unitaires est d'ordre $N^{1/3}$, il est clair que des versions plus sophistiquées que l'algorithme d'A. Frieze et S. Suen avec remontées limitées qui fonctionneraient même s'il y a 2, ou 3, ou tout nombre fini de clauses unitaires en même temps échoueraient presque sûrement pour $\alpha > \alpha_H$.

Quelques heuristiques. L'heuristique de l'exemple ci-dessus, que nous avons appelée R (pour *random*) dans la publication P2, est sans doute la plus simple que l'on puisse envisager, et, bien sûr, pas la plus efficace. L'ensemble règle PU et heuristique R est appelé dans la littérature informatique heuristique PU [68] (ou UP en anglais, pour *unit propagation*). En effet, les informaticiens appellent heuristique l'ensemble des règles qui précisent quelle variable affecter et comment l'affecter. Comme la règle PU est incontournable dans tout algorithme DPLL sensé, nous appelons heuristique uniquement la règle qui s'ajoute à PU. L'heuristique GUC [68] (*generalized unit clause*) conseille de prendre une variable de la clause la plus courte et de l'affecter *de manière à satisfaire cette clause* et non pas au hasard. Intuitivement, cette heuristique est plus efficace que R, et cela se confirme quantitativement : alors que la probabilité de succès P_{succ} de l'algorithme glouton avec PU et R (mais sans apprentissage) n'est finie à grand N , sur la distribution 3-SAT aléatoire, que pour $\alpha < \alpha_R = 8/3$, pour DPLL avec PU et GUC elle l'est jusqu'en $\alpha_{GUC} \approx 3,003$ [68]. L'heuristique HL [59] (pour *heaviest literal*) conseille de choisir le littéral qui apparaît le plus grand nombre de fois dans l'instance réduite et de l'affecter à « vrai » (c'est-à-dire d'affecter la variable de ce littéral de telle sorte que la valeur logique du littéral soit « vrai »), indépendamment des longueurs des clauses ou du nombre d'occurrences du littéral complémentaire. Son seuil est $\alpha_{HL} \approx 3.52$. L'heuristique CL [59] (pour *complementary [pairs of] literals*) est plus compliquée et tient compte des occurrences des littéraux et de leurs littéraux complémentaires, et cherche à faire diminuer autant que possible le rapport du nombre de clauses de longueur deux au nombre de clauses de longueur trois. C'est l'étude théorique de cette heuristique qui a permis de trouver la borne inférieure rigoureuse du seuil α_c de la transition de phase statique de la distribution 3-SAT aléatoire la plus précise à ce jour : $\alpha_c \geq \alpha_{CL} \approx 3,52$. L'heuristique KCNFS [69], enfin, assez complexe, a été conçue pour minimiser le nombre de remontées dans l'arbre de recherche et donc accélérer l'algorithme là où il est le plus lent, au voisinage de la transition statique. Elle a remporté la compétition SAT 2003 dans la catégorie « instances aléatoires ».

4.2 Résultats

La figure 4.1 montre les courbes de $P_{succ}(\alpha)$ pour différentes heuristiques. On constate que la transition P_{succ} fini– P_{succ} nul (à la limite $N \rightarrow +\infty$) a lieu en un seuil α_H qui dépend de l'heuristique (plus l'heuristique est performante, plus il est élevée). Mais faisons un grossissement des courbes au voisinage du seuil (à droite sur la figure) : nous constatons que la convergence est non uniforme, comme pour la transition de percolation du chapitre 2. Peut-on faire un changement d'échelles des axes α et P_{succ} , qui dépend de N , pour que ces courbes

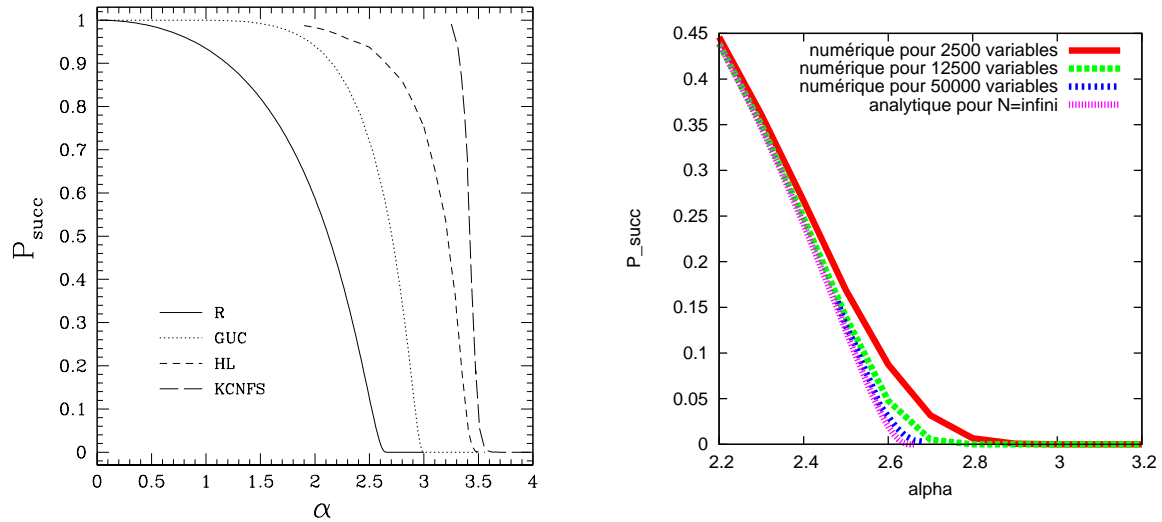


FIG. 4.1 – **À gauche** : Probabilité P_{succ} que l’algorithme glouton avec différentes heuristiques trouve une solution à une instance de la distribution 3-SAT aléatoire en fonction du nombre moyen α de clauses par variable (résultats analytiques à la limite $N \rightarrow +\infty$ pour les heuristiques R et GUC, résultats numériques pour HL et KCNFS). Pour chaque heuristique, un seuil en α , qui dépend de l’heuristique, sépare la région où P_{succ} est finie à la limite $N \rightarrow +\infty$ de celle où P_{succ} est exponentiellement faible en N . **À droite** : Agrandissement de la région au voisinage du seuil pour R. Les courbes pour N fini, obtenues numériquement, convergent de façon non uniforme vers la courbe analytique pour N infini. Nous montrons dans ce chapitre que cette convergence non uniforme suit une loi d’échelle.

se superposent et trouver ainsi une relation d’échelle? La réponse est oui. La figure 4.2 (à gauche) nous indique comment choisir l’échelle de l’axe P_{succ} : en $\alpha = \alpha_c$, $\ln P_{\text{succ}}$ se comporte asymptotiquement comme $N^{1/6}$. De plus, la largeur de la fenêtre critique en α est d’ordre $N^{-1/3}$ — comme pour la percolation des graphes d’Erdős et Rényi —, si bien que la relation d’échelle s’écrit

$$-\ln P_{\text{succ}} [(1 + \epsilon)\alpha_H, N] = N^{1/6} \Phi(\epsilon N^{1/3}). \quad (4.8)$$

Cette relation est vérifiée numériquement sur la figure 4.2 à droite, où nous avons reporté, après choix des axes conformément à cette relation d’échelle, les données numériques pour $P_{\text{succ}}(\alpha, N)$ pour les nombres de variables $N = 1000$ et $N = 20000$ pour l’heuristique R : les courbes se superposent, aux effets de taille finie près. Mieux : si nous ajoutons les données pour l’heuristique GUC, après le choix d’échelles des axes adéquat (c’est-à-dire avec les *mêmes* exposants $1/6$ et $1/3$, mais avec le seuil $\alpha_{\text{GUC}} \approx 3,003$ au lieu de $\alpha_{\text{R}} = 8/3$ et des coefficients numériques indépendants de N différents sur les deux axes), elles se superposent aussi. C’est le phénomène d’universalité critique.

En fait, l’exemple de fonctionnement de l’algorithme DPLL donné à la section précédente nous a laissé entrevoir que la distribution d’instances pertinente pour l’étudier est une distribution aléatoire où les clauses peuvent être de longueurs trois, deux, un et zéro. En particulier, la distribution $(2 + p)$ -SAT d’instances du problème SAT [70] choisit, pour N variables et M clauses, pM clauses-3 uniformément au hasard selon la procédure de la distribution 3-SAT aléatoire et $(1 - p)M$ clauses-2 selon la procédure de 2-SAT aléatoire.

Cas $p > 2/5$. Nous avons montré que la relation d’échelle précédente est valable, avec les mêmes exposants et la même fonction d’échelle, pour les algorithmes gloutons avec la règle PU et toute heuristique, auxquels on soumet des instances de n’importe quelle distribution

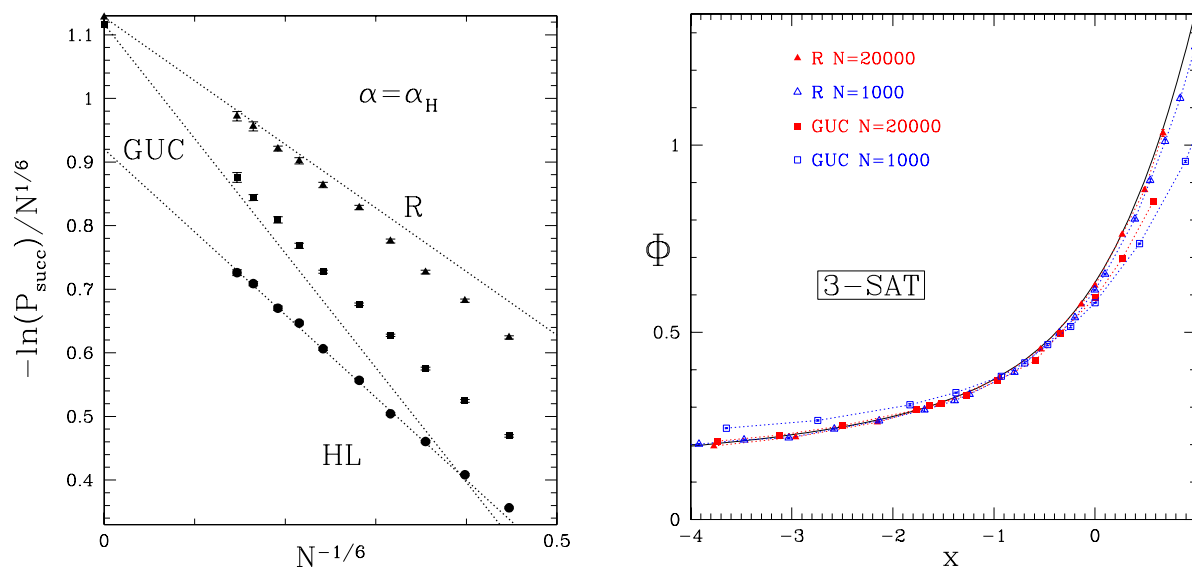


FIG. 4.2 – **À gauche** : Estimations numériques de la probabilité de succès de l’algorithme glouton pour trois heuristiques différentes aux seuils respectifs des transitions dynamiques de ces trois heuristiques, en fonction de la tailles des instances N de la distribution 3-SAT aléatoire soumises à cet algorithme. Les données sont tracées avec un choix d’échelles qui met en évidence que, au seuil de la transition et pour N grand, $-\ln P_{\text{succ}}$ a pour premiers termes dans son développement asymptotique des termes d’ordre $N^{1/6}$ et N^0 . **À droite** : Mêmes estimations numériques pour des valeurs de α différentes de α_H , et tracées en utilisant une quantité proportionnelle à $N^{1/3}(\alpha - \alpha_H)$ en abscisses et $-\ln P_{\text{succ}}(\alpha, N)/N^{1/6}$ en ordonnées, pour montrer la validité de la relation d’échelle (4.8). La ligne continue est la courbe de la fonction d’échelle Φ que nous avons calculée analytiquement (de même que les coefficients de proportionnalité des axes), voir ci-dessous.

$(2 + p)$ -SAT, du moment que $p > 2/5$:

$$-\ln P_{\text{succ}}[\alpha_H(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3})] = N^{1/6} r_H^\Phi \Phi(r_H^{\epsilon_\alpha} \epsilon_\alpha) + E_H + \mathcal{O}(N^{-1/6}). \quad (4.9)$$

Les coefficients r_H^Φ et $r_H^{\epsilon_\alpha}$ ne sont pas universels, ni le terme sous-dominant E_H , comme il est bien connu [71], mais nous pouvons les calculer (voir la publication P2 pour des exemples de valeur). La fonction d'échelle Φ est universelle et vaut

$$\Phi(x) := \frac{1}{4} \int_{\mathcal{A}(x)}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{x - \text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y)}} \left[\frac{\text{Ai}'(y)^2}{\text{Ai}(y)^2} - y \right]^2, \quad (4.10)$$

où Ai est la fonction d'Airy Ai et $\mathcal{A}(x)$ est la fonction réciproque de $x \mapsto \text{Ai}'(x)/\text{Ai}(x)$. L'apparition de la fonction Ai ici n'est pas une grande surprise, car nous verrons plus loin que la dynamique de l'algorithme dans la région critique peut être interprétée comme un mouvement brownien biaisé avec bord absorbant — voir par exemple [72] ou la revue [73]. La courbe de Φ est donnée figure 4.2 à droite et elle est comparée avec succès aux données numériques. Le mécanisme sous-jacent à l'universalité est le suivant : quand α est proche du seuil α_H , il arrive (presque sûrement) une période *critique* durant le déroulement de l'algorithme où le nombre de clauses unitaires est presque tout le temps non nul (il est même d'ordre $N^{1/3}$, alors qu'en dehors de la période critique il est presque sûrement fini) : seule une affectation de variable sur $N^{1/3}$ a lieu selon l'heuristique H, toutes les autres se faisant selon la règle PU car il y a au moins une clause unitaire. Durant cette période, la règle heuristique H n'a donc asymptotiquement pas d'influence. Or c'est précisément dans cette période que le plus de contradictions sont rencontrées, car les contradictions (clauses-0) prennent naissance des clauses unitaires, et donc que l'algorithme a le plus de chances d'échouer — le terme dominant du développement asymptotique de $\ln P_{\text{succ}}$ est uniquement dû à la contribution de la période critique, et il est indépendant de H. Le terme sous-dominant fait intervenir ce qui se passe avant et après la période critique, donc dépend fortement de l'heuristique, et il n'est pas universel.

Cas où $p < 2/5$ (et en particulier cas $p = 0$: distribution 2-SAT). La relation d'échelle (4.9) où P_{succ} est une exponentielle étirée en N n'est plus valable et il faut la remplacer par

$$-\ln P_{\text{succ}} \left[\alpha_H(p) \left(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3} \right), N \right] = \frac{\ln N}{12\beta(p)} + H[\epsilon_\alpha, \beta(p)] + F(1) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \quad (4.11)$$

où $\beta(p) := (2 - 5p)/[2(1 - p)]$ et

$$F(1) = \frac{\ln \beta(p)}{\beta(p)} \frac{3p}{8(1 - p)} - \frac{4 - p}{16(1 - p)}. \quad (4.12)$$

La fonction H est définie dans la publication P2 indirectement (elle s'exprime à partir de la solution d'une équation aux dérivées partielles) et nous n'avons pas réussi à en donner une expression analytique, mais nous pouvons en donner une approximation de bonne qualité en résolvant numériquement cette équation aux dérivées partielles ; par exemple, $H(0, 0) = 0, 24371 \pm 10^{-5}$ (cas 2-SAT). Le seuil α_H vaut $1/(1 - p)$, et il est commun à tous les algorithmes qui utilisent la règle PU (quelle que soit l'heuristique H), de même que la relation d'échelle ci-dessus, à cause du même phénomène que précédemment : au voisinage de α_H , le nombre de clauses unitaires est presque sûrement d'ordre $N^{1/3}$, si bien que l'algorithme fait presque toujours appel à PU et presque jamais à l'autre règle (en moyenne l'autre règle est utilisée une fois sur $N^{1/3}$). Pour $p < 2/5$, dans le développement asymptotique de $-\ln P_{\text{succ}}$, aussi bien le coefficient $1/(12\beta(p))$ que le terme sous-dominant $H[\epsilon_\alpha, \beta(p)] + F(1)$ sont universels. Remarquer qu'ici, contrairement à ce qui se passait pour $p > 2/5$, l'exposant critique $1/[12\beta(p)]$ dépend de p , donc il y a à proprement parler une infinité de classes d'universalité. Les choses deviennent plus claires si nous écrivons la relation précédente sous une forme qui exhibe une fonction d'échelle Ψ_p :

$$P_{\text{succ}} \left[(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3}) \alpha_H(p), N \right] = N^{-1/[12\beta(p)]} \Psi_p \left(\epsilon_\alpha N^{1/3} \right) \left[1 + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \right] \quad (4.13)$$

où

$$\Psi_p(x) := e^{-H[x,\beta(p)]-F(1)}. \quad (4.14)$$

C'est ici P_{succ} qui constitue le membre de gauche, et non pas $\ln P_{\text{succ}}$ comme pour $p > 2/5$. L'exposant $1/3$ pour la largeur de la fenêtre critique est le même que pour $(2+p)$ -SAT avec $p > 2/5$, mais l'exposant $1/[12\beta(p)]$ varie continûment avec p . Il devient infini en $p = 2/5$, signe que ce régime d'échelles cesse d'être valable. Comme (4.9), cette relation d'échelle est bien vérifiée numériquement : même si les effets de taille finie, en $N^{-1/3}$, sont importants, grâce à notre connaissance du terme sous-dominant indépendant de N dans le développement asymptotique de $\ln P_{\text{succ}}$ nous pouvons montrer l'accord entre nos prédictions et des simulations pour des instances de tailles 500 à 100000 (voir la figure 7 de la publication P2).

Cas $(2+2/5)$ -SAT. C'est le cas intermédiaire entre les deux précédents. Le terme dominant du développement asymptotique de $-\ln P_{\text{succ}}$ est $N^{1/6}$ comme pour $p > 2/5$, mais en revanche le terme sous-dominant n'est pas fini comme dans la relation (4.9) : il y a une correction logarithmique. Le raccord entre les deux régimes nécessite de faire un grossissement de la région autour de $p = 2/5$ (voir aussi la figure 3 de la publication P2) et nous trouvons :

$$-\ln P_{\text{succ}}(\alpha, p, N) = N^{1/6} \Phi(\epsilon_\alpha, \epsilon_p) + \ln(N)/24 + \mathcal{O}(1) \quad (4.15)$$

en

$$\alpha = \frac{5}{3} \left(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3} + \frac{2}{3} \epsilon_p N^{-1/6} \right) \quad \text{et} \quad p = \frac{2}{5} \left(1 + \epsilon_p N^{-1/6} \right), \quad (4.16)$$

où la fonction d'échelle Φ généralisée vaut

$$\Phi(\epsilon_\alpha, \epsilon_p) = \frac{1}{4} \int_{\mathcal{A}[\epsilon_\alpha - \frac{4}{9}\epsilon_p^2]}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{\epsilon_\alpha + \frac{1}{4}\epsilon_p^2 - \text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y)}} \times \left[\frac{\text{Ai}'(y)^2}{\text{Ai}(y)^2} - y \right]^2$$

quand $\epsilon_\alpha \leq \frac{4}{9}\epsilon_p$ et $\epsilon_p \leq 0$. Voir P2, paragraphe 6.2.2, pour la discussion des raccords dans les cas limites : $\epsilon_p \rightarrow -\infty$ etc. Ici encore, la relation d'échelle avec correction logarithmique est comparée avec succès aux estimations numériques de tailles finies pour P_{succ} .

4.3 Outils pour trouver ces résultats

Nous citons ci-dessous les principaux outils qui nous ont permis d'établir les résultats précédents en les restreignant au cas des algorithmes gloutons de résolution d'instances de K -SAT aléatoire, mais ils ont une portée bien plus générale et sont utilisés pour beaucoup d'autres algorithmes (que ce soit pour les problèmes de satisfaction de contraintes ou encore la recherche du cœur- k des graphes aléatoires [74] — voir p. 122).

4.3.1 Le principe des décisions différées

M.-T. Chao et J. Franco ont montré [75, 68] que, pour les heuristiques R et GUC, lorsque la distribution des instances à résoudre est la distribution K -SAT aléatoire, durant la première descente dans l'arbre des combinaisons des valeurs des variables exploré par l'algorithme DPLL, c'est-à-dire tant qu'il n'y a pas de remontée suite à la découverte d'une contradiction, la distribution statistique des instances partiellement réduites est uniforme si l'on conditionne au nombre de clauses des différentes longueurs et aux variables pas encore affectées. Par exemple : s'il reste les variables x , y et z et une seule clause, de longueur deux, cette clause est l'une des $\binom{3}{2} \times 2^2 = 12$ clauses-2 possibles avec probabilité $1/12$ pour chacune. Les sources d'aléa (qui mènent à l'existence d'une distribution) sont d'une part les instances de départ, d'autre part les éventuels choix aléatoires de l'algorithme. L'outil qui permet de démontrer cela a été baptisé « principe des décisions différées » dans la littérature informatique [76]. L'idée est très simple. Reprenons l'exemple de résolution « à la main » d'une instance. Dans la formule (4.5),

issue de l'affectation de x à vrai, le littéral \bar{t} fait forcément intervenir t car c'est la dernière des quatre variables qui n'a pas encore été affectée. En revanche, que ce littéral soit \bar{t} plutôt que t est complètement arbitraire : le déroulement de l'algorithme eût été le même, car l'heuristique R n'y accorde pas d'importance. Par conséquent, nous aurions aussi bien pu laisser, dans la formule de départ, une boîte noire à la place de \bar{t} , simplement étiquetée « un littéral qui fait intervenir t », et ne faire le tirage au sort entre t et \bar{t} qu'au moment où nous en avons réellement besoin, c'est-à-dire quand nous devons examiner la clause unitaire \bar{t} . De même : à l'étape précédente, après l'affectation de z à « faux », il restait deux clauses unitaires et une clause-2 faisant intervenir les variables x et t . Mais jamais nous n'avons eu besoin de savoir quelles variables, parmi x et t , et avec quels « exposants » (niées ou pas), se trouvent dans ces clauses jusqu'à cette étape, donc nous aurions pu laisser des boîtes noires « une clause unitaire faisant intervenir x ou t », « une clause-2 faisant intervenir x et t » *etc.* dans l'instance de départ et les instances partiellement réduites jusqu'ici, et faire le tirage au sort au dernier moment. Ceci rappelle l'interprétation dite de Copenhague de la mécanique quantique, où l'état quantique d'un système reste dans une superposition linéaire — chat mort, chat vivant dans l'exemple fameux du chat de Schrödinger — jusqu'à ce qu'un observateur observe ce système — qu'il ouvre la cage du chat et regarde (souhaitons au physicien expérimentateur que l'observateur ne travaille pas pour la S.P.A. !). Cette propriété d'uniformité aléatoire conditionnée aux nombres de clauses, valable pour les heuristiques R et GUC, peut être généralisée : elle est valable pour CL et HL du moment que l'on conditionne aux nombres d'occurrences des littéraux présents [59]. Elle n'est plus valable après une remontée dans l'arbre de recherche. Elle est bien sûr valable pour notre algorithme glouton, puisqu'il ne fait jamais de remontée. Elle ne serait plus valable si les instances de départ n'étaient pas tirées selon la distribution K -SAT aléatoire (cette distribution a la propriété remarquable d'avoir une loi de probabilité produit, comme la distribution des graphes d'Erdős et Rényi).

4.3.2 Un processus markovien pour les nombres de clauses

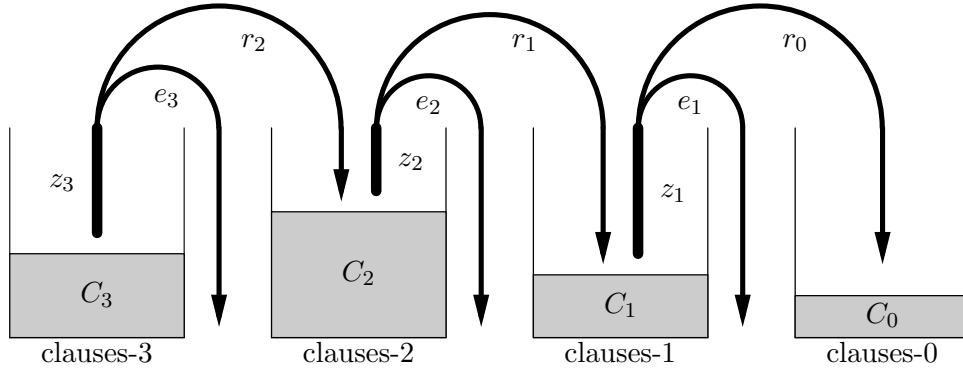
Après T affectations de variables par l'algorithme, l'instance a été partiellement réduite et il reste $N - T$ variables non affectées sur les N variables de départ, et un certain nombre C_0, C_1, C_2, C_3 de clauses-0, -1, -2 et -3. Pour les heuristiques R et GUC, d'après ce que nous venons de dire, grâce à l'indépendance statistique des variables dans les clauses, il suffit de connaître les distributions de ces nombres de clauses C_l pour en déduire la distribution statistique des instances partiellement réduites (en particulier, notre but est de calculer la probabilité qu'il n'existe pas de clause-0, c'est-à-dire que l'algorithme n'ait pas encore échoué). Toujours pour ces heuristiques, les distributions des nombres C_l évoluent sous un processus markovien (dont les coefficients dépendent du temps) [65] : si $P(\vec{C}, T)$ est la probabilité que le vecteur (C_0, C_1, \dots, C_K) prenne la valeur \vec{C} à l'étape T , nous pouvons écrire

$$P(\vec{C}'; T + 1) = \sum_{\vec{C}} M[\vec{C}' \leftarrow \vec{C}; T] P(\vec{C}; T) \quad (4.17)$$

où la matrice de Markov

$$M[\vec{C}' \leftarrow \vec{C}; T] = (1 - \delta_{C_1, 0}) M_{\text{PU}}[\vec{C}' \leftarrow \vec{C}; T] + \delta_{C_1, 0} M_{\text{H}}[\vec{C}' \leftarrow \vec{C}; T] \quad (4.18)$$

est détaillée plus loin. Elle traduit le « principe des vases communicants » entre les récipients imaginaires des clauses-0, -1, ... et $-K$ illustré ci-dessous pour $K = 3$ (le principe des vases communicants n'est pas tout à fait respecté, car certaines clauses sont satisfaites et éliminées, d'où les flots e_3, e_2 et e_1 — il y a des fuites ! En tout cas $z_k = e_k + r_{k-1}$ pour tout $k \geq 1$) :



Par exemple, pour l'heuristique H=R, en notant $b(n; m, q) := \binom{n}{m} q^m (1-p)^{n-m}$ la loi de probabilité binomiale et $\delta_{n,m}$ le symbole de Kronecker qui vaut un si $n = m$ et zéro sinon, la matrice M est la somme des matrices des règles PU et R d'expressions

$$\begin{aligned}
 M_X[\vec{C}' \leftarrow \vec{C}; T] &= \sum_{z_K=0}^{C_K} b \left[z_K; C_K, \frac{K}{N-T} \right] \sum_{r_{K-1}=0}^{z_K} b \left[r_{K-1}; z_K, \frac{1}{2} \right] \delta_{C'_K, C_K - z_K} \quad (4.19) \\
 &\times \sum_{z_{K-1}=0}^{C_{K-1}} b \left[z_{K-1}; C_{K-1}, \frac{K-1}{N-T} \right] \sum_{r_{K-2}=0}^{z_{K-1}} b \left[r_{K-2}; z_{K-1}, \frac{1}{2} \right] \delta_{C'_{K-1}, C_{K-1} - z_{K-1} + r_{K-1}} \\
 &\times \dots \times \sum_{z_2=0}^{C_2} b \left[z_2; C_2, \frac{2}{N-T} \right] \sum_{r_1=0}^{z_2} b \left[r_1; z_2, \frac{1}{2} \right] \delta_{C'_2, C_2 - z_2 + r_2} F_X[C'_1, C_1, r_1, C'_0, C_0, \frac{1}{N-T}]
 \end{aligned}$$

où, pour X=PU et R respectivement,

$$\begin{aligned}
 F_{\text{PU}} &:= \sum_{z_1=0}^{C_1-1} b \left[z_1; C_1 - 1, \frac{1}{N-T} \right] \delta_{C'_1, C_1 - 1 - z_1 + r_1} \sum_{r_0=0}^{z_1} b \left[r_0; z_1, \frac{1}{2} \right] \delta_{C'_0, C_0 + r_0}, \\
 F_{\text{R}} &:= \delta_{C'_1, r_1} \delta_{C'_0, C_0}. \quad (4.20)
 \end{aligned}$$

Interprétons par exemple l'expression de F_{PU} : la probabilité que la règle de propagation unitaire, qui choisit une variable apparaissant dans une clause unitaire et l'affecte de manière que cette clause-1 soit satisfaite, transforme une instance partiellement réduite à C_0 clauses-0 et C_1 clauses-1 en une instance à C'_0 clauses-0 et C'_1 clauses-1, sachant que r_1 nouvelles clauses-1 sont formées à partir de clauses-2, est la somme des probabilités des situations où $z_1 = 0, 1, \dots, C_1 - 1$ clauses-1 contenaient la variable choisie (sachant qu'une clause-1 au moins la contenait par définition de la règle PU). Ces probabilités sont données par la loi binomiale $b[z_1; C_1 - 1; 1/(N - T)]$: en effet, les clauses-1 ont une distribution uniforme et sont statistiquement indépendantes donc, pour former chaque clause-1 si l'on imagine qu'on les tire au sort au dernier moment selon le principe des décisions différées, il faut choisir indépendamment au hasard une variable parmi les $N - T$ variables qui n'ont pas encore été affectées. Une fois z_1 fixé, on sait que $z_1 + 1$ clauses-1 seront satisfaites ou réduites en clauses-0 et que r_1 seront formées par réduction de clauses-2, donc l'événement n'est compatible avec les valeurs de C_1 et C'_1 demandées que si $C'_1 = C_1 - 1 - z_1 + r_1$ (sens du symbole δ). Il reste encore à spécifier combien de clauses-1 seront satisfaites et combien seront réduites parmi les z_1 clauses-1 qui vont disparaître : soit e_1 le nombre de clauses-1 qui contenaient le même littéral que la clause-1 choisie par la règle PU (c'est-à-dire la même variable et le même « exposant », variable niée ou non niée). Ces clauses-1 seront satisfaites et éliminées, et les $r_0 := z_1 - e_1$ autres clauses-1 contenant la variable choisies seront réduites en clauses-0. Comme la façon dont la variable choisie apparaît dans les z_1 clauses-1 est aléatoire et indépendante d'une clause à l'autre (la variable a à chaque fois la probabilité 1/2 d'être niée et 1/2 de ne pas l'être), la probabilité que r_0 clauses-1 soient non satisfaites et réduites est donnée par la loi binomiale $b[r_0; z_1; 1/2]$. Enfin, la valeur de r_0 doit être compatible avec C_0 et C'_0 d'où le deuxième δ .

Un raisonnement similaire permet de comprendre ou d'établir l'expression de M tout entière. Nous pouvons aussi écrire une matrice similaire pour l'heuristique GUC, et de même pour HL et CL à condition de remplacer le vecteur \vec{C} par un vecteur contenant entre autres les nombres de littéraux ayant 0, 1, 2, ... occurrences dans l'instance partiellement réduite.

4.3.3 Des fonctions génératrices

Ce processus markovien s'étudie plus facilement si nous utilisons des fonctions génératrices : soit $\vec{X} := (X_0, X_1, \dots, X_K)$ et

$$G(\vec{X}; T) := \sum_{\vec{C}} X_0^{C_0} X_1^{C_1} \dots X_K^{C_K} P(\vec{C}; T). \quad (4.21)$$

La *fonction génératrice* G n'est autre que la transformée de Legendre de la probabilité P . Dans le cas de l'heuristique R, l'équation d'évolution de P se traduit pour G en

$$G(\vec{X}, T+1) = \frac{1}{f_1} G(X_0, f_1, f_2, \dots, f_K; T) + \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) G(X_0, 0, f_2, f_3, \dots, f_K; T) \quad (4.22)$$

où f_1, \dots, f_K désignent

$$f_j(\vec{X}; T) := X_j + \frac{j}{N-T} \left(\frac{1+X_{j-1}}{2} - X_j \right) \quad (4.23)$$

pour $j = 1, \dots, K$. Pour l'heuristique GUC :

$$\begin{aligned} G(\vec{X}; T+1) &= \frac{1}{f_1} G(X_0, f_1, f_2, \dots, f_K; T) + \left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1} \right) G(X_0, 0, f_2, f_3, \dots, f_K; T) \\ &+ \left(\frac{1}{f_3} - \frac{1}{f_2} \right) G(X_0, 0, 0, f_3, \dots, f_K; T) \\ &+ \dots + \left(\frac{1}{f_K} - \frac{1}{f_{K-1}} \right) G(X_0, 0, 0, \dots, 0, f_K; T). \end{aligned} \quad (4.24)$$

De ces équations d'évolution pour G nous pouvons tirer les équations d'évolution pour les moyennes $\langle C_l \rangle(T)$ des C_l , conditionnées à l'absence de clauses-0 (une manière de le faire est de prendre les dérivées de G par rapport aux X_l en $X_0 = 0$ et $X_1 = X_2 = \dots = X_K = 1$, voir la publication P2). Par exemple :

$$\begin{aligned} \langle C_j \rangle(T+1) - \langle C_j \rangle(T) &= -\frac{j}{N-T} \langle C_j \rangle(T) + \frac{1}{2} \frac{j+1}{N-T} \langle C_{j+1} \rangle(T) \quad \text{si } 2 \leq j \leq K \\ \langle C_1 \rangle(T+1) - \langle C_1 \rangle(T) &= -\frac{1}{N-T} \langle C_1 \rangle(T) + \frac{1}{N-T} \langle C_2 \rangle(T) \\ &+ \left(1 - \frac{1}{N-T}\right) \left(\langle \delta_{C_1,0} \rangle(T) - 1 \right) \end{aligned} \quad (4.25)$$

$$\begin{aligned} \langle C_0 \rangle(T+1) - \langle C_0 \rangle(T) &= \frac{1}{2(N-T)} \left(\langle C_1 \rangle(T) - 1 + \langle \delta_{C_1,0} \rangle(T) \right) = \\ &= \frac{1}{2(N-T)} \langle \max(C_1 - 1, 0) \rangle(T) \end{aligned} \quad (4.26)$$

(avec $C_{K+1} := 0$).

4.3.4 La concentration de la mesure

En fait, les choses sont encore plus simple : toujours grâce à l'indépendance statistique des variables dans les clauses, il y a *concentration de la mesure* (ou auto-moyennance) des C_l à $T = 0$, et cela perdure pour $l \geq 2$ aux instants T ultérieurs car les variations $\Delta C_l :=$

$C_l(T+1) - C_l(T)$ pour $l \geq 2$ sont elles-mêmes concentrées autour de leurs moyennes. Comme, de plus, nous pouvons approximer les moyennes de ces variations $\langle \Delta C_l \rangle$ pour $l \geq 2$ par des fonctions continues $g_l[C_2/(N-T), C_3/(N-T), \dots, C_k/(N-T)]$ au prix d'une erreur d'ordre $o(1)$, les moyennes des C_l pour $l \geq 2$ sont elles aussi approximables par des fonctions continues (et même dérivables), et il vient pour les C_l :

$$C_l(T) = Nc_l(t) + o(N-T), \quad 2 \leq l \leq K \quad (4.27)$$

où c_l est une fonction régulière de $t \in [0, 1]$ (t est le temps réduit $t := T/N$) et $o(N-T)$ est une variable aléatoire gaussienne de moyenne $\mathcal{O}(1)$ et d'écart-type $\mathcal{O}(\sqrt{N-T})$ — souvenons-nous que $N-T$ est le nombre de variables qui n'ont pas encore été affectées. Ceci a été formalisé en un théorème par N. Wormald [77]; voir [76] pour une application du théorème au cas qui nous occupe.

La raison pour laquelle l'approximation ci-dessus ne s'étend pas *pas* à C_1 et C_0 est que les termes en δ et en \max dans les équations d'évolution (4.25) et (4.26) empêchent l'existence de fonctions continues g_1 et g_0 . Ce n'est pas qu'une limitation formelle : contrairement aux C_l avec $l \geq 2$, C_0 et C_1 peuvent acquérir des distributions larges que nous sommes obligés d'étudier.

Mais, au moins pour les C_l avec $l \geq 2$, nous pouvons remplacer les équations d'évolution discrètes (4.25) par un système d'équations différentielles. Mieux : ce système est triangulaire, donc nous pouvons exprimer en cascade toutes les fonctions $c_l(t)$ depuis c_K jusqu'à c_2 . Nous trouvons ainsi par exemple

$$c_3(t) = \alpha p(1-t)^3, \quad c_2(t) = \alpha(3pt/2 + 1-p)(1-t)^2 \quad (4.28)$$

pour des instances de $(2+p)$ -SAT aléatoire avec l'heuristique R.

La concentration de la mesure autour des trajectoires moyennes $c_l(t)$ a été discutée soigneusement (presque rigoureusement) dans la section 3.3 de la publication P2, et nous invitons le lecteur intéressé à s'y reporter. Ici, rappelons simplement que l'approximation qui consiste à remplacer les $C_l(T)$ par les $c_l(t)$ ne pose pas de problème de principe à condition de respecter certaines conditions au moment de choisir des échelles qui satisfont à certaines bornes au moment de faire un grossissement de la période critique en vue d'établir l'existence des fonctions d'échelle Φ et Ψ_p .

4.3.5 Les trajectoires de résolution

Rappelons que notre but est de calculer la probabilité que le nombre de clauses-0 C_0 soit nul quand les N variables ont été affectées. À ce stade, les distributions des C_l avec $l \geq 2$ sont maîtrisées, mais il nous reste à étudier les distributions de C_0 et C_1 qui ne sont pas toujours auto-moyennantes. Pour cela nous reportons les solutions c_2 et c_3 trouvées précédemment dans les équations d'évolution de la fonction génératrice, ce qui nous amène à étudier la fonction génératrice réduite

$$G_{01}(X_0, X_1; T|C_2) := \sum_{C_0=0}^M \sum_{C_1=0}^M X_0^{C_0} X_1^{C_1} P(C_0, C_1; T|C_2) \quad (4.29)$$

(M est le nombre total de clauses dans l'instance de départ), qui satisfait à

$$G_{01}(X_0, X_1; T+1|C_2) = \left(1 + \frac{X_1 - 1}{N-T}\right)^{C_2(\alpha, T)} \times \left[\frac{1}{f_1} G_{01}(X_0, f_1; T|C_2) + \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) G_{01}(X_0, 0; T|C_2) \right] \quad (4.30)$$

où $f_1 = \frac{1+X_0}{2(N-T)} + X_1 \left(1 - \frac{1}{N-T}\right)$. Cette équation d'évolution traduit la règle PU ; l'heuristique H ni intervient qu'indirectement, à travers la trajectoire typique de résolution $C_2(\alpha, T) =$

$Nc_2(\alpha, t)$ (cette dernière dépend de la valeur initiale α du rapport « clauses par variable » et de l'heuristique).

Le comportement de $C_1(T)$ est très différent suivant que $\langle C_2 \rangle / (N_T)$ est strictement inférieur à un ou non, comme l'ont remarqué A. Frieze et S. Suen [65]. Examinons l'équation d'évolution (4.25) et supposons qu'à un instant T il y ait presque sûrement des clauses unitaires. Cette équation s'écrit alors

$$\langle C_1 \rangle(T+1) - \langle C_1 \rangle(T) = \frac{1}{N-T} [1 - \langle C_1 \rangle(T)] + \frac{1}{N-T} \langle C_2 \rangle(T) - 1. \quad (4.31)$$

Si $\langle C_2 \rangle / (N-T) < 1$, à chaque étape l'accroissement moyen de C_1 est strictement négatif (le premier terme du membre de droite est négatif ou nul puisque, par hypothèse, $C_1 \geq 1$), donc C_1 décroît tant que la probabilité qu'il soit non nul est un. On peut comprendre ce comportement en se rappelant le fonctionnement de l'algorithme : si $C_1 > 0$, il choisit, selon la règle PU, une clause unitaire et la satisfait. Le nombre de clauses unitaires décroît donc au moins de un. De plus, la variable affectée par l'algorithme apparaît dans, en moyenne, une clause sur $N-T$ dans les $C_1 - 1$ autres clauses-1 que celle qui a été choisie. Donc le nombre de clauses unitaires décroît, en plus et en moyenne, de $(\langle C_1 \rangle - 1) / (N-T)$ (nous ne considérons pas l'éventualité de l'apparition d'une contradiction car l'équation d'évolution de $\langle C_1 \rangle$ ci-dessus est conditionnée à l'absence de clauses-0). Enfin, la variable choisie apparaît dans, en moyenne, 2 clauses-2 sur $N-T$, la moitié du temps niée et la moitié du temps non niée. Donc, en moyenne, 1 clause-2 sur $N-T$ est satisfaite par l'affectation de la variable, et 1 clause-2 sur $N-T$ est réduite en clause-1 : $\langle C_2 \rangle / (N-T)$ nouvelles clauses-1 sont donc créées.

Bref, si $d_2(t) := c_2(t)/(1-t) < 1$, le nombre de clauses-1 reste proche de zéro car ces clauses sont éliminées plus vite qu'elles ne sont créées, et l'on peut montrer qu'alors la probabilité d'apparition d'une clause-0 au moins lors de l'élimination de toutes les clauses de départ reste finie à la limite $N \rightarrow +\infty$ — l'algorithme glouton a une probabilité de succès finie. En revanche, si $c_2(t)/(1-t)$ est, à un moment ou à un autre, strictement supérieur à un, les clauses-1 s'accumulent — il s'en forme même un nombre extensif, d'ordre N , si $c_2(t)/(1-t)$ reste > 1 sur un intervalle fini de t . Alors la probabilité de succès de l'algorithme glouton est exponentiellement faible en N . Le régime critique, on le devine, est atteint quand $c_2(t)/(1-t)$ atteint un mais ne reste pas pendant un nombre d'étapes $\Delta T = N\Delta t$ d'ordre N au voisinage de cette valeur. Pour savoir quel régime est pertinent en fonction du rapport initial α du nombre de clauses M au nombre de variables N , il nous suffit d'examiner la trajectoire $c_2(t)$. Pour la distribution $(2+p)$ -SAT et les heuristiques UC et GUC, étant donné les propriétés précédentes, le comportement de l'algorithme conditionné au succès (c'est-à-dire que l'on « oublie » de compter les cas où il échoue) peut se représenter par sa trajectoire dans le plan (c_2, c_3) ou encore dans le plan $(p := c_3/(c_2 + c_3), \alpha := (c_2 + c_3)/(1-t))$. Quelques exemples sont montrés figure 4.3 à gauche. Cette figure permet de comprendre la différence entre régimes critiques à p supérieur et inférieur à $2/5$: si l'instance de départ est tirée dans la distribution $(2+p)$ -SAT avec $p > 2/5$, la trajectoire de résolution est *tangente* à la ligne critique $d_2 = 1$ — nous pouvons calculer le seuil α_R en cherchant la valeur initiale de α pour laquelle la trajectoire touche la ligne $d_2 = 1$ sans la franchir, et nous trouvons $\alpha_R = 8/3$. En revanche, si $p < 2/5$, le seul moyen de toucher la ligne $d_2 = 1$ sans la franchir est de faire partir la trajectoire *sur* cette ligne, car les trajectoires sont sécantes à cette ligne ou ne la touchent jamais. Le cas $p = 2/5$ est intermédiaire : la trajectoire de résolution qui touche la ligne critique $d_2 = 1$ est tangente à cette ligne mais démarre dessus (du point « tricritique » ($p = 2/5, \alpha = 5/3$)).

4.3.6 Des équations de diffusion avec biais

Dans tous les cas (p inférieur ou supérieur à $2/5$), l'établissement des relations d'échelle critiques commence par le choix d'un paramétrage adapté de la période critique du déroulement de l'algorithme, où $C_2/(N-T)$ est proche de un. Ce choix est discuté en détail à la section 4.2 de la publication P2 et il est différent suivant que p est supérieur ou inférieur à $2/5$. Il ne

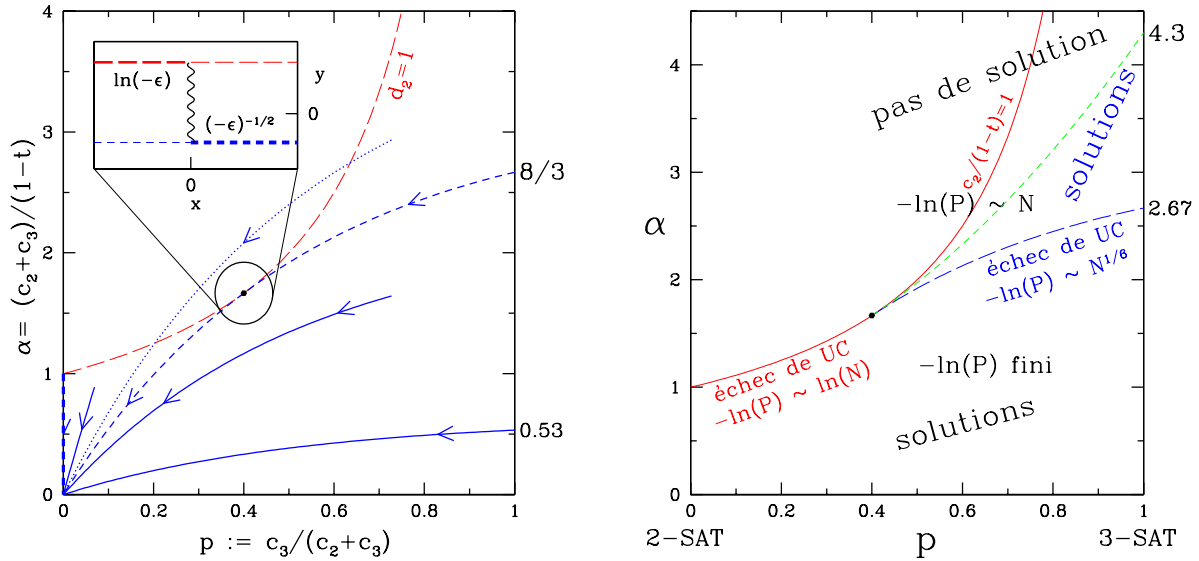


FIG. 4.3 – **À gauche** : Quelques trajectoires de résolution de l’algorithme glouton conditionné au succès pour l’heuristique R sur des instances de la distribution $(2+p)$ – SAT aléatoire. Les trajectoires en lignes continues n’atteignent jamais la ligne en trait interrompu long « $d_2 = 1$ » où le nombre (moyen et typique) de clauses-1 peut cesser d’être fini à la limite $N \rightarrow +\infty$. Pour elles, la probabilité de succès est finie. Les trajectoires en trait interrompu court touchent cette ligne mais n’y restent pas pendant un nombre d’étapes de l’algorithme ΔT d’ordre N : elles tombent dans le cas critique. La trajectoire en trait pointillé est une trajectoire théorique qui passerait un temps ΔT d’ordre N dans la région située au-dessus de la ligne $d_2 = 1$, donc pour laquelle le nombre de clauses-1 C_1 deviendrait d’ordre N et la probabilité de succès P_{succ} exponentiellement faible en N . Cette trajectoire est solution des équations d’évolution pour $c_2(t)$ et $c_3(t)$ comme les autres, mais, contrairement aux autres, nous ne pouvons pas garantir que c’est une trajectoire typique autour de laquelle les trajectoires réelles se concentrent à la limite $N \rightarrow +\infty$. L’agrandissement de la région centrale est pertinent pour comprendre le raccord entre régimes critiques à p supérieur et inférieur à $2/5$; voir la publication P2. **À droite** : Résumé des comportements critiques mis en relation avec l’allure des trajectoires de résolution. Des solutions existent presque sûrement dans la région situé en dessous de la ligne critique $d_2 = 1$ et de la ligne en trait interrompu court (où a lieu la transition de phase statique pour $p > 2/5$; son emplacement n’est pas connu exactement à ce jour). L’algorithme glouton n’est capable de trouver ces solutions avec probabilité finie que dans la région en dessous de la ligne $d_2 = 1$ et de la portion de la trajectoire critique qui atteint le point « tricritique » ($p = 2/5, \alpha = 5/3$). Cette portion de trajectoire critique est ici montrée pour l’heuristique R, sa position dépend de l’heuristique (H) — seul son point d’arrivée ($p = 2/5, \alpha = 5/3$) est universel. En dehors de cette région de succès, l’algorithme ne trouve une solution qu’avec probabilité P_{succ} exponentiellement faible en N (soit qu’il n’y a pas de solution, soit qu’il n’est pas capable de la trouver). Le comportement critique dynamique, universel, de l’algorithme glouton (*i.e.* de P_{succ}) se rencontre le long de la frontière entre ces deux régions; les deux cas $p < 2/5$ et $p > 2/5$ sont rappelés (voir le chapitre précédent pour le détail et le cas particulier $p = 2/5$).

s'agit pas vraiment d'un « choix » mais plutôt d'un calcul : en fait, nous nous rendons compte en étudiant le développement asymptotique à grand N de l'équation d'évolution (4.30) que les échelles pertinentes en fonction de N des différentes quantités qui apparaissent dans notre calcul sont contraintes. En particulier, nous introduisons

$$\bar{\pi}(x_1, t) := \lim_{N \rightarrow +\infty} \frac{G_{01}(X_0, X_1 = 1 - x_1 N^{-1/3}, T = tN | C_2)}{G_{01}(X_0, 1, T = tN | C_2)} \quad (4.32)$$

puis

$$T =: t^* N + t_2 N^{2/3} \text{ pour } p < 2/5, \quad T =: t^* N + t_3 N^{5/6} \text{ pour } p > 2/5 \quad (4.33)$$

où t^* est la date telle que $c_2(t^*) = 1 - t^*$ le long de la trajectoire critique ($t^* = 0$ pour $p < 2/5$), et

$$\mu(t_2) := \lim_{N \rightarrow +\infty} -\ln G_{01}(X_0, 1, T = t_2 N^{2/3} | C_2). \quad (4.34)$$

Après ce paramétrage, nous faisons un développement asymptotique à grand N de l'équation d'évolution (4.30) ; il s'ensuit une équation différentielle ordinaire (EDO) en x_1 , paramétrée par t_3 , pour $\bar{\pi}(x_1, t_3)$ dans le cas $p > 2/5$ (X_0 est fixé et sous-entendu) et une équation aux dérivées partielles (EDP) pour $\pi(x_1, t_2) := \exp[-\mu(t_2)]\bar{\pi}(x_1, t_2)$ dans le cas $p < 2/5$. Ces équations sont moins faciles à résoudre que celles que l'on obtient en prenant la transformée de Laplace inverse, autrement dit en repassant au langage des densités de probabilité ρ à partir du langage des fonctions génératrices π . Le choix d'échelle $X_1 = 1 - x_2 N^{-1/3}$ correspond, pour la variable C_1 conjuguée de X_1 , au choix $c := C_1/N^{1/3}$, autrement dit, dans la phase critique de l'algorithme, la variable aléatoire $c = C_1/N^{1/3}$ a une distribution bien définie à la limite $N \rightarrow +\infty$ — c'est ce qui nous faisait écrire plus haut que C_1 est d'ordre $N^{1/3}$ dans cette période critique.

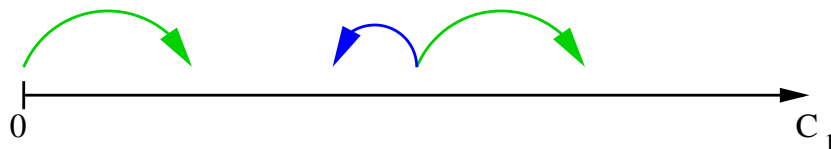
Pour $p < 2/5$, la densité de probabilité non normalisée de c , ρ , satisfait à l'EDP

$$\partial_{t_2} \rho(c, t_2) = \frac{1}{2} \partial_c^2 \rho(c, t_2) + \beta(p) t_2 \partial_c \rho(c, t_2) - \frac{1}{2} c \rho(c, t_2) \quad (4.35)$$

avec la condition au bord

$$\frac{1}{2} \partial_c \rho(0, t_2) + \beta(p) t_2 \rho(0, t_2) = 0. \quad (4.36)$$

Le paramètre $\beta(p)$, défini plus haut, est indépendant de l'heuristique H ; c'est la pente de la courbe $d_2(t)$ lors de la traversée de la ligne critique $d_2 = 1$, et elle est uniquement dictée par la règle PU. Chacun des trois termes du membre de droite de l'EDP ci-dessus, en laquelle le physicien reconnaît une équation de diffusion avec biais, peut s'interpréter : le premier terme (dérivée seconde) traduit la diffusion de c , l'aléa (fluctuations de C_1). Le deuxième est un terme de dérive ; c'est une conséquence de l'action de l'algorithme, qui essaie constamment de ramener c vers zéro. Le troisième est un terme de source qui traduit l'effet des contradictions : la probabilité de former une clause-0 est proportionnelle à c et elle fait décroître la probabilité $\rho(c, t_2)$ que l'algorithme n'ait pas échoué avant t_2 (et que C_1 vaille $cN^{1/3}$). La condition au bord s'obtiendrait, dans un système physique de diffusion de particules avec biais et destruction des particules avec un taux proportionnel à l'abscisse c , si l'on plaçait une paroi réfléchissante (impénétrable) en $c = 0$ — elle empêche c de prendre des valeurs négatives. Nous pouvons aussi interpréter le fonctionnement de l'algorithme comme une marche aléatoire biaisée sur le demi-axe $C_1 \geq 0$:



avec destruction du système avec une probabilité proportionnelle à C_1 . C'est en résolvant l'EDP pour ρ que nous avons trouvé la relation d'échelle (4.13). Nous n'avons pas réussi à résoudre cette équation analytiquement, mais nous en avons fait des développements asymptotiques à petites et grandes valeurs de t_2 et une résolution numérique précise — le lecteur intéressé est renvoyé à la section 5 et aux annexes de la publication P2.

Pour $p > 2/5$, la densité de probabilité normalisée de c , $\bar{\rho}$, satisfait à l'EDO

$$0 = \frac{1}{2} \partial_c^2 \bar{\rho}(c, t_3) + e_2(t_3) \partial_c \bar{\rho}(c, t_3) + \frac{1}{2(t-t^*)} [\bar{c}(t_3) - c] \bar{\rho}(c, t_3) \quad (4.37)$$

avec la condition au bord

$$\frac{1}{2} \partial_c \bar{\rho}(0, t_3) + e_2(t_3) \bar{\rho}(0, t_3) = 0; \quad (4.38)$$

$\bar{c}(t_3)$ est la moyenne de c :

$$\bar{c}(t_3) := -\partial_{x_1} \bar{\pi}(0, t_3) = \int_{c=0}^{+\infty} \bar{\pi}(c, t_3) c \, dc. \quad (4.39)$$

Les paramètres t^* et $e_2(t_3)$ dépendent de l'heuristique H (par exemple, $t^* = 5/6 - 1/(3p)$ et $e_2(t_3) = 36t_3^2 p^2 / (p+2)^2 - \epsilon_\alpha$ pour R); c'est à cause d'eux qu'il apparaît des coefficients indépendants de N non universels, r_H^Φ et $r_H^{\epsilon_\alpha}$, dans la relation d'échelle (4.9). Ici, il n'y a pas de terme en dérivée par rapport à la date t_3 car l'équilibrage (l'adaptation à la dérive et aux sources) que ce terme traduit a lieu sur une échelle de temps T d'ordre $N^{2/3}$, alors que la phase critique dure de l'ordre de $N^{5/6}$ pas de temps, car la trajectoire de résolution est *tangente* à la courbe $d_2 = 1$:

$$1 - d_2(t - t^*) \propto (t - t^*)^2. \quad (4.40)$$

Dans le cas $p < 2/5$, la trajectoire était *sécante* et la phase critique durait moins longtemps (de l'ordre de $N^{2/3}$ pas de temps). L'interprétation de la condition au bord et des deux premiers termes de l'équation est la même que plus haut (diffusion et biais). Le troisième terme fait intervenir \bar{c} et son signe dépend de l'écart entre la valeur de c et la moyenne \bar{c} ; ceci vient du fait que la fonction $\bar{\rho}$ qui satisfait à cette EDO est la densité de probabilité de c *conditionnée* à l'absence d'échec de l'algorithme avant l'instant actuel. Cette EDO peut être résolue analytiquement, et elle nous a permis d'établir la relation d'échelle (4.9).

Dans tous les cas, l'étude de l'EDP ou de l'EDO pour ρ ou $\bar{\rho}$ nous donne aussi accès à la distribution de C_1 dans le régime critique (voir les publications P1, P2).

Nos résultats peuvent être étendus au cas d'instances des distributions K -SAT aléatoires avec $K > 3$. Nous trouvons les mêmes comportements critiques, plus de nouveaux comportements dus au fait que $d_2(t)$ peut être tangent à la ligne $d_2 = 1$ autrement que comme une parabole : si $1 - d_2(t - t^*) \propto (t - t^*)^n$ (avec nécessairement $n < K$), l'exposant $1/6$ de la relation d'échelle (4.9) est changé en $\frac{1}{3}(1 - \frac{1}{n})$. Mais cela nécessite un « réglage » minutieux des nombres moyens de clauses-2, -3, -4, *etc.* Voir la section 6.3 de la publication P2 pour plus de détails.

4.4 Interprétation du comportement critique

Cette interprétation fait appel à nos connaissances sur le phénomène de percolation du graphe aléatoire (voir la section 2.2 p. 33). Elle nous permet de comprendre simplement les valeurs des exposants critiques (dans le cas $p > 2/5$) et de prédire ce qui se passe pour des distributions voisines de « K -SAT aléatoire » d'instances de problèmes de satisfaction de contraintes, où les contraintes peuvent être représentées comme des hyperarêtes dans l'hypergraphe où les variables sont les sommets et où les présences des différentes hyperarêtes possibles sont des événements statistiquement indépendants de probabilité fixe (qui ne dépend que du

nombre de sommet de l'hyperarête envisagée). Par simplicité, nous nous restreignons ici au cas de K -SAT aléatoire.

Soit le graphe orienté \mathcal{G} [44, 78] dont les $2(N - T)$ sommets représentent les littéraux non affectés après T affectations par l'algorithme glouton des N variables initialement présentes et où :

- Chaque clause unitaire est représentée en marquant le somme qui correspond à son littéral.
- Chaque clause-2 x OU y est représentée par les arêtes orientées $\bar{x} \rightarrow y$ et $\bar{y} \rightarrow x$.

La moyenne du nombre d'arêtes (arrivantes ou partantes) par sommet est la quantité d_2 introduite plus haut. Une étape pilotée par PU choisit un sommet marqué (disons z), marque les sommets aux extrémités des arêtes orientées qui partent de z , puis retire z et toutes les arêtes adjacentes (arrivantes ou partantes). De plus, des clauses-3 peuvent être réduites en clauses-2 (non satisfaites) suite à l'affectation de la variable qui satisfait z , et l'on rajoute les paires d'arêtes orientées correspondant à ces nouvelles clauses-2. Une étape pilotée par H (en l'absence de sommet marqué) conduit à la disparition de l'un des sommets et des arêtes adjacentes, à la disparition éventuelle de certaines arêtes (les clauses-2 satisfaites par l'affectation de la variable choisie) et à l'apparition éventuelle d'autres (les clauses-3 réduites et non satisfaites).

Lorsqu'il apparaît un sommet marqué (une clause unitaire), la règle PU fait entrer l'algorithme dans un *round* [79], où la règle PU est appliquée répétitivement jusqu'à disparition de tous les sommets marqués. Quand le *round* commence, il est certain que tous les sommets joignables à partir du premier sommet marqué choisi z en suivant une ou plusieurs arêtes orientées seront éliminés, car ces sommets seront marqués tôt ou tard. Ces sommets définissent la composante connexe (pour les arêtes orientées) de z . D'autres sommets peuvent aussi être éliminés : ceux qui seront ajoutés à cette composante connexe du fait de la « pluie » de nouvelles arêtes issues de la réduction des clauses-3, qui provoque la *coalescence* [80] de composantes connexes. Cette pluie est uniforme en vertu du principe des décisions différées vu à la section précédente. Si, à un moment donné, un sommet y et son sommet conjugué (nié) \bar{y} sont dans la composante connexe en cours d'exploration, il est certain que l'algorithme va être K.O. au cours du *round* par formation d'une clause-0 (contradiction). Quand $d_2 \geq 1$, le graphe \mathcal{G} percole [14, 78], et il apparaît une composante connexe géante, qui contient de nombreuses boucles, et donc probablement une boucle qui relie un littéral et son conjugué. Donc, avant même la pluie de nouvelles arêtes lors du *round*, on peut se douter de l'issue du match. Inversement, quand $d_2 < 1$, les composantes connexes sont de taille au plus $\ln N$ et la probabilité qu'il n'existe pas de boucle reliant un littéral et son conjugué est finie. La transition dynamique des algorithmes gloutons est donc reliée à la transition de percolation de \mathcal{G} — la principale différence avec le cas d'Erdős et Rényi est qu'ici \mathcal{G} évolue sans cesse.

Voyons comment retrouver les exposants critiques du cas $(2 + p)$ -SAT avec $p > 2/5$. Nous savons que la fenêtre de la transition de percolation statique a pour largeur $|d_2 - 1| \propto N^{-1/3}$, et que la probabilité qu'un vertex soit dans une composante connexe de taille S est proportionnelle à $Q(S) \propto S^{-3/2}$ (avec une coupure à $S = N^{2/3}$). Donc le régime critique de \mathcal{G} sera atteint pour peu que le rapport α initial soit à distance inférieure à $N^{-1/3}$ du seuil α_c , car la relation entre α initial et d_2 est linéaire d'après une simple étude balistique (voir la figure 4.3 gauche). D'où la valeur de l'exposant $1/3$ des relations d'échelle.

Une fois le régime critique atteint, nous savons qu'il dure tant que $|d_2 - 1|$ est d'ordre $N^{-1/3}$, c'est-à-dire, pour la classe 3-SAT où $|d_2 - 1| \propto (t - t^*)^2$, $\Delta t \propto N^{-1/6}$ et $\Delta T \propto N^{5/6}$ variables sont éliminées. Pour $(2 + p)$ -SAT avec $p < 2/5$ (abrégé en « 2-SAT » dans la suite), $|d_2 - 1| \propto |t - t^*|$ et seules $\Delta T \propto N^{2/3}$ variables sont éliminées. Soit S_1, S_2, \dots, S_J les tailles des composantes éliminées par la règle PU dans le régime critique. Leur nombre est

$$J \propto \Delta T \left[\int dS Q(S) S \right]^{-1} \propto N^{1/2} \quad (4.41)$$

pour 3-SAT et $N^{1/3}$ pour 2-SAT. On peut objecter que la distribution $Q(S)$ n'est valable *a priori* pour les graphes d'Erdős et Rényi statiques, mais ce résultat s'étend à notre cas (au moins pour les heuristiques R et GUC) du fait de l'uniformité des probabilités (principe des décisions différées) : les arêtes ajoutées à \mathcal{G} tombent en pluie uniforme. Cette pluie prolonge simplement la période où \mathcal{G} est critique par rapport à ce qu'aurait duré l'élimination des composantes connexes en l'absence d'ajout de nouvelles arêtes. Durant l'élimination de la j^e composante, le nombre C_1 subit une marche aléatoire sur le demi-axe $C_1 \geq 0$, où le biais est faible car nous sommes dans le régime critique, donc C_1 fait pratiquement une excursion brownienne libre, qui dure S_j pas de temps (donc $N^{2/3}$ car les composantes connexes d'un graphe aléatoire percolant sont de tailles $N^{2/3}$ comme nous le savons). Durant cette excursion, C_1 atteint une valeur maximale de l'ordre de la racine carrée de la durée de l'excursion selon la loi d'échelle bien connue de la diffusion, $x \propto \sqrt{t}$. Donc la probabilité qu'aucune clause-0 ne soit produite pendant l'élimination de la j^e composante est de l'ordre de

$$[(1 - q)^{C_1}]^{S_j} \propto \exp\left(-\frac{S_j^{3/2}}{N}\right) \quad (4.42)$$

où $q \propto 1/N$ est la probabilité qu'un vertex marqué donné (il y en a C_1) soit la négation de celui que l'algorithme élimine. La probabilité P_{succ} qu'aucune clause-0 ne soit produite pendant l'élimination des J composantes est donnée par

$$-\ln P_{\text{succ}} \propto \frac{J}{N} \int dS Q(S) S^{3/2} \propto N^{1/6} \quad (4.43)$$

d'où la valeur de l'exposant $1/6$. Ce n'est pas la valeur moyenne $N^{1/3}$ de la taille des composantes qui fixe l'exposant $1/6$, mais la taille $N^{2/3}$ des composantes critiques, car, dans l'équation ci-dessus, $Q(S)S^{3/2}$ est d'ordre un et l'intégrale voit sa valeur fixée par sa borne supérieure $S_{\text{max}} \propto N^{2/3}$. En revanche, la taille moyenne $N^{1/3}$ des composantes fixe la probabilité que C_1 soit nul dans le régime critique : C_1 est nul à chaque fois que l'algorithme sort victorieux d'un *round*, puis redevient strictement positif très rapidement, donc cette probabilité est d'ordre $N^{-1/3}$.

Malheureusement, pour $(2 + p)$ -SAT avec $p < 2/5$, cette approche est trop grossière et mène à une valeur finie de $-\ln P_{\text{succ}}$, car il aurait fallu qu'elle prît les corrections en $\ln N$ en compte.

Pour K -SAT avec $K > 3$, un raisonnement similaire sur la percolation des hypergraphes [26] mène aux valeurs $1/3$ et $\frac{1}{3} \left(1 - \frac{1}{L-1}\right)$ des exposants critiques quand l'hypergraphe où les hyperarêtes correspondent aux clauses-2, -3, ..., $-L$ avec $L \leq K$ percole, mais pas celui des clauses-2, -3, ..., $-L+1$. Cela se produit quand le nombre de clauses- l par variable vaut $\alpha_l = 2^{l-1}/[l(l-1)]$ pour $2 \leq l \leq L$ mais pas pour $l = L+1$. Le cas de 3-SAT est retrouvé pour $L = 3$. Pour $L \geq 3$, la fonction d'échelle Φ est la même quel que soit L car l'EDO (4.37) est toujours valable — seul le coefficient non universel e_2 change (au lieu d'être une fonction quadratique de la date t_3 pour 3-SAT, il est un polynôme de degré pair plus élevé), donc seuls les coefficients $r_H^{e\alpha}$ et r_H^Φ de la relation d'échelle changent, mais pas la fonction Φ elle-même.

Comme les exposants critiques de la transition de percolation des graphes d'Erdős et Rényi sont très robustes (ils restent les mêmes si, par exemple, on conditionne ces graphes à une certaine distribution des nombres d'arêtes de chaque sommet [17]), il en est de même des exposants critiques des classes d'universalité que nous avons mises en évidence. C'est pourquoi ils sont valables aussi bien pour les heuristiques R et GUC que CL et HL (les données numériques pour l'heuristique HL sont compatibles avec la fonction d'échelle Φ , voir la figure 2 de la publication P1), et probablement pour d'autres heuristiques et d'autres PSC. Il serait intéressant de savoir si les graphes « sans échelle » introduits à la section 2.4 mènent à une classe d'universalité et, plus généralement, quels graphes tombent dans quelle classe d'universalité. Cela permettrait aussi de mieux appréhender les instances industrielles du problème SAT : quelle distribution est-elle pertinente ? Le comportement critique des algorithmes sur

ces instances (s'il y en a un) permet-il d'identifier une classe d'universalité pertinente pour elles ? On ne sait pas encore si le seuil dynamique des algorithmes gloutons α_H peut *égaler* le seuil statique α_c de la transition de phases ; si tel est le cas, il serait intéressant de comparer les comportements critiques respectifs (l'un fournissant une borne pour l'autre).

Chapitre 5

Appendice : publication P1

Christophe Deroulers et Rémi Monasson,
*Critical behaviour of combinatorial search algorithms, and the unitary-
propagation universality class.*

Europhysics Letters **68** (1), pp. 153–159 (2004)

cond-mat/0405319

Critical behaviour of combinatorial search algorithms, and the unitary-propagation universality class

C. DEROULERS and R. MONASSON

CNRS-Laboratoire de Physique Théorique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75005 Paris, France.

(received 17 May 2004; accepted 9 August 2004)

PACS. 89.20.Ff – Computer science and technology.

PACS. 05.20.-y – Classical statistical mechanics.

PACS. 89.70.+c – Information theory and communication theory.

Abstract. – The probability $P(\alpha, N)$ that search algorithms for random Satisfiability problems successfully find a solution is studied as a function of the ratio α of constraints per variable and the number N of variables. P is shown to be finite if α lies below an algorithm-dependent threshold α_A , and exponentially small in N above. The critical behaviour is universal for all algorithms based on the widely-used unitary propagation rule: $P[(1 + \epsilon)\alpha_A, N] \sim \exp(-N^{1/6} \Phi(\epsilon N^{1/3}))$. Exponents are related to the critical behaviour of random graphs, and the scaling function Φ is exactly calculated through a mapping onto a diffusion-and-death problem.

Introduction. The discovery of universality in phase transition phenomena was a major progress in modern condensed matter and statistical physics. The purpose of this letter is to point out that universality also takes place in computer science, more precisely, in computational complexity theory. There, the goal is to understand whether a computational task consisting in processing a large number N of input data can be carried out in a time scaling only polynomially *e.g.* N^3 , and not exponentially *e.g.* 2^N , with N [1]. Depending on input data defining parameters, dynamical phase transitions between these two behaviours may take place [2–4]. We prove hereafter, for the case of the celebrated Satisfiability (SAT) problem [1], that the onset of complexity at criticality is universal in that it depends on some structural features of resolution algorithms and input data statistics only.

Definitions of computational task and algorithm. In the random K -SAT problem [2], one wants to find a solution to a set of $M = \alpha N$ randomly drawn constraints (clauses) over a set of N Boolean variables x_i ($i = 1 \dots N$). Each constraint reads $z_{i_1} \vee z_{i_2} \vee \dots \vee z_{i_K}$, where \vee denotes the logical OR; z_ℓ is a variable x_{i_ℓ} or its negation \bar{x}_{i_ℓ} with equal probabilities ($= \frac{1}{2}$), and (i_1, i_2, \dots, i_K) is a K -uplet of distinct integers unbiasedly drawn from the set of the $\binom{N}{K}$ K -uplets. We now study the $K = 3$ case, the smallest value for which the problem is NP-complete [1], and $K \geq 4$ later.

Our algorithms start from *tabula rasa*, then iteratively assign variables to true (T) or false (F) according to two well-defined rules (specified below), and modify the constraints

accordingly *e.g.* $\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3$ becomes $\bar{x}_1 \vee x_3$ if $x_2 = T$ [2,5]. At the end, no constraint is left (a solution is found — success case), or a contradiction is found (one variable previously assigned to, say, T is required to be F from modified constraints — failure case). The first assignment rule, UP (for unitary propagation) [5], is common to all algorithms: if a clause with a unique variable is produced at some stage of the procedure *e.g.* \bar{x}_1 , then this variable is assigned to satisfy the clause *e.g.* $x_1 = F$. The second rule is a specific and arbitrary prescription taking over UP when it cannot be used *i.e.* in the absence of unique variable clause. In the simplest algorithm, referred to as R (random), the prescription consists in setting any unknown variable to T or F with prob. $\frac{1}{2}$ independently of the remaining clauses [5]; more sophisticated prescriptions [6,7] will be studied later.

Resolution procedures used in practical applications are based on the combination of the above algorithm and a backtracking principle [2]: in case of failure, the last variable assigned through the prescription (not through UP) is flipped, and the algorithm resumes from this stage. At the end, either a solution is found or all possible backtracks have failed, and a proof of the absence of solution is obtained. The resolution time typically scales as $O(N)$ if $\alpha < \alpha_A$ and $\exp O(N)$ if $\alpha > \alpha_A$, where the threshold α_A depends on the algorithm. Intuition suggests and analyses prove [4,8] that this poly/exp crossover is due to the success/failure transition of the pure algorithm *i.e.* without backtracking. More precisely, α_A can be identified with the ratio at which the probability $P_{\text{succ}}(\alpha, N)$ of success of the pure algorithm vanishes as $N \rightarrow \infty$ [5]. To understand the onset of complexity at α_A , it is thus natural to analyze how P_{succ} vanishes when the ratio α is kept close to its critical value and N increases.

Analysis of the R algorithm. Each time a new variable is assigned some clauses are eliminated, other are reduced or left unchanged. We thus characterize the set of clauses by its state $(C_1(T), C_2(T), C_3(T))$, where C_j is the number of j -clauses *i.e.* involving j variables ($j = 1, 2, 3$) and T is the number of assigned variables [4,5]. Consider a 3-clause left at ‘time’ T . When $T \rightarrow T+1$, the newly assigned variable has a probability $3/(N-T)$ to appear (as is, or negated) in this 3-clause; if so the clause will be satisfied or reduced into a 2-clause (with equal prob. $\frac{1}{2}$). As a consequence the average change of C_3 equals $-3C_3(T)/(N-T)$. In the large N limit, the density $c_3(t) = C_3(tN)/N$ of 3-clauses becomes concentrated around its average value, solution of the ordinary differential equation $dc_3/dt = -3c_3/(1-t)$. A similar reasoning leads to $dc_2/dt = 3c_3/2/(1-t) - 2c_2/(1-t)$ for the density c_2 of 2-clauses. Solving these equations with initial conditions $c_3(0) = \alpha, c_2(0) = 0$ gives $c_3(t) = \alpha(1-t)^3, c_2(t) = \frac{3}{2}\alpha t(1-t)^2$ and the resolution trajectories of Fig. 1 [4].

The above evolution for c_2, c_3 is correct as long as no contradiction has emerged as a result of the production of two opposite 1-clauses *e.g.* x_1 and \bar{x}_1 . The probability $P_N(C_1; T)$ that the assignment of T variables has produced no contradiction and a set of constraints with C_1 1-clauses obeys a Markovian evolution from T to $T+1$ with a transition matrix [4],

$$H_N[C'_1 \leftarrow C_1; T, C_2] = \sum_{s_2, r_2} \mathcal{M}_{p_2}^{C_2; s_2, r_2} \left[\mathbb{I}_{C_1} \mathbb{I}_{C'_1 - r_2} + (1 - \mathbb{I}_{C_1}) \sum_{s_1} \mathcal{M}_{p_1}^{C_1 - 1; s_1, 0} \mathbb{I}_{C'_1 - C_1 + 1 + s_1 - r_2} \right] \quad (1)$$

where \mathbb{I}_C denotes the Kronecker function: $\mathbb{I}_C \equiv 1$ if $C = 0$, 0 otherwise. Variables appearing in (1) are as follows: s_j (respectively r_j) is the number of j -clauses which are satisfied (resp. reduced to $j-1$ clauses) when the $(T+1)^{\text{th}}$ variable is assigned. These are stochastic variables drawn from multinomial distributions $\mathcal{M}_p^{C; x, y} \equiv \binom{C}{x, y} p^{x+y} (1-2p)^{C-x-y}$. Parameter $p_j \equiv j/2/(N-T)$ equals the probability that a j -clause contains the variable just assigned; $r_1 = 0$ demands that no opposite 1-clauses and thus no contradiction are present. Equation

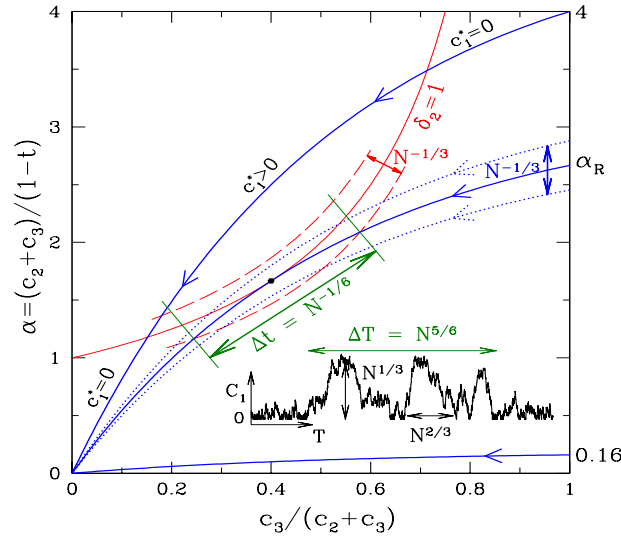


Fig. 1 – Resolution trajectories for the R algorithm (bold lines, arrows indicate time direction, from a fraction $t = 0$ of eliminated variables — right axis — to $t = 1$ — lower left corner where a solution is found). For initial ratio $\alpha < \alpha_R$, C_1 stays bounded (success case). When $\alpha > \alpha_R$, $C_1 \sim N$ when the trajectory lies above the contradiction line $\delta_2 = 1$, and the density c_1^* is positive (failure case). At the critical ratio $\alpha_R (= \frac{8}{3})$, the trajectory hits tangentially (black dot) the contradiction line. The critical region is defined by fluctuations $\sim N^{-1/3}$ for finite size N around these two lines (dotted and dashed lines respectively), and is crossed through assignment of a fraction $\Delta t = N^{-1/6}$ of variables. **Inset:** C_1 vs. T in the critical region for a particular run with $N = 10^5$ and $\alpha = \alpha_R$. Reported scalings correspond to the largest components ($S \sim N^{2/3}$).

(1) defines a random motion for a walker moving on the semi-infinite line $C_1 \geq 0$ with time-dependent and random (through C_2) rates. The success/failure transition takes place when the average number $\delta_2 = c_2/(1-t)$ of 1-clauses created from 2-clauses (right move) exceeds the number of 1-clauses (1⁽¹⁾) eliminated by UP each time a variable is assigned (left move) [5].

Successful regime ($\delta_2 < 1$). If elimination of 1-clauses is faster than creation, C_1 stays bounded throughout the search process. On time scales $1 \ll T \ll N$, C_1 reaches equilibrium, with a distribution $p_0(C_1, t)$ function of slow variables only *i.e.* c_2, t . This, and the probability of success can be derived with the simple Ansatz $P_N(C_1; T) = p_0(C_1, t) + p_1(C_1, t)/N + O(N^{-2})$ and sending $N \rightarrow \infty$. We find that $p_0(C_1, t) \sim \exp(-\rho C_1)$ at large C_1 , where ρ is the time-dependent positive root of $\rho/\delta_2(t) = 1 - e^{-\rho}$. As expected, $\rho > 0$ and C_1 is bounded as long as $\delta_2 < 1$. At fixed ratio α , δ_2 reaches its maximum $\delta_2^M = \frac{3}{8}\alpha$ along the resolution trajectory for a fraction $t_R = \frac{1}{2}$ of assigned variables; the transition takes thus place at $\alpha_R = \frac{8}{3}$ [5]. The probability of success is given by $P_{\text{succ}} = \sum_{C_1} p_0(C_1, 1) = \exp[\frac{1}{2r} - \arctan(1/\sqrt{r-1})/2/\sqrt{r-1}]$ with $r = \alpha_R/\alpha$, and is shown in Fig. 2 (top inset). Note that $-\ln P_{\text{succ}}[\alpha_R(1-\epsilon)] \sim \frac{\pi}{4} \epsilon^{-1/2}$ as α reaches its critical value α_R from below [9].

Failure regime ($\delta_2 > 1$). When $\alpha > \alpha_R$, the resolution trajectory crosses the contradiction line $\delta_2 = 1$ (Fig. 1). C_1 then becomes of the order of N and each assignment has a finite probability to produce some contradiction; the probability of success is thus exponentially small with N [10]. Later the trajectory crosses the contradiction line back and $C_1 = O(1)$ again. This behaviour is captured with the Ansatz $P_N(C_1; T) = \exp(-N\omega(c_1, t))$ where ω is

⁽¹⁾More than one clause can be satisfied especially when $C_1 \sim N$ *i.e.* in the failure regime.

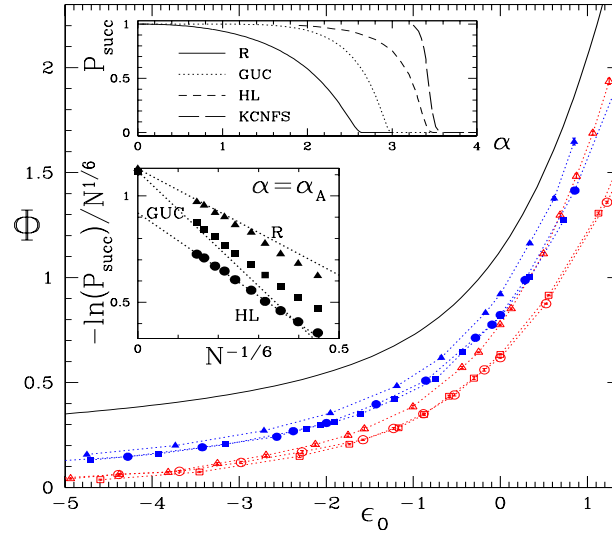


Fig. 2 – Scaling function Φ (solid line) compared to numerical simulations for $N = 1000$ (empty), 20000 (filled symbols) and algorithms R (Δ), GUC (\square) and HL (\circ). Error bars (with $\simeq 10^5$ samples) are smaller than symbol size. Data for GUC and HL are rescaled horizontally and vertically, see text. Dotted lines serve as a guide for the eye. **Bottom inset:** $-\ln(P_{\text{succ}})/N^{1/6}$ vs. $N^{-1/6}$ at the critical thresholds $\alpha_R, \alpha_{\text{GUC}} \simeq 3.003, \alpha_{\text{HL}} \simeq 3.425$. Linear fits (dotted lines) extrapolate to theoretical predictions for $\Phi(0)$ (available for R and GUC) on the left axis. **Top inset:** P_{succ} vs. α showing the algorithm-dependent success/failure transition. Curves are analytical for R, GUC, and numerical for HL, KCNFS.

the rate function associated to the large deviations of the density c_1 of 1-clauses. ω fulfills a first order partial differential equation [4, 10], which can be explicitly solved for ratios slightly above the threshold *i.e.* $\alpha = \alpha_R(1 + \epsilon)$. The coordinates c_1^*, ω^* of the minimum of ω *i.e.* the most likely trajectory are, at time $t = \frac{1}{2}(1 + s\sqrt{\epsilon})$: $c_1^* = 0, \omega^* = 0$ if $s < -1$; $c_1^* = \frac{1}{2}(1 - s^2)^2 \epsilon^2$, $\omega^* = [-\frac{s^5}{20} - \frac{s^3}{6} + \frac{s}{4} + \frac{2}{15}] \epsilon^{5/2}$ if $|s| < 1$; $c_1^* = 0, \omega^* = \frac{4}{15} \epsilon^{5/2}$ if $s > 1$. Thus, $-\ln P_{\text{succ}} \sim \frac{4}{15} \epsilon^{5/2} N$ to the lowest order in ϵ .

Critical regime ($\delta_2 \simeq 1$). For N large but finite and α close to α_R , finite-size scaling [2] applies if

$$-\ln P_{\text{succ}} \left((1 + \epsilon) \alpha_R, N \right) = N^\lambda \Phi(\epsilon N^\theta) \quad (2)$$

for some regular function Φ . In the infinite size N limit, this expression should agree with the above results for the successful ($\epsilon < 0$) and failure ($\epsilon > 0$) regimes. Matching the powers in N and ϵ , we find $\lambda - \frac{\theta}{2} = 0$, $\Phi(x) \sim \frac{\pi}{4} |x|^{-1/2}$ as $x \rightarrow -\infty$, and $\lambda + \frac{5\theta}{2} = 1$, $\Phi(x) \sim \frac{4}{15} x^{5/2}$ as $x \rightarrow +\infty$. As a result, $\lambda = \frac{1}{6}$ and $\theta = \frac{1}{3}$. Figure 2 (lower inset) shows the good agreement of numerical experiments performed at the critical point with the prediction $-\ln P_{\text{succ}} \sim N^{1/6}$.

Introduction of the oriented graph G representing 1- and 2-clauses allows us to understand the above scalings. G is made of $2(N - T)$ vertices (one for each variable x_i and its negation \bar{x}_i), C_1 marked vertices (one for each 1-clause z_i), and $2C_2$ edges ($z_i \vee z_j$ is represented by two oriented edges $\bar{z}_i \rightarrow z_j$ and $\bar{z}_j \rightarrow z_i$) [11]. δ_2 is simply the average (outgoing) degree of vertices in G . A step of UP corresponds to removing a marked vertex (and its attached outgoing edges), after having marked its descendants; steps are repeated until the connected component is entirely removed (no vertex is marked). Then a vertex is picked up according to the

prescription and marked, and UP resumes. A contradiction arises when two ‘opposite’ vertices *i.e.* associated to opposite variables are marked. The success/failure transition coincides with the percolation transition on G *i.e.* $\delta_2 = 1$ as expected. From random graph theory [11, 12], in the percolation critical window $|\delta_2 - 1| \sim N^{-1/3}$, the probability that a vertex belongs to a component of size S is $Q(S) \sim S^{-3/2}$, with a cut-off equal to the largest size, $N^{2/3}$ [13]. From Fig. 1, departure ratios α have to differ from α_R by $N^{1/3}$ for resolution trajectories to fall into the critical window. Hence $\theta = \frac{1}{3}$. The time spent by resolution trajectories in the critical window is $\Delta t \sim \sqrt{|\delta_2 - 1|} \sim N^{-1/6}$, corresponding to $\Delta T = N \Delta t \sim N^{5/6}$ eliminated variables. Let S_1, S_2, \dots, S_J be the sizes of components eliminated by UP in the critical window; we have $J \sim \Delta T / \int dS Q(S) S \sim N^{1/2}$. During the j^{th} elimination, the number of marked vertices ‘freely’ diffuses, and reaches $C_1 \sim \sqrt{S_j}$ (Inset of Fig. 1). The probability that no contradiction occurs is $[(1 - q)^{C_1}]^{S_j} \sim e^{-S_j^{3/2}/N}$ where $q \sim \frac{1}{N}$ is the probability that a marked vertex is ‘opposite’ to the one eliminated by UP. Thus $-\ln P_{\text{succ}} \sim J \int dS Q(S) S^{3/2}/N \sim N^{1/6}$, giving $\lambda = \frac{1}{6}$. Notice that, while the average component size is $S \sim N^{1/3}$ (and thus $P_N(C_1 = 0) \sim N^{-1/3}$), the value of λ is due to the largest components with $S \sim N^{2/3}$ *i.e.* $C_1 \sim N^{1/3}$ marked vertices. The distribution of $c = C_1/N^{1/3}$ is calculated below.

Scaling function. To calculate Φ in (2), we magnify the critical region in Fig. 1 and consider ratios $\alpha = \frac{8}{3}(1 + \epsilon_0 N^{-\theta})$ and times $t = \frac{1}{2}(1 + t_0 N^{-\tau})$, where θ and τ are scaling exponents to be determined. We then decompose the probability of having C_1 clauses in the critical region into the product $P_N(C_1, T) = \exp[-N^\lambda \varphi(t_0)] \times F(C_1, t_0)$; the first term is the probability that no contradiction has been found up to ‘time’ t_0 , and F is the (normalized) probability distribution of 1-clauses. Clearly $\varphi(t_0 \rightarrow -\infty) = 0$ since the probability that the search process has ended is not vanishingly small before the trajectory enters the critical region (Fig. 1). We make the Ansatz $F(C_1) = N^{-\gamma} f(c = C_1 N^{-\gamma})$ where f is the probability distribution of the rescaled number c of unit-clauses (Fig. 3). Last of all, the probability that a variable is set through a free choice and not UP, $P_N(C_1 = 0)$, is assumed to scale as f_0/N^{γ_0} .

The evolution equation for P_N based on matrix (1) imposes $\theta = \gamma = \gamma_0 = \frac{1}{3}$, $\lambda = \tau = \frac{1}{6}$ in agreement with the above scaling arguments (2). In addition, we find $d\varphi/dt_0 = \bar{c}(t_0)$, the average value of c with distribution f solution of

$$\frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial c^2} + v_0 \frac{\partial f}{\partial c} + (\bar{c} - c) f = 0 \quad (3)$$

with $v_0 \equiv t_0^2 - \epsilon_0$. Boundary conditions are $(\partial_c f + v_0 f)|_{c=0} = 0$ (reflecting wall) and $f_0 = f(0)/2$. The diffusion term in (3) reflects the Gaussian stochastic nature of 2- to 1-clauses reductions, the drift term favors small (respectively large) values of the density c when $v_0 > 0$ (resp. $v_0 < 0$) — corresponding to $\delta_2 < 1$ and $\delta_2 > 1$ respectively — and the third term expresses the relative death-rate of search processes with respect to the average rate \bar{c} (the higher c , the more likely it is to encounter a contradiction)⁽³⁾. The solution of differential equation (3) reads $f(c) \propto \exp(-v_0 c) \text{Ai}[\sqrt[3]{2}c + z(v_0)]$, where Ai is the Airy function, $z(x)$ is the inverse function of $x(z) = -\sqrt[3]{2} \text{Ai}'(z)/\text{Ai}(z)$. Distribution f is shown on Fig. 3 for several values of the drift. Positive (respectively negative) v_0 correspond to trajectories below (resp. above) the contradiction line (Fig. 1), with distributions f peaked around $c = 0$ (resp. $c > 0$).

⁽²⁾These results are not affected by the presence of Gaussian fluctuations $\sim N^{-1/2}$ in $c_2(t)$.

⁽³⁾Notice that (3) lacks any time derivative since f reaches stationarity on a much shorter time-scale ($N^{-1/3}$) than the one relevant for P_{succ} ($N^{-1/6}$).

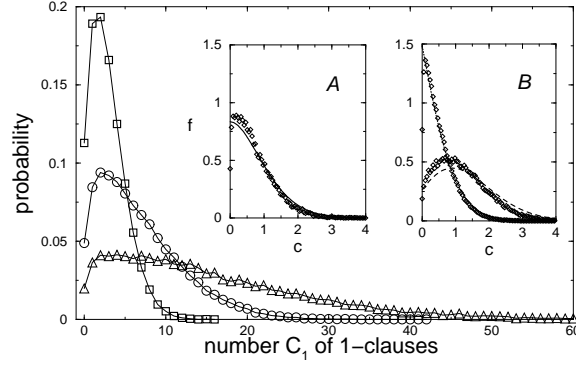


Fig. 3 – Histograms of the numbers C_1 of 1-clauses for sizes $N = 10^2$ (\square), 10^3 (\circ) and 10^4 (\triangle) right at criticality (time $t = \frac{1}{2}$ and ratio $\alpha = \frac{8}{3}$). Note the sharp increase of the probability around $C_1 = 0$, in quantitative agreement with the theoretical prediction $f_0 = f(0)/2$. **Insets:** theoretical distributions f for $c = C_1/N^{1/3}$ at criticality (A, same data as main figure), and for drifts $v_0 = 0.5$ (B, dotted), $v_0 = -0.7$ (B, dashed curve) compared to numerics.

The probability of success remains unchanged (to the leading order in N) once the trajectory exits from the critical region, thus $-\ln P_{\text{succ}}/N^\lambda = \varphi(t_0 \rightarrow +\infty)$. This proves the existence of the scaling function defined in (2), with

$$\Phi(\epsilon_0) = \frac{1}{4} \int_{-\epsilon_0}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{\epsilon_0 + x}} [x^2 - 2^{2/3} z(x)] \quad (4)$$

Scaling function Φ is plotted and compared to numerics in Fig. 2. It is an easy check that all the results related to the successful and failure regimes *e.g.* the values c^*, ω^* listed above for finite ϵ and $N \rightarrow \infty$ are found back when $\epsilon_0 \rightarrow \pm\infty$ respectively.

Universality. The critical point of R, or any algorithm A that implements UP *e.g.* GUC [5] or HL [6] where variables are chosen to satisfy 2-clauses or according to their occurrences respectively, is reached when the resolution trajectory is, for some time t_A , tangent to the $\delta_2 = 1$ line: $\delta_2(t_A + \Delta t) - 1 = b(\Delta t)^n$ with $n \geq 2$ even integer and b determined from the derivatives of the density c_2 of 2-clauses at t_A . The tangency condition reflects that the creation of new edges in G , from the reduction of 3- into 2-clauses, precisely compensates the elimination of edges by UP. Although the resolution trajectory strongly depends on A, the critical behaviour depends on n, b only, and is thus universal.

The value of n is 2 for R, GUC, HL and generic algorithms A. Therefore, $\theta = \frac{1}{6}, \lambda = \frac{1}{3}$ independently of A; the scaling function is $\Phi_A(\epsilon_0) = r_A^\Phi \Phi(r_A^\epsilon \epsilon_0)$ where the r_A 's are functions of b *e.g.* $r_{\text{GUC}}^\Phi \simeq 0.9902, r_{\text{GUC}}^\epsilon \simeq 1.7182$. Fig. 2 illustrates that GUC and HL fall in this UP universality class. Numerical investigations suggest that more complex algorithms as KCNFS [7] do, too. This universality class is robust against any change, either induced by algorithms or present in the input data distribution, in the degree sequence of the clauses graph G , a consequence of the robustness of the critical component size distribution $Q(S)$ [13].

Higher values of $n (\geq 4)$ are exceptionally found for finely-tuned input data statistics *e.g.* with clauses of different lengths $\ell (\leq K)$ and appropriate ratios α_ℓ (so far we have restricted to $K = 3$ with $\alpha_3 \equiv \alpha$). If the ratios at the critical point $\delta_2 = 1$ are such that the reduction of $(\ell + 1)$ - to ℓ -clauses compensates the disappearance of ℓ -clauses for all $2 \leq \ell < K$, then the resolution trajectory will stay longer in the critical region, making P_{succ} decrease. The precise condition is $\alpha_\ell = 2^{\ell-1}/\ell/(\ell - 1)$ at criticality [14], leading to $\lambda = \frac{n-1}{3n}$ with $n = K - 1$ (2).

It would be interesting to extend our study to structured input data distributions *e.g.* leading to clause graphs G embedded in finite-dimensional spaces, and possibly to $\theta \neq \frac{1}{3}$. In this context, developing renormalization tools to capture the critical behaviour of algorithms would be the natural yet apparently difficult next step. It would also be worth to study universality for other types of algorithms *e.g.* local search procedures [15], or other computational tasks [3] *e.g.* graph coloring [9], where poly/exp transitions take place.

REFERENCES

- [1] C. Papadimitriou, K. Steiglitz, *Combinatorial Optimization*, Dover (1998).
- [2] S. Kirkpatrick, B. Selman, *Science* **264**, 1297 (1994); B. Selman, S. Kirkpatrick. *Artificial Intell.* **81**, 273 (1996).
- [3] S. Mertens, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 4281 (1998); A.K. Hartmann, M. Weigt, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1658 (2001); A. Montanari, R. Zecchina, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 178701 (2002); R. Mulet *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 268701 (2002).
- [4] S. Cocco, L. Ein-Dor, R. Monasson. *in New optimization algorithms in physics*, A. Hartmann, H. Rieger (eds), Wiley (2004) (see <http://www.lpt.ens.fr/~monasson>)
- [5] M.T. Chao, J. Franco. *Inform. Sci.* **51**, 289 (1990); A. Frieze, S. Suen. *J. of Algorithms* **20**, 312 (1996).
- [6] A.C. Kaporis, L.M. Kirousis, E.G. Lalas. *ESA 02*, Lecture Notes in Comp. Sci. **2461**, 574 (2002).
- [7] G. Dequen, O. Dubois. *Proc. SAT'03*, 486 (2003).
- [8] D. Achlioptas, P. Beame, M. Molloy, *J. Comp. Sci. Syst.* **68**, 238 (2004).
- [9] H. Jia, C. Moore. *Proc. CP 2004, the Tenth International Conference on Principles and Practice of Constraint Programming* (2004).
- [10] S. Cocco, R. Monasson. *Phys. Rev. E* **66**, 037101 (2002).
- [11] B. Bollobas *et al.* *Rand. Struct. Algor.* **18**, 201 (2001).
- [12] S. Janson, T. Luczak, A. Rucinski. *Random Graphs*, Wiley (2000).
- [13] M.E.J. Newman, S.H. Strogatz, D.J. Watts, *Phys. Rev. E* **64**, 026118 (2001).
- [14] C. Goldschmidt, *Ann. Prob.* **33**, 1573 (2005), preprint math.PR/0401208 (2004); our graph G is oriented, hence the power of 2.
- [15] G. Semerjian, R. Monasson, *Phys. Rev. E* **67**, 066103 (2003); W. Barthel, A.K. Hartmann, M. Weigt, *Phys. Rev. E* **67**, 066104 (2003); S. Seitz, P. Orponen, *Elec. Notes Discr. Math.* **16** (2003).

Chapitre 6

Appendice : publication P2

Christophe Deroulers et Rémi Monasson,
Criticality and Universality in the Unit-Propagation Search Rule.

European Physical Journal B **49** (3), pp. 339–369 (2006)

cond-mat/0508125

Criticality and universality in the unit-propagation search rule^{*}

C. Deroulers^a and R. Monasson

CNRS-Laboratoire de Physique Théorique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75231 Paris Cedex 05, France

Received 5 August 2005 / Received in final form 29 November 2005

Published online 10 March 2006 – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2006

Abstract. The probability $P_{\text{success}}(\alpha, N)$ that stochastic greedy algorithms successfully solve the random SATisfiability problem is studied as a function of the ratio α of constraints per variable and the number N of variables. These algorithms assign variables according to the unit-propagation (UP) rule in presence of constraints involving a unique variable (1-clauses), to some heuristic (H) prescription otherwise. In the infinite N limit, P_{success} vanishes at some critical ratio α_H which depends on the heuristic H . We show that the critical behaviour is determined by the UP rule only. In the case where only constraints with 2 and 3 variables are present, we give the phase diagram and identify two universality classes: the power law class, where $P_{\text{success}}[\alpha_H(1 + \epsilon N^{-1/3}), N] \sim A(\epsilon)/N^\gamma$; the stretched exponential class, where $P_{\text{success}}[\alpha_H(1 + \epsilon N^{-1/3}), N] \sim \exp[-N^{1/6} \Phi(\epsilon)]$. Which class is selected depends on the characteristic parameters of input data. The critical exponent γ is universal and calculated; the scaling functions A and Φ weakly depend on the heuristic H and are obtained from the solutions of reaction-diffusion equations for 1-clauses. Computation of some non-universal corrections allows us to match numerical results with good precision. The critical behaviour for constraints with > 3 variables is given. Our results are interpreted in terms of dynamical graph percolation and we argue that they should apply to more general situations where UP is used.

PACS. 89.20.Ff Computer science and technology – 05.40.-a Fluctuation phenomena, random processes, noise, and Brownian motion – 02.50.Ey Stochastic processes – 89.75.Da Systems obeying scaling laws

1 Introduction

Many computational problems rooted in practical applications or issued from theoretical considerations are considered to be very difficult in that all exact algorithms designed so far have (worst-case) running times growing exponentially with the size N of the input. To tackle such problems one is thus enticed to look for randomized (stochastic) polynomial-time algorithms, guaranteed to run fast but not to find a solution. The key estimator of the performances of these search procedures is the probability of success, $P_{\text{success}}(N)$, that is, the probability over the stochastic choices carried out by the algorithm that a solution is found (when it exists) in polynomial time, say, less than N . Roughly speaking, depending on the problem to be solved and the nature of the input, two cases may arise in the large N limit¹

$$P_{\text{success}}(N) = \begin{cases} \Theta(1) & (\text{success case}) \\ \exp(-\Theta(N)) & (\text{failure case}). \end{cases} \quad (1)$$

^{*} Preprint LPTENS-05/24.

^a e-mail: christophe.deroulers@lpt.ens.fr

¹ Recall that $f(x) = \Theta(x)$ means that there exist three strictly positive real numbers X, a, b such that, $\forall x > X$, $ax < f(x) < bx$.

When P_{success} is bounded from below by a strictly positive number at large N , a few runs will be sufficient to provide a solution or a (probabilistic) proof of absence of solution; this case is referred to as *success case* in the following. Unfortunately, in many cases, P_{success} is exponentially small in the system's size and an exponentially large number of runs is necessary to reach a conclusion about the existence or not of a solution; this situation is hereafter denoted by *failure case*.

An example is provided by the K-SAT problem, informally defined as follows. An instance of K-SAT is a set of constraints (called clauses) over a set of Boolean variables. Each constraint is the logical OR of K variables or their negations. Solving an instance means either finding an assignment of the variables that satisfies all clauses, or proving that no such assignment exists. While 2-SAT can be solved in a time linear in the instance size [1], K-SAT with $K \geq 3$ is NP-complete [2]. The worst-case running time may be quite different from the running time once averaged over some distribution of inputs. A simple and theoretically-motivated distribution consists in choosing, independently for each clause, a K -uplet of distinct variables, and negate each of them with probability one half. The K-SAT problem, together with the flat distribution of instances is called random K-SAT.

In the past twenty years, various randomized algorithms were designed to solve the random 3-SAT problem in linear time with a strictly positive probability P_{success} [3] when the numbers M of clauses and N of variables tend to infinity at a fixed ratio² $\alpha = M/N$. These algorithms are based on the recognition of the special role played by clauses involving a unique variable, called unit-clauses (unit-clauses are initially absent from the instance but may result from the operation of the algorithm), and obey the following

UNIT-PROPAGATION (UP) RULE: WHEN THE INSTANCE INCLUDES (AT LEAST) A UNIT-CLAUSE, SATISFY THIS CLAUSE BY ASSIGNING ITS VARIABLE APPROPRIATELY, PRIOR TO ANY OTHER ACTION.

UP merely asserts that drawing obvious logical consequences from the constraints is better done first. Its strength lies in its recursive character: assignment of a variable from a 1-clause may create further 1-clauses, and lead to further assignments. Hence, the propagation of logical constraints is very efficient to reduce the size of the instance to be treated. In the absence of unit-clause, some choice has to be made for the variable to assign and the truth value to give. This choice is usually made according to some heuristic, the simplest one being

RANDOM (R) HEURISTIC: WHEN THE INSTANCE INCLUDES NO UNIT-CLAUSE, PICK ANY UNSET VARIABLE UNIFORMLY AT RANDOM, AND SET IT TO TRUE OR FALSE WITH PROBABILITIES ONE HALF.

The specification of the heuristic e.g. R, together with UP, entirely defines the randomized search algorithm³. The output of the procedure is either ‘Solution’ if a solution is found, or ‘Don’t know’ if a contradiction (two opposite unit-clauses) is encountered. The probability that the procedure finds a solution, averaged over the choices of instances with ratio α , was studied by Chao and Franco [7,5], Frieze and Suen [8], with the result

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\text{success}}(\alpha, N) = \begin{cases} \Theta(1) & \text{if } \alpha < \alpha_{\text{R}} = \frac{8}{3} \\ 0 & \text{if } \alpha > \alpha_{\text{R}} \end{cases} \quad (2)$$

for Random 3-SAT, R heuristic & UP. The above study was then extended to more sophisticated and powerful heuristic rules H, defined in Section 2.2. It appears that identity (2) holds for all the randomized algorithms based on UP and a heuristic rule H, with a critical ratio value α_{H} that depends on H. Cocco and Monasson then showed that, for ratios above α_{H} , the probability of success is indeed exponentially small in N , in agreement with the generally expected behaviour (1).

The transition from success to failure in random 3-SAT was quantitatively studied in a recent letter [9]. We found that the width of the transition scales as $N^{-1/3}$, and that

² Other scalings for M, N were investigated too and appear to be easier to handle, see reference [4].

³ This procedure is called the Unit-Clause algorithm in the computer science literature [5,6].

the probability of success in the critical regime behaves as a stretched exponential of N with exponent $1/6$. More precisely,

$$P_{\text{success}} \left[\alpha_{\text{H}}(1 + \epsilon N^{-1/3}), N \right] = \exp \left(-N^{1/6} \Phi(\epsilon) [1 + o(1)] \right) \quad (3)$$

for Random 3-SAT, and UP. The calculation of the scaling function Φ relies on an accurate characterization of the critical distribution of the number of unit clauses, for an exact expression see equation (111). The important statement here is that the above expression holds *independently* of the heuristic H, provided the randomized procedure obeys UP⁴. This result allowed us to evoke the existence of a universality class related to UP.

In the present paper, we provide all the calculations which led us to equation (3). We also calculate subdominant corrections to the $N^{1/6}$ scaling of $\ln P_{\text{success}}$ in (3), which allow us to account for numerical experiments in a more accurate manner than in reference [9] (see Sect. 6). In addition, we study the robustness of the stretched exponential behaviour with respect to variations in the problem to be solved. We argue that the class of problems to be considered for this purpose is random $2+p$ -SAT, where instances are mixed 2- and 3-SAT instances with relative fractions p and $1-p$ (for fixed $0 \leq p \leq 1$) [10]. Our results are sketched in Figure 1. It is found that the stretched exponential behaviour holds for a whole set of critical random $2+p$ -SAT problems, but not all of them. More precisely, equation (3) remains true for $p \geq 2/5$. For $p < 2/5$, the probability of success at criticality decreases as a power law only,

$$P_{\text{success}} \left[\alpha_{\text{R}}(p) (1 + \epsilon N^{-1/3}), N \right] = \frac{A_{\text{H}}(\epsilon, p)}{N^{\gamma(p)}} [1 + o(1)] \quad (4)$$

for Random $2+p$ -SAT, $p < 2/5$, and UP. The value of the universal decay exponent is $\gamma(p) = (1-p)/(2-5p)/6$. The calculation of the prefactor $A_{\text{H}}(p, \epsilon)$ shows similarities with the one of $\Phi(\epsilon)$ above, but is more difficult and shown in Section 5.

2 Definitions and brief overview of known results

2.1 Random K-SAT and $2+p$ -SAT problems

In the random K -SAT problem [11,12], where K is an integer no less than 2, one wants to find a solution to a set of $M = \alpha N$ randomly drawn constraints (called *clauses*) over a set of N Boolean variables x_i ($i = 1 \dots N$): x_i can take only two values, namely True (T) and False (F).

⁴ Strictly speaking, Φ depends on H through two global magnification ratios along the X and Y axis: $\Phi_{\text{H}}(\epsilon) = y_{\text{H}} \Phi(x_{\text{H}} \epsilon)$, where $x_{\text{H}}, y_{\text{H}}$ are heuristic-dependent real numbers and Φ is universal.

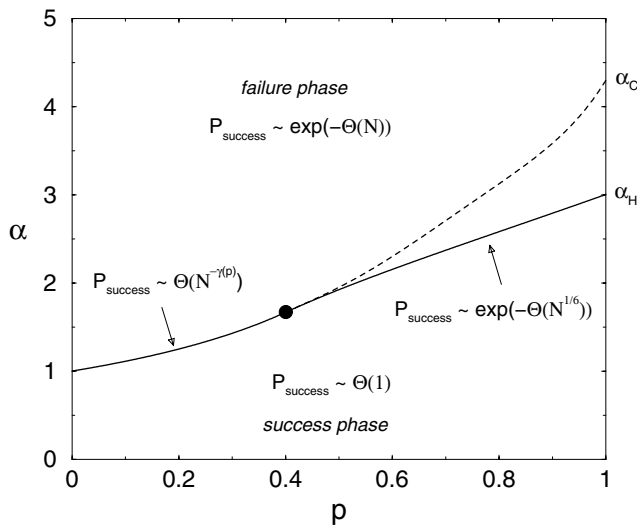


Fig. 1. Scaling of the probability of success of randomized search algorithm based on a heuristic H and the UP rule for the $2+p$ -SAT model with instances of size N and having α clauses per variable. The dynamic (or kinetic) critical line is represented for the R heuristic, $\alpha_R(p) = 1/(1-p)$ for $p < 2/5$, $24p/(2+p)^2$ for $p > 2/5$ separates the failure phase (upper region) from the success phase (lower region). Along the critical line, P_{success} decays as a power law for $p < 2/5$ with a p -dependent exponent $\gamma(p) = (1-p)/(2-5p)/6$, and as a stretched exponential with exponent $1/6$ when $p > 2/5$. The static critical line (dashed curve) coincides with the dynamic one for $p < 2/5$ and lies above for larger values of p , see Section 2.1.

Each constraint reads $z_{i_1} \vee z_{i_2} \vee \dots \vee z_{i_K}$, where \vee denotes the logical OR; z_ℓ is called a *literal*: it is either a variable x_{i_ℓ} or its negation \bar{x}_{i_ℓ} with equal probabilities ($= 1/2$), and (i_1, i_2, \dots, i_K) is a K -uplet of distinct integers unbiasedly drawn from the set of the $\binom{N}{K}$ K -uplets. Such a clause with K literals is called a K -clause, or clause of length K . Such a set of M clauses involving N variables is named an *instance* or *formula* of the K -SAT problem. An instance is either *satisfiable* (there exists at least one *satisfying assignment*) or *unsatisfiable* (contrary case). We will be mainly interested in the large N , large M limit with fixed $\alpha = M/N$ and K . Notice that the results presented in this paper are, or have been obtained for this ‘flat’ distribution only, and do not hold for real-world, industrial instances of the SAT problem.

A distribution of constraints will appear naturally in the course of our study: the random $2+p$ -SAT problem [10]. For fixed $0 \leq p \leq 1$, each one of the $M = \alpha N$ clauses is of length either 2 or 3, with respective probabilities $1-p$ and p . Parameter p allows one to interpolate between 2-SAT ($p = 0$) and 3-SAT ($p = 1$).

Experiments and theory show that the probability P_{sat} that a randomly drawn instance with parameters p, α be satisfiable is, in the large N limit, equal to 0 (respectively, 1) if the ratio α is smaller (resp., larger) than some critical value $\alpha_C(p)$. Nowadays, the value of $\alpha_C(p)$ is rigorously known for $p \leq 2/5$ only, with the result $\alpha_C(p) = 1/(1-p)$ [13], see Figure 1. For 3-SAT the

best current upper and lower bounds to the threshold are 4.506 [14] and 3.52 [15] respectively. For finite but large N , the steep decrease of P_{sat} with α (at fixed p) takes place over a small change $\delta\alpha = \Theta(N^{-\frac{1}{\nu}})$ in the ratio of variables per clause, called width of the transition. Wilson has shown that the width exponent ν is bounded from below by 2 (for all values of p) [16]. For 2-SAT, a detailed study by Bollobás et al. establishes that $\nu = 3$ [17], and that P_{sat} is finite at the threshold $\alpha = 1$. A numerical estimate of this critical P_{sat} may be found in reference [18] and we provide a more precise one in Appendix A: $P_{\text{sat}}(p = 0, \alpha = 1) = 0.907 \pm 10^{-3}$.

2.2 Greedy randomized search algorithms

In this paper, we are not interested in the probability of satisfaction P_{sat} (which is a property characteristic of the random SAT problem only) but in the probability P_{success} ($\leq P_{\text{sat}}$) that certain algorithms are capable of finding a solution to randomly drawn instances. These algorithms are defined as follows.

Initially [11,12,19], all variables are unset and all clauses have their initial length (K in the K -SAT case, 2 or 3 in the $2+p$ -SAT case). Then the algorithms iteratively set variables to the value T (true) or F (false) according to two well-defined rules (mentioned in the introduction and detailed below), and update (reduce) the constraints accordingly. For instance, the 3-clause $(\bar{x}_1 \vee \bar{x}_2 \vee x_3)$ is turned into the 2-clause $(\bar{x}_1 \vee x_3)$ if x_2 is set to T , and is satisfied, hence removed from the list of clauses, if x_2 is set to F . A 1-clause (or unit-clause) like \bar{x}_1 may become a 0-clause if its variable happens to be inappropriately assigned (here, to T); this is called a *contradiction*. In this case, the algorithms halt and output ‘don’t know’, since it can not be decided whether the contradiction results from an inadequate assignment of variables (while the original instance is satisfiable) or from the fact that the instance is not satisfiable. If no contradiction is ever produced, the process ends up when all clauses have been satisfied and removed, and a solution (or a set of solutions if some variable are not assigned yet) is found. The output of the algorithms is then ‘Satisfiable’.

We now make explicit the aforementioned rules for variable assignment. The first rule, UP (for Unit-Propagation) [8], is common to all algorithms: if a clause with a unique variable (a 1-clause), e.g. \bar{x}_1 , is produced at some stage of the procedure, then this variable is assigned to satisfy the clause, e.g. $x_1 := F$. UP is a corner stone of practical SAT solvers. Ignoring a 1-clause means taking the risk that it becomes a 0-clause later on (and makes the whole search process fail), while making the search uselessly longer in the case of an unsatisfiable instance⁵.

⁵ Another fundamental rule in SAT solvers that we do not consider explicitly here, although it is contained in the CL heuristic [15] to which our results apply, is the Pure Literal rule [3], where one assigns only variables (called *pure literals*) that appear always the same way in clauses, i.e. always negated or always not negated). Removal of pure literals and of their

Therefore, as long as unit-clauses are present, the algorithms try to satisfy them by proper variable assignment. New 1-clauses may be in turn produced by simplification of 2-clauses, and 0-clauses (contradictions) when several 1-clauses require the same variable to take opposite logical values.

The second rule is a specific and arbitrary prescription for variable assignment taking over UP when it cannot be used i.e. in the absence of 1-clause. It is termed *heuristic* rule because it does not rely on a logical principle as the UP rule. In the simplest heuristic, referred to as random (R) here, the prescription is to set any unassigned variable to T or F with probability $1/2$ independently of the remaining clauses [5,8]. More sophisticated heuristics are able to choose a variable that will satisfy (thus eliminate) the largest number of clauses while minimizing the odds that a contradiction is produced later. Some examples are:

1. GUC [5] (for Generalized Unit Clause) prescribes to take a variable in the shortest clause available, and to assign this variable so as to satisfy this clause. In particular, when there are no 1-clauses, 2-clauses are removed first, which decreases the future production of 1-clauses and thus of contradictions.
2. HL [15] (for Heaviest Literal) prescribes to take (in absence of 1-clauses, as always) the literal that appears most in the reduced instance (at the time of choice), and to set it to T (by assigning accordingly its variable), disregarding the number of occurrences of its negation or the length of the clauses it appears in.
3. CL [15] (for Complementary Literals) prescribes to take a variable according to the number of occurrences of it and of its negation in a rather complex way, such that the number of 2-clauses decreases maximally without making the number of 3-clauses too much decrease.
4. KCNFS [20] is an even more complex heuristic, specially designed to reduce the number of backtrackings needed to prove that a given instance is unsatisfiable, on top of standard tricks to improve the search.

2.3 The success-to-failure transition

Chao and Franco have studied the probability P_{success} that the randomized search process based on UP and the R heuristic, called UC (for unit-clause) algorithm, successfully finds a solution to instances of random 3-SAT with characteristic parameters α, N [5], with the result (2). This study was extended by Achlioptas et al. to the case of random $2+p$ -SAT [13], with the following outcome:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} P_{\text{success}}(\alpha, p, N) \begin{cases} > 0 & \text{if } \alpha < \alpha_{\text{R}}(p) \\ = 0 & \text{if } \alpha > \alpha_{\text{R}}(p) \end{cases} \quad (5)$$

for the R heuristic and UP, where

$$\alpha_{\text{R}}(p) = \frac{1}{1-p} \quad \text{if } p \leq \frac{2}{5}, \quad \frac{24p}{(2+p)^2} \quad \text{if } p \geq \frac{2}{5}. \quad (6)$$

attached clauses make the instance shorter without affecting its logical status (satisfiable or not).

Hence, as simple as is UC, this procedure is capable to reach the critical threshold $\alpha_{\text{C}}(p)$ separating satisfiable from unsatisfiable instances when $p \leq 2/5$. For $p > 2/5$, a finite gap separates $\alpha_{\text{R}}(p)$ from $\alpha_{\text{C}}(p)$ in which instances are (in the large N limit) almost surely satisfiable but UC has a vanishingly small probability of success.

Similar results were obtained for the heuristics H listed above, especially for $p = 1$ (3-SAT). The smallest ratios, called thresholds and denoted by α_{H} , at which P_{success} vanishes in the infinite N limit are: $\alpha_{\text{GUC}} \simeq 3.003$ [5], $\alpha_{\text{HL}} \simeq 3.42$ [15], $\alpha_{\text{CL}} \simeq 3.52$ [15]. The 3-SAT threshold for the KCNFS heuristic is not known.

In this paper, we are interested in the critical scaling of P_{success} with N , that is, when α is chosen to be equal, or very close to its critical and heuristic-dependent value α_{H} (at fixed p). More precisely, we show that P_{success} may vanish either as a stretched exponential (3) or as an inverse power law (4). Strikingly, although the randomized search algorithms based on different heuristics exhibit quite different performances e.g. values of α_{H} , we claim that the scaling of P_{success} at criticality is essentially unique. The mechanism that monitors the transition from success to failure at α_{H} of the corresponding algorithms is indeed UP. For instance, for KCNFS, a numerical study shows that the special, complex heuristic is never used when α is close to the α_{KCNFS} threshold of this algorithm.

Hereafter, we show that universality holds for random K -SAT with $K \geq 3$ and for $2+p$ -SAT with $p \geq 2/5$ on the one hand, and $p < 2/5$ on the other hand. In the $p < 2/5$ case, for which α_{H} and α_{C} coincide (Sect. 5), there is strictly speaking an infinite family of universality classes, depending on the parameter p (in particular, the critical exponent $\gamma_{\text{H}}(p)$ — see (4) — varies continuously with p). These analytical predictions are confirmed by numerical investigations.

3 Generating function framework for the kinetics of search

This section is devoted to the analysis of the greedy UC = UP + R algorithm, defined in the previous section, on instances of the random $2 + p$ -SAT or K -SAT problems. We introduce a generating function formalism to take into account the variety of instances which can be produced in the course of the search process. We shall use $b(n; m, q) = \binom{m}{n} q^n (1-q)^{m-n}$ to denote the Binomial distribution, and $\delta_{n,m}$ to represent the Kronecker function over integers n : $\delta_{n,m} = \{1 \text{ if } n = m, 0 \text{ otherwise}\}$.

3.1 The evolution of the search process

For the random $2 + p$ -SAT and K -SAT distributions of boolean formulas (instances), it was shown by Chao and Franco [7,5] that, during the first descent in the search tree i.e. prior to any backtracking, the distribution of residual formulas (instances reduced because of the partial assignment of variables) keeps its uniformity conditioned to the

numbers of ℓ -clauses ($0 \leq \ell \leq K$). This statement remains correct for heuristics slightly more sophisticated than R e.g. GUC, SC₁ [5–7], and was recently extended to splitting heuristics based on literal occurrences such as HL and CL [15]. Therefore, we have to keep track only of these numbers of ℓ -clauses instead of the full detailed residual formulas: our phase space has dimension $K + 1$ in the case of K -SAT (4 for $2 + p$ -SAT). Moreover, this makes random $2 + p$ -SAT a natural problem. After partial reduction by the algorithm, a 3-SAT formula is turned into a $2 + p$ -SAT formula, where p depends on the steps the algorithm has already performed.

Call $P(\mathbf{C}; T)$ the probability that the search process leads, after T assignments, to a clause vector $\mathbf{C} = (C_0, C_1, C_2, \dots, C_K)$. Then, we have

$$P(\mathbf{C}'; T + 1) = \sum_{\mathbf{C}} M[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] P(\mathbf{C}; T) \quad (7)$$

where the transition matrix M is

$$M[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] = (1 - \delta_{C_1, 0}) M_{\text{UP}}[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] + \delta_{C_1, 0} M_{\text{R}}[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T]. \quad (8)$$

The transitions matrices corresponding to unit-propagation (UP) and the random heuristic (R) are

$$\begin{aligned} M_X[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] &= \sum_{z_K=0}^{C_K} b[z_K; C_K, K\mu] \\ &\times \sum_{r_{K-1}=0}^{z_K} b\left[r_{K-1}; z_K, \frac{1}{2}\right] \delta_{C'_K, C_K - z_K} \\ &\times \sum_{z_{K-1}=0}^{C_{K-1}} b[z_{K-1}; C_{K-1}, (K-1)\mu] \\ &\times \sum_{r_{K-2}=0}^{z_{K-1}} b\left[r_{K-2}; z_{K-1}, \frac{1}{2}\right] \delta_{C'_{K-1}, C_{K-1} - z_{K-1} + r_{K-1}} \\ &\times \dots \times \sum_{z_2=0}^{C_2} b[z_2; C_2, 2\mu] \\ &\times \sum_{r_1=0}^{z_2} b\left[r_1; z_2, \frac{1}{2}\right] \delta_{C'_2, C_2 - z_2 + r_2} F_X[C'_1, C_1, r_1, C'_0, C_0, \mu] \end{aligned} \quad (9)$$

where $\mu := \frac{1}{N-T}$ and, for $\mathbf{X} = \text{UP}$ and R ,

$$\begin{aligned} F_{\text{UP}} &:= \sum_{z_1=0}^{C_1-1} b[z_1; C_1 - 1, \mu] \delta_{C'_1, C_1 - 1 - z_1 + r_1} \\ &\times \sum_{r_0=0}^{z_1} b\left[r_0; z_1, \frac{1}{2}\right] \delta_{C'_0, C_0 + r_0}, \\ F_{\text{R}} &:= \delta_{C'_1, r_1} \delta_{C'_0, C_0}. \end{aligned} \quad (10)$$

The above expressions for the transition matrices can be understood as follows. Let A be the variable assignment

after T assignments, and \mathcal{F} the residual formula. Call \mathbf{C} the clause vector of \mathcal{F} . Assume first that $C_1 \geq 1$. Pick up one 1-clause, say, ℓ . Call z_j the number of j -clauses that contain ℓ or $\bar{\ell}$ (for $j = 1, 2, 3$). Due to uniformity, the z_j 's are binomial variables with parameter $j/(N-T)$ among $C_j - \delta_{j,1}$ (the 1-clause that is satisfied through unit-propagation is removed). Among the z_j clauses, r_{j-1} contained ℓ and are reduced to $(j-1)$ -clauses, while the remaining $z_j - r_{j-1}$ contained $\bar{\ell}$ and are satisfied and removed. r_{j-1} is a binomial variable with parameter $1/2$ among z_j . 0-clauses are never destroyed and accumulate. The new clause vector \mathbf{C}' is expressed from \mathbf{C} and the z_{j+1} 's, r_j 's using Kronecker functions; thus, $M_P[\mathbf{C}', \mathbf{C}; T]$ expresses the probability that a residual formula at step T with clause vector \mathbf{C} gives rise to a (non violated) residual instance at step $T + 1$ through unit-propagation. Assume now $C_1 = 0$. Then, a yet unset variable is chosen and set to T or F uniformly at random. The calculation of the new vector \mathbf{C}' is identical to the unit-propagation case above, except that $z_1 = r_0 = 0$ (absence of 1-clause). Hence, putting both $C_1 \geq 1$ and $C_1 = 0$ contributions together, $M[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T]$ expresses the probability to have an instance after $T + 1$ assignments and with clause vector \mathbf{C}' produced from an instance with T assigned variables and clause vector \mathbf{C} .

3.2 Generating functions for the numbers of clauses

It is convenient to introduce the generating function $G(\mathbf{X}; T)$ of the probability $P(\mathbf{C}; T)$ where

$$\mathbf{X} := (X_0, X_1, X_2, \dots, X_K),$$

$$G(\mathbf{X}; T) := \sum_{\mathbf{C}} X_0^{C_0} X_1^{C_1} \dots X_K^{C_K} P(\mathbf{C}, T).$$

Evolution equation (7) for the P 's can be rewritten in terms of a recurrence relation for the generating function G ,

$$\begin{aligned} G(\mathbf{X}; T + 1) &= \frac{1}{f_1} G(X_0, f_1, f_2, \dots, f_K; T) \\ &+ \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) G(X_0, 0, f_2, f_3, \dots, f_K; T) \end{aligned} \quad (11)$$

where f_1, \dots, f_K stand for the functions

$$f_j(\mathbf{X}; T) := X_j + \frac{j}{N-T} \left(\frac{1 + X_{j-1}}{2} - X_j \right) \quad (12)$$

($j = 1, \dots, K$). Notice that probability conservation is achieved in this equation: $G(1, 1, \dots, 1; T) = 1$ for all T .

Variants of the R heuristic will translate into additional contributions to the recurrence relation (11). For instance, if the algorithm stops as soon as there are no reducible clauses left ($C_1 = C_2 = \dots = C_K = 0$) instead of assigning all remaining variables at random (such

a variation is closer to what is used in a practical search algorithm), the transition matrix is modified into

$$M[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] = (1 - \delta_{C_1,0}) M_{\text{UP}}[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] + \delta_{C_1,0}(1 - \delta_{C_2,0}\delta_{C_3,0}\dots\delta_{C_K,0}) M_{\text{R}}[\mathbf{C}' \leftarrow \mathbf{C}; T] \quad (13)$$

and equation (11) becomes

$$G(\mathbf{X}; T+1) = \frac{1}{f_1} G(X_0, f_1, f_2, \dots, f_K; T) + \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) G(X_0, 0, f_2, f_3, \dots, f_K; T) - G(X_0, 0, 0, \dots, 0; T). \quad (14)$$

In this case, G is not normalized any longer; $G(1, 1, \dots, 1; T)$ is now the probability that search has not stopped after assignment of T variables. One could also impose that the algorithm comes to a halt as soon as a contradiction is detected i.e. when C_0 gets larger than or equal to unity. This requirement is dealt with by setting X_0 to 0 in the evolution equation for G (11), or (14). All probabilities are now conditioned to the absence of 0-clauses, and, again, G is not normalized.

For the more complicated heuristic GUC (without stopping condition), the recurrence relation reads

$$G(\mathbf{X}; T+1) = \frac{1}{f_1} G(X_0, f_1, f_2, \dots, f_K; T) + \left(\frac{1}{f_2} - \frac{1}{f_1}\right) G(X_0, 0, f_2, f_3, \dots, f_K; T) + \left(\frac{1}{f_3} - \frac{1}{f_2}\right) G(X_0, 0, 0, f_3, \dots, f_K; T) + \dots + \left(\frac{1}{f_K} - \frac{1}{f_{K-1}}\right) G(X_0, 0, 0, \dots, 0, f_K; T). \quad (15)$$

The above recurrence relations (11), (14), (15)... will be useful in Section 3.4 to derive the distribution of unit-clauses. As far as j -clauses are concerned with $j \geq 2$, we shall see in Section 3.3 that, thanks to self-averageness in the large N limit, it is sufficient to know their expectation values, $\langle C_j \rangle(T)$. The average number of j -clauses is the derivative, evaluated at the point $X_0 = X_1 = \dots = X_K = 1$, of the generating function G with respect to X_j : $\langle C_j \rangle(T) = \partial_{X_j} \ln G(1, 1, \dots, 1; T)$ ⁶. Evaluating the derivative at another point is used to take conditional average: for instance, the average of C_1 conditioned to the absence of 0-clauses is $\langle C_1 \rangle(T) = \partial_{X_1} \ln G(0, 1, \dots, 1; T)$ (here, $G(0, 1, 1, \dots, 1; T)$ may be less than 1 as we have seen). Taking derivatives with respect to more than one X_j would give information about correlation functions and/or higher order moments of the C_j 's.

⁶ The logarithm plays no role when G is normalized, i.e. $G(1, 1, \dots, 1; T) = 1$.

For evolution equation (11), the system of evolution equations for the $\langle C_j \rangle(T)$'s is triangular:

$$\langle C_j \rangle(T+1) - \langle C_j \rangle(T) = -\frac{j}{N-T} \langle C_j \rangle(T) + \frac{1}{2} \frac{j+1}{N-T} \langle C_{j+1} \rangle(T) \quad \text{if } 2 \leq j \leq K \quad (16)$$

$$\langle C_1 \rangle(T+1) - \langle C_1 \rangle(T) = -\frac{1}{N-T} \langle C_1 \rangle(T) + \frac{1}{N-T} \langle C_2 \rangle(T) + \left(1 - \frac{1}{N-T}\right) (\langle \delta_{C_1,0} \rangle(T) - 1) \quad (17)$$

$$\langle C_0 \rangle(T+1) - \langle C_0 \rangle(T) = \frac{1}{2(N-T)} (\langle C_1 \rangle(T) - 1 + \langle \delta_{C_1,0} \rangle(T)) = \frac{1}{2(N-T)} \langle \max(C_1 - 1, 0) \rangle(T) \quad (18)$$

(with $C_{K+1} := 0$) and it can be solved analytically, starting from $\langle C_K \rangle(T)$ down to $\langle C_2 \rangle(T)$, with the initial condition $C_j(0) = \alpha N \delta_{j,K}$ (α is the initial clauses-per-variables ratio). However, the equations for $\langle C_1 \rangle(T)$ and $\langle C_0 \rangle(T)$ involve more information than the averages of the C_j 's, namely the probability that there is no 1-clauses, and they can't be solved directly: we shall study the full probability distribution of C_1 in the sequel, in order to extract the finally useful information, that is the probability $\langle \delta_{C_0,0} \rangle(T)$ that the search process doesn't fail (doesn't detect any 0-clause or contradiction) up to step T of the algorithm.

Before going on, let us point out that at least two strategies are at hand to compute this finally useful quantity. We just explained one: we set $X_0 = X_1 = 1$ in G , compute the averages of the C_j 's ($j \geq 2$) (these stochastic variables turn out to self-average in this case where C_0 and C_1 are free — see below), compute the full distribution of C_0 and C_1 conditioned to the averages of the C_j 's ($j \geq 2$), and finally extract the probability that C_0 vanishes up to time T . The other one starts with noticing that this last probability is nothing other than $G(0, 1, 1, \dots, 1; T)$: thus, it seems more natural to compute it through studying the generating function $G(0, X_1, X_2, \dots, X_K; T)$ with X_0 set to 0, i.e. to condition all probabilities and averages on the success of the search, or equivalently to require the process to stop as soon as a contradiction appears. But this would prevent us to solve the evolution equations for the $\langle C_j \rangle(T)$'s and would finally lead to more complication: indeed, in such a case, since G is not normalized, the quantity $G(0, 1, 1, \dots, 1; T)$, that expresses the probability that no contradiction is found, and that can't be expressed without information about C_1 , appears in every equation — or, put in another way, there are correlations between all C_j 's and C_1 . Therefore, we prefer to take the seemingly less direct first route and study from now on only the simplest kinetics (11), with UC heuristic and no stop condition.

Another way of circumventing this problem could be to do a kind of coarse-graining by grouping steps of the algorithm where 1-clauses are present (and the Unit

Propagation principle is used) into so-called *rounds* [15, 21], and then do as if the rounds where the elementary steps: at the end of each step, C_1 is always vanishing, so that one needs to keep track only of the C_j 's, $j \geq 2$, in the coarse-grained process.

3.3 On the self-averageness of clause numbers and resolution trajectories

Is the knowledge of the sole averages $\langle C_j \rangle(T)$ enough, at least for $2 \leq j \leq K$, to compute the success probability of the search process? The answer is yes, in a large range of situations, because the C_j 's are self-averaging (for $j \geq 2$).

It may be shown rigorously [6], using Wormald's theorem [22], that, with the kinetics defined above and no constraints on the C_j 's (i.e. with all X_j set to 1), C_2, C_3, \dots, C_K are self-averaging in the $T, N \rightarrow +\infty$ with fixed $t := T/N$ limit in such a way that we can approximate them by continuous functions of the reduced parameter $t \in [0, 1]$:

$$C_j(T) = Nc_j(t) + o(N - T), \quad 2 \leq j \leq K \quad (19)$$

where $o(N - T)$ is actually an asymptotically Gaussian fluctuation term, i.e. a stochastic variable with average $\mathcal{O}(1)$ and standard deviation $\mathcal{O}(\sqrt{N - T})$ ($N - T$ is the number of not-yet-assigned variables). The self-averageness of the C_j 's is a consequence of the concentration of their variations [6]: given $\mathbf{C}(T)$, the variation terms $\Delta C_j := C_j(T + 1) - C_j(T)$ for $j \geq 2$, equation (16) are concentrated around constant averages, and these averages $\langle \Delta C_j \rangle$ may be approximated by continuous functions $g_j(C_2/(N - T), C_3/(N - T), \dots, C_K/(N - T), t)$ with errors $o(1)$. However, the δ term in equation (17) and the max term in equation (18) are not smooth and prevent the existence of continuous functions g_1 and g_0 . This has deep consequences, since the distribution of C_1 is found to be broad (in the large N limit, the standard deviation is not negligible w.r.t. the average, but of the same order of magnitude). We conclude as in previous subsection that we shall be obliged to study the full distribution of C_1 and C_0 .

Equation (19) ensures that we can safely replace the values of the C_j 's, $j \geq 2$, with their averages in the large N, T limits. Let $\mathcal{E}(T)$ be a probabilistic event at step T , such as: 'the search detects no contradiction up to step T '. We divide the space $C_2(T'), C_3(T'), \dots, C_K(T')$, $0 \leq T' \leq T$ into a tube \mathcal{C} centered on the average trajectory $\langle C_2 \rangle(T'), \dots, \langle C_K \rangle(T')$ and into its exterior $\bar{\mathcal{C}}$. The probability of $\mathcal{E}(T)$ then reads:

$$\mathbb{E}[\mathcal{E}(T)] = \mathbb{E}[\mathcal{E}(T) \cap \mathcal{C}] + \mathbb{E}[\mathcal{E}(T) \cap \bar{\mathcal{C}}] \quad (20)$$

and we shall choose the size of \mathcal{C} so that the second term is negligible with respect to the first one, i.e. to the probability of $\mathcal{E}(T)$ conditioned to the C_j 's lying close to their averages at all times $0 \leq T' \leq T$.

Fix $2 \leq j \leq K$ and $1/2 < \delta < 1$. At time $0 \leq T' \leq T$, if the asymptotic standard deviation of

$C_j(T')$ is $\sigma_j(T')\sqrt{N - T}$, the probability that the discrete stochastic variable $C_j(T')$ lies away from its average by more than $\sigma_j(T')(N - T)^\delta$, or equivalently that the (asymptotically) continuous stochastic variable $C_j(T')/[\sigma_j(T')\sqrt{N - T}]$ lies away from its average by more than $(N - T)^{\delta-1/2}$, is

$$\begin{aligned} \Delta(T') &:= 2 \int_{(N-T)^{\delta-1/2}}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} \\ &= \frac{2}{\sqrt{2\pi}(N-T)^{\delta-1/2}} e^{-(N-T)^{2\delta-1/2}} \\ &\quad + \mathcal{O}\left[\frac{e^{-(N-T)^{2\delta-1/2}}}{(N-T)^{3\delta-3/2}}\right]. \end{aligned} \quad (21)$$

Although the value of $\sigma_j(T')$ depends on T' , it varies only smoothly with the reduced parameter $t = T/N$ and it makes sense to use a single exponent δ to define the region \mathcal{C} . The probability that $C_j(T')$ stays close to the average trajectory up to $\sigma_j(T')(N - T)^\delta$ from $T' = 0$ to T is then

$$\Delta := \prod_{T'=0}^T (1 - \Delta(T')) = 1 - \mathcal{O}\left(N^{3/2-\delta} e^{-N^{2\delta-1/2}}\right). \quad (22)$$

Generalizing this to the parallelepipedic region \mathcal{C} with boundaries such that each $C_j(T')$, $2 \leq j \leq K$, is always at the distance at most $\sigma_j(T')(N - T)^\delta$ from its average, we find that the measure of \mathcal{C} is

$$\mathbb{E}[\mathcal{C}] = (1 - \Delta)^{K-1} = 1 - \mathcal{O}\left(N^{3/2-\delta} e^{-N^{2\delta-1/2}}\right) \quad (23)$$

and the complementary measure is $\mathbb{E}[\bar{\mathcal{C}}] = 1 - \mathbb{E}[\mathcal{C}]$ so that

$$\mathbb{E}[\mathcal{E}(T)] = \mathbb{E}[\mathcal{E}(T) \cap \mathcal{C}] + \mathcal{O}\left(N^{3/2-\delta} e^{-N^{2\delta-1/2}}\right) \quad (24)$$

where the second term vanishes as N gets large, as we wished.

Finally, let us draw the scheme of the computations to follow: any trajectory of $C_2(T), \dots, C_K(T)$ inside \mathcal{C} brings a contribution to $\mathbb{E}[\mathcal{E}(T) \cap \mathcal{C}]$ that lies close to the conditional average $\mathbb{E}[\mathcal{E}(T)|C_2(T) = Nc_2(t), \dots, C_K(T) = Nc_K(t)]$ by an relative error at most $\mathcal{O}(N^\zeta)$ in any direction $(+C_2, -C_2, \dots)$, ζ being computed later, together with the conditional average (it depends presumably on δ). Thus, we can approximate the total contribution $\mathbb{E}[\mathcal{E}(T) \cap \mathcal{C}]$ with

$$\begin{aligned} &\left[1 - \mathcal{O}\left(N^{3/2-\delta} e^{-N^{2\delta-1/2}}\right)\right] \\ &\quad \times \mathbb{E}[\mathcal{E}(T)|C_2(T) = Nc_2(t), \dots, C_K(T) = Nc_K(t)] \\ &\quad \times [1 + \mathcal{O}(N^\zeta)] \end{aligned} \quad (25)$$

to get

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\mathcal{E}(T)] &= \\ &\mathbb{E}[\mathcal{E}(T)|C_2(T) = Nc_2(t), \dots, C_K(T) = Nc_K(t)] \\ &\quad \times [1 + \mathcal{O}(N^\zeta)] + \mathcal{O}\left(N^{3/2-\delta} e^{-N^{2\delta-1/2}}\right) \end{aligned} \quad (26)$$

where we shall have to ensure (by a proper choice of δ if possible) that the neglected terms are indeed negligible with respect to the computed conditional expectation value: if δ is too large, the weight of the region $\bar{\mathcal{C}}$ is very small, but we allow deviations from the average and typical trajectory inside the (too loose) region $\bar{\mathcal{C}}$ that may bring contributions substantially different from the typical one. Conversely, if we group into $\bar{\mathcal{C}}$ near the typical trajectory only the most faithful trajectories, we have a good control over the main contribution, but the weight of the ‘treaters’ in $\bar{\mathcal{C}}$ may not be negligible any more.

The self-averaging of C_1 and C_0 (or its lack) has consequences that may be observed numerically. Let us study the distribution over instances of the probability P that the UC = UP + R greedy, randomized algorithm detects no contradiction during its run. That is, for each of the ≈ 4000 instances that we draw at random, we do 10^4 to 10^5 runs of the algorithm (with different random choices of the algorithm) and we estimate the probability of success of the algorithm on this instance⁷.

The cumulative distribution function of P is plotted in Figure 2 for instances of 3-SAT with initial clauses-per-variable ratio $\alpha = 2$ (left curves) and $8/3$ (right curves), for sizes of problems $N = 1000$ and 10000 . For each size N , P is rescaled to fix the average to 0 and the standard deviation to $1/\sqrt{2}$. For $\alpha < 8/3$, C_1 has finite average and standard deviation when $N \rightarrow +\infty$, and ΔC_1 may be approximated by a continuous function g_1 like the ΔC_j 's for $j \geq 2$ (see Sect. 4.1). The numerical distributions of P are successfully compared to a Gaussian distribution (the average of P for $\alpha < 8/3$ is computed in Sect. 4.1, see Eq. (48)). For $\alpha = 8/3$, things are different. C_1 has average and standard deviation of the order of $N^{1/3}$ (see Sect. 4.2 and following). As for $\alpha = 2$, the width of the finite-size distributions of P vanishes with N — they concentrate about their average (computed in Sect. 6, see Eq. (123)), and the rescaled finite-size distributions of P are numerically seen to converge to a well-defined distribution. However, this distribution is *not* Gaussian — this effect seems rather small, but significant.

If we now plug the self-averaged form (19) of the C_j 's, $j \geq 2$, in their evolution equations (16), we get, using the reduced parameter $t = T/N$,

$$\frac{dc_j}{dt} = -\frac{j}{1-t}c_j(t) + \frac{j+1}{2(1-t)}c_{j+1}(t) \quad 2 \leq j \leq K \quad (27)$$

with $c_{K+1} := 0$. This triangular system of equations, with the initial conditions $c_j(0) = \alpha\delta_{j,K}$, is easily solved for given K . For instance, for $2+p$ -SAT and the R heuristic,

⁷ Alternatively, we could get the same result by doing one run of the algorithm on each instance (and averaging over many more instances) since the sequence b of choices of the algorithm on the instance A is the same as the sequence a of choices of the algorithm on an instance B obtained by relabeling the variables and the clauses of instance A . However, this technique was slower in practice because much time is spent building new instances.

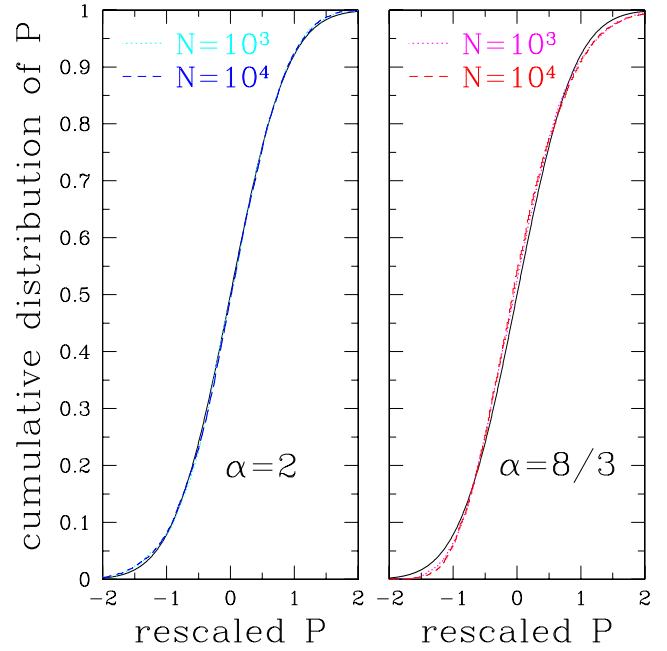


Fig. 2. Numerical estimates for the cumulative probability distributions of the probability P of success of the UC=R+UP algorithm on random 3-SAT instances with sizes $N = 10^3$ (dots) and 10^4 (dashes) and initial clauses-per-variable ratios $\alpha = 2$ (left) and $8/3$ (right). The P -axis for each distribution (each value of α and N) is chosen so that the rescaled distributions have average 0 and standard deviation $1/\sqrt{2}$. The solid lines show the Gaussian cumulative distribution $[1 + \text{erf}(x)]/2$. For $\alpha = 2$, numerical distribution are in good agreement with a Gaussian shape, but not for the critical ratio $\alpha = 8/3$.

the solution reads

$$c_3(t) = \alpha p(1-t)^3 \quad (28)$$

$$c_2(t) = \alpha(3pt/2 + 1 - p)(1-t)^2 \quad (29)$$

whereas, for $2+p$ -SAT and the GUC heuristic,

$$c_3(t) = \alpha p(1-t)^3 \quad (30)$$

$$c_2(t) = (1-t) \{ \ln(1-t) + \alpha[3pt(2-t)/4 + (1-p)] \}. \quad (31)$$

For K -SAT with the R heuristics with initial ratios $\alpha_j = C_j/N$,

$$c_2(t) = (1-t)^2 \sum_{j=2}^K \alpha_j j(j-1) 2^{1-j} t^{j-2}. \quad (32)$$

The parametric curve $[c_2(t), c_3(t), \dots, c_K(t)]$, $0 \leq t \leq 1$, will be called *resolution trajectory*. It describes, forgetting about 0- and 1-clauses, the typical evolution of the reduced formula under the operation of the algorithm. In the case of 3- or $2+p$ -SAT, a useful alternative phase space is the $p \times \alpha$ plane, where $\alpha = (c_2 + c_3)/(1-t)$ is the (instantaneous) 2-or-3-clauses-per-variable ratio and p is, as usual, the proportion of 3-clauses amongst the

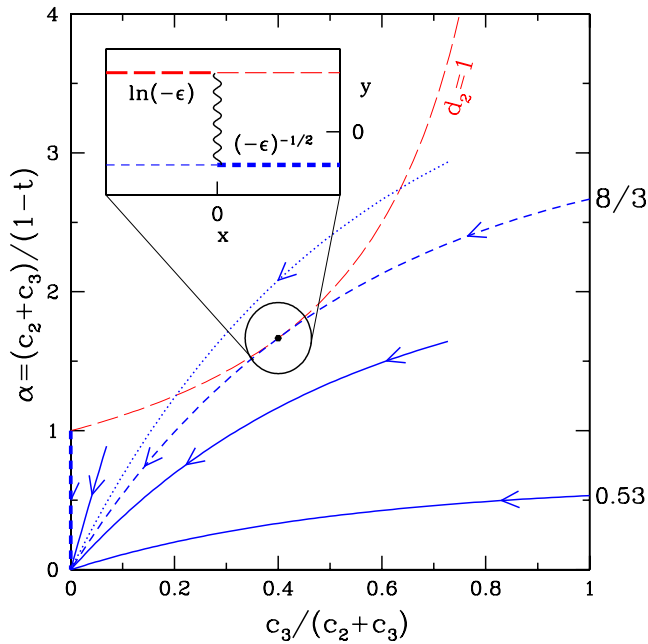


Fig. 3. Some resolution trajectories of the UC=UP+R algorithm. If the trajectory of some algorithm stays strictly below the $d_2 = \alpha(1-p) = 1$ line (long-dashed line), 1-clauses don't accumulate and the success probability P_{success} of the algorithm is finite as $N \rightarrow +\infty$ (solid trajectories). Critical behaviour is when the trajectory gets tangent to this line or starts on it (short-dashed trajectories). When the trajectory spends time in the region above this line (dotted trajectory), P_{success} gets exponentially small in N . Inset: the singular behaviour of P_{success} around the $(p = 2/5, \alpha = 5/3)$ point is better understood if one uses local coordinates (x, y) . x is the distance along the common tangent to the $d_2 = 1$ line and the critical trajectory. y is such that lines of constant y are, in the original coordinates, parabolas, tangent to the $d_2 = 1$ line. The point $(2/5, 5/3)$ is spread onto the wavy line. Left and right limits of P_{success} for $x \rightarrow 0$ on the wavy line are well-defined but distinct. The $N \rightarrow +\infty$ limit of $-\ln P_{\text{success}}$ has the indicated singularities on the thick lines.

2- and 3-clauses. Some resolution trajectories of the UC algorithm are shown in Figure 3. They all end at the $c_1 = c_2 = c_3 = 0$ point with $t = 1$: almost all variables have to be assigned before no clauses are left (and a solution is found). More clever algorithms such as GUC are able to find solutions with a finite fraction of remaining unset variables, and give a family of solutions with a finite entropy at once.

3.4 Reduced generating functions for 0- and 1-clause numbers

From now on, we identify C_2, C_3, \dots, C_K with their asymptotic averages $NC_j(t)$ as discussed above, and study the kinetics of C_0 and C_1 as driven by C_2, C_3, \dots, C_K . Under these assumptions, it is easy to write the evolution equation for C_0 and C_1 that corresponds to (7): if $P(C_0, C_1; T|C_2)$ is the probability that the search pro-

cess leads, after T assignments and with imposed values of C_2, C_3, \dots, C_K at all steps 0 to N , to the numbers C_0, C_1 of 0-, 1-clauses,

$$P(C'_0, C'_1; T+1|C_2) = \sum_{C_0} \sum_{C_1} M_1[C'_0, C'_1 \leftarrow C_0, C_1; T|C_2] P(C_0, C_1; T|C_2) \quad (33)$$

where the expression of M_1 is deduced from that of M by canceling all what it written on the left of the sum over z_2 in (9). It is readily seen in that expression that, actually, the transition matrix M_1 doesn't depend explicitly on C_3, C_4, \dots, C_K but only on C_2 ; therefore, we dropped the unnecessary dependence in the above equation. M_1 also depends explicitly on time through $\mu = 1/(N-T)$. This evolution equation translates into the following equation for the generating function

$$G_{01}(X_0, X_1; T|C_2) := \sum_{C_0=0}^M \sum_{C_1=0}^M X_0^{C_0} X_1^{C_1} P(C_0, C_1; T|C_2) :$$

$$G_{01}(X_0, X_1; T+1|C_2) = \left(1 + \frac{X_1 - 1}{N - T}\right)^{C_2(\alpha, T)} \times \left[\frac{1}{f_1} G_{01}(X_0, f_1; T|C_2) + \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) G_{01}(X_0, 0; T|C_2) \right] \quad (34)$$

where $f_1 = \frac{1+X_0}{2(N-T)} + X_1(1 - \frac{1}{N-T})$, see (12). Since the X_0 argument of G_{01} is the same in all terms, we shall drop it when there is no ambiguity and use the lighter notation $G_1(X_1; T|C_2) := G_{01}(X_0, X_1; T|C_2)$. The key equation above yields the main results of the next sections: in particular, $G_{01}(0, 1; T|C_2)$ is the probability that the search process *detected* no contradictions (i.e. produced no 0-clauses, even if there are already contradictory 1-clauses such as ' a ' and ' \bar{a} ') while assigning the first T variables, and $G_{01}(0, 1; T = N|C_2)$ is the probability that a solution has been found by the search process, i.e. that all N variables were assigned without production of a contradiction (if all variables were assigned, any produced contradiction was necessarily detected).

4 The probability of success

In this section, the generating function formalism is used to study the probability $P_{\text{success}}(\alpha, p, N)$ that UC successfully finds a solution to a random instance of the $2 + p$ -SAT problem with N variables and αN clauses. We first consider the infinite size limit, denoted by $P_{\text{success}}(\alpha, p)$. As explained in Section 2.3, the probability of success vanishes everywhere but for ratios smaller than a critical value $\alpha_R(p)$. This threshold line is re-derived, with a special emphasis on the critical behaviour of P_{success} when $\alpha \rightarrow \alpha_R(p)$.

We then turn to the critical behaviour at large but finite N , with the aim of making precise the scaling of $P_{\text{success}}(\alpha, p, N)$ with N . A detailed analysis of the behaviour of the terms appearing in the evolution equation for the generating functions G (34) is performed. We show that the resulting scalings are largely common to all algorithms that use the Unit Propagation rule.

4.1 The infinite size limit, and the success regime

For a sufficiently low initial clauses-per-variables ratio α , the algorithm finds a solution with positive probability when $N \rightarrow \infty$. It is natural to look for a solution of equation (34) with the following scaling:

$$G_1(X_1, T = tN|C_2) = \pi_0(X_1, t) + o(1) \quad (35)$$

when $T, N \rightarrow +\infty$, π_0 being a smooth function of X_1 and t (X_0 is kept fixed to 0). $\pi_0(1, t)$ is therefore, in the $N \rightarrow +\infty$ limit, the probability that the search process detected no contradiction after a fraction t of the variable has been assigned. The probability of success we seek for is $P_{\text{success}} = \pi_0(1, 1)$.

We furthermore know that C_2 , which drives the evolution of C_1 in (34), is concentrated around its average: we take

$$C_2(\alpha, T = tN) = (N - T)d_2(\alpha, t) + \mathcal{O}[(N - T)^\delta] \quad (36)$$

with

$$d_2(t) := c_2(t)/(1 - t) \quad (37)$$

and $1/2 < \delta < 1$ will be chosen later. Inserting the above Ansatz into (34) yields

$$\begin{aligned} \pi_0(X_1, t) &= \frac{e^{(X_1-1)d_2(t)}}{X_1} [\pi_0(X_1, t) + (X_1 - 1) \pi_0(0, t)] \\ &+ \mathcal{O}[(1 - X_1)(N - T)^{\delta-1}] + \mathcal{O}[(N - T)^{-1}] \end{aligned} \quad (38)$$

hence, in the thermodynamic limit $N, T \rightarrow +\infty$, an equation for π_0 ,

$$\pi_0(X_1, t) = \frac{e^{(X_1-1)d_2(t)}}{X_1} [\pi_0(X_1, t) + (X_1 - 1) \pi_0(0, t)]. \quad (39)$$

This equation does not suffice by itself to compute $\pi_0(1, t)$. Yet it yields two interesting results if we differentiate it w.r.t. X_1 to the first and second orders in $X_1 = 1$:

$$\pi_0(0, t) = (1 - d_2(t)) \pi_0(1, t) \quad (40)$$

$$\frac{\partial \pi_0}{\partial X_1}(1, t) = \frac{d_2(t)(2 - d_2(t))}{2(1 - d_2(t))} \pi_0(1, t). \quad (41)$$

Under assumption (35), $\pi_0(0, t)/\pi_0(1, t) = 1 - d_2(t)$ can be interpreted as the probability $\rho_1(t)$ that there is no 1-clause at time t conditioned to the survival of the search process. $d_2(t)$ is then the (conditional) probability that there is at least one 1-clause⁸. As $\rho_1(t)$ has to be positive or null, $d_2(t)$ cannot be larger than 1. As long as this

⁸ And the δ term that appears in equation (17) is actually a continuous function of $C_2/(N - T)$ so that equation (19) holds also for $j = 1$.

is ensured, $\rho_1(t)$ has a well-defined and positive limit in the $N \rightarrow +\infty$ limit (at fixed reduced time t). The conditional average of C_1 , $\partial_{X_1} \pi_0(1, t)/\pi_0(1, t)$, can be expressed from (41) and is of the order of one when $N \rightarrow +\infty$. The terms of the r.h.s. of (17) compensate each other: 1-clauses are produced from 2-clauses slower than they are eliminated, and do not accumulate. Conversely, in the *failure* regime (Sect. 2.3), 1-clauses accumulate, and cause contradictions.

To complete the computation of $\pi_0(1, t)$, we consider higher orders in the large N expansion of G_1 . In general, this would involve the cumbersome fluctuation term $\mathcal{O}[(X_1 - 1)(N - T)^{\delta-1}]$, but, at $X_1 = 1$, only the ‘deterministic’ $\mathcal{O}[(N - T)^{-1}]$ correction is left since C_2 disappears from equation (34). Thus we assume

$$\begin{aligned} G_1(1, T = tN|C_2) \\ = \pi_0(1, t) + \frac{1}{N - T} \pi_1(1, t) + o\left(\frac{1}{N - T}\right) \end{aligned} \quad (42)$$

which yields, when inserted into (34),

$$-(1 - t) \frac{\partial \pi_0}{\partial t}(1, t) = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial \pi_0}{\partial X_1}(1, t) + \pi_0(0, t) - \pi_0(1, t) \right]. \quad (43)$$

This equation (43) can be turned into an ordinary differential equation for $\pi_0(1, t)$ using (40) and (41); after integrating over t , with the initial condition $\pi(1, t = 0) = 1$ i.e. no contradiction can arise prior to any variable setting, we find the central result of this section [8, 13]:

$$\pi_0(1, t) = \exp\left(-\int_0^t \frac{d\tau}{4(1 - \tau)} \frac{d_2(\tau)^2}{1 - d_2(\tau)}\right) \quad (44)$$

which is finite if, and only if, $d_2(\tau) < 1$ for all $0 \leq \tau \leq 1$ (the apparent divergence at $\tau = 1$ is in practice compensated by the factors involving d_2).

The above result can be used in (40) and (39) to compute $\pi_0(X_1, t)$, that is the generating function of the probability $P(C_1, t)$ that there are C_1 1-clauses and no contradiction has occurred after assignment of a fraction t of the variables,

$$\begin{aligned} \pi_0(X_1, t) &:= \sum_{C_1 \geq 0} P(C_1, t) X_1^{C_1} \\ &= [1 - d_2(t)] \frac{1 - X_1}{1 - X_1 e^{-(X_1-1)d_2(t)}} \pi_0(1, t). \end{aligned} \quad (45)$$

As long as $d_2(t) < 1$, the average number of 1-clauses $\langle C_1 \rangle(t)$ is finite as $N \rightarrow +\infty$. This sheds light on the finiteness of P_{success} . The probability of not detecting a contradiction at the time step $T \rightarrow T+1$ is $(1 - \mu/2)^{\max(C_1-1, 0)} \simeq 1 - \max(C_1 - 1, 0)/2/(N - T)$, and P_{success} is the product of $\Theta(N)$ quantities of that order⁹.

⁹ We can't go further and compute a function $\pi_1(X_1, t)$ corresponding to the order $1/N$ in (35), since the ‘Gaussian fluctuations’ term $\mathcal{O}[(N - T)^\delta]$ in (36) would dominate the $1/N$ introduced correction — only for $X_1 = 1$ is this $1/N$ -term relevant, so that we could write down (43). It is also impossible to compute $\pi_1(1, t)$ alone.

The validity condition $d_2(t) = c_2(t)/(1-t) < 1$ is fulfilled at all steps t if, and only if, the initial clauses-per-variable ratio α is smaller than a threshold, α_R , as can be seen from the expression of $c_2(t) = \langle C_2 \rangle(T)/N$ that results from equation (29). Graphically, in the (p, α) plane, the resolution trajectory in Figure 3 stays below the line $\alpha(1-p) = 1$ iff. α is small enough. Finding the threshold value for α and a given p is an easy ballistic problem:

- If $p < 2/5$ ('2-SAT family'), whatever the initial clauses-per-variable α , the resolution trajectory (Fig. 3) will always either be entirely below the $d_2 = 1$ line (success case, low α), or cut it (failure case, high α). The threshold value of α is reached when the resolution trajectory starts exactly on it (critical case), therefore

$$\alpha_R(p) = 1/(1-p) \quad \text{if } p < 2/5. \quad (46)$$

- If $p \geq 2/5$ ('3-SAT class'), the resolution trajectory for low α is also entirely below the $d_2 = 1$ line (success case). This situation ends when the resolution trajectory gets *tangent* to the $d_2 = 1$ line, whereas for $p < 2/5$ it was *secant*.

All critical trajectories for $p \geq 2/5$ share the support of the critical trajectory for $p = 1$ (3-SAT) that starts at $(p = 1, \alpha = 8/3)$, and all become tangent to the $d_2 = 1$ line at the $(p = 2/5, \alpha = 5/3)$ point (reached after a finite time), whereas for $p < 2/5$ there are several critical trajectories. Here,

$$\alpha_R(p) = 24p/(2+p)^2 \quad \text{if } p \geq 2/5. \quad (47)$$

The probability $P_{\text{success}} = \pi_0(1,1)$ that the UC algorithm finds a solution is obtained from equation (44) with $d_2(t) = \alpha(1-t)(3/2pt + 1 - p)$, equation (29):

$$\begin{aligned} -\ln P_{\text{success}}(\alpha, p) &= \frac{1}{4\sqrt{24p/(2+p)^2/\alpha - 1}} \\ &\times \left[\arctan \frac{1}{\sqrt{24p/(2+p)^2/\alpha - 1}} \right. \\ &\quad \left. + \arctan \frac{5(p-2/5)}{(2+p)\sqrt{24p/(2+p)^2/\alpha - 1}} \right] \\ &- \frac{1}{8} \ln \left(\frac{1}{1-p} - \alpha \right) - \frac{1}{8} \ln(1-p) + \frac{\alpha(p-4)}{16}. \quad (48) \end{aligned}$$

Of particular interest is the singularity of P_{success} slightly below the threshold ratio. At fixed p , as α increases, the first singularity is encountered when the resolution trajectory tangent to the $d_2 = 1$ line is crossed i.e. for $\alpha = 24p/(2+p)^2$ (Fig. 3, largest short-dashed line, and thick short-dashed line in the inset). If $p > 2/5$ (3-SAT class), the two arctan in equation (48) tend to $\pi/2$ and P_{success} vanishes as ($\epsilon < 0$):

$$-\ln P_{\text{success}}[(1+\epsilon)\alpha_R(p), p] = \frac{\pi}{4} \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}} + \Theta(1). \quad (49)$$

For $p = 2/5$, one of the two arctan vanishes for all α , and the first ln brings another singularity ($\epsilon < 0$):

$$-\ln P_{\text{success}} \left[\frac{5}{3}(1+\epsilon), \frac{2}{5} \right] = \frac{\pi}{8} \frac{1}{\sqrt{-\epsilon}} - \frac{1}{8} \ln(-\epsilon) + \Theta(1). \quad (50)$$

And for $p < 2/5$, the two arctan have opposite signs so that the first term of equation (48) has no singularity while crossing the 'limiting' resolution trajectory $\alpha = 24p/(2+p)^2$ (thin short-dashed line of the inset of Fig. 3). A singularity is found when α reaches the $d_2 = 1$ line, $\alpha = 1/(1-p)$ (thick long-dashed line of the inset of Fig. 3), with the outcome ($\epsilon < 0$)

$$-\ln P_{\text{success}}[(1+\epsilon)\alpha_R(p), p] = -\frac{1-p}{2(2-5p)} \ln(-\epsilon) + \Theta(1). \quad (51)$$

The difference of nature of the singularities between the 2-SAT and 3-SAT families corresponds to different divergences of $-\ln P_{\text{success}}$ with N , as will be computed in the next section.

For completeness, let us check that the above calculation is compatible with our approximation (26). The first term of the l.h.s. there is equal to P_{success} plus the $1/(N-T)$ correction from equation (42). The second term there, in $\mathcal{O}(N^\zeta)$, corresponds here to the fluctuations of C_2 : $\mathcal{O}(N^{\delta-1})$ in equation (38), thus $\zeta = \delta - 1$. If we take for δ any value on the allowed interval $]1/2, 1[$, the two approximation terms in (26) vanish as $N \rightarrow +\infty$. Therefore, as long as P_{success} is finite for large N , these approximation terms are actually negligible.

4.2 Large N scalings in the critical regime

Our previous study of the success regime breaks down when $d_2(t)$ reaches 1 during operation of the algorithm. Indeed, consider the infinite- N generating function for C_1 , G_1 , given by equation (45). As a function of X_1 , G_1 vanishes uniformly on any compact interval $[0, 1-\eta]$, $\eta > 0$, as $d_2 \rightarrow 1$. The $X_1 = 1$ point is singular since normalization enforces $\pi_0(1, t) = 1$ (assuming $X_0 = 1$): all useful information is concentrated in a small region around $X_1 = 1$. Expanding equation (45) for $X_1 \rightarrow 1$ yields

$$\begin{aligned} \pi_0(X_1, t) &= \left\{ 1 + d_2(t) \frac{1-X_1}{1-d_2(t)} - \frac{X_1 d_2^2(t)}{2} \frac{1-X_1}{1-d_2(t)} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O} \left[\frac{(1-X_1)^2}{1-d_2(t)} \right] \right\}^{-1}. \quad (52) \end{aligned}$$

Non-trivial results are obtained when $1-X_1$ and $1-d_2(t)$ are of the same (vanishingly small) order of magnitude — let us call it Δ . We suspect that Δ is some negative power of N , to be determined below. Let us define

$$X_1 =: 1 - x_1 \Delta, \quad e_2(t) := \Delta^{-1}(1 - d_2(t)) \quad (53)$$

so that equation (36) now reads

$$C_2[\alpha, T = tN] = [1 - e_2(\alpha, t)\Delta](N - T) + \mathcal{O}[(N - T)^\delta] \quad (54)$$

where, as previously, the exponent δ will be tuned later according to the framework equation (26).

We assume that, in the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$, $\Delta \rightarrow 0$ but at fixed x_1 , $e_2(t)$, and time t , the normalized generating function of C_1 conditioned to the typical value of $C_2(t)$,

$$\frac{G_1(X_1 = 1 - x_1\Delta, T = tN|C_2)}{G_1(1, T = tN|C_2)} \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \bar{\pi}(x_1, t) \quad (55)$$

where the limit $\bar{\pi}$ is a smooth function of x_1 and t (which also depends on X_0 and e_0). $\bar{\pi}(x_1, t)$ is the generating function for the stochastic variable $c := C_1/\Delta$, conditioned to the success of the algorithm. Equation (52) gives information about the $e_2 \rightarrow +\infty$ limit of $\bar{\pi}$. Furthermore, equation (45) shows that

$$\Delta^{-1} G_1(0, T|C_2)/G_1(1, T|C_2) \xrightarrow{N \rightarrow +\infty} \sigma(t), \quad (56)$$

a well defined limit of the order of unity for $T = tN$ and C_2 given by equation (54). We now plug the previous conventions and assumption into the evolution equation for the *conditional*, normalized generating function of C_1 . This equation is formed by dividing equation (34) by $G_1(1, T|C_2)$, which yields, in a formal way,

$$\text{LHS} = \text{RHS}_1 + \text{RHS}_2 \quad (57)$$

$$\text{LHS} := G_1(X_1, T + 1|C_2)/G_1(1, T|C_2)$$

$$\text{RHS}_1 := \left(1 + \frac{X_1 - 1}{N - T}\right)^{C_2(\alpha, T)} \frac{1}{f_1} \frac{G_1(f_1; T|C_2)}{G_1(1, T|C_2)}$$

$$\text{RHS}_2 := \left(1 + \frac{X_1 - 1}{N - T}\right)^{C_2(\alpha, T)} \left(1 - \frac{1}{f_1}\right) \frac{G_1(0; T|C_2)}{G_1(1, T|C_2)}.$$

From this equation we get, in the following subsections, all results relevant to the critical behaviour of the success probability of the greedy algorithm.

4.2.1 Analysis of the RHS terms

The two contributions of the r.h.s. of the evolution equation (57) have the detailed expression (for $X_0 = 0$):

$$\begin{aligned} \text{RHS}_1 = & \left\{ 1 + x_1 e_2(t) \Delta^2 + \frac{1}{2N(1-t)} + \frac{x_1^2}{2} \Delta^2 \right. \\ & + \mathcal{O}((x_1^3 + x_1^2 e_2(t)) \Delta^3) + \mathcal{O}\left(x_1 \frac{\Delta}{N(1-t)}\right) \\ & \left. + \mathcal{O}[x_1 \Delta (N-T)^{\delta-1}] \right\} \\ & \times \left\{ \bar{\pi}(x_1, t) + \frac{1}{2N(1-t)\Delta} \partial_{x_1} \bar{\pi}(x_1, t) \right. \\ & \left. + \mathcal{O}[(N-T)^{-2} \Delta^{-2}] \right\} \quad (58) \end{aligned}$$

and

$$\begin{aligned} \text{RHS}_2 = & -\sigma(t) \Delta \left\{ x_1 \Delta + \frac{1}{2N(1-t)} + \mathcal{O}\left(\frac{x_1 \Delta}{N(1-t)}\right) \right. \\ & \left. + \mathcal{O}(x_1^3 \Delta^3) + \mathcal{O}[(N-T)^{-2}] + \mathcal{O}\{x_1^2 \Delta^2 (N-T)^{\delta-1}\} \right\} \end{aligned}$$

where, as usual, $T = tN$.

Apart from the dominant term $\bar{\pi}(x_1, t)$ that cancels with the dominant term of the l.h.s., the first terms have order Δ^2 and $1/(N\Delta)$ (we here assume that $t < 1$ in the critical regime, which will be the case in all subsequent situations). Then, Δ^3 , $1/N$, Δ/N and so on are negligible for large N (because Δ vanishes, but slower than $1/(N-T)$) since the integer C_2 may not vary by less than unity). So do the terms stemming from fluctuations of C_2 around its typical value, $\Delta^2(N-T)^{\delta-1}$ and $\Delta(N-T)^{\delta-1}$, if we choose δ carefully (see below). Choosing Δ such that $\Delta^2 = 1/(N\Delta)$ allows us to gather a maximal number of terms in the equation for $\bar{\pi}$. Other choices are possible but trivial, in that they would correspond to either the success or the failure regimes, but not to the critical case. From now on, $\Delta := N^{-1/3}$.

Then, the fluctuations of C_2 in the above expansion are of the order of $\Delta(N-T)^{\delta-1} = (N-T)^{\delta-4/3}$. Using the notations from equation (26), $\zeta = \delta - 4/3$. These fluctuations are negligible with respect to $N^{2/3}$ if $\delta < 2/3$. Remember that the range of possible values for δ was $]1/2, 1[$; in the critical situation here, we may choose $\delta \in]1/2, 2/3[$. It will be checked later that the third term of the l.h.s. of equation (26) is also negligible w.r.t. the first one. Finally,

$$\begin{aligned} \text{RHS}_1 + \text{RHS}_2 = & \bar{\pi}(x_1, t) + N^{-2/3} \\ & \times \left[\frac{1}{2(1-t)} \partial_{x_1} \bar{\pi}(x_1, t) + (e_2(t) x_1 + \frac{x_1^2}{2}) \bar{\pi}(x_1, t) \right. \\ & \left. - \sigma(t) x_1 \right] + \mathcal{O}[(N-T)^{-1}, x_1 (N-T)^{\delta-4/3}]. \quad (59) \end{aligned}$$

4.2.2 Analysis of the LHS terms

LHS in equation (57) has to do with time evolution. The values of d_2 or e_2 are given by the average value of C_2 calculated in Section 3.3. e_2 is of the order of unity when $N \rightarrow +\infty$ if the resolution trajectory comes close to $d_2 = 1$ i.e. if the initial clauses-per-variable ratio α is close to its threshold value equations (46 - 47). We zoom in around the time, say, t^* where d_2 is closest to 1 (or equal to 1 if we are exactly on the borderline between the success and failure cases) and let

$$T = t^* N + t_0 N \Delta^a = t^* N + t_0 N^{1-a/3}. \quad (60)$$

a will be fixed later for each family of near-critical trajectories so that $1 - d_2(t)$ is indeed of order Δ on a finite interval of rescaled times t_0 . We now assume that $\bar{\pi}$ and $G_1(X_1 = 1)$ have, when $N \rightarrow \infty$ and time T is given

by (60), well defined limits, regular w.r.t. t_0 ¹⁰. The l.h.s. of equation (57) may be written for large N

$$\text{LHS} = G_1(1, T+1|C_2)/G_1(1, T|C_2) \bar{\pi}(x_1, T+1) \quad (61)$$

where $T+1 = t_0 + N^{-1}\Delta^{-a} = t_0 + N^{-1+a/3}$. As time t_0 goes on, the shape of the distribution of C_1/Δ (encoded into $\bar{\pi}$) and the probability of success (given by $G_1(1, T|C_2)$) both vary. Fix first x_1 at 0 so that $X_1 = 1$ and $\bar{\pi} = 1$, then equations (61) and (59) read

$$\text{LHS} = 1 + N^{-1+a/3} \partial_{t_0} \ln[G_1(1, t_0|C_2)] \quad (62)$$

$$\begin{aligned} \text{RHS}_1 + \text{RHS}_2 = 1 + \frac{1}{2(1-t^*)} N^{-2/3} \partial_{x_1} \bar{\pi}(1, t) \\ + \mathcal{O}[(N-T)^{-1}]. \end{aligned} \quad (63)$$

Comparing the two members, equation (62) and equation (63), of equation (57) shows that $\ln[G_1(1, t_0|C_2)]$ is of the order of $N^{(1-a)/3}$, with subleading terms of the order of $N^{-a/3}$ at most. Defining $\lambda := (1-a)/3$, we have in the large N limit

$$-N^{-\lambda} \ln G_1(1, T|C_2) \rightarrow \mu(t_0), \quad (64)$$

a regular function of t_0 . Equations (62) and (59) with $x_1 = 0$ yield

$$\partial_{t_0} \mu(t_0) = -\frac{1}{2(1-t^*)} \partial_{x_1} \bar{\pi}(0, t_0). \quad (65)$$

As $\bar{\pi}$ is the generating function of $c = C_1/\Delta$ (conditioned to success of the algorithm),

$$\bar{c}(t_0) := -\partial_{x_1} \bar{\pi}(0, t_0) \quad (66)$$

is the conditional average of the rescaled number c of unit-clauses.

For general x_1 now, the previous assumptions lead from the expression (61) of the l.h.s. of equation (57) to

$$\begin{aligned} \text{LHS} = \bar{\pi}(x_1, t_0) + N^{-1+a/3} \partial_{t_0} \bar{\pi}(x_1, t_0) \\ - N^{-2/3} \bar{\pi}(x_1, t_0) \partial_{t_0} \mu(t_0) + \mathcal{O}(N^{-2+2a/3}). \end{aligned} \quad (67)$$

4.3 Critical evolution equations

Comparing the two sides of the evolution equation, equation (59) and equation (67), we are left with two situations.

¹⁰ This assumption could presumably be demonstrated using the same technique as for Wormald's theorem [22]. If we introduce ex nihilo the functions $\bar{\pi}$ and G_1 that satisfy the equations (68)–(69), we could show that the difference between the sequences, for T from 1 to N , of the discrete quantities $G_1(X_1, T|C_2)$ and of the approximate quantities $\bar{\pi}[(1-X_1)N^{1/3}, (T-Nt^*)N^{-1+a/3}] G_1[1, t_0 = (T-Nt^*)N^{-1+a/3}]$, vanishes when $N \rightarrow +\infty$. The reason is that the difference between two consecutive terms of each of the two sequences is the same up to a small quantity that yields a negligible difference at the final date $T = N$, and the initial conditions for both sequences are equal.

– If $a = 1$: $\lambda = 0$ and it is convenient to use the non-normalized (non-conditional) generating function

$$\pi(x_1, t_0) := \exp[-\mu(t_0)] \bar{\pi}(x_1, t_0).$$

The total probability here, $\pi(0, t_0)$, is not 1 as for $\bar{\pi}$ but the success probability of the greedy algorithm. π satisfies the following PDE:

$$\begin{aligned} \partial_{t_0} \pi(x_1, t_0) = \frac{1}{2(1-t^*)} \partial_{x_1} \pi(x_1, t_0) \\ + \left[e_2(t_0)x_1 + \frac{x_1^2}{2} \right] \pi(x_1, t_0) - \sigma(t_0)x_1. \end{aligned} \quad (68)$$

– If $a < 1$: the probability of success has the scaling relationship $P_{\text{success}} \propto \exp[-\Theta(N^{(1-a)/3})]$. The time-derivative term $\partial_{t_0} \bar{\pi}(x_1, t_0)$ is negligible w.r.t. other terms, and $\bar{\pi}$ satisfies the ODE:

$$\begin{aligned} 0 = \frac{1}{2(1-t^*)} [\partial_{x_1} \bar{\pi}(x_1, t_0) + \bar{c}(t_0) \bar{\pi}(x_1, t_0)] \\ + \left[e_2(t_0)x_1 + \frac{x_1^2}{2} \right] \bar{\pi}(x_1, t_0) - \sigma(t_0)x_1. \end{aligned} \quad (69)$$

The third possibility, $a > 1$, leads to inconsistencies and has to be rejected¹¹.

In the previous section, we classified the critical resolution trajectories into two families: those of the 2-SAT family ($p < 2/5$) start from the $d_2 = 1$ line but are secant to it, and those of the 3-SAT family ($p > 2/5$) do not start on this line but get tangent to it ('parabola situation'). As we will see in the next sections, these two families correspond, respectively, to values of the exponent a equal to 1 and 1/2, making successively equation (68) and (69) relevant.

5 The 2-SAT class (power law class)

5.1 Equations for 2-SAT and its family

When $p < 2/5$, the critical resolution trajectory starts on the $d_2 = 1$ line and is secant to it (at time $t^* = 0$) with slope

$$\beta(p) := \frac{2-5p}{2(1-p)}. \quad (70)$$

The threshold value of α is $\alpha_R(p) = 1/(1-p)$ (Eq. (46)). On this resolution trajectory, $1-d_2(t-t^*) \propto t-t^*$. Therefore, this resolution trajectory is at distance $\Delta = N^{-1/3}$ of the $d_2 = 1$ line as long as $t-t^*$ is of order Δ^1 : the exponent a equals 1 here and the relevant equation is equation (68).

¹¹ We would have either subdominant terms of the order of $N^{-1+a/3}$, larger than the dominant term (of the order of 1) $\bar{\pi}(x_1, t_0)$ if $a \geq 3$, or the two equations $\partial_{t_0} \bar{\pi}(x_1, t_0) = 0$ and an ODE for $\bar{\pi}$ at fixed t_0 but with coefficients $e_2(t_0)$ and $\sigma(t_0)$. In the latter case, since $\bar{\pi}$ would be constant with time, e_2 and thus d_2 should also be constant, which is impossible in the context of our algorithm (see Eq. (27)).

The critical regime is realized when α is close to the value $\alpha_R(p) = 1/(1-p)$.

The relevant scaling is

$$\alpha = \alpha_R(p)(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3}) \quad (71)$$

with finite ϵ_α since, if α is less than $\alpha_R(p)$ by more than $\Delta = N^{-1/3}$, at the initial date $t = 0$, $d_2(0)$ is already out of the critical region $1 - \Delta$ (remember that $d_2(t)$ decreases with time if $p < 2/5$ as can be seen in Fig. 3). Conversely, if α is above $\alpha_R(p)$ by a distance much greater than Δ at time $t = 0$, $1 - d_2(0)$ is an order of magnitude higher than the critical distance Δ and an infinite duration, on the scale of t_2 in equation (60) with $a = 1$, is needed until this critical distance is reached. Notice that the *critical window* here coincides with the critical window of the static phase transition for 2-SAT [17].

Finally, t^* is such that $d_2(t) = 1$, therefore

$$t^* = \epsilon_\alpha/\beta(p)N^{-1/3} + \mathcal{O}(N^{-2/3})$$

from equation (29), and the relevant scaling for time is

$$T = [t_2 + \epsilon_\alpha/\beta(p)]N^{2/3} \quad (72)$$

according to equation (60), where we replaced the notation t_0 with t_2 to emphasize that this scaling is proper to the 2-SAT family.

We have to solve equation (68) with this choice of scales and with proper initial and boundary conditions. Define

$$p_{\text{no-contr}}(\rightarrow t_2) := \pi(x_1 = 0, t_2). \quad (73)$$

This is the probability that the algorithm detects no contradiction from $T = 0$ up to the (rescaled) time t_2 . We shall send $t_2 \rightarrow +\infty$ at the end. In the case of the greedy UC algorithm, $1/[2(1-t^*)] = 1/2 + \mathcal{O}(N^{-1/3})$ and $e_2(t_2) = \beta(p)t_2 + \mathcal{O}(N^{-1/3})$, so that equation (68) reads:

$$\begin{aligned} \partial_{t_2}\pi(x_1, t_2) &= \frac{1}{2}\partial_{x_1}\pi(x_1, t_2) \\ &+ \left[\beta(p)t_2x_1 + \frac{x_1^2}{2} \right] \pi(x_1, t_2) - \sigma(t_2)x_1. \end{aligned} \quad (74)$$

In practice, we find it easier to perform an inverse Laplace transform of equation (68) before solving it; this amounts to work with probability density functions (PDFs) rather than with generating functions. In particular, the difficulty of computing σ that appears in equation (68) is turned into a boundary condition on the PDF that is easier to deal with.

If we plug the critical scaling of X_1 , equation (53), into the definition of the generating function $G_1(X_1)$ of C_1 :

$$\begin{aligned} G_1(X_1) &:= \sum_{C_1=0}^{+\infty} X_1^{C_1} P(C_1) \\ &= \sum_{C_1=0}^{+\infty} e^{-x_1 C_1 N^{-1/3} + \mathcal{O}(N^{-2/3})} P(C_1) \end{aligned} \quad (75)$$

and (in an heuristic way) change the discrete sum on C_1 into an integral on $c := C_1 N^{-1/3}$, letting N go to $+\infty$:

$$\pi(x_1) = \int_0^{+\infty} e^{-x_1 c} \rho(c) dc \quad (76)$$

where $\rho(c)$ is the probability density function (PDF) of c , we see that $\pi(x_1)$ is the Laplace transform of $\rho(c)$ with respect to c . Here we have dropped the time dependence, but $\rho(c, t_2)$ is actually a function of c and t_2 and the Laplace transform is taken at fixed time.

In terms of $\rho(c, t_2)$, equation (74) translates into

$$\partial_{t_2}\rho(c, t_2) = \frac{1}{2}\partial_c^2\rho(c, t_2) + \beta(p)t_2\partial_c\rho(c, t_2) - \frac{1}{2}c\rho(c, t_2). \quad (77)$$

This inverse Laplace transform can be performed only if the limit when $x_1 \rightarrow +\infty$ of the r.h.s. of equation (74) is zero. Writing from (76) the asymptotic expansion for $\pi(x_1, t_2)$ in terms of the density of clauses and its derivatives at the origin $c = 0$,

$$\pi(x_1, t_2) = \rho(0, t_2)/x_1 + \partial_c\rho(0, t_2)/x_1^2 + o(1/x_1^2) \quad (78)$$

and plugging it into equation (74), we find that $\sigma(t_2) = 1/2\rho(0, t_2)$ and $\rho(c, t_2)$ satisfies the boundary condition:

$$\frac{1}{2}\partial_c\rho(0, t_2) + \beta(p)t_2\rho(0, t_2) = 0. \quad (79)$$

Conversely, one verifies that equation (77) supplemented with the boundary condition equation (79) leads by direct Laplace transform to equation (74) where $\sigma(t_2)$ is replaced with $\rho(0, t_2)/2$.

Equation (77), supplemented with equation (79), is a reaction-diffusion equation on the semi-infinite axis of $c = C_1/(N-T)^{1/3} > 0$. At the initial time step $T = 0$, i.e. $t_{2\text{init}} = -\epsilon_\alpha/\beta(p)$, there are no 1-clauses, so that $\pi(x_1, t_{2\text{init}}) = 1$ for all x_1 and $\rho(c, t_{2\text{init}})$ is a Dirac δ distribution centered on $c = 0$: the diffusing particles all sit on the $c = 0$ point. Then, they start diffusing (second-derivative term in Eq. (77)) because new 1-clauses are produced randomly from 2-clauses when variables are assigned by the algorithm. This diffusion is biased: the drift term $\partial_c\rho(c, t_2)$ comes from the tendency of the algorithm to make 1-clauses disappear (to satisfy them). A picture of this process may be found in the upper-right inset of Figure 8, where the PDF ρ is shown *after normalization*. The total number of particles is not conserved: the absorption term $c\rho(c, t_2)$ results from the stopping of some runs of the algorithm, those where a contradiction (a 0-clause) is detected.

The probability that no contradiction has been encountered till time t_2 , $p_{\text{no-contr}}(\rightarrow t_2) = \pi(0, t_2) = \int_{c=0}^{+\infty} \rho(c, t_2)dc$, is a decreasing function of t_2 , smaller than unity.

5.2 Results for 2-SAT and its family

Unfortunately, we were not able to solve analytically equation (77). Our study relies on an asymptotic expansion of

the solution of this equation for large times t_2 and on a numerical resolution procedure to get results at finite times t_2 . This numerical resolution was in turn helped with an asymptotic expansion at small times t_2 .

Details about the large times t_2 expansion may be found in Appendix C. In short, we find that the probability that the greedy algorithm does not stop till time t_2 decays algebraically at large times,

$$p_{\text{no-contr}}(\rightarrow t_2) = \int_0^{+\infty} \rho(c, t_2) dc \propto t_2^{-\frac{1}{4\beta}}. \quad (80)$$

The leading order of the probability of success at the final time step $T = N$ can be guessed by replacing t_2 with $N^{1/3}$:

$$P_{\text{success}}[\alpha_R(p), p] \propto N^{-\frac{1}{12\beta}}, \quad (81)$$

an intermediate behaviour between the success (finite P_{success}) and failure ($-\ln P_{\text{success}} \propto N$) situations defined in Section 2.3.

The proportionality factor in equation (81) can be calculated through a numerical resolution of equation (77) for finite values of t_2 .

5.2.1 Numerical resolution of equation (77) at finite times t_2

We have solved the reaction-diffusion-like equation (77) thanks to a standard numerical resolution scheme (the Crank-Nicholson method) after some preliminary steps. First we discretized both time and ‘space’ (the semi-infinite axis of c). It is convenient to consider finite-support functions, and we have tried the changes of variables $b = 1/(c+1)$ and $b = \exp(-c)$; the latter turned out to be better. The range $]0, 1]$ for b was discretized into \mathcal{N} points. The Crank-Nicholson method allows us to take a time step $1/\mathcal{N}$ for the numerical resolution (quite efficient as compared to the time step $1/\mathcal{N}^2$ for Euler’s method), provided that the Courant condition is respected. With equation (77) this is not the case, since the coefficient of the drift term, $\beta(p)t_2$, is not bounded with growing t_2 . We actually consider $\tilde{\rho}(c, t_2) = \exp(-\beta ct_2 - \beta^2 t_2^2/6)\rho(c, t_2)$ rather than $\rho(c, t_2)$ so that the Courant condition is satisfied. What we have to solve now is

$$\begin{aligned} \partial_{t_2} \tilde{\rho}(b, t_2) = & \frac{b^2}{2} \partial_b^2 \tilde{\rho}(b, t_2) + \frac{b}{2} \partial_b \tilde{\rho}(b, t_2) \\ & - \left[\beta(p) - \frac{1 - X_0}{2} \right] \ln(b) \tilde{\rho}(b, t_2) \end{aligned} \quad (82)$$

with $X_0 = 0$ and for $0 < b \leq 1$, and with the boundary condition

$$\partial_b \tilde{\rho}(1, t_2) - \beta(p)t_2 \tilde{\rho}(1, t_2) = 0. \quad (83)$$

At initial time $t_{2\text{init}} = -\epsilon_\alpha/\beta(p)$, $\rho(c, t_{2\text{init}}) = \delta(c)$. The most relevant term in equation (77) is the diffusion term, and we expect c to grow like $\sqrt{t_2 - t_{2\text{init}}}$ typically¹². Therefore, we start our numerical resolution at

¹² See also equation (D.6).

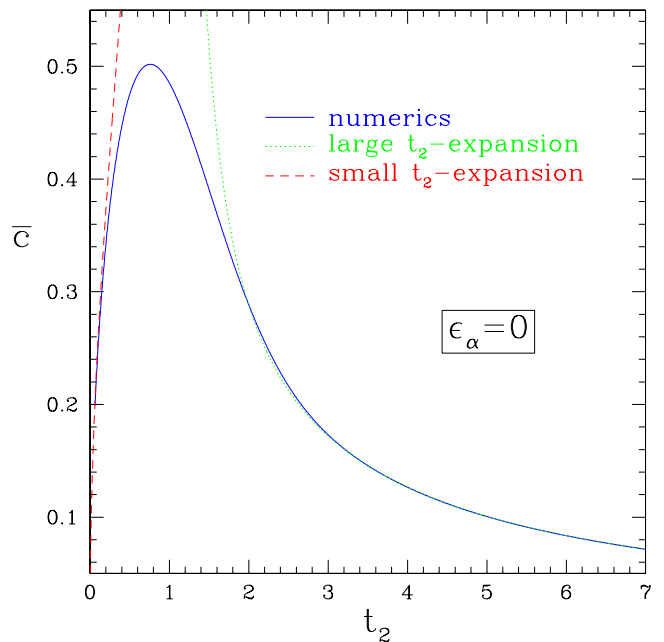


Fig. 4. Numerical data for $\bar{c}(t_2)$ in the case of critical 2-SAT ($\beta = 1$ and $\epsilon_\alpha = 0$), obtained by numerically solving equation (77). Comparisons with the analytical small- and large-times asymptotic expansions are shown.

time $t_{2\text{init}} + \mathcal{N}^{-1/2}$ so that a finite number of discretization points (instead of just the point on the $b = 1$ boundary) share the support of $\tilde{\rho}$. The initial condition is given by a short-time series expansion of the solution of equation (77). Details about this expansion are found in Appendix D.

We first tested our program by studying the linear equation (77), or more precisely equation (82) with X_0 set to 1. In this case, the distribution ρ is normalized to unity. We observed that this conservation rule is fulfilled by our numerical resolution scheme up to a small deviation of order $1/\mathcal{N}$, diverging with the simulation time t_2 . Therefore, we must be careful in our choice for the final time of the simulation. Moreover, when we plotted the conditional average $\bar{c}(t_2)$, we found a very good agreement with the analytical expansions at small and large times t_2 . This agreement was also observed for the non-linear equation (82) — see Figure 4. Therefore, we think that our numerical results are quite reliable, at least on finite time ranges.

5.2.2 Probability of success in the critical time regime and the scaling function H

As the numerical precision on $\bar{c}(t_2)$ is greater than on the total probability¹³, we have calculated the probability of success through the numerical results for \bar{c} . The

¹³ For instance, in the case of $X_0 = 1$, with $\mathcal{N} = 100$ and at $t_2 = 6.5$, the relative error on the total probability equals 6.8%, whereas it is only 2.5% on \bar{c} .

probability $\bar{\pi}(0, t_2)$ is indeed related to the values of $\bar{\tau}(t_2)$ by integrating equation (77) over c from 0 to $+\infty$, see equation (65):

$$\partial_{t_2} \ln p_{\text{no-contr}}(\rightarrow t_2) = -\bar{\tau}(t_2)/2 \quad (84)$$

where we have used the boundary condition equation (79). In practice, we integrated $\bar{\tau}$ numerically from $t_{2\text{init}}$ (which depends on p and ϵ_α) to $t_2 \approx 5$, and used our large- t_2 expansion (see Eq. (80) and Appendix C) for $t_2 > 5$, which yields

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(\rightarrow t_2; \epsilon_\alpha, p) = \frac{\ln t_2}{4\beta(p)} + H[\epsilon_\alpha, \beta(p)] + \mathcal{O}(t_2^{-3}) \quad (85)$$

with the following values for H at criticality ($\epsilon_\alpha = 0$): 0.24371 ± 10^{-5} for $p = 0$, 0.24752 ± 10^{-5} for $p = 1/7$, 0.20157 ± 10^{-5} for $p = 1/4$, -0.208 ± 10^{-3} for $p = 1/3$. These values are extrapolations to $\mathcal{N} = \infty$ of numerical results for a number of discretization points \mathcal{N} up to 1600. We checked that changing the end time of numerical integration from ≈ 5 to ≈ 10 did not change this extrapolation (although it notably affects the numerical integral for values of $\mathcal{N} \ll 1000$).

The behaviour of $p_{\text{no-contr}}$ in the critical time range is illustrated in the inset of Figure 6 in the case of 2-SAT. For $N = +\infty$ (continuous line), equation (85) yields the large- t_2 asymptote while data for small t_2 come from numerical results for equation (77). This compares well with results for finite sizes N from 25 to 1000 (points), even though the finite-size effects in $N^{-1/3}$ are large; for fixed t_2 , finite-size data converge to the $N = +\infty$ result but, on a series of data for fixed N , there is a cross-over from the time regime $T = t_2 N^{2/3}$ to the time regime $T = tN$ (where the correct scaling is illustrated in the main plot). The finite- N data were computed by direct solution of the evolution equation (34) for the generating function G_1 of C_1 , thanks to the technique exposed in Appendix E. They have no Monte-Carlo error but don't take into account the Gaussian fluctuations of c_2 .

H may be viewed as a scaling function of the parameter ϵ_α for the probability not to find a contradiction in the time scale $T = \Theta(N^{2/3})$. We computed along the same lines several values of H for various $\epsilon_\alpha \neq 0$ at fixed $p = 0$. Results are shown in Figure 5.

Let us check heuristically that the success and failure cases are recovered from the critical results when ϵ_α tends to $-\infty$ and $+\infty$ respectively; this amounts to precise the large- ϵ_α behaviour of the scaling function H . ϵ_α fixes the initial date $t_{2\text{init}} = -\epsilon_\alpha/\beta(p)$ in the time scale of t_2 and this in turn influences the value of H .

For $\alpha < \alpha_R(p)$ i.e. $\epsilon_\alpha = -\delta N^{1/3}$ for some fixed $\delta > 0$, $\bar{\tau}(t_2)$ reaches very quickly its asymptotic regime for large t_2 : $\bar{\tau}(t_2) \sim 1/(2\beta t_2)$, and we obtain

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(t_{2\text{init}} = \delta N^{1/3} \rightarrow tN^{1/3}) \approx \int_{\delta/\beta N^{1/3}}^{tN^{1/3}} \frac{dt_2}{4\beta t_2} = \frac{1}{4\beta} (\ln t - \ln \delta). \quad (86)$$

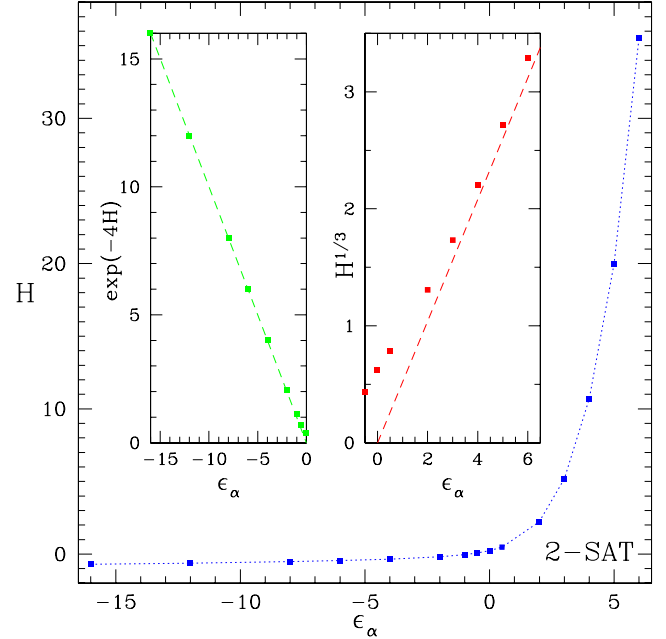


Fig. 5. Numerical results (dots) for the scaling function H of the probability $p_{\text{no-contr}}$ in the critical time scale as a function of the relative distance ϵ_α to the critical constraint-per-variable ratio, in the case of 2-SAT ($p = 0$, $\beta = 1$). The error bars are smaller than the symbol's size. The dotted line is a guide for the eye. Left inset: $y := \exp(-4H)$ is plotted vs. ϵ_α to show that, when $\epsilon_\alpha \rightarrow -\infty$, $H \sim -\ln(-\epsilon_\alpha)/4$. The straight line has equation $y = -\epsilon_\alpha$. Right inset: $H^{1/3}$ is plotted vs. ϵ_α to show that, when $\epsilon_\alpha \rightarrow +\infty$, $H \propto \epsilon_\alpha^3$. The straight line is a tentative linear fit.

$p_{\text{no-contr}}$ is finite, as expected in the success case. This computation shows that the scaling function H should behave like $-\ln(-\epsilon_\alpha)/(4\beta)$ for large negative ϵ_α ; this is confirmed numerically in the left inset of Figure 5.

Above the critical threshold, for $\epsilon_\alpha = +\delta N^{1/3}$ with $\delta > 0$, c is driven away from 0 at speed $\approx \delta/\beta N^{1/3}$ from time $t_2 = -\delta/\beta N^{1/3}$ to time 0 (see Eq. (77)), hence $c \approx \delta^2/\beta^2 N^{2/3}$ for a duration $\approx \delta/\beta N^{1/3}$. Hence,

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(t_{2\text{init}} = -\delta N^{1/3} \rightarrow t_2 = tN^{1/3}) \approx \frac{1}{12\beta} \ln N + \frac{\delta^3}{\beta^3} N. \quad (87)$$

$p_{\text{no-contr}}$ vanishes exponentially with N as expected. H should behave like ϵ_α^3 for large positive ϵ_α ; this is confirmed numerically in the right inset of Figure 5.

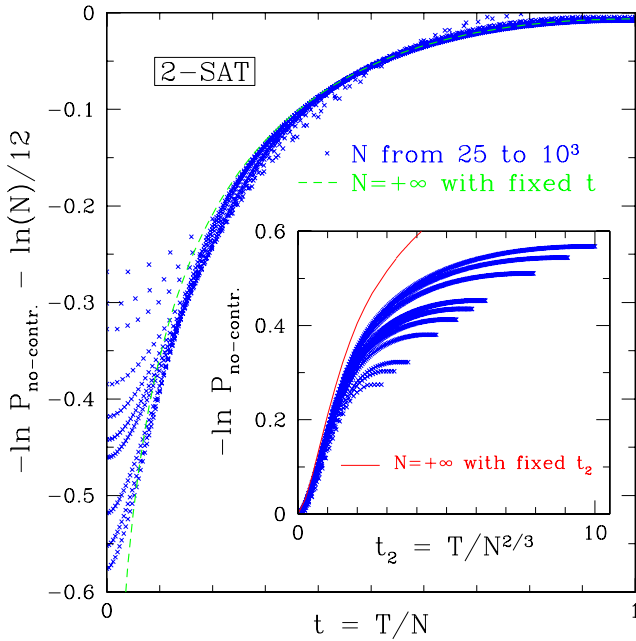


Fig. 6. Illustration of the two relevant time regimes for the probability $p_{\text{no-contr}}$ that no contradiction is found between $T = 0$ and some step T . Points are data for the exact solution of equation (34) in the case of 2-SAT at criticality ($\alpha = 1$) for sizes $N = 25, 37, 51, 101, 151, 201, 251, 501, 751$ and 1001 (increasingly close to the $N = +\infty$ asymptotic lines). Main plot: $-\ln p_{\text{no-contr}} - \frac{1}{12} \ln N$ is plotted vs. $t = T/N$. This quantity has a well-defined continuous limit when $N \rightarrow +\infty$ with fixed $t > 0$ (dashed line); see text for the computation of this limit. Because of the cross-over from the critical time-regime, convergence is non-uniform; finite-size effects are huge except if $T \gg N^{2/3}$. Inset: $-\ln p_{\text{no-contr}}$ is plotted vs. $t_2 = T/N^{2/3}$; it has a well-defined continuous limit when $N \rightarrow +\infty$ with fixed $t_2 > 0$ (solid line). Convergence is non-uniform; finite-size effects are huge in the cross-over regime $T \gg N^{2/3}$. Data for the solid line are from numerical solution of equation (77) and the asymptotic expression (85).

5.2.3 Matching together critical and non-critical time scales — final result for P_{success}

Equation (85) may be written as, setting $t_2 + \epsilon_\alpha/\beta = tN^{1/3}$,

$$-\ln P_{\text{success}}(T = 0 \rightarrow tN) = \frac{1}{4\beta(p)} \left(\frac{1}{3} \ln N + \ln t \right) + H[\epsilon_\alpha, \beta(p)] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{t^3 N}\right) + N^{-1/3} Q(tN^{1/3}, N) \quad (88)$$

where $Q(t_2, N)$ is bounded when $N \rightarrow +\infty$ with fixed t_2 ¹⁴.

The behaviour of $p_{\text{no-contr}}$ for times T of the order of N is illustrated in the main part of Figure 6 (for 2-SAT),

¹⁴ Q is like the sum of the asymptotic expansion of $-\ln P_{\text{success}}$ in powers of $N^{-1/3}$ without the leading term. Our aim is to precise how $Q(t_2, N)$ behaves when both t_2 and N go to $+\infty$.

where $-\ln p_{\text{no-contr}} - \frac{1}{12} \ln N$ is plotted as a function of t . The dashed line is the $N = +\infty$ result $\frac{1}{4}(\ln t - t) + H(0, 1)$ (see below for the expression of Q). Data for finite-sizes N (points) compare well with this result if $T \gg N^{2/3}$; otherwise there are strong finite-size effects and the critical time regime results are relevant (see inset).

Outside the critical regime, the probability that no contradiction is found can be calculated along the lines of Section 4.1. In the $N \rightarrow +\infty$ limit with fixed ratio T/N , the probability that no 0-clause is found between times $0 < t < 1$ and 1 satisfies

$$\begin{aligned} -\ln p_{\text{no-contr}}(T = tN \rightarrow N) &= \\ &= \int_t^1 \frac{d\tau}{4(1-\tau)} \frac{d_2(\tau)^2}{1-d_2(\tau)} + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \\ &= -\frac{\ln t}{4\beta(p)} + \int_t^1 d\tau f(\tau) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \quad (89) \end{aligned}$$

since the reasoning that led to equations (42) and (44) is still valid here: if $t_{\text{init}} > 0$ and $\alpha = \alpha_R(p)(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3})$ according to equation (71), we know that $d_2(t)$ is bounded away from 1 when $N \rightarrow +\infty$. Notice that the subdominant term in equation (89) is not of order $1/N$ like in equation (42) because we approximate α with α_R . The expression for function f ,

$$f(t) := -\frac{1}{4} - \frac{3pt}{8(1-p)} - \frac{9p^2}{4(2-5p)(3pt+2-5p)}, \quad (90)$$

is found from equations (37) and (29).

Comparing equation (89) and equation (88) yields

$$N^{-1/3} Q(tN^{1/3}, N) = F(t) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) + \mathcal{O}(t^{-3}N^{-1}) \quad (91)$$

where F is a primitive of f . Using this expression for Q in equation (88), setting $t = N^{-1/3}(t_2 + \epsilon_\alpha/\beta)$ and letting t_2 go to 0 shows that $F(0) = 0$. Finally, the probability of success P_{success} is

$$-\ln P_{\text{success}} = \frac{\ln N}{12\beta(p)} + H[\epsilon_\alpha, \beta(p)] + F(1) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \quad (92)$$

with

$$F(1) = \frac{\ln \beta(p)}{\beta(p)} - \frac{3p}{8(1-p)} - \frac{4-p}{16(1-p)}. \quad (93)$$

The corrections due to the fluctuations of C_2 , temporarily left aside, are of the order of, from equation (26),

$$\mathcal{O}(N^{\delta-4/3} \ln N)$$

(without the \ln factor if $X_0 = 1$) and

$$\mathcal{O}\left[N^{3/2-\delta} \exp(-N^{2\delta-1/2})\right]$$

where δ has to be in the range $]1/2, 2/3[$. They are negligible w.r.t. all other terms of equation (92). Notice that δ has opposite effects on the two corrections, as was anticipated in the discussion following equation (26).

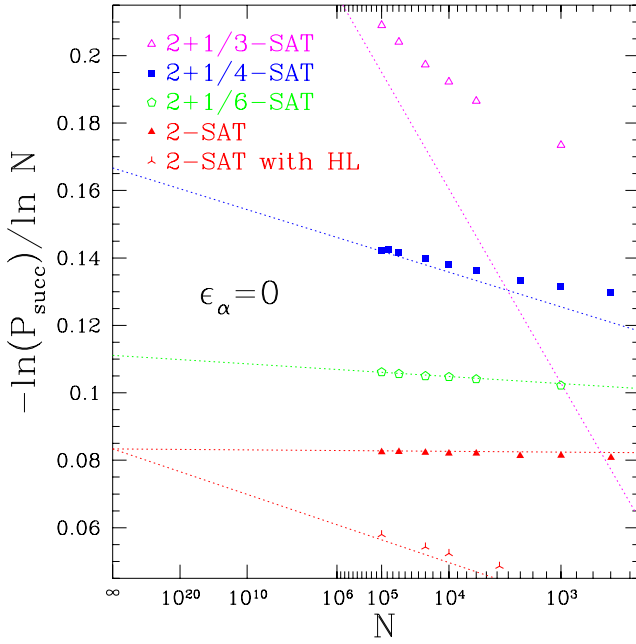


Fig. 7. Comparison of equations (94)–(97) (lines) with empirical estimates (symbols) for the probability of success of the greedy UC algorithm on instances of the random $2 + p$ -SAT problem at the critical initial constraint-per-variable ratio $\alpha_R(p)$ (i.e. $\epsilon_\alpha = 0$) for $p=0$, $p = 1/7$, $p = 1/4$ and $p = 1/3$, and data for the probability of success of the greedy HL algorithm [15] on instances of critical 2-SAT. The error bars are smaller than the symbols' sizes. Data for $-\ln P_{\text{success}}/\ln N$ are plotted against $1/\ln N$, and the straight lines come from our asymptotic analytical results, equations (94–97) (ignoring the $\mathcal{O}(N^{-1/3})$ terms), except for HL where it is a tentative extrapolation to $N = +\infty$.

Let us give precise values for some special cases, to illustrate the predictive power of our computation, although we have no analytical formula for H . For the greedy algorithm ($X_0 = 0$) at the critical point ($\alpha_R(p)$), $-\ln P_{\text{success}}$ equals, up to $\mathcal{O}(N^{-1/3})$,

$$\ln N/12 + 0.24371 \pm 10^{-5} - 1/4 \quad (94)$$

$$\ln N/9 + 0.24752 \pm 10^{-5} - 9/32 + \ln(3/4)/12 \quad (95)$$

$$\ln N/6 + 0.20157 \pm 10^{-5} - 5/16 - \ln(2)/4 \quad (96)$$

$$\ln N/3 - 0.208 \pm 10^{-3} - 11/32 - 3 \ln(2)/2 \quad (97)$$

for 2-SAT, 2+1/7-SAT, 2+1/4-SAT and 2+1/3-SAT respectively.

Figure 7 compares these results with empirical success probabilities, obtained by running the greedy UC algorithm on a large number ($4 \cdot 10^5$ to $3 \cdot 10^6$) of instances of random $2+p$ -SAT at critical initial clauses-per-variable threshold $\alpha_R(p)$ with sizes up to $N = 10^5$. Interpretation of the data could be difficult because finite-size effects are strong. But if we take into account the finite corrections to the $\ln N$ terms in equations (94)–(97), a very good agreement is found.

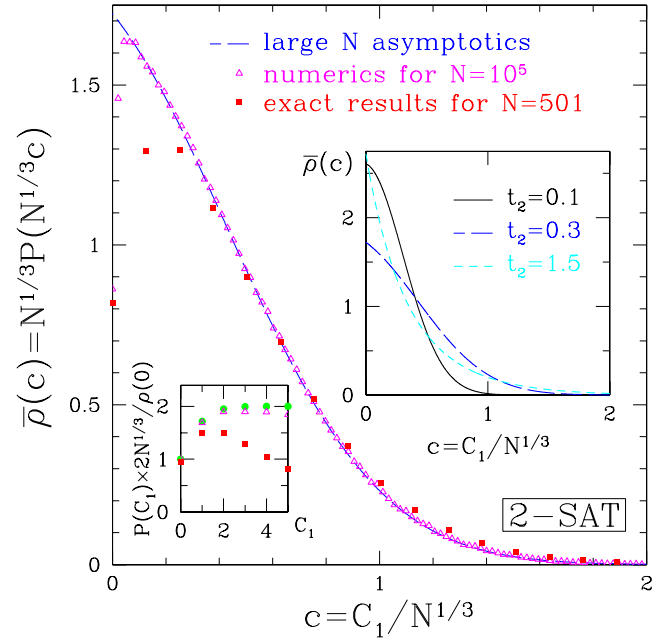


Fig. 8. The normalized PDF $\bar{\rho}$ of $c = C_1/N^{1/3}$ for 2-SAT at the critical initial clauses-per-variable ratio $\alpha = 1$ ($\epsilon_\alpha = 0$) and at $t_2 = 0.3$. Long-dashed line: limit result for $\bar{\rho}$ at $N = +\infty$. Dots: numerical results from $8 \cdot 10^5$ runs of the UC algorithm for $N = 10^5$ (Δ ; the error bars are smaller than the symbol's size) and results from the direct solution of equation (34) for $N = 501$ (\blacksquare) — see Appendix E. Lower-left inset: probability P (expressed in $N^{-1/3}\rho(0)/2$ units) that C_1 takes finite values at the $N = +\infty$ limit (\bullet). This shows how the discontinuity, at the scale of c , between $N^{1/3}P(C_1 = 0) = \sigma$ and $\lim_{c \rightarrow 0^+} \bar{\rho}(c) = 2\sigma$ is resolved at the scale of C_1 . Numerical data (same as for the main plot) converge to P when $N \rightarrow +\infty$. Upper-right inset: Normalized distributions $\bar{\rho}$ for $N = +\infty$ at times $t_2 = 0.1$ (solid line), $t_2 = 0.3$ (long dashes) and $t_2 = 1.5$ (short dashes).

5.2.4 The critical distribution of C_1

In the critical time regime (T of the order of $N^{2/3}$), the PDF of $c = C_1/N^{1/3} > 0$ is the solution ρ of equation (68). As a special case, the probability that no 1-clause is present is $\sigma \sim N^{-1/3}\rho(0)/2$. Convergence to this distribution, for $c > 0$ on one hand and for $c = 0$ on the other hand, is observed numerically — see Figure 8. The convergence is not uniform in the neighbourhood of $c = 0$, which is expected since the distribution ρ is singular in $c = 0$. There is rather a cross-over from the regime where $C_1 \ll N^{1/3}$ to the regime where C_1 is of the order of $N^{1/3}$. Equation (39) yields, going to the $d_2 \rightarrow 1$ limit (well-defined if $X_1 > 0$),

$$\pi_0(X_1) = \sum_{C_1} P(C_1) X_1^{C_1} = \frac{1 - X_1}{1 - X_1 \exp(1 - X_1)} \pi_0(0). \quad (98)$$

Hence (for large N with fixed X_1)

$$G_1(X_1) = N^{-1/3} \frac{\rho(0)}{2} \frac{1 - X_1}{1 - X_1 e^{1-X_1}} + o(N^{-1/3}). \quad (99)$$

The probabilities that C_1 takes the values 0, 1, 2, ... are given by the coefficients of the Taylor expansion, in $X_1 = 0$, of G_1 above. It is observed that these probabilities converge very quickly to $N^{-1/3}\rho(0)$, which coincides with the $c \rightarrow 0$ limit of the distribution ρ of $c = C_1/N^{1/3}$. These probabilities are plotted in the lower-left inset of Figure 8, together with numerical data for finite sizes. A good agreement is found.

5.2.5 Universality

For a given $p < 2/5$, all algorithms that use the UP rule fall into the same universality class (which depends on p). They share the result equation (92) with common H (but $F(1)$ is a non-universal correction), and the critical distribution of C_1 studied in Section 5.2.4.

The reason is two-fold: first, the analysis done so far in Section 5 is still valid for another heuristic than R, run on random instances of the $2+p$ -SAT problem, provided the critical trajectory starts on the $d_2 = 1$ line and is secant to it with some slope $\beta > 0$. Second, the value of β at *criticality* is universal and depends on p only, because, at criticality, the heuristic is almost never used and UP alone fixes the slope: even if the resolution trajectories of several heuristics may be quite different in general (compare e.g. Eqs. (29) for R and (31) for GUC), in the critical regime, the probability that $C_1 = 0$ and the heuristic is used is of the order of $N^{-1/3}$ only. Most of the time, the UP rule is used, and the resulting evolution of c_2 and c_3 is common to all algorithms: the slope of the critical trajectory is $\beta(p) = (2 - 5p)/[2(1 - p)]$ as for UC. We verified this by direct computation from equation (29) for R, equation (31) for GUC and the corresponding equations of reference [15] for HL and CL.

Figure 7 shows the agreement of empirical data for the HL heuristic, used on random 2-SAT instances, with the scaling of P_{success} that we derived for the R heuristic.

6 The 3-SAT class (stretched exponential class)

6.1 Equations and results for 3-SAT and its class

We now address the case $p > 2/5$. Here, the critical resolution trajectory starts *below* the $d_2 = 1$ line and gets tangent to it, at point $(p = 2/5, \alpha = 5/3)$ at a finite time, $t^* \in]0, 1[$. From equation (29), $d_2(t)$ is locally a parabola around t^* : $1 - d_2(t - t^*) \propto (t - t^*)^2$. The critical resolution trajectory is at distance $\Delta = N^{-1/3}$ of the $d_2 = 1$ line as long as $t - t^*$ is of order $\Delta^{1/2}$: the exponent a equals 1/2 here and the relevant equation is equation (69), not equation (68) as for 2-SAT. The computation is easier here (at least for the leading order) since we have an ordinary differential equation (the time enters into play only as a parameter of the coefficients of this ODE) rather than a partial derivatives equation. The relevant scaling for time is

$$T = t^*N + t_3N^{5/6} \quad (100)$$

according to equation (60) where we replaced the notation t_0 with t_3 to emphasize that this scaling is proper to the 3-SAT class.

As for 2-SAT, the critical regime extends to a non-empty range of values of α . This critical window is the same: we set

$$\alpha = \alpha_R(p)(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3}) \quad (101)$$

with finite ϵ_α . Indeed, if α is less than $\alpha_R(p)$ by more than $\Delta = N^{-1/3}$, because $d_2(t)$ is increasing proportionally with α (see Eqs. (28) and (29)), the resolution trajectory will be out of the critical region in particular at the time t^* where $d_2(t)$ is maximal since $1 - d_2(t) \gg \Delta$, and therefore at all times. Conversely, if α is above $\alpha_R(p)$ by a distance much greater than Δ , at time t^* $1 - d_2$ is an order of magnitude higher than the critical distance Δ , which implies that the resolution trajectory would stay for an infinite duration, on the scale of t_3 in equation (60) with $a = 1/2$, above the $d_2 = 1$ line – this would yield numerous contradictions (0-clauses) and let the probability of success be exponentially small.

6.1.1 Results for the critical time regime

We now have to solve equation (69). As for the 2-SAT family, we prefer to do computations on the (here normalized, or conditioned to success of the greedy algorithm) PDF $\bar{\rho}$ of the stochastic variable $C_1/N^{1/3}$ rather than on its generating function $\bar{\pi}$. Performing an inverse Laplace transform on equation (69) yields

$$0 = \frac{1}{2}\partial_c^2\bar{\rho}(c, t_3) + e_2(t_3)\partial_c\bar{\rho}(c, t_3) + \frac{1}{2(1 - t^*)}[\bar{c}(t_3) - c]\bar{\rho}(c, t_3) \quad (102)$$

with the boundary condition,

$$\frac{1}{2}\partial_c\bar{\rho}(0, t_3) + e_2(t_3)\bar{\rho}(0, t_3) = 0. \quad (103)$$

The parameters in equations (102) and (103) are $t^* = 5/6 - 1/(3p)$ and $e_2(t_3) = 36t_3^2p^2/(p + 2)^2 - \epsilon_\alpha$.

Here, the initial condition is mostly irrelevant: the initial step of the algorithm, $T = 0$ or $t^* \rightarrow -\infty$, is far out of the critical time region (finite t^*). When the resolution trajectory enters this region, the distribution of C_1 has already equilibrated to its critical value and is only subject to ‘adiabatic’ changes during the crossing of the critical region (Eq. (102) has no time derivative). Solving the ODE (102) brings out the explicit critical distribution of 1-clauses.

Let $u(c, t_3) := \bar{\rho}(c, t_3) \exp[e_2(t_3)c]$, $k(p) = [6p/(2 + p)]^{-1/3}$ and

$$z := \left[c - \bar{c}(t_3) + \frac{2 + p}{6p}e_2(t_3)^2 \right] / k(p). \quad (104)$$

Equation (102) is recast into an equation that admits Airy's Ai and Bi functions as linearly independent solutions:

$$\partial_z^2 u(z, t_3) - zu(z, t_3) = 0. \quad (105)$$

See references in [23] for studies of equation (105) in the context of (semi-classical) quantum mechanics or [24] in the context of Brownian motion (similar to our situation). Since u has to vanish for large z (because $\bar{\rho}(c, t_3) \rightarrow 0$ for large c) whereas Bi(z) is not bounded for large z , $u(z, t_3) = A(t_3)\text{Ai}(z)$ where A is a normalization coefficient. The boundary condition equation (103) reads

$$\text{Ai}'(z_0)/\text{Ai}(z_0) = -k(p)e_2(t_3) \quad (106)$$

where z_0 is expressed from equation (104) with $c = 0$. Let \mathcal{A} be the reciprocal function of Ai'/Ai . Inverting equation (106) yields an expression for $\bar{c}(t_3)$:

$$\bar{c}(t_3) = k(p)^3 e_2(t_3)^2 - k(p)\mathcal{A}[-k(p)e_2(t_3)] \quad (107)$$

and

$$\bar{\rho}(c, t_3) = A(t_3)e^{-e_2(t_3)c}\text{Ai}\{k(p)c + \mathcal{A}[-k(p)e_2(t_3)]\}. \quad (108)$$

We did not compute explicitly the normalization constant $A(t_3)$. The critical distribution $\bar{\rho}$ is plotted in Figure 9 for 3-SAT ($p = 1$) and several values of e_2 , to show the influence of the drift on its shape. The agreement with numerics is good; the same phenomenon in $c = 0$ as for the 2-SAT family is observed: at $N = \infty$, $\bar{\rho}$ is singular, and for finite N there is a cross-over from the regime $C_1 \ll N^{1/3}$ to the regime $C_1 = cN^{1/3}$ (see Sect. 5.2.4).

The probability that the greedy algorithm doesn't find a contradiction in the critical regime from time $t_3^{(1)}$ up to time $t_3^{(2)}$ satisfies, according to equation (64) and the discussion preceding it,

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(t_3^{(1)} \rightarrow t_3^{(2)}) = N^{1/6} \left[\mu(t_3^{(2)}) - \mu(t_3^{(1)}) \right] + \mathcal{O}(N^{-1/6}) \quad (109)$$

where, from equation (65) and the initial condition $p_{\text{no-contr}}(T = 0) = 1$, $\partial_{t_3} \mu = k(p)^{-3} \bar{c}(t_3)/2$ and $\mu(t_3) \rightarrow 0$ as $t_3 \rightarrow -\infty$. In the interesting situation where $t_3^{(1)} < 0 < t_3^{(2)}$, using the y variable such that $\text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y) := -k(p)e_2(t_3)$ rather than t_3 ,

$$\begin{aligned} \mu(t_3^{(2)}) - \mu(t_3^{(1)}) &= \frac{k(p)^{1/2}}{4} \\ &\times \left(\int_{\mathcal{A}[k(p)\epsilon_\alpha]}^{\mathcal{A}[-k(p)e_2(-t_3^{(1)})]} + \int_{\mathcal{A}[k(p)\epsilon_\alpha]}^{\mathcal{A}[-k(p)e_2(t_3^{(2)})]} \right) \\ &\times \frac{dy}{\sqrt{k(p)\epsilon_\alpha - \text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y)}} \left[\frac{\text{Ai}'(y)^2}{\text{Ai}(y)^2} - y \right]^2. \end{aligned} \quad (110)$$

Define (the integral is finite)

$$\Phi(x) := \frac{1}{4} \int_{\mathcal{A}(x)}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{x - \text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y)}} \left[\frac{\text{Ai}'(y)^2}{\text{Ai}(y)^2} - y \right]^2. \quad (111)$$

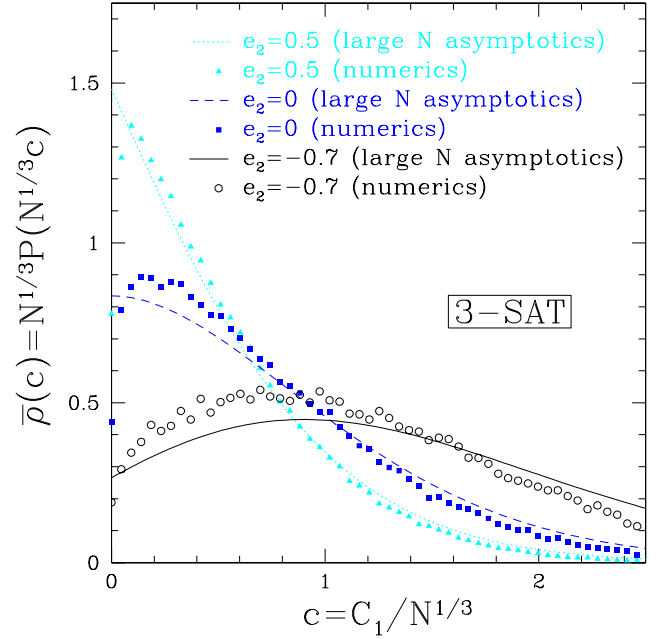


Fig. 9. Critical distributions $\bar{\rho}$ for $c = C_1/N^{1/3}$ in the case of 3-SAT with drifts $e_2 = 0.5$ (solid line, \circ), $e_2 = 0$ (dashed line, \blacksquare) and $e_2 = -0.7$ (dotted line, \triangle). Points are from numerical estimates with size $N = 10^4$.

For large positive $t_3^{(2)}$ (and similarly for large negative $t_3^{(1)}$),

$$\mu(t_3^{(2)}) - \mu(0) = \sqrt{k(p)}\Phi[k(p)\epsilon_\alpha] - \frac{k(p)^3}{4t_3^{(2)}} + \mathcal{O}(t_3^{(2)-5}) \quad (112)$$

where we have used a large- t_3 expansion of equation (107). From equation (100), t_3 is of order $N^{1/6}$ at most, thus equation (112) allows one to express μ in terms of Φ only, up to corrections of the order of $N^{-1/6}$. Anticipating that the non-critical time regime, like the success case in Section 4.1, brings contributions to $\ln P_{\text{success}}$ of order $\mathcal{O}(1)$ in N , the total probability of success (at time $T = N$) of the greedy UC algorithm reads

$$-\ln P_{\text{success}}[(1 + \epsilon_\alpha)\alpha_R(p), p] = N^{1/6} 2\sqrt{k(p)}\Phi[k(p)\epsilon_\alpha] + \mathcal{O}(1) \quad (113)$$

where the function Φ is closely related¹⁵ to the universal function introduced in reference [9]. It may easily be computed with a mathematical software and is plotted in Figure 10.

Let us heuristically check that the success and failure cases are recovered from the critical results when ϵ_α tends

¹⁵ To lighten notations here, we have rescaled the argument x and the value of Φ by constant coefficients w.r.t. reference [9]. Moreover, the new Φ is more universal: it is exactly the scaling function at the tricritical point $p = 2/5$, $\alpha = 5/3$ for all heuristics (both r_{H}^Φ and $r_{\text{H}}^{\epsilon_\alpha}$ equal one in this case) — see Section 6.2.

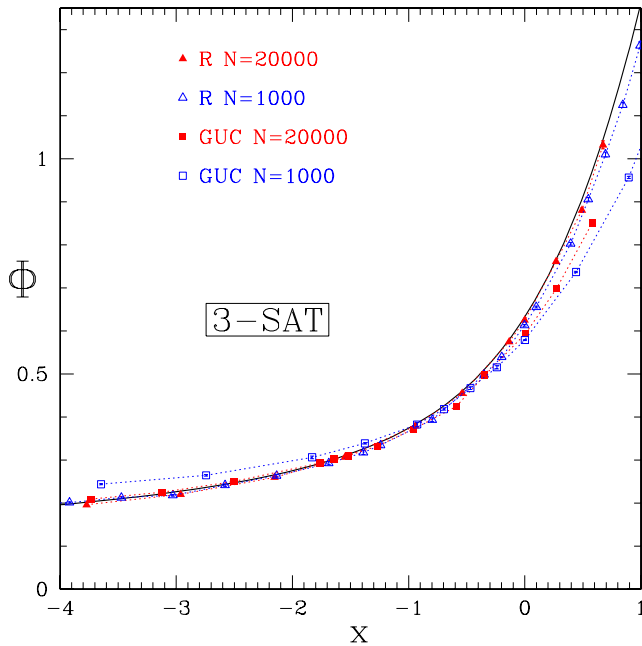


Fig. 10. Empirical data for the probability of success of the greedy algorithms with R and UC heuristics on 10^3 to 7×10^5 instances of the random 3-SAT problem, for several initial clauses-per-variable ratios. Error bars are smaller than the symbol's sizes. Dotted lines are guides for the eye. Data are plotted after rescaling their x and y axis with coefficients r^Φ and r^ϵ to compare them with universal scaling function Φ (solid line), according to equation (126).

to $-\infty$ and $+\infty$ respectively. Using the asymptotic expansions of Ai and Ai' [25,26], the asymptotic behaviour of Φ is found:

$$\Phi(x) \sim \frac{\pi}{8\sqrt{-x}} \quad \text{when } x \rightarrow -\infty$$

$$\Phi(x) = \frac{4}{15}x^{5/2} - a\frac{\sqrt{x}}{2} + o(\sqrt{x}) \quad \text{when } x \rightarrow +\infty$$

where $a \approx -2.338107410$ is the greatest zero of Ai on the real axis. Taking now $\epsilon_\alpha = N^{1/3}\epsilon$ shows that $-\ln P_{\text{success}} \approx \pi/(4\sqrt{-\epsilon})$ for $\epsilon < 0$, in agreement with equation (49), and $-\ln P_{\text{success}} \approx 4\epsilon N/15$, in agreement with the expected failure behaviour.

6.1.2 Matching critical and non-critical time scales — final result for P_{success}

Here we use a heuristic reasoning, based on what we learned from the study of the 2-SAT family. On the one hand, the results from the previous paragraph show that the probability no to find a contradiction between times t^*N and $T = t^*N + t_3N^{5/6}$ equals (with an obvious convention for negative t_3)

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = t^*N \rightarrow t^*N + t_3N^{5/6}) = N^{1/6} [\mu(t_3) - \mu(0)] + R(t_3, N) \quad (114)$$

where the function $R(t_3, N)$ (assumed to be regular) is bounded when $N \rightarrow +\infty$ with fixed t_3 . Setting $t_3 = (t - t^*)N^{1/6}$ and using equation (112),

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = t^*N \rightarrow tN) = N^{1/6} \sqrt{k(p)} \Phi[k(p)\epsilon_\alpha] - \frac{k(p)^3}{4} \frac{1}{t - t^*} + \mathcal{O}(N^{-1/6}) + R[(t - t^*)N^{1/6}, N]. \quad (115)$$

On the other hand, out of the critical time regime, we may modify equation (89) (with the expression of $d_2(t)$ for $\alpha = 5/3$) to compute the lost of success probability in the large N limit between given times on the scale of T/N . For $t < t^*$ and $t > t^*$ respectively,

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = 0 \rightarrow tN) = -\frac{k(p)^3}{4} \left(\frac{1}{t - t^*} + \frac{1}{t^*} \right) + \frac{1}{4} \ln \left(\frac{t^* - t}{t^*} \right) + \int_0^t d\tau f(\tau) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \quad (116)$$

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = tN \rightarrow N) = -\frac{k(p)^3}{4} \left(\frac{1}{1 - t^*} - \frac{1}{t - t^*} \right) + \frac{1}{4} \ln \left(\frac{1 - t^*}{t - t^*} \right) + \int_t^1 d\tau f(\tau) + \mathcal{O}(N^{-1/3}) \quad (117)$$

where f is the function

$$f(t) := -\frac{3p}{2(p+2)} - \frac{9p^2}{(p+2)^2}(t - t^*). \quad (118)$$

Equations (116–117) share with equation (115) a divergence in $1/(t - t^*)$, but they also have a logarithmic divergence that does not appear in equation (115). We speculate that, if we pushed the asymptotic expansion for large N that led to equation (114) one step further, we would find

$$R(t_3, N) = g(t_3) + S(t_3, N) \quad (119)$$

with $g(t_3) \sim \ln(|t_3|)/4$ when $t_3 \rightarrow \pm\infty$ and with $S(t_3, N)$ regular and bounded in the two limits, first $N \rightarrow +\infty$ with fixed t_3 , then $t_3 \rightarrow \pm\infty$. At this new order, the time-derivative term $\partial_{t_0} \bar{\pi}(x_1, t_0)$ that was canceled to write equation (69) becomes relevant. It yields a correction to the probability of success that originates physically from the slow, ‘secular’, evolution of the shape of the probability distribution \bar{p} of $c = C_1/N^{1/3}$: the solution of equation (69) is the distribution of c in a true stationary state, but here we have only a quasi-stationary situation (c is slowly driven) and the actual distribution is always delayed w.r.t. the perfectly equilibrated solution of equation (69).

With the assumption (119), equation (115) reads, for $t \geq t^*$,

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = t^*N \rightarrow tN) = N^{1/6} \sqrt{k(p)} \Phi[k(p)\epsilon_\alpha] \pm \frac{1}{24} \ln N \mp \frac{k(p)^3}{4} \frac{1}{t-t^*} \pm \frac{1}{4} \ln |t-t^*| \mp g(0) + \mathcal{O}(N^{-1/6}) + S[(t-t^*)N^{1/6}, N] \quad (120)$$

and comparing equation (120) with equations (116–117) yields

$$S[(t-t^*)N^{1/6}, N] = \begin{cases} F_<(t) + \mathcal{O}(N^{-1/6}) & \text{if } t < t^* \\ F_>(t) + \mathcal{O}(N^{-1/6}) & \text{if } t > t^* \end{cases} \quad (121)$$

where $F_<$ and $F_>$ are two primitives of f . Replacing expressions (119) and (121) with $t = t^* + t_3 N^{-1/6}$ in equation (114) and using the regularity of S in $t_3 = 0$ shows that

$$F_<(t) = F_>(t) = \int_{t^*}^t f(\tau) d\tau. \quad (122)$$

Finally, adding equation (120) for the two cases $t \geq t^*$ after making the substitution equation (122) yields the total probability of success of the greedy algorithm UC = UP + R for $p > 2/5$:

$$-\ln P_{\text{success}} = N^{1/6} 2\sqrt{k(p)} \Phi[k(p)\epsilon_\alpha] + E(p) + \mathcal{O}(N^{-1/6}) \quad (123)$$

with

$$E(p) = \frac{3p(p-4)}{2(p+2)^2} - \frac{3p}{2(5p-2)} + \frac{1}{4} \ln \left(\frac{6p}{5p-2} - 1 \right). \quad (124)$$

While the $N^{1/6}$ divergences of the two cases of equation (120) add up, the $\ln N$ divergences cancel out. Similarly, if we set $t = t^* - \tau$ in equation (116) and $t = t^* + \tau$ in equation (117), add the results and let $\tau \rightarrow 0$, the $\ln |t-t^*|$ divergences cancel out. This seems reasonable since the slow adaptation of the shape of \bar{p} is symmetric w.r.t. the time t^* : before t^* , the driving term in equation (69) pushes c away from 0 and the equilibration delay of the distribution of c makes the actual c smaller than the perfectly equilibrated c . Hence the $\ln N$ term in equation (120) for $t < t^*$ has a negative contribution to the probability of finding two contradictory 1-clauses. Conversely, after t^* , the driving pulls c towards 0 back. The delay of c makes it larger than what the perfectly equilibrated c would be. This yields a positive $\ln N$ correction in equation (120). The balance of the two slow adaptations is null for symmetry reasons.

The corrections due to the fluctuations of C_2 , temporarily left aside, have order, after equation (26),

$$\mathcal{O}[N^{\delta-4/3} \exp(-N^{1/6}\Phi)] \quad \text{and} \quad \mathcal{O}\left[N^{3/2-\delta} \exp(-N^{2\delta-1}/2)\right]$$

with possible choices of δ in the range $]1/2, 2/3[$. Taking δ in the range $]7/12, 2/3[$ ensures that both corrections are negligible w.r.t. all terms of equation (123).

The result (123) is compared to empirical success probabilities of the greedy UC = R + UP algorithm on a large number (2000 to 7×10^5) of instances of the random 3-SAT problem with sizes up to $N = 20000$ in Figure 10. In spite of strong finite-size effects (in $1/N^{1/6}$), there is an excellent agreement because equation (123) provides also the first subdominant term.

6.1.3 Universality

Any heuristic H run on a set of random instances with self-averaging C_2 and a typical C_2 such that, for a given initial constraint-per-variable ratio α , the resolution trajectory becomes tangent to the $d_2 = 1$ line at a finite time $t^* \in]0, 1[$ with

$$1 - d_2(t-t^*) \propto (t-t^*)^2 \quad (125)$$

has the same critical behaviour as R . Indeed, in such a case, the generating function for C_1 satisfies equation (34) and one may use critical scalings for the quantities C_1 , T , α and P_{success} to derive equation (102) from equation (34). In these scalings, the exponents are independent of H because the geometric situation expressed by equation (125) is the same as for heuristic R. Solving equation (102) yields the same scaling function Φ as for the R heuristic, i.e. there exists numbers α_H , r_H^Φ and $r_H^{\epsilon_\alpha}$ (that depend on H and p) such that¹⁶

$$-\ln P_{\text{success}}[\alpha_H(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3})] = N^{1/6} r_H^\Phi \Phi(r_H^{\epsilon_\alpha} \epsilon_\alpha) + E_H + \mathcal{O}(N^{-1/6}). \quad (126)$$

E_H is a non-universal correction (even the contribution from a primitive of the universal term $\ln |t-t^*|/4$ in equation (120) to E_H is not universal because t^* depends on H). Scaling relation (126) is expected to hold for most, if not all, algorithms using UP on random $2+p$ -SAT instances with $p > 2/5$. For GUC we performed analytic computations on the basis of equation (31). The values of the numbers above are, in the case of $p = 1$, i.e. random 3-SAT, with GUC heuristic:

$$\alpha_{\text{GUC}} \approx 3.003494331$$

$$\text{is such that } 3\alpha_{\text{GUC}}/2 - \ln(3\alpha_{\text{GUC}}/2) = 3$$

$$r_{\text{GUC}}^\Phi = \alpha_{\text{GUC}}^{-1/12} \alpha_{\text{R}}(1)^{1/12} 2^{5/6} \approx 1.764223038$$

$$r_{\text{GUC}}^{\epsilon_\alpha} = (3\alpha_{\text{GUC}}/4 - 1/2) \alpha_{\text{GUC}}^{-1/6} \alpha_{\text{R}}(1)^{1/6} 2^{-1/3} \approx 1.363750542$$

$$F_{\text{GUC}}(1) \approx -1.2438849.$$

Empirical data for the probability of success of the UP+GUC algorithm are compared with the universal function Φ in Figure 10 — as for heuristic R, the agreement is very good, despite strong finite-size effects.

¹⁶ For heuristic R, $r_{\text{R}}^\Phi = 2\sqrt{k(p)}$ and $r_{\text{R}}^{\epsilon_\alpha} = k(p)$.

Notice also that the point where the critical resolution trajectory gets tangent to the $d_2 = 1$ line is universal. At this point, the residual 2-clauses-per-unassigned-variables ratio $d_2 = \alpha(1 - p) = 1$ and the residual 3-clauses-per-unassigned-variables ratio $\alpha p = 3/2$ so that each affectation of variable through UP produces, in average, a new 2-clause from the remaining 3-clauses — this is why $d_2(t)$ has a vanishing derivative and the trajectory does not cross the $d_2 = 1$ line. Moreover, the resolution trajectory (e.g. its curvature) is locally the same for all heuristics since almost all time steps use UP; the chances that the heuristic rule is used in one step during the critical regime scale like $P(C_1 = 0) \sim N^{-1/3}$. Therefore, improving some heuristic may only affect the pre- and post-critical time regimes. A good heuristic is one that does its best to avoid the critical region, or to delay entering it as much as possible.

6.2 The special case of 2+2/5-SAT

6.2.1 The tricritical point ($p = 2/5, \alpha = 5/3$)

For $p = 2/5$, the critical window for α is the same as for 2- and 3-SAT, $\alpha = 5/3(1 + \epsilon_\alpha N^{-1/3})$. The critical resolution trajectory is tangent to the $d_2 = 1$ line so that $-\ln P_{\text{success}}$ scales like $N^{1/6}$ like in the 3-SAT class. In addition, the delay of the actual distribution \bar{p} of $c = C_1/N^{1/3}$ w.r.t. the fully equilibrated distribution that solves equation (69) contributes to the success probability with a non-vanishing subdominant $\ln N$ term. This is because, instead of reversing its direction, the driving of c is directed towards 0 during the whole algorithm's run, for the critical resolution trajectory starts *on* the $d_2 = 1$ line.

For times T of the order of $N^{5/6}$, equation (102) is relevant (with $t^* = 0$ and $e_2(t_3) = t_3^2 - \epsilon_\alpha$). In the expression (110), $k(p) = 1$ and $t_3^{(1)}$ has to be 0. This yields

$$-\ln P_{\text{success}} \left[\frac{5}{3}(1 + \epsilon_\alpha), \frac{2}{5} \right] = \Phi(\epsilon_\alpha) N^{1/6} + o(N^{1/6}). \quad (127)$$

The critical distribution \bar{p} of $C_1/N^{1/3}$ is the same as for the 3-SAT family, up to scaling factors.

As for 3-SAT, we did not compute directly the correction due to secular evolution of \bar{p} ¹⁷, but we deduced its contribution to the final result by comparison between the time scales of $t_3 = T/N^{5/6}$ and of $t = T/N$. For fixed t and large N , equation (120) reads here

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = 0 \rightarrow tN) = N^{1/6} \Phi(\epsilon_\alpha) + \frac{1}{24} \ln N - \frac{1}{4t} + \frac{1}{4} \ln t - g(0) + \mathcal{O}(N^{-1/6}) + S(tN^{1/6}, N) \quad (128)$$

¹⁷ This would be possible by keeping a further order in the expansion of equation (34) and supplementing equation (69) with a PDE where \bar{p} appears as a driving term.

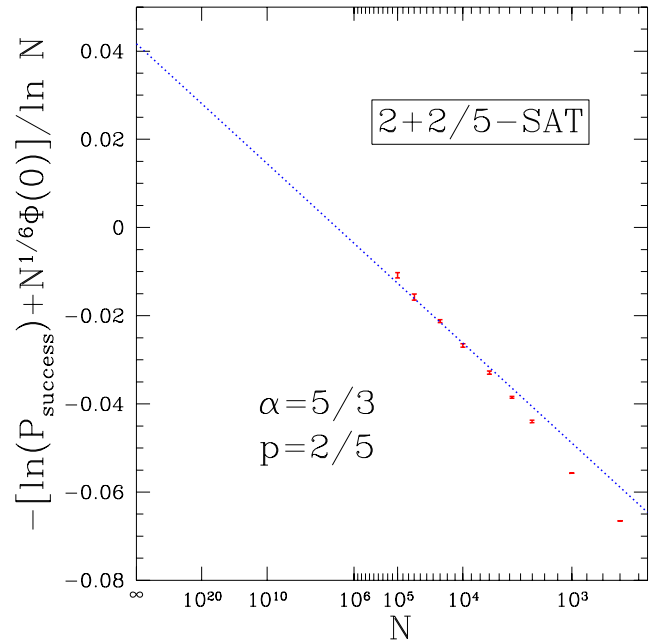


Fig. 11. Comparison of empirical estimates of P_{success} with prediction equation (130) for $\epsilon_\alpha = 0$. We plot $-\ln P_{\text{success}} + \Phi(0)/\ln(N)$ as a function of $1/\ln(N)$. The straight line is the analytical prediction, $1/24 - 5/8/\ln(N)$.

while equation (117) reads

$$-\ln p_{\text{no-contr}}(T = tN \rightarrow N) = \frac{1}{4} \left(\frac{1}{t} - 1 \right) - \frac{1}{4} \ln t - \frac{3}{8} + \frac{1}{4}t + \frac{1}{8}t^2 + \mathcal{O}(N^{-1/3}). \quad (129)$$

Thus $S(tN^{1/6}, N) = -t/4 - t^2/8 + g(0)$, and

$$-\ln P_{\text{success}} = N^{1/6} \Phi(\epsilon_\alpha) + \ln(N)/24 - 5/8 + o(1). \quad (130)$$

This expression compares well with numerical estimates in the critical $\epsilon_\alpha = 0$ case, see Figure 11.

As a side remark, in the range of time steps of the order of $N^{2/3}$, equation (77) with vanishing $\beta(p)$ is relevant. Numerical evidence shows that its solution ρ , once normalized, converges to the PDF \bar{p} that satisfies equation (102) with $e_2 = t^* = 0$, which is natural since \bar{p} is the stationary solution of equation (77). This equilibration process takes a finite range of time $T/N^{2/3}$, but a vanishing range of time t_3 : this is why the solution of equation (102) yields a finite value for $\bar{c}(t_3 = 0)$, whereas C_1 at $T = 0$ is 0.

For $p = 2/5$, the scaling function Φ is truly universal, in the sense that $r^{\epsilon_\alpha} = r^\Phi = 1$ for all heuristics. Indeed, the resolution starts already in the critical regime where UP is used at almost every step and the heuristic becomes irrelevant; the trajectory $d_2(t)$ is then locally universal.

6.2.2 Matching the 2-SAT family with the 3-SAT class

The refined scaling $p = 2/5(1 + \epsilon_p N^{-1/6})$ allows us to blow up the transition between the 2-SAT family where P_{success}

decays algebraically with exponent $\gamma(p)$ and the 3-SAT class where it decays as a stretched exponential. Now, the critical window for α is $\alpha = \frac{5}{3}(1 + \frac{2}{3}\epsilon_p N^{-1/6} + \epsilon_\alpha N^{-1/3})$, $e_2(t_3) = (t_3 - \frac{5}{6}\epsilon_p)^2 - \frac{1}{4}\epsilon_p^2 - \epsilon_\alpha$ and

$$-\ln P_{\text{success}} = N^{1/6}\Phi(\epsilon_\alpha, \epsilon_p) + \ln(N)/24 + \mathcal{O}(1)$$

with

$$\Phi(\epsilon_\alpha, \epsilon_p) = \frac{1}{4} \int_{\mathcal{A}[\epsilon_\alpha - \frac{4}{9}\epsilon_p^2]}^{+\infty} \frac{dy}{\sqrt{\epsilon_\alpha + \frac{1}{4}\epsilon_p^2 - \text{Ai}'(y)/\text{Ai}(y)}} \times \left[\frac{\text{Ai}'(y)^2}{\text{Ai}(y)^2} - y \right]^2 \quad (131)$$

for $\epsilon_\alpha \leq \frac{4}{9}\epsilon_p^2$ and $\epsilon_p \leq 0$. If we send ϵ_p to $-\infty$ (as e.g. $-N^{1/6}q$) with $\epsilon_\alpha \ll \frac{4}{9}\epsilon_p^2$, Φ behaves like $1/\epsilon_p$ and P_{success} is finite. This was expected since, in this case, we dive into the success region below the $d_2 = 1$ line. However, if we follow the $d_2 = 1$ line and set $\epsilon_\alpha = \frac{4}{9}\epsilon_p^2$, Φ behaves like $-\ln(\epsilon_p)/\epsilon_p$ and $-\ln P_{\text{success}} = \ln(N)[1/24 - 1/(20q)]$ to the leading order in N , which matches the singularity (51).

6.3 Case of K-SAT with $K \geq 4$

For general K , that is for random instances with initially N variables and C_2 2-clauses, C_3 3-clauses, ..., C_K K -clauses, $d_2(t)$ may become tangent to the $d_2 = 1$ line with an exponent greater than 2: $1 - d_2(t - t^*) \propto (t - t^*)^n$ with $n < K$, and the scaling exponent λ for $-\ln P_{\text{success}}$ may take the value $\frac{1}{3}(1 - \frac{1}{n})$. This happens when reduction of j -clauses into $j - 1$ -clauses compensates exactly the lost of $j - 1$ -clauses for $j \geq 4$, so that $d_2(t)$ stays longer close to the critical $d_2 = 1$ line. n is necessarily integer because c_2 is computed after solving a triangular system of equations like (27). When n is odd, the critical resolution trajectory crosses (with vanishing slope) the $d_2 = 1$ line, coming from the failure region ($d_2 > 1$) into the success one. Thus the critical behaviour may be reached only if the trajectory starts *on* this line (initial $C_2 = N$; otherwise, the trajectory stays for a number of time steps $0 \leq T \leq N$ of the order of N in the failure region $d_2 > 1$ and the probability of success vanishes exponentially), and $-\ln P_{\text{success}}$ is necessary accompanied with a $\ln N$ subleading term (because of the secular equilibration of the critical distribution of C_1 , like in the $2 + 2/5$ -SAT case).

The critical behaviour of the 2-SAT family is recovered if the initial clauses-per-variable ratios $\alpha_j = C_j/N$ are low enough, with initial $\alpha_2 = 1$, so that the resolution trajectory is secant to the $d_2 = 1$ line at time $t = 0$. The results for the R heuristic are universal (see Sect. 5.2.5) and equation (32) leads to

$$P_{\text{success}} \propto N^{\frac{1}{12(1 - \frac{3C_3}{2C_2})}} \quad (132)$$

provided $\alpha_2 = 1$, $\alpha_3/\alpha_2 < 2/3$, $\alpha_4/\alpha_3 < 1$, $\alpha_5/\alpha_4 < 6/5$, ..., $\alpha_K/\alpha_{K-1} < 2(K - 2)/K$.

As for $2+p$ -SAT, the critical initial clauses-per-variable ratios that yield a stretched-exponential behaviour are not universal, but the position where the resolution trajectory meets the $d_2 = 1$ hyperplane (with exponent n) in the space of the α_j 's is. It lies on the boundary of the region that inequalities above define: if $n = 2$, $\alpha_2 = 1$, $\alpha_3 = 2/3$ and $\alpha_4 < 2/3$. If $n = 3$, $\alpha_4 = 2/3$ additionally but $\alpha_5 < 4/5$, and so on. The trajectory can't reach tangentially the boundary twice (because, in the neighbourhood of the points where the boundary is hit tangentially, the flow is going away; coming for a second time to one of these points would need to re-increase some clauses-per-variable ratios, which is impossible precisely because of the inequalities above); thus $-\ln P_{\text{success}}$ can have at most one power-law divergence (i.e. only one power of N) and one $\ln N$ divergence (always present when n is odd).

In the situation where the greatest power of N that appears in $-\ln P_{\text{success}}$ is $(1 - 1/n)/3$, the technique of computation based on equation (26) may still be applied, provided that $\delta \in]2/3 - 1/(6n), 2/3[$. The shrinking of this interval as $n \rightarrow +\infty$ probably means that large deviations of c_2 for finite size N have more and more influence (on the statistics of C_1 and on P_{success}) as n is increased.

7 Discussion and perspectives

7.1 How well does UP estimate the ground state energy of $2 + p$ -SAT formulas?

At the critical initial constraint-per-variable ratio α , the probability P_{success} that an algorithm using the UP rule finds a satisfying assignment to a random formula vanishes algebraically with large N . In contrast, for 2-SAT and $\alpha = 1$, such a satisfying assignment exists with finite probability [17], that we numerically estimated to 0.907 ± 10^{-3} – see Appendix A. To this respect, even though the dynamic threshold of algorithms using the UP rule is *equal* to the static threshold $\alpha_C(p)$ for $p < 2/5$, they perform not very well *at* the threshold (at least for $p = 0$). But we argue here that they don't overestimate too much the minimum number of clauses that can be satisfied simultaneously in an instance of SAT. This number is also commonly referred to as the ground state energy of the instance. Finding it amounts to solve the so-called MAX-SAT optimization problem, and, like the SAT problem [2], this problem is classified as difficult by the computer scientists. It is known to grow like $(\alpha - \alpha_R)^3$ for $\alpha > \alpha_R$ [27].

If we allow the greedy algorithm to keep running even if 0-clauses are found, the final number C_0 of 0-clauses is an upper bound to the ground state energy. The average C_0 may be computed from the generating function G_{01} that satisfies equation (34) with $X_0 = 1$. Using non-zero values of X_0 doesn't modify substantially the computations of G_1 that we did so far. Equation (77) reads now

$$\partial_{t_2} \rho(c, t_2) = \frac{1}{2} \partial_c^2 \rho(c, t_2) + \beta(p) t_2 \partial_c \rho(c, t_2) - \frac{1 - X_0}{2} c \rho(c, t_2) \quad (133)$$

and equation (88) becomes

$$G_{01}(\rightarrow tN^{1/3}; X_0, X_1 = 1) = \frac{1 - X_0}{12\beta(p)} \ln N + \frac{\ln t}{4\beta(p)} + H[X_0, \epsilon_\alpha, \beta(p)] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{t^3 N}\right) \quad (134)$$

where H depends also on X_0 . Deriving equation (134) w.r.t. X_0 and setting $X_0 = 1$ yields

$$\langle C_0 \rangle(\rightarrow tN^{1/3}) = \frac{1}{12\beta(p)} \ln N + \partial_{X_0} H[X_0, \epsilon_\alpha, \beta(p)]|_{X_0=1} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{t^3 N}\right). \quad (135)$$

We know that, if $X_0 = 0$, $H[X_0, \epsilon_\alpha, \beta(p)]$ behaves like ϵ_α^3 for large positive ϵ_α . Assuming that the behaviour is the same for general X_0 , the average number of 0-clauses at the end of the critical time regime is

$$\langle C_0 \rangle(\rightarrow tN^{1/3}) \approx h(p)[\alpha - \alpha_R(p)]^3 N + \frac{1}{12\beta(p)} \ln N + \mathcal{O}(1) \quad (136)$$

for some universal number $h(p)$ (as in Sect. 5.2.5, in the critical regime the heuristic is almost never used, only UP is used, hence $h(p)$ is universal, or, in other words, independent of the heuristic). The subsequent non-critical time regime $N^{1/3} \lesssim T \leq N$ brings only a finite contribution to $\langle C_0 \rangle$. Therefore, algorithms using UP give an upper bound to the ground state energy of 2+ p -SAT problems with $p < 2/5$ that grows with α like $h(p)(\alpha - \alpha_R)^3$. This speculation agrees well with numerical results for the average C_0 at the end of runs of UC = UP + R or UP + HL on instances of 2-SAT, see Figure 12. The scaling $\langle C_0 \rangle \propto N^{1/12}$ is also numerically correct (not shown in the figure).

The exponent 3 in $h(p)(\alpha - \alpha_R)^3$ agrees with the (non-rigorous) results for the ground state energy of random 2-SAT computed in Section VI of [27]. However, the numerical estimate $h(0) \approx 0.27$ (see Fig. 12) is clearly different from the coefficient 0.15 computed in Section VI of [27]: the bound that UP provides is not tight¹⁸. As a side remark, general rigorous results [28, 29] show that, using techniques quite different from UP, one can design an algorithm running in polynomial time that finds, for any instance of random 2-SAT, an assignment which satisfies at least 93.1% of the number of clauses that can be satisfied simultaneously in that instance (let us call this number optimum of the instance; it is the difference between the number of clauses and the ground state energy). Conversely, it is proved impossible to find a polynomial time-algorithm that would, for each instance, satisfy simultaneously a number of clauses of at least $21/22 \approx 95.5\%$ of the optimum (for 3-SAT, these two bounds become $7/8$). For 2-SAT, our results state that, *in average*, the polynomial time greedy algorithms that use UP outperform

¹⁸ It might be that the exact ratio of $h(p)$ to the coefficient of the ground state energy is 2.

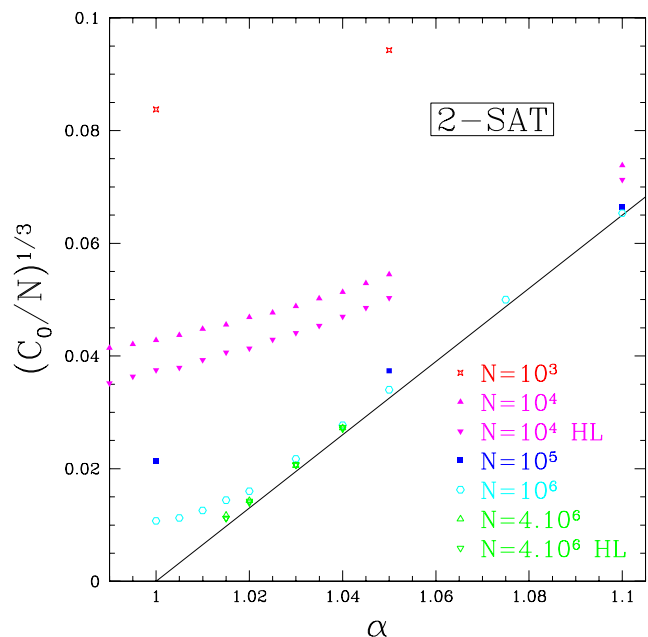


Fig. 12. Numerical test of the scaling relationship (136) for the UC=UP+R and UP+HL algorithms on 2-SAT (data are for heuristic R when not otherwise stated). The rescaled average number of 0-clauses $(\langle C_0 \rangle / N)^{1/3}$ is plotted vs. the initial clauses-per-variable ratio α . The error bars are smaller than the symbol's sizes. The solid line is a tentative fit with slope $0.65 \approx 0.27^{1/3}$. For $\alpha = 1$, finite-size effects are strong since $\langle C_0 \rangle$ decreases with N as $N^{-1/12}$, which is consistent with equation (136). Using the HL heuristic rather than the fully random R heuristic gives some improvement for finite sizes, but no improvement in the thermodynamic limit because the heuristic plays no role in the critical regime.

these worst-case bounds for α close to α_R (they satisfy in average a number of clauses that tends to the optimum as α tends to α_R , although on some rare instances they may perform badly). It might be interesting to know the average behaviour of the algorithms of [28, 29] and see whether they get closer to the ground state energy as algorithms based on UP.

7.2 Interpretation as a random graph percolation phenomenon

Introduction of the oriented graph \mathcal{G} representing 1- and 2-clauses allows us to re-interpret some of the scalings that we found in the previous sections. \mathcal{G} is made of $2(N - T)$ vertices (one for each variable x_i and its negation \bar{x}_i), C_1 marked vertices (one for each 1-clause z_i), and $2C_2$ edges ($z_i \vee z_j$ is represented by two oriented edges $\bar{z}_i \rightarrow z_j$ and $\bar{z}_j \rightarrow z_i$) [1, 17]. d_2 is simply the average (ingoing or outgoing) degree of vertices in \mathcal{G} .

A step of UP removes a marked vertex, say z , and its attached outgoing edges, after having marked its descendants (2-clauses with \bar{z} are reduced). If \bar{z} appears in some 3-clauses, these clauses become 2-clauses, i.e. new

pairs of edges in \mathcal{G} . UP-steps are repeated until no vertex is marked, then some vertex is marked according to the heuristic of the algorithm and another *round* of UP starts. During a round, there is a competition between the elimination of edges and vertices and the creation of new edges. All vertices in the (outgoing-edges) connected component of the initial \mathcal{G} that started with the first marked vertex are removed. In addition, the vertices that have been linked to this component through the new edges are also removed. A contradiction arises (a 0-clause appears) when two conjugate vertices z and \bar{z} are marked. When \mathcal{G} percolates (this happens for $d_2 \geq 1$ [30,17]), there exist many oriented loops going from one literal z to its conjugate and back to it [1]. Marking a vertex of such a loop results sooner or later in the marking of both z and \bar{z} , and the algorithm fails. Conversely, if \mathcal{G} doesn't percolate, there is no such loop with finite probability. The success/failure transition of the algorithms using UP is related to the percolation transition of \mathcal{G} ; if the value of d_2 is bounded away from 1, \mathcal{G} never percolates and the probability of success is finite. Although the results for percolation of random graphs were obtained in a static context, they apply readily to the graph \mathcal{G} that is kinetically built, because of conditional uniformity (see Sect. 3.1).

Notice that the percolation phenomenon of random graphs is very robust. For instance, taking random graphs conditioned to a certain degree distribution of the vertices [31] does not change the universality class if the probability of the large degrees decays not too slowly. Such (directed) graphs \mathcal{G} appear in the context of algorithms with the HL or CL heuristics that select literals according to their degrees. We have checked numerically for HL that the degree distribution in \mathcal{G} is far from the Poisson distribution that we find for non-conditioned \mathcal{G} 's (e.g. for R and GUC). Still, the probabilities of finding vertices of high degrees decrease fast and \mathcal{G} has the same percolation critical behaviour as a random graph. A parallel can be drawn between the robustness of the critical behaviour of random graphs and, in our computation, the weak dependence of the probability law for C_1 on that of C_2 (only the average of C_2/N matters thanks to self-averaging).

In the percolation critical window $|d_2 - 1| \sim N^{-1/3}$ [30,17], the probability that a vertex belongs to a component of size S is $Q(S) \sim S^{-3/2}$ [31], with a cut-off equal to the largest size, $N^{2/3}$. From Figure 3, departure ratios α have to differ from α_{flat} by $N^{1/3}$ for resolution trajectories to fall into the critical window. Hence the critical window in α has width $N^{-1/3}$ for both the 2-SAT family and the 3-SAT class.

When the resolution trajectory is tangent to the $d_2 = 1$ line (3-SAT class), it spends the time $\Delta t \sim \sqrt{|d_2 - 1|} \sim N^{-1/6}$ in the critical window, corresponding to $\Delta T = N \Delta t \sim N^{5/6}$ eliminated variables. Let S_1, S_2, \dots, S_J be the sizes of components eliminated by UP in the critical window; we have $J \sim \Delta T / (\int dS Q(S) S) \sim N^{1/2}$. During the j^{th} elimination, the number of marked vertices 'freely' diffuses, and reaches $C_1 \sim \sqrt{S_j}$. The probability that no contradiction occurs is $[(1 - q)^{C_1}]^{S_j} \sim \exp(-S_j^{3/2}/N)$

where $q \sim \frac{1}{N}$ is the probability that a marked vertex is the negation of the one eliminated by UP. Thus $-\ln P_{\text{success}} \sim \int dS Q(S) S^{3/2}/N \sim N^{1/6}$, giving $\lambda = \frac{1}{6}$. Notice that, while the average component size is $S \sim N^{1/3}$ (and thus the probability that C_1 vanishes in the critical time regime is $\sim N^{-1/3}$, consistently with Eq. (56)), the value of λ is due to the largest components with $S \sim N^{2/3}$ i.e. $C_1 \sim N^{1/3}$ marked vertices.

In the case of the 2-SAT family, the algorithm eliminates only $\Delta T \sim N^{2/3}$ variables and $J \sim N^{1/3}$ connected components. The estimation above yields a finite $-\ln P_{\text{success}}$ and fails to predict the correct answer because it doesn't take the $\ln N$ corrections into account.

For general K -SAT, one may attach to an instance a family of oriented hypergraphs where vertices are the literals and the l -clauses are l -hyperedges, for $2 \leq l \leq L$ and some fixed integer L between 2 and K . The first graph of this family, for $L = 2$, is \mathcal{G} . The critical behaviours exhibited in Section 6.3 appear when the first hypergraphs, $2 \leq l \leq L$ for some $3 \leq L \leq K$, percolate. This happens [32] for clauses-per-variable ratios $\alpha_l = 2^{l-1}/[l(l-1)]$ for $2 \leq l \leq L$; then $-\ln P_{\text{success}} \sim N^\lambda$ with $\lambda = \frac{1}{3}(1 - \frac{1}{L-1})$.

7.3 Unit-Propagation in other problems

The Unit-Propagation rule that we defined for SAT problems may easily be generalized to other contexts. In the graph coloring problem, one wants to know if the vertices of a given graph may be colored with K colors in such a way that no two vertices that share an edge have the same color. A family of algorithms that deal with such graphs processes the graph by maintaining the list of available colors on each vertex (initially the list of all K colors) [33, 34]. When a vertex is colored with some color, this color is removed from the list of available colors of the neighbours of this vertex. The UP rule would be defined as: "When, on the partially colored graph, at least one vertex has only one available color, color it with this color prior to any other action". We expect equation (34) to hold also for such graph coloring algorithms, after choosing a relevant value for C_2 . This value may be computed by the technique of differential equations [33,34] like in equations (27). The probability of success of the randomized, greedy coloring algorithms should behave like P_{success} for K -SAT; in particular, for the case of 3 colors, it should have a success-to-failure transition with critical behaviour in $N^{1/6}$.

Similarly, the study of greedy algorithms using UP for other hard *decision* computational problems [35] should lead to the same critical behaviour (that is, problems where the answer of the algorithm should be either "yes - satisfiable - colorable - ..." or "no - unsatisfiable - uncolorable - ...").

In the framework of error-correcting codes, the authors of reference [36] also found a critical behaviour that is governed by a Brownian motion with parabolic drift [24], which leads to Airy distributions, as we found for C_1 in Section 6.

There is another important family of problems, called *optimization* problems, where the answer is a number. For example, in the MAX-SAT problem, believed to be a hard computational problem, one wants to know, for some instance of SAT, the maximal number of satisfied clauses or, equivalently, the ground state energy, i.e. the minimal number of violated clauses over all assignments of variables of this instance. In the context of graph coloring, one may look for the minimal number of colors needed to color some graph, etc. Knowing whether their random formulation (where instances are drawn uniformly at random) fall into the same universality classes as the random SAT problem requires more investigation. However, each optimization problem has a *decision* version, which can be related to this work. For instance, the decision version of random MAX-2+p-SAT would be: “is there an assignment of the variables of this instance such that the number of violated clauses does not exceed some fixed number m ?” We can deal with it by asking for the probability that the greedy algorithm using UP ends, after having assigned all variables, with a number C_0 of 0-clauses that does not exceed m . As long as m is bounded in the large N limit, this new success probability can be computed by summing the 0th, 1st, 2nd, ..., m th derivatives of $G_{01}(X_0, 1; N|C_2)$ with respect to X_0 in $X_0 = 0$. A dynamic phase transition between success and failure phases is found as for the random 2+p-SAT problem and, both for $p < 2/5$ and $p \geq 2/5$, the largest term in the expression for $-\ln P_{\text{success}}$ at criticality is independent of m : the critical exponents are unchanged, although subdominant terms now depend on m (in particular, for $p < 2/5$, terms in $m \ln(\ln(N))$ appear in the expression of $-\ln P_{\text{success}}$ at criticality). We expect the exponents to remain the same for algorithms using UP on the decision version of other optimization problems. It would be interesting to know what happens when m is allowed to become large with N .

Another interesting question is whether instances of SAT (or other problems) with strong correlations, such that self-averaging of C_2 is lacking, would lead to new universality classes. This could be the case for instances of SAT such that \mathcal{G} can be embedded into a finite-dimensional space, or with a power-law distribution of the number of occurrences of variables in clauses, possibly built by preferential attachment of new variables to highly-connected old variables. Graphs with such features are observed in real-world applications such as the ‘World Wide Web’ or social networks; they might be helpful in modeling industrial instances of SAT better than the random, ‘flat’ distribution.

We thank Andrea Montanari and Federico Ricci-Tersenghi (who motivated the study in Section 7.1) for stimulating discussions. Partial financial support from the ‘Statistical physics of Information Processing and Combinatorial Optimization’ (STIPCO) Network of the Research Training Network programme of the European Commission and from the French Ministry of Research through the ‘ACI Jeunes Chercheurs’ ‘Algorithmes d’optimisation et systèmes désordonnés quantiques’ is acknowledged. We thank the Laboratoire de Physique

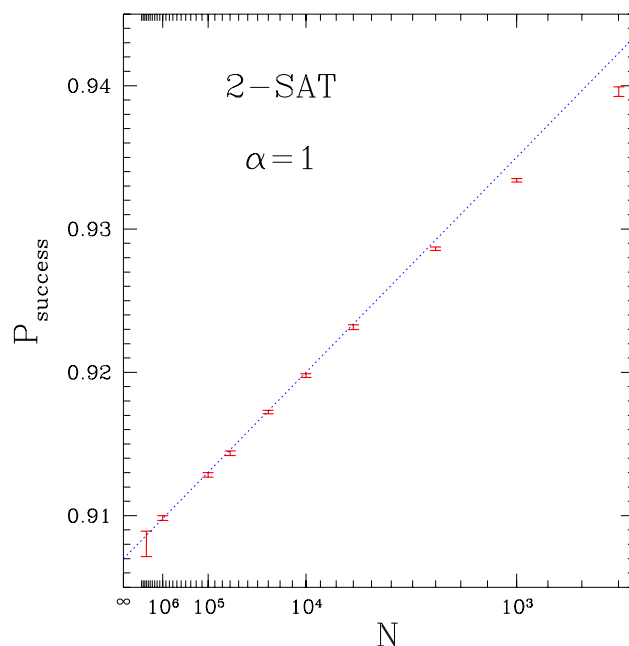


Fig. 13. Numerical estimates of the probability of satisfiability of critical ($\alpha = 1$) random 2-SAT formulas for different sizes N , plotted vs. $N^{-1/3}$. The straight line is a guess for the tangent to the curve at the point where it cuts the $N = \infty$ axis.

Théorique in Strasbourg, where part of this work was realized, for its hospitality.

Appendix A: Numerical estimate of the probability of satisfiability for critical 2-SAT

Reference [17] rigorously proves that the probability of a random 2-SAT formula of size N with initial constraint-per-variable $\alpha = 1$ is finite (whereas it vanishes for large N if $\alpha > 1$). A numerical estimate of this probability was given in Figure 5 of reference [18], but for very small sizes N (up to 90). We give here more precise results, based on numerical estimates of the probability of satisfiability for formulas of sizes $N = 500$ to 5×10^6 . For each size N up to 10^6 , we drew at random more than 3×10^6 instances (for $N = 5 \times 10^6$, we drew only 10^5) and we determined if they were satisfiable or not thanks to the well-known algorithm of reference [1]. This algorithm finds, by depth-first exploration, the strongly connected components of an oriented graph built from the 2-clauses, similar to the graph we introduced in Section 7.2. Results from the simulations are plotted in Figure 13. They appear to be fully consistent with the finite-size scaling hypothesis

$$P_{\text{sat}}(N) = P_{\text{sat}\infty} + \Theta\left(N^{-1/3}\right) \quad (\text{A.1})$$

and yield

$$P_{\text{sat}\infty} = 0.907 \pm 10^{-3}. \quad (\text{A.2})$$

Appendix B: Path-integral formalism for the kinetics of search

The standard, yet non-rigorous, technique of path integrals is another tool to study the search process. Let us re-derive some results of Sections 3 and 4.1 with it; this will show the correspondence between, on one hand, K-SAT related quantities and physical quantities such as moments, and, on the other hand, generating functions techniques and path-integral techniques, hopefully bringing more insights to both approaches.

We start from the evolution equation (7) and write the probability $P(T)$ that the search process doesn't produce any 0-clause from times 0 to T as an iteration (this quantity was $G(0, 1, 1, \dots, 1; T)$ in Sect. 3):

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{B}_T} P(\mathbf{B}_T; T) &= \sum_{\mathbf{B}_T} \sum_{\mathbf{B}_{T-1}} \dots \sum_{\mathbf{B}_1} M(\mathbf{B}_T \leftarrow \mathbf{B}_{T-1}; T-1) \\ &\times M(\mathbf{B}_{T-1} \leftarrow \mathbf{B}_{T-2}; T-2) \times \dots \times M(\mathbf{B}_1 \leftarrow \mathbf{C}_0; 0) \\ &= \sum_{\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_{T-1}} \sum_{\mathbf{B}_1, \dots, \mathbf{B}_T} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{y}_1}{(2\pi)^K} \dots \frac{d\mathbf{y}_T}{(2\pi)^K} \\ &\times \exp\left(\sum_{L=1}^T \hat{\mathbf{y}}_{\mathbf{L}} \cdot (\mathbf{B}_L - \mathbf{C}_L)\right) \prod_{L=0}^{T-1} M(\mathbf{B}_{L+1} \leftarrow \mathbf{C}_L; L) \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

with $\mathbf{C}_0 := (0, 0, \dots, 0, \alpha N)$ and $\hat{\mathbf{y}}^2 = -1$. All clause vectors are, in this Appendix, of dimension K instead of $K+1$ since the number of 0-clauses is always zero. The \mathbf{y}_L 's constrain the \mathbf{C}_L 's to mimic the \mathbf{B}_L 's, so that we can write the formally quadratic expression $M(\mathbf{B}_{L+1} \leftarrow \mathbf{B}_L; L)$ as the uncoupled expression $M(\mathbf{B}_{L+1} \leftarrow \mathbf{C}_L; L)$. Carrying out the sums over the \mathbf{B}_L 's first, we obtain

$$\begin{aligned} P(T) &:= \sum_{\mathbf{B}_T} P(\mathbf{C}_T; T) \\ &= \sum_{\mathbf{C}_1, \dots, \mathbf{C}_T} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\mathbf{y}_1}{(2\pi)^K} \dots \frac{d\mathbf{y}_T}{(2\pi)^K} \exp\left(-\sum_{L=1}^T \hat{\mathbf{y}}_{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{C}_L\right) \\ &\times \exp\left(\sum_{L=0}^T \ln[\mathbf{f}(\mathbf{X}_L; L)] \cdot \mathbf{C}_L\right) \\ &\times \prod_{L=0}^T \left[(1 - \delta_{(\mathbf{C}_L)_1, 0}) e^{-\hat{\mathbf{y}}_{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{C}_L} + \delta_{(\mathbf{C}_L)_1, 0} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

where $(\mathbf{X}_L)_i = \exp(\hat{\mathbf{y}}_{\mathbf{L}} \cdot \mathbf{C}_L)_i$, the vector-valued function $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots, f_K)$ is defined through (12) and the dot denotes the usual scalar product of \mathbb{R}^K . In the large N limit, a continuous formulation for $P(T)$ can be obtained. Let us define the reduced time, $\ell = L/N$ and the clause densities $\mathbf{c}(\ell) = \mathbf{C}(L)/N$. Define for $i = 1, \dots, K$

$$\gamma_j(\mathbf{y}; t) := \frac{j}{1-t} \left(\frac{e^{-y_j}(1 + e^{y_j-1})}{2} - 1 \right) \quad (\text{B.3})$$

with $y_0 := -\infty$, and $\gamma := (\gamma_1, \dots, \gamma_K)$. The probability P at time $T = tN$ can be written as a path integral over the

values of clause densities \mathbf{c} and (from now on complex) 'momenta' \mathbf{y} between times 0 and t ,

$$\begin{aligned} P(tN) &= \int_{\mathbf{c}(0)=(0,0,\dots,0,\alpha)}^{\mathbf{c}(t)=(c_1,c_2,\dots,c_K)} \mathcal{D}\mathbf{c}(\ell) \mathcal{D}\mathbf{y}(\ell) \\ &\times \exp\left(-N \mathcal{S}[\{\mathbf{c}(\ell), \mathbf{y}(\ell)\}]\right) \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

where the action reads

$$\begin{aligned} \mathcal{S}[\{\mathbf{c}(\ell), \mathbf{y}(\ell)\}] &= \int_0^t d\ell \left\{ \mathbf{y}(\ell) \cdot \frac{d\mathbf{c}}{d\ell}(\ell) - \gamma(\mathbf{y}(\ell); \ell) \cdot \mathbf{c}(\ell) \right. \\ &\left. - \ln[\rho_1(\ell) e^{-y_1(\ell)} + 1 - \rho_1(\ell)] \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

where $\rho_1(\ell)$ denotes the probability that there is at least one unit clause at time ℓ *i.e.* the number of instants L such that $C_1(L) \geq 1$ between $L = \ell N$ and $L = \ell N + \Delta L$, divided by ΔL , with $1 \ll \Delta L \ll L$. Minimization of the action (B.5) yields the classical equations of motion. Differentiating with respect to momenta, we find

$$\begin{aligned} \frac{\delta \mathcal{S}}{\delta y_i(\ell)} = 0 &\rightarrow \frac{dc_i}{d\ell}(\ell) = \sum_j \frac{\partial \gamma_j(\mathbf{y}(\ell); \ell)}{\partial y_i(\ell)} c_j(\ell) \\ &- \frac{\delta_{i,1} \rho_1(\ell)}{\rho_1(\ell) + (1 - \rho_1(\ell)) e^{y_1(\ell)}} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

for $i = 1, \dots, K$. Some care has to be brought to the minimization of the action with respect to the clause densities since ρ_1 and c_1 are not independent. During the time interval $[\ell, \ell + d\ell]$, the number C_1 of unit clauses is either of the order of N ($c_1 > 0$ and $\rho_1 = 1$) or of the order of unity ($c_1 = 0$ and $\rho_1 < 1$)¹⁹. With this caveat, we obtain

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta c_i(\ell)} = 0 \rightarrow \frac{dy_i}{d\ell}(\ell) = -\gamma_i(\mathbf{y}(\ell); \ell) \quad (i = 2, \dots, K) \quad (\text{B.7})$$

and

– if $c_1(\ell) > 0$, then $\rho_1(\ell) = 1$ and

$$\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta c_1(\ell)} = 0 \rightarrow \frac{dy_1}{d\ell}(\ell) = -\gamma_1(\mathbf{y}(\ell); \ell) \quad (\text{B.8})$$

– if $c_1(\ell) = 0$, then $\rho_1(\ell)$ is given by equation (B.6) for $i = 1$,

$$\frac{1}{\rho_1(\ell)} = 1 - e^{-y_1(\ell)} + e^{-y_1(\ell)} \left(\frac{\partial \gamma_2(\mathbf{y}(\ell); \ell)}{\partial y_1(\ell)} c_2(\ell) \right)^{-1}. \quad (\text{B.9})$$

Equation (B.9) makes sense if the r.h.s. is larger than unity. In the case where $y_1 = 0$, it agrees with equation (40).

¹⁹ This statement is true outside the critical regime where c_1 and ρ_1 are both vanishing as (negative) powers of N .

Appendix C: Large t_2 -expansion of the solution ρ of the PDE (77)

In this Appendix we explain the method we used to get an asymptotic expansion of the solution of equation (77) at large times t_2 , and we quote the results. Equation (77) is here treated in the general case $X_0 \in [0, 1]$ and reads

$$\partial_{t_2} \rho(c, t_2) = \frac{1}{2} \partial_c^2 \rho(c, t_2) + \beta(p) t_2 \partial_c \rho(c, t_2) - \frac{1 - X_0}{2} c \rho(c, t_2). \quad (\text{C.1})$$

First, we change the variables c and t for $u := ct_2$ and $s := 1/t_2$ respectively, and define g as $g(u, s) := \rho(c, t_2)$. This is motivated by the expectation that, at large times t_2 , both the drift term (that pushes diffusing particles towards the $c = 0$ boundary) and the absorption term (that kills situations where many particles are away from the $c = 0$ boundary) constrain the PDF ρ to be concentrated around the $c = 0$ boundary: $\rho(c, t_2)$ will be non-vanishing only for values of c that tend to 0 as $t \rightarrow +\infty$. With this choice of scale, equation (C.1) turns at the leading order in s when $s \rightarrow 0$ into

$$\partial_u^2 g(u, s) + 2\beta \partial_u g(u, s) = 0 \quad (\text{C.2})$$

$$\partial_u g(0, s) + 2\beta g(0, s) = 0 \quad (\text{C.3})$$

hence $g(u, s) = A(s) \exp(-2\beta u)$: c has at large times an exponential statistical distribution, with average (conditioned to success of the greedy algorithm) $\bar{c}(t_2) = 1/(2\beta t_2)$.

To actually compute the normalization factor $A(s)$, we need to introduce formally the correction to this leading-order term. Let $\rho(c, t_2) =: A(s) \exp(-2\beta u) + B(s)h(u, s)$ with the requirement $B(s) \ll A(s)$ as $s \rightarrow 0$. The leading-order terms in equation (C.1) (after cancellation of the formerly leading-order terms) satisfy

$$\begin{aligned} [-2\beta s u A(s) - s^2 \partial_s A + u s (1 - X_0) A(s)/2] \exp(-2\beta u) \\ = s^{-2} B(s) (\partial_u^2 h + \beta \partial_u h) \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

with the boundary condition $\partial_u h(0, s) + 2\beta h(0, s) = 0$. This yields, after integration from $u = 0$ to $+\infty$ (we assume that $h(u, s) \rightarrow 0$ when $u \rightarrow +\infty$ just like ρ does),

$$A(s) \propto s^{-1 + \frac{1-X_0}{4\beta}} \quad (\text{C.5})$$

and, for the leading order of $\rho(c, t_2)$ at large times:

$$\rho(c, t_2) \propto t_2^{-1 - \frac{1-X_0}{4\beta}} \exp(-2\beta c t_2). \quad (\text{C.6})$$

This shows that the probability of success of the algorithm decays algebraically at large times t_2 :

$$\pi(0, t_2) = \int_{c=0}^{+\infty} \rho(c, t_2) dc \propto t_2^{-\frac{1-X_0}{4\beta}}. \quad (\text{C.7})$$

Subleading orders in the expansion of ρ at large t_2 may be found iteratively by the same technique. For the sake of completeness, let us quote here what we found:

$$\begin{aligned} \rho(c, t_2) \propto t_2^{1-(1-X_0)/4\beta} e^{-2\beta c t_2} \\ \times \left[1 + \left(1 - \frac{1-X_0}{4\beta} \right) \left(c^2 t_2^2 - \frac{6\beta-1+X_0}{12\beta^3} \right) t_2^{-3} \right. \\ + \left(1 - \frac{1-X_0}{4\beta} \right) \left\{ \frac{c^2 t_2^2}{48\beta^4} [(6\beta^3 X_0 + 24\beta^4 - 6\beta^3) c^2 t_2^2 \right. \\ + (48\beta^3 + 8\beta^2 X_0 - 8\beta^2) c t_2 \\ + (-2\beta + 2X_0\beta + 2X_0 + 48\beta^2 - 1 - X_0^2)] \\ - \frac{6\beta-1+X_0}{1152\beta^7} \times (384\beta^2 - 50\beta + 50X_0\beta \\ \left. \left. - 1 + 2X_0 - X_0^2) \right\} t^{-6} + o(t^{-6}) \right] \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

and, for the conditional average of c :

$$\begin{aligned} \bar{c}(t_2) = \frac{1}{2\beta t_2} + \frac{4\beta - (1 - X_0)}{8\beta^4 t_2^4} \\ + \frac{5}{32\beta^7 t_2^7} [4\beta - (1 - X_0)] [5\beta - (1 - X_0)] + o(\beta^{-7} t_2^{-7}). \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Notice that the expansions here can only be asymptotic series, without a finite radius of convergence (as a function of $s = 1/t_2$), because they are independent of the initial conditions. Indeed, fix $\epsilon > 0$ and suppose that the sum of the expansion for ρ above is the right solution, up to a uniform small difference ϵ , on a finite interval of t_2 , say $]A, +\infty[$. Let $\rho_{\text{approx}}(c, t_2)$ be this sum of the expansion. Then ask for the solution of equation (77) that has initial condition $\rho(c, A+1) = \rho_{\text{approx}}(c, A+1) + 10\epsilon$: it should also be $\rho_{\text{approx}}(c, A+1)$ up to a difference ϵ — contradiction! Therefore, the precision of the approximations obtained with partial sums of the expansion above decreases as we try to get values for smaller and smaller times t_2 , and we should keep that in mind when we use the present results.

Appendix D: Small t_2 -expansion of the solution ρ of the PDE (77)

In this Appendix we explain the method we used to get an asymptotic expansion of the solution of equation (C.1) at small times t_2 , and we quote the results.

We use the exact solution of equation (C.1) without the non-linear term $c\rho(c, t_2)$ (that is, for the special value $X_0 = 1$) as a guide for a relevant choice of variables. Disregarding the boundary condition equation (79), we easily solve the resulting linear PDE thanks to Fourier transform:

$$\begin{aligned} \rho_{\text{linear}}(c, t_2) = \frac{\text{constant}}{\sqrt{t_2 - t_{2\text{init}}}} \\ \times \exp \left\{ -\frac{1}{2(t_2 - t_{2\text{init}})} \left[c + \frac{\beta(p)}{2} (t_2^2 - t_{2\text{init}}^2) \right]^2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

which suggests us to use the following variables for our expansion:

$$v := t_2 - t_{2\text{init}}, \quad u := \frac{c + \beta(p)/2(t_2^2 - t_{2\text{init}}^2)}{\sqrt{t_2 - t_{2\text{init}}}},$$

$$\rho(c, t_2) =: \frac{1}{\sqrt{v}} g(u, v).$$

The equations for g are

$$2v\partial_v g = \partial_u^2 g + u\partial_u g$$

$$+ \left[1 - (1 - X_0)v^{3/2}u + (1 - X_0)\beta(p)/2v^2(2t_{2\text{init}} + v) \right] \quad (\text{D.2})$$

$$\partial_u g[\beta(p)/2\sqrt{v}(2t_{2\text{init}} + v), v] =$$

$$- 2\beta(p)\sqrt{v}(t_{2\text{init}} + v)g[\beta(p)/2\sqrt{v}(2t_{2\text{init}} + v), v]. \quad (\text{D.3})$$

At $t_2 = t_{2\text{init}}$, i.e. at $v = 0$, g is Gaussian, as expected from the study of the linear equation (with $X_0 = 1$): $g(u, 0) = \sqrt{2\pi^{-1}} \exp(-u^2/2)$. Letting $v^\gamma h(u, v)$ be the deviation, at positive times v , between the exact g and this Gaussian expression, and substituting this into the equations for g , we see that the boundary condition constrains γ to the value $1/2$, and we are led to the ODE for $h(u, 0)$

$$\partial_u^2 h(u, 0) + u\partial_u h(u, 0) = 0 \quad (\text{D.4})$$

with boundary condition $\partial_u h(0, 0) = -2\beta(p)t_{2\text{init}}/\sqrt{2\pi}$. Adding the physical requirement that $h(u, 0) \rightarrow 0$ as $u \rightarrow +\infty$, we find the unique solution $h(u, 0) = \beta(p)t_{2\text{init}}[1 - \text{erf}(u/\sqrt{2})]$. Going on with this iterative process, we find that $\rho(c, v = t_2 - t_{2\text{init}})$ has the following expansion at small v :

$$\rho(c, v) = \sqrt{\frac{2}{\pi v}} \exp\left[-\frac{(c + \beta v w)^2}{2v}\right] \left[1 + 2\beta^2 t_{2\text{init}}^2 v \right.$$

$$- v(c + \beta v w) \left(\frac{3\beta}{4} + \frac{1 - X_0}{8} + 2\beta^3 t_{2\text{init}}^3 \right) + o(v) \Big]$$

$$+ \left(1 - \text{erf}\frac{c + \beta v w}{\sqrt{2v}} \right) \left\{ \beta t_{2\text{init}} - 2\beta^2 t_{2\text{init}}^2 (c + \beta v w) \right.$$

$$+ v \left(\frac{3\beta}{4} - \frac{1 - X_0}{8} + 2\beta^3 t_{2\text{init}}^3 \right) \left[\frac{(c + \beta v w)^2}{v} + 1 \right]$$

$$\left. \left. + o(v) \right\} \quad (\text{D.5})$$

where w stands for $(2t_{2\text{init}} + v)/2$. Hence the expression for the conditional average of c :

$$\bar{c}(t_2) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{t_2 - t_{2\text{init}}} - \frac{\beta(p)}{2} t_{2\text{init}} (t_2 - t_{2\text{init}})$$

$$+ \frac{\beta(p)^2}{6} \sqrt{\frac{2}{\pi}} t_{2\text{init}}^2 (t_2 - t_{2\text{init}})^{3/2}$$

$$+ (t_2 - t_{2\text{init}})^2 \left[\frac{9(1 - X_0) + 10\beta(p)}{32} \right.$$

$$\left. - \frac{2}{3\pi}(1 - X_0) \right] + \mathcal{O} \left[(t_2 - t_{2\text{init}})^{5/2} \right]. \quad (\text{D.6})$$

Appendix E: Direct numerical solution of the evolution equation (34) for the generating function G_1

For limited sizes N of the problem, equation (34) may be solved directly, with exact or high precision computer arithmetic. It may be used to compute the probability of success of the greedy algorithm from time steps 0 to T , $G_1(1, T)$ or the distribution of C_1 from the generating function G_1 .

We assume that $X_0 = 0$ and that C_2 is known (from e.g. Eq. (29)). At $T = N$, C_1 is either 1 or 0 and a useful set of values of X_1 in equation (34) is 0, 1 only. To compute $G_1(X_1, N)$ with $X_1 = 0$ or 1, it is enough to know $G_1(X_1, N - 1)$ with $X_1 = 0, 1/2$ or 1 after equation (12) (we set $X_0 = 0$). This in turns requires successively the values $G(X_1, T)$ for all $X_1 \in 0, 1/[2(N - T)], 1/(N - T), \dots, 1$. Starting from the known initial condition $G(X_1, 0) = 1$, it is possible to compute iteratively, from $T = 0$ to N , all values $G(k/[2(N - T)], T)$ for $0 \leq k \leq 2(N - T)$ (at each step, only $2(N - T) + 1$ numbers are stored). In practice, getting accurate results requires either doing exact arithmetics (which may be quite slow and/or memory consuming) or working with high precision floating point arithmetic (roughly speaking, the number of decimals digits has to be equal to N). This limited the range of N to a few hundreds on the computer we used (2.4GHz Pentium IV processor with 1GB of RAM).

Using rounded, integer values for C_2 rather than simply $N \times c_2$ from equation (29) makes computations much faster. In the case where exact arithmetic is used, it is needed to manage only rational numbers. For N large enough, it brings only a small error on G_1 .

If the number of 1-clauses at time T is bounded by $2(N - T)$, C_1 is a polynomial of degree at most $2(N - T)$. Knowing its $2(N - T) + 1$ values $G(k/[2(N - T)], T)$ is enough to compute it: G_1 may be expressed as a weighted sum of Lagrange interpolating polynomials. Finally, the coefficients of $G_1(X_1)$ indicate the probability law of C_1 . We used this technique to get the numerical results for the distribution of C_1 for 2-SAT with $N = 501$ that are plotted in Figure 8. Contrary to estimates based on runs of the very algorithms under study, it doesn't require averaging over many series since there is no randomness in the computation.

References

1. B. Aspvall, M.F. Plass, R.E. Tarjan, Inf. Process. Lett. **8**, 121 (1979)
2. C. Papadimitriou, K. Steiglitz, *Combinatorial Optimization* (Dover, 1998)
3. J. Franco, Ann. Oper. Res. **1**, 273 (1984)
4. J. Franco, R.P. Swaminathan, Ann. Math. Artificial Intelligence **20**, 357 (1997)
5. M.-T. Chao, J. Franco, Inform. Sci. **51**, 289 (1990)

6. D. Achlioptas, *Theor. Comp. Sci.* **265**, 159 (2001)
7. M.-T. Chao, J. Franco, *SIAM J. Comput.* **15**, 1106 (1986)
8. A. Frieze, S. Suen, *J. Algorithms* **20**, 312 (1996)
9. C. Deroulers, R. Monasson, *Europhys. Lett.* **68**, 153 (2004), e-print [arXiv:cond-mat/0405319](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0405319)
10. R. Monasson, R. Zecchina, S. Kirkpatrick, B. Selman, L. Toyansky, in *4th Workshop on Physics and Computation* (Boston University, 1996)
11. S. Kirkpatrick, B. Selman, *Science* **264**, 1297 (1994)
12. B. Selman, S. Kirkpatrick, *Artificial Intelligence* **81**, 273 (1996)
13. D. Achlioptas, L.M. Kirousis, E. Kranakis, D. Krizanc, *Theor. Comp. Sci.* **265**, 109 (2001)
14. O. Dubois, Y. Boufkhad, J. Mandler, *Typical random 3-sat formulae and the satisfiability threshold*, in *Proc. 11th ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms* (2000), pp. 126–127
15. A.C. Kaporis, L.M. Kirousis, E.G. Lalas, *The probability analysis of a greedy satisfiability algorithm*, in *Proc. 10th Ann. European Symp. on Algorithms* (2002), pp. 574–585
16. D.B. Wilson, *Random Structures and Algorithms* **21**, 182 (2002), e-print [arXiv:math.PR/0005136](https://arxiv.org/abs/math.PR/0005136)
17. B. Bollobás, C. Borgs, J.T. Chayes, J. Han Kim, D. Bruce Wilson, *Random Structures and Algorithms* **18**, 201 (2001)
18. H. Shen, H Zhang, *An empirical study of max-2-sat phase transition*. in *Proc. of LICS'03 Workshop on Typical Case Complexity and Phase Transitions* (Ottawa, Canada, 2003)
19. M. Davis, H. Putnam, *J. ACM* **7**, 201 (1960)
20. G. Dequen, O. Dubois, *Lect. Notes Comput. Sci.* **2919**, 486 (2004)
21. D. Achlioptas, G.B. Sorkin, *Optimal myopic algorithms for random 3-SAT*, in *IEEE Symposium on Foundations of Computer Science* (2000), pp. 590–600
22. N.C. Wormald, *Ann. Appl. Probab.* **5**, 1217 (1995)
23. J.R. Albright, *J. Phys. A – Math. Gen.* **10**, 485 (1977)
24. P. Groeneboom, *Probability Theory and Related Fields* **81**, 79 (1989)
25. M. Abramowitz, I.A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 9th edn. (Dover, New York, 1964)
26. H.J. Silverstone, S. Nakai, J.G. Harris, *Phys. Rev. A* **32**, 1341 (1985)
27. R. Monasson, R. Zecchina, *Phys. Rev. E* **56**, 1357 (1997), e-print [arXiv:cond-mat/9606215](https://arxiv.org/abs/cond-mat/9606215)
28. J. Håstad, *Some optimal inapproximability results*. in *STOC'97: Proceedings of the twenty-ninth annual ACM symposium on Theory of computing* (New York, NY, USA, ACM Press, 1997), pp. 1–10
29. J. Håstad, *J. ACM* **48**, 798 (2001)
30. S. Janson, T. Łuczak, A. Ruciński, *Random Graphs* (Wiley, 2000)
31. M.E.J. Newman, S.H. Strogatz, D.J. Watts, *Phys. Rev. E* **64**, 026118–1–17 (2001)
32. C. Goldschmidt, *Annals of Probability* **33**, 1573 (2005), e-print [arXiv:math.PR/0401208](https://arxiv.org/abs/math.PR/0401208)
33. D. Achlioptas, M. Molloy, *The analysis of a list-coloring algorithm on a random graph*. in *FOCS'97: Proceedings of the 38th Annual Symposium on Foundations of Computer Science (FOCS'97)* (Washington, DC, USA, IEEE Computer Society, 1997), pp. 204–212
34. L. Ein-Dor, R. Monasson. *J. Phys. A – Math. Gen.* **36**, 11055 (2003)
35. M.R. Garey, D.S. Johnson, *Computers and Intractability: a guide to the theory of NP-completeness* (W.H. Freeman and Co., New York, 1979)
36. A. Amraoui, A. Montanari, T.J. Richardson, R.L. Urbanke, *Finite-length scaling for iteratively decoded ldpc ensembles*, in *Proc. 41th Annual Allerton Conference on Communication, Control and Computing, Monticello, IL, Oct 2003, 2004*, e-print [arXiv:cs.IT/0406050](https://arxiv.org/abs/cs.IT/0406050)



Deuxième partie

La durée de vie de l'état métastable du processus de contact

Résumé. Nous décrivons dans cette partie un formalisme pour étudier des processus définis uniquement par des règles cinétiques et nous l'appliquons au calcul perturbatif (en grande dimension d'espace) de la fonction de grandes déviations de l'état métastable du processus de contact. Le chapitre 7 discute des exemples de tels processus et introduit le processus de contact. Le chapitre 8 motive puis décrit le formalisme que nous avons introduit ; il est semblable à la théorie de champ moyen dynamique (*Dynamic Mean-Field Theory* ou DMFT) utilisée en physique des systèmes d'électrons fortement corrélés dans les solides. Enfin le chapitre 9 donne des applications de ce formalisme, principalement au processus de contact.

Chapitre 7

Processus stochastiques définis par des règles cinétiques

DANS toute cette partie, nous appelons un *processus* un ensemble de configurations (au sens vu dans l'introduction pour les modèles statistiques statiques) muni de règles de transition indiquant quelle configuration succède à une configuration donnée. Ainsi, étant donné une configuration de départ, on peut construire une fonction qui, à un paramètre discret ou continu appelé la date (ou le temps) et souvent noté t , associe une configuration : il suffit d'appliquer répétitivement les règles de transition en partant de la configuration de départ et de la date initiale. Les règles de transition peuvent être de nature stochastique (par exemple, « si l'on est dans la configuration une telle, tirer au sort uniformément un nombre entre zéro et un exclus ; le successeur de cette configuration est telle configuration ou telle autre selon que ce nombre est supérieur strictement à deux tiers ou non »). En ce cas, le processus est dit *stochastique* (dans le cas contraire, il est dit *déterministe*). Les règles de transition sont appelées *cinétique*, même si l'on rencontre fréquemment le nom de *dynamique* dans la littérature ou le langage courant. Nous préférons réserver ce dernier nom aux cas où l'on peut définir des *forces* au sens où la mécanique l'entend, de même qu'en chimie l'on parle de cinétique (de réaction) plutôt que de dynamique.

7.1 États d'équilibre de modèles définis par un hamiltonien : rappels

De nombreux modèles de la physique statistique sont définis par un hamiltonien (noté H), par exemple le modèle d'Ising vu en introduction. Un tel modèle est la donnée de la description géométrique des configurations du modèle et de la fonction H , qui associe un nombre (l'énergie) à toute configuration du modèle et à toute valeur des champs extérieurs éventuellement présents (ces champs, comme la pression, le champ magnétique, *etc.* modélisent l'influence de l'environnement du système). Dans une étude de l'*état d'équilibre* du système physique modélisé, il est supposé que ce système évolue dans le temps de façon éventuellement compliquée mais suivant la dynamique hamiltonienne associée à H (que nous ne définirons pas ici) et qu'il atteint de toute façon une situation d'équilibre (ou s'en rapproche asymptotiquement), à laquelle on s'intéresse uniquement, où la probabilité de chacune des configurations est bien définie et constante dans le temps et où toutes les configurations du système compatibles avec ses paramètres macroscopiques fixés (par exemple son volume si le système est confiné dans une enceinte) sont atteintes, fût-ce rarement (propriété appelée ergodicité). Il s'agit bien ici d'une *dynamique* et non d'une simple *cinétique* car une évolution hamiltonienne fait intervenir des *forces*. Par exemple, dans le cas d'un modèle s'inscrivant dans le cadre de la mécanique classique et qui fait intervenir N particules ponctuelles de masses m_i qui interagissent deux par deux selon une énergie potentielle V , les degrés de liberté du système étant paramétrés par les variables de position q_i et les variables de moments p_i , $1 \leq i \leq N$, H est de la forme

$$H(q_1, q_2, \dots, q_N, p_1, p_2, \dots, p_N) := \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \sum_{1 \leq i < j \leq N} V(q_i - q_j)$$

et les lois d'évolution des variables avec le temps t sont les équations différentielles, appelées équations de Hamilton-Jacobi,

$$\begin{aligned}\frac{dq_i}{dt} &= \partial_{p_i} H \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\partial_{q_i} H.\end{aligned}\tag{7.1}$$

On reconnaît dans la deuxième équation l'expression mathématique du principe fondamental de la dynamique : le taux d'augmentation de la quantité de mouvement p par unité de temps est égal à la force $-\partial_q V$. Une telle évolution conserve l'énergie, c'est-à-dire que cette grandeur ne peut varier que par échanges entre le système et son environnement ; elle est constante dans le temps si le système est isolé. On souhaite calculer les propriétés du système physique dans cet état d'équilibre, c'est-à-dire les valeurs moyennes, moments, fluctuations, fonctions de corrélation, *etc.* d'observables définies sur les configurations du modèle. Par définition de l'état d'équilibre d'un système hamiltonien, ces grandeurs ne dépendent pas du temps et de l'histoire du système (c'est-à-dire de la façon dont il est arrivé dans cet état, pourvu qu'il y arrive) ; mieux : comme on va le voir, on peut les calculer sans connaître explicitement les lois d'évolution du système. C'est ce qui justifie l'intérêt particulier de l'étude des états d'équilibre (il y en a infiniment moins que des évolutions de systèmes hors d'équilibre, donc il est en principe plus facile de les reproduire expérimentalement, de les recenser, de s'en servir pour comparer les systèmes, *etc.*). De plus, la connaissance de l'état d'équilibre permet de déduire des renseignements sur des propriétés du système dans une situation proche de l'équilibre (par exemple sur la façon dont on s'en approche), grâce à des outils tels que le théorème de fluctuation-dissipation. En effet, quand le système est dans son état d'équilibre il n'est en général pas figé mais fluctue (selon la dynamique hamiltonienne), et il n'y a pas de différence intrinsèque entre un système qui évolue, à l'équilibre, d'une configuration peu probable atteinte lors d'une fluctuation vers une configuration plus probable (« typique »), et un système proche de l'équilibre qui évolue d'une configuration typique de son état hors équilibre actuel vers une configuration typique de son état d'équilibre.

Les présupposés cités ci-dessus ne sont pas vrais pour tous les systèmes. Par exemple, si l'univers (dont beaucoup s'accordent à penser que l'évolution est hamiltonienne) est indéfiniment en expansion cosmologique, quel est son état d'équilibre ? La probabilité de toute configuration dans un modèle qui le décrirait passe de zéro (quand l'univers est plus petit que la région occupée par la matière dans cette configuration) à une valeur finie maximale (quand l'univers a la taille de cette région) puis décroît vers zéro (l'univers étant de plus en plus grand, il est de moins en moins probable que la matière soit dans cette configuration donnée car le nombre de configurations accessibles augmente), donc n'est jamais stationnaire. D'autre part, nombreux sont les systèmes dont l'évolution n'est *pas* hamiltonienne et où l'on ne peut pas définir une énergie conservée : par exemple une population d'être vivants dans laquelle un virus diffuse, ou des données informatiques qui évoluent lors du traitement par un algorithme. (Bien entendu, les phénomènes biologiques en jeu dans la diffusion du virus ou le fonctionnement de l'ordinateur sur lequel est implanté l'algorithme sont régis, au niveau microscopique, par les lois hamiltoniennes de la physique, mais ce niveau de description n'est pas pertinent pour comprendre la maladie ou le traitement des données car la diffusion de la maladie ou ce traitement présentent des caractéristiques indépendantes des espèces d'être vivants concernées ou de la sorte d'ordinateur utilisé, et le caractère hamiltonien de la physique ne transparaît pas dans les modèles pertinents, macroscopiques, de ces phénomènes, de même que les phénomènes irréversibles de notre quotidien macroscopique reposent sur des lois microscopiques réversibles). Un autre exemple est constitué par les milieux granulaires, sujet de la troisième partie de ce mémoire : l'état d'équilibre d'un ensemble de grains de sable, autrement dit un empilement de grains qui ne bouge plus, n'est *pas* l'aboutissement d'une évolution hamiltonienne, car cette évolution dissipe l'énergie qu'ont les grains au début de la formation de l'empilement.

Admettons les hypothèses d'évolution hamiltonienne et d'existence d'un état d'équilibre ergodique (où toutes les configurations peuvent être atteintes), et plaçons-nous dans cet état. Si le système modélisé est isolé de son environnement, son énergie est comme on l'a dit constante dans le temps, et le théorème de Liouville (ou son analogue quantique concernant la matrice densité si le modèle utilise la mécanique quantique) et l'ergodicité de l'évolution entraînent que toutes les configurations qui ont cette énergie sont équiprobables [81]. On appelle entropie le logarithme de ce nombre (à un facteur constant près, et en supposant que le nombre de configurations est fini). Si le système peut interagir avec son environnement, c'est-à-dire échanger de l'énergie avec lui, mais conserve ses autres paramètres macroscopiques (son nombre de constituants, son volume, *etc.*) et que l'ensemble *système et environnement* est à l'équilibre, on peut appliquer le raisonnement précédent à cet ensemble. On en déduit que l'énergie du système étudié fluctue et que la probabilité d'observer, à un instant donné, l'une de ses configurations est proportionnelle à l'exponentielle de l'énergie de cette configuration multipliée par l'opposé de la température inverse β — c'est un paramètre dont la valeur est fixée par la dérivée de l'entropie par rapport à l'énergie, prise en l'énergie présente dans le système (ou l'énergie moyenne si elle fluctue) : cette dérivée doit être la même pour le système et pour son environnement, ce qui fixe leurs énergies moyennes respectives et la valeur de β . β caractérise, pour un système donné, la valeur moyenne de l'énergie lors de fluctuations à l'équilibre (c'est-à-dire au sein d'un système plus grand isolé et à l'équilibre). Les propriétés d'équilibre du système sont des fonctions de β (*via* l'énergie) et des autres paramètres macroscopiques du système (volume V , nombre de particules N , *etc.*). On peut les calculer si l'on connaît la valeur de la fonction de partition Z , c'est-à-dire de la somme des probabilités des configurations (à un facteur commun près), comme fonction de β et de ces paramètres :

$$Z(\beta, V, N, \dots) = \sum_{\text{configurations } \mathcal{C}} \exp[-\beta H(\mathcal{C})].$$

En effet, la fonction de partition se comporte comme une fonction génératrice ; par exemple, la dérivée de son logarithme par rapport à β est égale à l'énergie moyenne. Si les paramètres V , N , *etc.* peuvent aussi fluctuer, il est utile de calculer la transformée de Legendre de la fonction de partition par rapport au paramètre concerné (cela revient à introduire un terme supplémentaire dans l'exponentielle qui donne les probabilités des configurations, égal au paramètre multiplié par un multiplicateur de Lagrange conjugué appelé champ). La dualité entre l'énergie (le paramètre) et β (le champ conjugué) est un exemple d'une telle relation.

Autrement dit, dans le cas d'un modèle hamiltonien dont on n'étudie que l'état d'équilibre, le travail du théoricien consiste à calculer la fonction de partition en fonction de β et des autres paramètres et/ou champs conjugués, puis à la dériver pour obtenir les moyennes des quantités voulues. En pratique il est rare que l'on puisse faire ce calcul exactement et l'on recourt à des approximations. En particulier, il est souvent possible de faire le calcul dans le cas dit du champ moyen discuté dans l'introduction de ce mémoire, où la géométrie de dimension finie du système disparaît et où chaque composante du système peut interagir avec chacune des autres, et l'on peut ensuite prendre ce calcul comme point de départ d'un développement perturbatif. (Un cas particulier intéressant où le calcul exact est faisable, au moins quand certains champs sont nuls, est celui des systèmes intégrables — voir la troisième partie de ce mémoire).

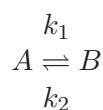
Précisons pour mémoire qu'un modèle non hamiltonien peut être étudié de cette façon à condition qu'il possède un état d'équilibre et que l'on connaisse la probabilité des différentes configurations dans cet état. C'est le cas en particulier si ce modèle est défini par une cinétique qui satisfait à la condition dite d'équilibre détaillé (définie et discutée au chapitre 14), mais pas seulement : par exemple, si, dans un modèle à nombre fini de configurations, chaque configuration a exactement n successeurs dans la cinétique et n antécédents, avec n entier strictement positif fixé, et si de toute configuration on peut passer à toute autre après une ou plusieurs transitions (ergodicité), un état d'équilibre unique existe et chaque configuration y a la même probabilité (alors que la condition d'équilibre détaillé est violée s'il y a au moins une transition dont la transition inverse est impossible).

7.2 Processus définis par leur cinétique

L'approche précédente ne dit rien sur la façon dont il faut étudier des systèmes non hamiltoniens et/ou hors équilibre. Or, même parmi les systèmes hamiltoniens, il y a des systèmes sans état d'équilibre (voir l'exemple de l'univers en expansion ci-dessus), et il y a des systèmes pour lesquels il existe un état d'équilibre, mais où l'on s'intéresse précisément à ce qui se passe hors de cet équilibre. Par exemple, dans un système sujet au vieillissement (comme les mousses et les verres), la convergence vers l'équilibre est continue mais très lente et prend parfois un temps nettement supérieur à la durée des études expérimentales, donc il est crucial de savoir étudier les propriétés du système quand il est hors équilibre. De même dans l'étude des algorithmes (dont la première partie de ce mémoire présente un cas) : on cherche à savoir par exemple combien de temps la convergence vers l'état final prend. D'autres systèmes restent très longtemps, sans évolution notable, dans un état qui n'est pas représentatif de leur état d'équilibre et qu'ils finissent par quitter brutalement après un temps très long (on qualifie un tel état de *métastable*). C'est le cas du diamant, dont le destin théorique est de se transformer en graphite (après une durée astronomique!).

Dans tous ces cas, pour modéliser le système il faut préciser la façon dont il évolue dans le temps, c'est-à-dire sa *cinétique* [82]. Cette cinétique conditionne les valeurs des observables et c'est à partir d'elle qu'il faut mener les calculs. Remarquer qu'il y a infiniment plus de modèles définis par une cinétique que de modèles définis par un hamiltonien : un modèle défini par un hamiltonien peut être vu comme un modèle défini par une cinétique (la cinétique des équations de Hamilton-Jacobi (7.1) pour un modèle de mécanique classique, l'équation de Schrödinger pour un modèle quantique). L'inverse n'est pas vrai. De même, on peut simuler n'importe quel champ de forces dérivant d'une énergie potentielle dans le plan en faisant des encoches asymétriques sur une planche horizontale (principe de la roue à rochets) : quand on tapote la planche, les particules présentes dessus se déplacent dans le sens et avec la vitesse moyenne imposés par les encoches. Inversement, certains champs de forces ainsi produits ne dérivent pas tous d'une énergie potentielle, notamment si les encoches obligent les particules à faire des boucles fermées.

Même quand un processus possède un état d'équilibre vers lequel sa cinétique converge, étudier cette cinétique peut nous renseigner sur cet état d'équilibre (ce peut être plus facile que d'étudier directement l'état d'équilibre, et c'est parfois indispensable quand on ne connaît pas cet état d'équilibre, c'est-à-dire que l'on ne connaît pas les configurations visitées par le système dans cet état ou qu'elles sont techniquement difficiles à décrire). Par exemple, en chimie, les taux de réaction redonnent le résultat de la loi d'action de masse et permettent donc de calculer l'enthalpie libre : pour la réaction



on doit avoir à l'équilibre $k_1[A] = k_2[B]$ (égalité des vitesses), donc, d'après la loi d'action de masse, l'enthalpie libre de la réaction est connue : $\Delta_r G_0 = -RT \ln(k_1/k_2)$. De même, en combinatoire et en informatique théorique, étudier des cinétiques particulières (c'est-à-dire dans ce contexte des algorithmes particuliers) peut nous renseigner sur des propriétés intrinsèques du problème que ces algorithmes résolvent, indépendamment des algorithmes (ces propriétés sont l'analogie de celles de l'état d'équilibre dans un problème de physique). C'est ainsi que les bornes inférieures au seuil de la transition de satisfaisabilité aléatoire abordée dans la première partie de ce mémoire ont été établies en montrant que certains algorithmes trouvaient une solution avec probabilité finie quand le paramètre α du problème (rapport du nombre de contraintes au nombre de variables) est inférieur à un seuil : si tel algorithme trouve des solutions pour une valeur de α , c'est qu'il en existe, donc le seuil en α à partir duquel il n'existe presque sûrement pas de solution est supérieur à cette valeur. Chaque algorithme possède un seuil propre, non intrinsèque du problème, mais ce seuil apporte une information

non triviale sur le problème (voir la partie I de ce mémoire). De même, le seuil de la transition de percolation de cœur- k des graphes aléatoires (*k-core percolation* en anglais) a été trouvé en étudiant un algorithme particulier de recherche du cœur- k par décimation du graphe [74]. Dans cet exemple, k est un nombre entier naturel fixé et l'on part d'un graphe aléatoire d'Erdős et Rényi de la famille $G(N, p)$ (voir la section 2.2 p. 33), où chaque paire de sommets est reliée par une arête avec probabilité $p = c/N$. L'algorithme retire répétitivement du graphe les sommets possédant strictement moins de k arêtes. Le graphe restant (éventuellement vide) est appelé le cœur- k du graphe initial. Les configurations de l'état d'équilibre, dans ce problème, sont les cœurs- k des graphes de $G(N, p)$, mais elles sont difficiles à décrire et énumérer (contrairement aux configurations du modèle d'Ising à l'équilibre, par exemple), donc il est plus facile de les étudier indirectement *via* l'algorithme de décimation. Quand le graphe aléatoire est remplacé par un réseau hypercubique de dimension D avec dilution de liens (chaque lien est présent avec une probabilité p fixée et absent avec probabilité $1 - p$), ce même problème (trouver le plus grand sous-ensemble de sommets ayant au moins k arêtes) est appelé *percolation bootstrap* [83] et la recherche du cœur- k peut se faire avec le même algorithme. Le nom anglais *bootstrap* a une étymologie controversée ; l'un des explications de son origine fait appel aux aventures du baron de Münchhausen qui se serait sorti d'un marécage en se tirant les cheveux ou aurait atteint la Lune en tirant très fort sur les lacets de ses bottes (*boots*). On pourrait alors traduire *bootstrap percolation* par « percolation tout-se-tient », puisque les sites de l'amas percolant tiennent ensemble mutuellement (si l'un d'entre eux avait une arête de moins, plusieurs sites seraient à retirer du cœur- k). On le trouve aussi parfois traduit en « percolation d'initialisation » (sans doute par analogie avec la procédure d'initialisation des ordinateurs appelée *bootstrap* ou, couramment, *boot*, et parce que cette percolation ne se manifeste pas tout de suite mais nécessite une phase d'initialisation du réseau). Enfin, un modèle très semblable à la percolation *bootstrap* est celui de la percolation des chaînes de forces [84] que nous rencontrerons dans la troisième partie de ce mémoire.

Avant d'indiquer au chapitre suivant comment le théoricien peut étudier de tels processus et quels outils peuvent remplacer la fonction de partition, donnons quelques exemples de processus stochastiques définis par des règles cinétiques particulièrement intéressants.

Exemples en physique et chimie. La cinétique chimique a étudié de nombreux modèles dits de réaction-diffusion, où les réactions chimiques sont limitées par la diffusion des réactifs et des produits, et donc où une approche de type champ moyen où l'on écrit des équations différentielles pour les densités moyennes des réactifs et produits n'est pas pertinente (alors qu'une telle approche décrit bien la cinétique en solution bien agitée). Un exemple très célèbre de système réacto-diffusif est la réaction de Belousov-Zhabotinsky. Il peut aussi y avoir réaction-diffusion pour des réactions nucléaires. Ou encore diffusion sans réaction, hors d'équilibre, comme dans les modèles de transport ASEP et ses variantes [85]. D'autres catégories importantes de modèles sont les modèles de croissance de cristaux et les modèles de dépôt balistique, et les modèles à contrainte cinétique étudiés pour expliquer la physique des systèmes vitreux [86].

Exemples en biologie. Les modèles d'épidémie ou de biologie des populations sont souvent des processus stochastiques ; nous en verrons des exemples au chapitre 9. Le fonctionnement cellulaire fait aussi intervenir de nombreux phénomènes modélisés par des processus stochastiques : métabolisme, expression génétique, assemblage des protéines, *etc.* Une grande partie des processus intracellulaires sont soumis à un bruit stochastique important en raison des petits nombres de molécules mis en jeu — et pourtant on observe une stabilité remarquable du fonctionnement des organismes vivants. On s'accorde donc à dire que les processus biologiques sont résistants au bruit stochastique mais les mécanismes qui permettent cela ne sont pas encore clairs. Il est en tout cas crucial de prendre en compte l'aspect stochastique lors d'une étude de la biologie cellulaire.

Exemples en sciences sociales et économie. De nombreux modèles étudiés dans ce domaine (à l'intersection avec la théorie des jeux en mathématiques) sont des processus sto-

chastiques, comme le jeu de la minorité (*minority game*), le modèle des électeurs (*voter model*) [87, 88], les modèles d'élaboration d'un langage par des robots.

Exemples en combinatoire et en informatique. Dans ce domaine, tout algorithme peut être vu comme une cinétique et, pour peu que les données d'entrée soient aléatoires et/ou que l'algorithme lui-même fasse des choix aléatoires au cours de son évolution, nous avons affaire à un processus stochastique (hors d'équilibre si l'algorithme ne boucle pas, ce qui est en général indésirable!). L'algorithme de recherche du cœur- k ci-dessus et tous les algorithmes mentionnés dans la première partie de ce mémoire sont des systèmes définis par des règles stochastiques, qui peuvent engendrer des phénomènes de vieillissement et de métastabilité. L'algorithme WalkSAT [52, 53], en particulier, présente un phénomène de métastabilité très similaire à ce que l'on observe pour le processus de contact (et qui est décrit à la section suivante). C'est un algorithme non local de recherche de solutions pour instances du problème SAT (défini dans la première partie de ce mémoire). Dans sa version la plus simple (Random-WalkSAT [54]), les variables de l'instance à étudier sont d'abord affectées au hasard, puis, tant qu'il reste des clauses non satisfaites, l'algorithme choisit une clause non satisfaite de l'instance, y change la valeur de l'une des variables de manière que la clause soit satisfaite, et recommence. Pour des instances du problème K-SAT aléatoire, cette procédure de résolution trouve une solution en temps moyen linéaire quand le nombre moyen de clauses par variable n'excède pas un certain seuil; au-dessus de ce seuil, et en dessous du seuil où, presque sûrement, les instances n'ont pas de solution, il reste pendant une durée moyenne exponentielle en la taille du problème (*i.e.* le nombre de variables) dans un état métastable où le nombre moyen de clauses non satisfaites fluctue autour d'une valeur moyenne avant de tomber, à la faveur d'une fluctuation favorable de grande ampleur, à zéro (*i.e.* une solution est trouvée) [89, 90]. Il existe de nombreux algorithmes fonctionnant sur des principes voisins et qui présentent des phénomènes cinétiques intéressants; voir par exemple l'introduction de [55] pour une liste récente. La plupart des processus stochastiques que définissent ces algorithmes sur l'ensemble des instances du problème SAT tirées avec probabilité uniforme (ou bien sur une instance donnée) sont toutefois plus difficiles à étudier que le processus de contact défini ci-dessus parce qu'ils font intervenir des considérations non locales (par exemple, le nombre total de clauses non satisfaites dans l'instance) et un couplage entre deux descriptions partiellement redondantes, les valeurs des variables booléennes et les états des clauses (satisfaites ou non satisfaites) — voir la discussion sur ce point au paragraphe 8.5.2.

7.3 Le processus de contact

La source de notre intérêt pour les processus stochastiques définis par leurs règles d'évolution stochastique était l'étude d'algorithmes. Comme les calculs requis pour l'étude d'un algorithme réaliste nous semblaient trop ambitieux (voir ci-dessus), nous nous sommes restreint, dans le cadre de ce travail de thèse, à l'étude d'un processus simple appelé *processus de contact*, que nous définissons ci-dessous (il a fait l'objet de plusieurs livres et revues [87, 88, 91]). Cependant nous espérons poursuivre ces travaux, tirant profit de l'expérience acquise sur ce cas particulier.

7.3.1 Définition

Le processus de contact (parfois abrégé dans la suite en PC) a été introduit par T. E. Harris en 1974 dans le cadre de la théorie mathématique des probabilités [92] (mais Schlögl a introduit en 1972, dans le but d'étudier des transitions de phase hors équilibre, des modèles [93] dont le processus de contact est un cas particulier si l'on prend une constante de réaction nulle et que l'on discrétise l'espace). Beaucoup le voient comme un modèle simple d'épidémie (voir discussion ci-dessous). Il est défini sur un graphe. Des cas particuliers importants sont les réseaux de dimensions D , \mathbb{Z}^D , et les arbres de Cayley T_d (l'arbre de Cayley, ou réseau de

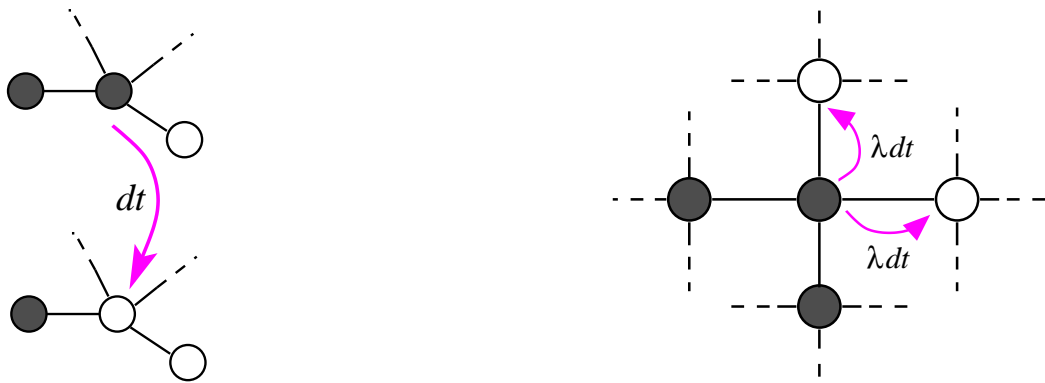


FIG. 7.1 – Représentation schématique des deux règles cinétiques définissant le processus de contact : règle de guérison spontanée à gauche, à droite règle de contamination.

Bethe, T_d est un graphe sans boucle où chaque nœud est relié à $d + 1$ autres nœuds — en particulier T_1 est simplement la droite discrète \mathbb{Z} ; T_d est infini et planaire). Chaque sommet du graphe (aussi appelé *site*), qui modélise un individu d'une population, est muni d'une variable booléenne indiquant si le sommet est « vide » ou « sain » (variable à FAUX) ou bien « occupé », « plein » ou « malade » (variable à VRAI). La valeur de ces variables évolue en temps continu. Pendant chaque intervalle infinitésimal de temps dt , les règles suivantes, illustrées figure 7.1, s'appliquent indépendamment :

- Un site malade a la probabilité dt de devenir sain (règle de guérison spontanée).
- Une arête reliant un site sain à un site malade a la probabilité $\tilde{\lambda} dt$ de rendre malade le site sain (règle de contamination). $\tilde{\lambda}$ est un nombre réel positif ou nul fixé.

Par conséquent : un site sain relié à n sites malades a la probabilité $n \tilde{\lambda} dt$ de devenir malade. La probabilité qu'un site sain devienne malade et guérisse (ou inversement) durant la durée dt est formellement d'ordre $(dt)^2$ (les deux événements étant indépendants), ce qui signifie qu'elle est nulle à la limite du temps continu où le processus est défini.

Dans toute la suite, le processus sera étudié sur un graphe où chaque sommet a un nombre fixe d'arêtes, noté z , et nous prendrons comme taux de contamination $\tilde{\lambda}$ le rapport λ/z où λ est un réel positif fixé. En effet, à la limite où $z \rightarrow +\infty$ (cas d'un réseau complet par exemple), les phénomènes intéressants se produisent quand $\tilde{\lambda}$ est de l'ordre de $1/z$.

Remarquer que ce prétendu modèle d'épidémie ne prend en compte ni l'immunisation (un individu qui guérit d'une maladie est souvent immunisé contre elle et ne peut pas retomber malade, au moins avant un certain temps), ni la mortalité des individus (si une fraction importante de la population meurt, il se peut que l'épidémie se propage moins vite car les individus ont moins de contacts), ni le déplacement des individus ou le déplacement lointain du vecteur de la maladie (c'est cette dernière caractéristique, la contamination par contact direct, qui lui donne son nom ; on pourrait d'ailleurs aussi dire et écrire « processus par contact », puisque le contact est un moyen et non une fin dans ce modèle). Le processus de contact est d'ailleurs appelé aussi modèle SIS (pour susceptible-infecté-susceptible) pour bien rappeler les deux premières caractéristiques (ni immunisation, ni mort). Il peut être un modèle sensé pour l'envahissement d'une population fixe ou simplement d'un environnement par une espèce (qui peut être un parasite ou un hôte). On peut penser à la colonisation d'un milieu par une espèce qui se reproduit principalement par bouturage (comme les hydres, certaines algues, les fraisiers, les orties) et qui est soumise à une certaine mortalité (la règle de « guérison » modélisant tout simplement la mort des individus colonisateurs — qui ne peuvent pas coexister sur un même site car ils seraient en compétition pour les ressources naturelles), ou bien à l'envahissement par contact direct ou tout au moins par sauts à courte distance de plantes ou d'animaux fixes (plantes, éponges, certains mollusques) par un hôte ou un parasite (le gui est un mauvais

exemple car, même si ses hôtes, à savoir les arbres, sont fixes, il est propagé aussi bien à courtes qu'à grandes distances par les oiseaux qui mangent ses baies).

Le modèle peut être facilement généralisé. Des versions où les interactions sont à longue portée ont été étudiées ; voir par exemple l'étude récente [94] qui propose de modéliser le phénomène de décrochage (d'une interface) par une version du processus de contact à longue portée. On peut ajouter du *désordre gelé* en choisissant des valeurs de $\tilde{\lambda}$ qui dépendent de l'arête. On peut aussi faire dépendre λ du temps. Voir [95] pour le cas où la probabilité de contamination d'un site *ne dépend pas* du nombre de voisins infectés de ce site (pourvu qu'il y en ait au moins un) — cette variante est appelée *processus de contact à seuil*. Nous nous restreignons dans toute la suite au cas (sans seuil) où $\tilde{\lambda}$ est uniforme et constant.

On peut aussi envisager un modèle équivalent en temps discret, les règles ci-dessus étant réécrites avec des probabilités d'évolution par pas de temps (à la limite où ces probabilités tendent vers zéro et où le nombre de pas de temps tend vers l'infini à produit constant, on doit retrouver la version du modèle en temps continu). Un tel modèle discret peut être plus facile à simuler sur ordinateur.

7.3.2 Comportement qualitatif

La définition ci-dessus se compose de deux phénomènes antagonistes : la règle de guérison spontanée tend à diminuer le nombre de sites malades, tandis que la règle de contamination tend à l'augmenter. Le paramètre λ détermine l'importance relative de ces deux règles. En fait, on peut voir par des simulations Monte Carlo ou un calcul approché de type champ moyen (exact sur un graphe complet), et prouver mathématiquement [87, 88], qu'il existe un seuil λ_c pour λ en dessous duquel le nombre de sites malades décroît et atteint rapidement zéro, quelle que soit sa valeur de départ. La figure 7.2 montre trois séries temporelles typiques pour le nombre de sites infectés lors d'une simulation numérique sur réseau complet, où le seuil λ_c vaut un : on remarque nettement l'extinction rapide pour $\lambda = 0,5$. Au-dessus du seuil λ_c , deux comportements sont possibles.

Sur réseau \mathbb{Z}^D , l'épidémie envahit tout le réseau et y reste longtemps, c'est-à-dire que la probabilité qu'un site soit malade (au sens où l'on étudie le processus sur de nombreuses copies du réseau en parallèle et où l'on mesure les probabilités sur ces copies, au même instant) est strictement positive pour tous les sites et pendant une longue durée (on parle alors de *survie locale* du processus, car on peut s'apercevoir *localement* que l'épidémie persiste, c'est-à-dire en observant un ensemble fini de sites, ou encore de *récurrence*, car le nuage de sites infectés revient souvent sur un site donné). Cette probabilité, et le nombre moyen de sites malades à un instant donné qui lui correspond, augmentent comme on peut s'y attendre avec $\lambda - \lambda_c$ (ils s'annulent sans discontinuité pour $\lambda = \lambda_c$). L'état de « maladie endémique » ne dure cependant pas indéfiniment : il est le siège de fluctuations du nombre de sites malades, et il finit par se produire une fluctuation où ce nombre passe à zéro (tous les sites malades guérissant à peu de choses près en même temps). Ensuite, il ne se passe plus rien, car dans ce modèle aucune règle ne crée des sites malades s'il n'y en a pas au moins un. Pour cette raison, on qualifie l'état où tous les sites sont sains d'état stable absorbant (une fois qu'il l'a atteint, le système ne le quitte plus), tandis que l'état d'épidémie endémique n'est que *métastable* : une fluctuation portant sur un nombre fini de sites ne suffit pas pour que le système le quitte, mais une fluctuation (bien particulière donc rare) sur un nombre de sites du même ordre que le nombre total de sites dans le réseau suffit [96, 97]. Ce comportement se voit nettement sur la figure 7.2 pour $\lambda = 1.6$. C'est un mécanisme similaire qui gouverne la métastabilité dans les systèmes à transition de phase continue (par exemple le basculement entre les deux aimantations possibles d'un modèle d'Ising à champ extérieur nul et pour un système de taille finie). Rappelons à titre de comparaison ce qui se passe pour une transition de phases *discontinue* (ou *du premier ordre*) : comme nous l'avons vu dans l'introduction, une telle transition se produit quand il existe deux états thermodynamiques différents dont les énergies libres en fonction des paramètres intensifs (souvent la température et la pression

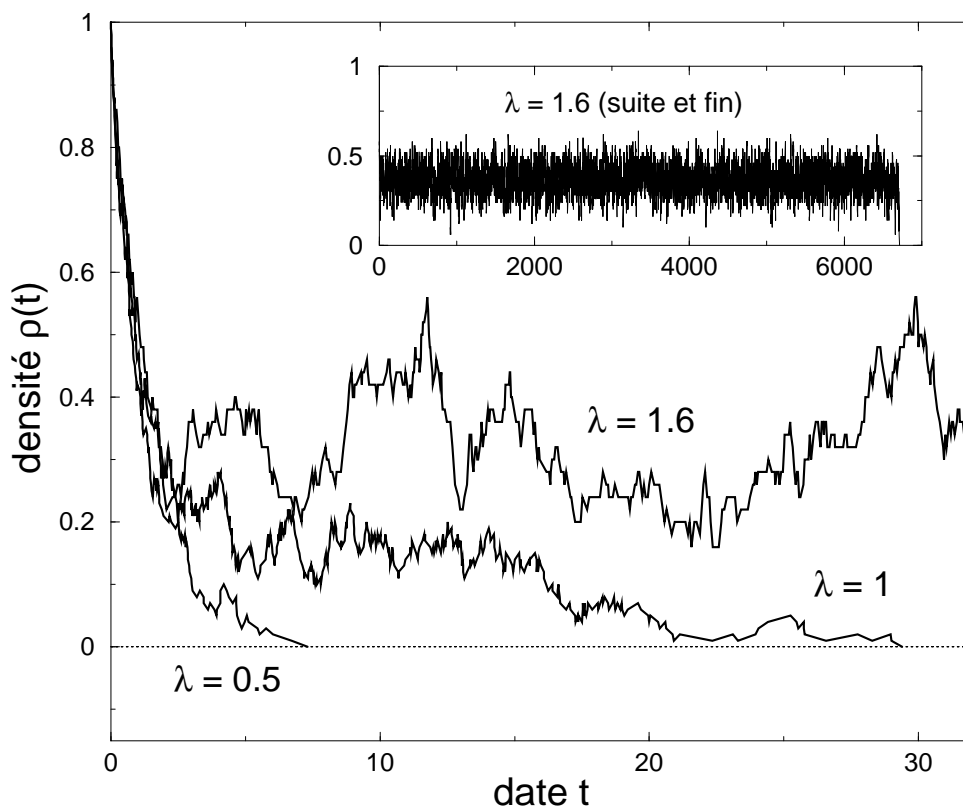


FIG. 7.2 – Trois séries temporelles pour la densité $\rho(t)$ de sites infectés dans une simulation numérique du processus de contact sur réseau complet de $N = 100$ sites, pour les valeurs du taux de contamination λ 0,5, 1 et 1,6. Pour $\lambda = 0,5$, l'épidémie s'éteint très vite (la moyenne de $\rho(t)$ sur les séries de simulation décroît exponentiellement avec t ; dans *une* série, ρ fluctue autour de la courbe de sa moyenne et elle atteint zéro au bout d'une durée finie, même si la moyenne n'atteint mathématiquement jamais zéro, à cause de ces fluctuations). Pour $\lambda = \lambda_c = 1$, la valeur critique, elle s'éteint après une décroissance algébrique (en $1/t$) de la moyenne de $\rho(t)$. Enfin, pour $\lambda = 1,6$, la moyenne de ρ relaxe rapidement vers la valeur $1 - 1/\lambda$, puis ρ fluctue très longtemps autour de cette valeur (le système est dans un état *métastable*) avant qu'une fluctuation de grande ampleur lui fasse atteindre zéro (l'insert montre la suite est la fin de la courbe de $\rho(t)$ pour $\lambda = 1,6$).

— nous prendrons pour simplifier la température seulement) se croisent. L'état stable à basse température, c'est-à-dire celui dont l'énergie libre est la plus basse quand la température est basse, voit son énergie libre passer au-dessus de celle de l'autre état quand la température franchit une valeur dite critique, donc il devient instable, et un système initialement dans cet état finit en principe par « tomber » dans l'état devenu stable. De même quand la température critique est franchie dans l'autre sens (avec coexistence des deux phases possible quand le système est exactement à la température critique). Cependant, comme nous l'avons longuement discuté au début de ce chapitre, l'énergie libre à la limite thermodynamique ne nous renseigne que sur l'état d'équilibre et ne dit rien sur la *cinétique* de la transition. En fait, cette cinétique possède une durée caractéristique dont l'origine est expliquée plus loin. Si le point critique est franchi en une durée plus courte que cette durée caractéristique, le système reste dans la phase qui était stable de l'autre côté de ce point (et qui est maintenant métastable), jusqu'à ce qu'une fluctuation d'ampleur suffisante le fasse basculer tout entier dans la phase stable. De l'eau liquide peut ainsi exister, à la pression d'une atmosphère, à une température strictement inférieure à 0°C (on parle alors d'eau *surfondue*), mais si on la remue trop elle gèle brutalement en bloc. Il y a une différence importante entre un liquide surfondu (transition de phase du premier ordre) et le processus de contact (ou plus généralement la métastabilité des systèmes à transition de phase du deuxième ordre). Dans un liquide surfondu, la phase métastable liquide voit sans cesse apparaître, au cours de fluctuations, de petits cristaux solides, qui sont instables et disparaissent spontanément, sauf s'ils dépassent une certaine taille, auquel cas ils croissent jusqu'à envahir tout le système et le faire basculer dans la phase stable [98, 99]. On dit que le mécanisme d'une telle transition de phase du premier ordre est la *nucléation* (*d'un germe critique*). Comme la taille critique des petits cristaux est finie, la probabilité d'engendrer un tel cristal par unité de temps dans un certain volume est finie, et elle augmente avec le volume. Autrement dit (voir le raisonnement qui lie probabilité par unité de temps et temps d'attente d'un événement plus bas), la durée de vie de l'état métastable est d'autant plus courte que le système est grand : il est plus facile d'avoir un verre d'eau surfondu qu'un lac entier. Au contraire, pour le processus de contact avec taux de contamination $\lambda > \lambda_c$, tous les « germes » sont instables, quelle que soit leur taille, sauf le germe qui recouvre le système tout entier. Il ne s'agit donc plus vraiment d'un « germe ». Par conséquent, la transition vers l'état absorbant nécessite qu'un événement d'autant plus rare que le système est grand se produise et, comme nous allons le voir, la durée de vie de l'état métastable du processus de contact *augmente exponentiellement* avec le nombre de sites du système, comme dans les modèles de champ moyen d'états métastables [100] (qui ne sont donc pas représentatifs du comportement des systèmes en dimension finie avec interactions à courte portée). Si l'on voit le processus de contact comme un modèle simple du développement d'une espèce vivante qui colonise son environnement, on comprend que l'extinction de l'espèce est, en l'absence de cataclysme ou de modification notable de l'environnement (changement climatique ou apparition d'un prédateur ou d'un concurrent), un événement quasiment impossible une fois que la population dépasse quelques centaines d'individus ($\exp(-100) \approx 10^{-42}$, donc si la durée de vie moyenne d'un individu est d'une seconde — constante de temps qui intervient dans la règle de « guérison spontanée » —, il faut attendre de l'ordre de 10^{42} secondes pour que l'espèce disparaisse, alors que l'univers a environ 15 milliards d'années soit 10^{18} secondes).

Graphes qui ressemblent localement à des arbres. Le deuxième comportement possible au dessus du seuil λ_c n'est pas observé sur réseau \mathbb{Z}^D . Il est observé sur les graphes qui ressemblent localement à des arbres, c'est-à-dire où le nombre de voisins à distance inférieure ou égale à d d'un site donné croît exponentiellement avec d — au moins quand d n'est pas trop grand. C'est le cas sur un arbre de Cayley T_d , bien sûr, mais aussi sur les graphes « comme le monde est petit ! » (*small world graphs* en anglais) [27] déjà mentionnés p. 42. Les mathématiciens distinguent en particulier la catégorie des graphes *non amenables*, c'est-à-dire moralement les graphes où le « bord » des sous-graphes finis n'est jamais négligeable devant l'intérieur. L'archétype d'un graphe non amenable est un arbre de Cayley T_d avec

$d \geq 2$: si un site est fixé (la racine), le nombre de sites situés à la distance r (comptée en nombre minimal d'arêtes à parcourir pour aller de la racine à ces sites) est d^r , tandis que le nombre de sites situés à une distance $< r$ est $1 + d + d^2 + \dots + d^{r-1} = (d^r - 1)/(d - 1)$, donc le rapport « bord/intérieur » vaut, pour r grand, $d - 1 \geq 1$ et ne décroît pas vers zéro (contrairement à ce qui se passe pour les régions hypercubiques finies dans \mathbb{Z}^D). On sait qu'en mécanique statistique les graphes où le bord compte autant de sites que l'intérieur sont le siège d'une multitude de comportements pathologiques car la limite thermodynamique n'y est pas de même nature que sur réseau (sur réseau, l'aire du bord d'une région est négligeable devant le volume de cette région, donc on peut découper le réseau en nombreuses grandes régions qui interagissent de façon négligeable et appliquer le théorème de la limite centrale à ces régions pour montrer l'émergence d'un comportement macroscopique d'ensemble, commun aux régions, avec concentration de la mesure (ou auto-moyennance), tandis qu'en présence d'un bord aussi important que l'intérieur les propriétés de l'intérieur sont fortement influencées par le bord et ne prennent pas toujours une valeur spontanée avec des fluctuations négligeables). Ce problème peut être partiellement éliminé en remplaçant le graphe à « bord extensif » par un graphe aléatoire d'Erdős et Rényi : dans un tel graphe, il n'y a pas de bord car le graphe « se replie sur lui-même » en grandes boucles, même si, localement autour d'un site donné, le graphe ressemble à un arbre car il n'y a pas de petites boucles et que le nombre de sites à distance inférieure ou égale à d croît comme une exponentielle et non un polynôme de d . Donnons la définition formelle d'un graphe amenable : c'est un graphe dont la *constante isopérimétrique au sens des arêtes* ι_E est nulle. Cette constante est la borne inférieure des rapports $|\partial_E K|/|K|$, c'est-à-dire « nombre d'arêtes sur le bord de K / nombre de sommets dans K » des ensembles K finis non vides de sommets du graphe (le bord au sens des arêtes $\partial_E K$ d'un tel ensemble K est l'ensemble des arêtes du graphe qui relient un sommet dans K à un sommet qui n'est pas dans K). Le lecteur intéressé trouvera davantage de précisions dans la revue [101]¹ ou dans l'article [102] consacrés aux transitions de phases dans les graphes non amenables.

Sur un arbre de Cayley T_d avec $d \geq 2$, il existe un deuxième seuil $\lambda'_c > \lambda_c$ tel que, si $\lambda_c < \lambda \leq \lambda'_c$, l'épidémie survit mais n'est pas récurrente. C'est-à-dire : si, à l'instant initial, un seul site particulier (par exemple la racine de l'arbre) est infecté, presque sûrement il y aura des sites infectés à tout instant ultérieur, mais, presque sûrement, il existe un instant au delà duquel la racine n'est plus jamais infectée (mathématiquement, si $p(t)$ est la probabilité que la racine soit infectée à t sachant qu'elle l'était à $t = 0$, $\liminf_{t \rightarrow +\infty} p(t) = 0$). Moralement, cela signifie que l'épidémie dure indéfiniment, mais ne s'étend pas à tout le réseau : le « nuage » de sites contaminé se déplace indéfiniment en direction des « bords » de l'arbre ; étant donné une région finie (un ensemble de sites fini), avec probabilité un il existe un instant au delà duquel la région ne compte plus jamais de site malade. Sur réseau \mathbb{Z}^D , les deux seuils sont confondus : une épidémie qui dure est forcément récurrente. On parle ici de *survie globale* (mais non locale) car il est nécessaire d'examiner tous les sites pour savoir si l'épidémie survit (étudier une région finie ne suffit pas). Là encore, l'« épidémie en transhumance » n'est qu'un état métastable qu'une fluctuation de grande ampleur finit par faire basculer dans l'état absorbant. Techniquement, on considère qu'il y a dans ce cas une infinité d'états métastables (c'est-à-dire une infinité de mesures de probabilité limites), alors que l'état métastable atteint pour $\lambda > \lambda_c$ est unique [88]. (Précisons par souci d'exhaustivité que le processus meurt quand $\lambda = \lambda_c$ et survit globalement mais pas localement quand $\lambda = \lambda'_c$).

Pour indiquer à quel point les graphes non amenables peuvent être « pathologiques », précisons qu'il existe des arbres non réguliers (c'est-à-dire où le nombre de voisins dépend du sommet) où, quand le paramètre λ varie continûment, l'on rencontre une infinité de transitions de phase entre survie locale et survie globale et inversement [103]. Cependant, ce comportement est plus qu'une curiosité mathématique, car il laisse une trace dans des graphes aléatoires qui

¹Attention à une coquille dans la définition des constantes isopérimétriques $\iota_V(G)$ et $\iota_E(G)$ p. 1101 de [101] : il faut lire $K \subset V$ et non $K \cup V$.

ressemblent localement à des arbres mais sont proches de graphes observés dans la réalité, comme les graphes « comme le monde est petit ! ». R. Durrett et P. Jung ont récemment montré [104] que, sur une variante de ces graphes, il existe deux seuils λ_c et λ'_c tels que :

- si $\lambda > \lambda_c$, le processus survit globalement.
- Soit un site donné et supposons qu'il est le seul site infecté à $t = 0$. Le premier instant τ où tous les sites sont guéris et le *premier* instant σ où soit le site 0 est malade, soit tous les sites sont guéris ont des distributions de probabilité qui convergent, à la limite thermodynamique sur les graphes, vers des distributions telles que ces instants sont presque sûrement infinis quand $\lambda_c < \lambda < \lambda'_c$ (et presque sûrement finis quand $\lambda > \lambda'_c$). Autrement dit, entre les deux seuils, si l'épidémie démarre avec un seul site infecté, il faut attendre un temps presque sûrement infini pour voir l'épidémie disparaître et un temps presque sûrement infini pour voir le site de départ de nouveau infecté. Cela signifie moralement que l'épidémie survit globalement mais n'est pas récurrente.

Transitions de phases. Chacun des seuils sur le taux de contamination λ envisagés ci-dessus est un point critique où a lieu une transition de phases. Il s'agit de transitions de phases *cinétiques* puisque chaque phase est caractérisée pour un comportement cinétique et qu'on ne calcule pas ici de propriétés d'un état d'équilibre (le seul état d'équilibre présent dans ce modèle est l'état absorbant où tous les sites sont sains, mais ses propriétés sont connues et peu intéressantes!). Mais ces transitions de phases ressemblent aux autres; en particulier, on peut y observer des exposants critiques et fonctions d'échelle. La transition sur réseau \mathbb{Z}^D , qui fait partie de la classe d'universalité de la percolation dirigée, a été bien étudiée [88] et fait l'objet du paragraphe suivant.

7.3.3 La transition de phases du modèle sur réseau \mathbb{Z}^D

Sur réseau \mathbb{Z}^D , la transition de phase (unique) a lieu au seuil λ_c dont on connaît des bornes rigoureuses [88] : $[1 - 1/(2D)]^{-1} \leq \lambda_c \leq 4$, et, en anticipant sur nos résultats, une expression asymptotique (exacte mais non rigoureuse) valable pour les grandes dimensions : $\lambda_c = 1 + 1/(2D) + 7/(12D^2) + \mathcal{O}(1/D^3)$ (en dimension $D = 1$, on connaît un développement perturbatif très poussé [105, 106], et pour $1 \leq D \leq 5$ des estimations numériques précises [107]).

Quand $\lambda < \lambda_c$, la densité moyenne ρ de sites malades (c'est-à-dire le nombre de sites malades divisé par le nombre total de sites N , ou *volume*, du réseau) décroît exponentiellement dans le temps, avec une durée caractéristique de l'ordre du logarithme du volume du réseau. Quand $\lambda > \lambda_c$, ρ relaxe vers sa valeur la plus probable dans l'état métastable, ρ^* (qui dépend de λ : $\rho^* = 1 - 1/\lambda - 1/(2D\lambda^2) + \mathcal{O}(1/D^2)$), avec une durée caractéristique du même ordre, puis tombe à zéro (état absorbant) après une durée *dont le logarithme* est de l'ordre du volume du réseau. À la limite thermodynamique, ce comportement est indépendant de la condition initiale pourvu que le réseau contienne au début de la cinétique une densité strictement positive de sites malades (c'est-à-dire un nombre de sites malades proportionnel au volume N , avec une constante de proportionnalité aussi petite que l'on veut). Pour un système de taille finie, la condition initiale joue un rôle : plus la densité initiale de sites malades est proche de 0, plus il est probable que la durée de l'épidémie ne soit pas de l'ordre de $\exp(\text{const } N)$ à cause de fluctuations qui font atteindre l'état absorbant avant l'état métastable.

Fonction de grandes déviations. Tant que le système reste dans la phase métastable, la probabilité d'observer les différentes valeurs de ρ définit la *fonction de grandes déviations* π :

$$P(N, t) =: e^{N\pi(\rho, t)}.$$

À la limite thermodynamique $N \rightarrow +\infty$, l'état métastable devient stable (car la probabilité d'une fluctuation qui fasse basculer le système dans l'état absorbant devient nulle) et l'on peut définir une fonction de grande déviation $\pi^*(\rho)$ indépendante du temps, caractéristique de l'état non absorbant, comme la limite de $\pi(\rho, t)$ quand $t \rightarrow +\infty$ (il faut prendre, dans

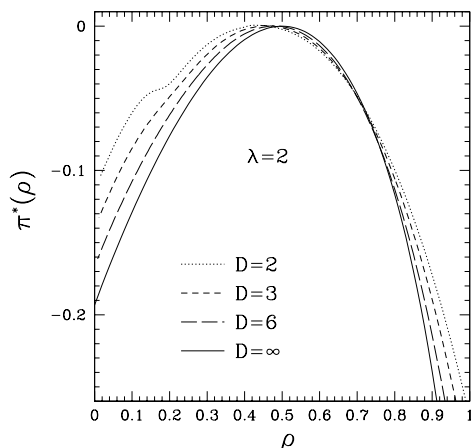


FIG. 7.3 – Allure de la distribution quasi stationnaire $\pi^*(\rho)$ de l'état métastable du processus de contact à la limite thermodynamique, pour la valeur 2 du paramètre λ . La courbe en trait continu est un résultat exact valable sur réseau complet (ou sur réseau \mathbb{Z}^D à la limite $D \rightarrow +\infty$). Les autres courbes sont des résultats analytiques perturbatifs à l'ordre $1/D$ sur les réseaux \mathbb{Z}^D ayant les dimensions indiquées (tirés des résultats présentés plus loin dans ce mémoire, section 9.2). Le caractère non convexe de la courbe pour $D = 2$ n'est pas physique; il est dû à ce que nous avons négligé les termes d'ordre $1/D^2$ et supérieurs. Remarquer l'effet qualitatif (confirmé par des simulations numériques) que $\pi^*(0)$ augmente en basse dimension, donc la durée de vie de l'état métastable y est plus faible qu'en champ moyen.

l'ordre, les limites thermodynamique $N \rightarrow +\infty$ puis de grand temps $t \rightarrow +\infty$; dans l'ordre inverse on trouverait le résultat caractéristique de l'état absorbant $\pi(\rho) = \delta(\rho)$, où δ est la distribution de Dirac). L'allure de $\pi^*(\rho)$ est donnée figure 7.3; nous donnerons son expression à la section 9.2. On constate que les valeurs de ρ qui s'écartent de ρ^* (la valeur *typique*, c'est-à-dire la plus probable) sont de moins en moins probables. Les *petites* déviations (ou fluctuations) de ρ ont une loi de probabilité qui ressemble à une loi gaussienne. Cette loi, pour laquelle la fonction de grandes déviations est rigoureusement une parabole, donne la limite quand $N \rightarrow +\infty$ de la loi de probabilité que la valeur d'une somme de N variables aléatoires indépendantes et de même distribution s'écarte de sa valeur moyenne, en vertu du théorème de la limite centrale. Sur réseau \mathbb{Z}^D ou sur un arbre de Cayley, on peut comprendre ce phénomène en découpant mentalement le réseau en régions carrées de côté L grand : ces régions interagissent peu, au sens où leur nombre de contacts avec les régions voisines, $4L$, est négligeable devant leur nombre de sites, L^2 , donc la densité totale ρ de sites malades est une moyenne de densités ρ de régions quasiment indépendantes auxquelles on peut appliquer le théorème de la limite centrale. Cet argument ne tient pas sur un réseau complet car un groupe de quelques sites distingués par la pensée a un grand nombre de contacts avec le reste du réseau, mais c'est précisément parce que ce nombre de contacts est grand que l'effet du reste du réseau sur le groupe de sites est rarement éloigné de sa moyenne, avec des fluctuations quasi gaussiennes, d'où des fluctuations de même nature pour la densité de sites malades dans le groupe de sites distingués. En revanche, les *grandes* déviations ne suivent pas une loi gaussienne (la courbe de $\pi^*(\rho)$ n'est pas une parabole), et ces grandes déviations présentent un comportement très intéressant. D'une part, la probabilité d'observer une densité égale à un est nulle ($\pi(\rho) \rightarrow -\infty$ quand $\rho \rightarrow 1$). D'autre part, la probabilité d'observer une densité nulle est exponentiellement faible (puisque $\pi^*(0) \neq 0$), mais non nulle : $\pi^*(0)$ est fini — ce fait est capital pour la métastabilité du processus, voir ci-dessous. Cette dissymétrie est causée par une différence entre termes de masse et termes de bord. En effet, la contamination se produit toujours par contact entre sites sains et sites malades, donc le taux de contamination global

est *grosso modo* proportionnel à l'« aire » du bord du nuage de sites malades, c'est-à-dire à un nombre qui croît avec la taille L du système comme L^{D-1} en dimension D si le nuage n'est pas fractal, ou comme L^d avec $D-1 < d < D$ s'il est [108]. Au contraire, le taux global de guérison spontanée est proportionnel au nombre de sites, donc croît comme $N = L^D$. C'est pourquoi, quand ρ est proche de un, la guérison spontanée l'emporte sur la contamination et empêche que tout le réseau soit contaminé, tandis que pour ρ proche de zéro la guérison spontanée peut arriver à vaincre la contamination, même si en moyenne celle-ci fait augmenter ρ vers sa valeur métastable ρ^* .

Pour un système de taille finie, la fonction $\pi(\rho, t)$ qui décrit la probabilité d'observer telle ou telle valeur de la densité ρ à la date t (et qui dépend de l'état du système à la date initiale $t = 0$) est, aux grandes dates, la superposition de deux distributions [109] : d'une part, un pic de Dirac centré en $\rho = 0$ et dont l'aire est égale à la probabilité que le système ait déjà basculé dans l'état absorbant, et d'autre part une courbe semblable à $\pi^*(\rho)$, translatée vers le bas du fait de la fuite de probabilité de l'état métastable vers l'état absorbant (cette distribution et le pic de Dirac se comportent comme des vases communicants).

Durée de vie de l'état métastable. La fonction π nous renseigne par définition sur la probabilité d'observer telle ou telle valeur de la densité ρ , mais on en déduit aussi l'ordre de grandeur du temps de vie de l'état métastable (ou, de manière équivalente, le taux de fuite de la probabilité que le système soit dans l'état métastable avec une densité $\rho > 0$ plutôt que dans l'état absorbant), à l'aide du raisonnement suivant. Quand le système se trouve dans l'état métastable, donc avec une densité ρ proche de la valeur la plus probable ρ^* , il ne peut passer dans l'état absorbant qu'après que la densité a diminué jusqu'à une valeur proche de zéro. En effet, en chaque durée infinitésimale le nombre de sites malades n ne varie que d'un au plus. Donc la probabilité de sauter dans l'état absorbant est inférieure ou égale à celle d'atteindre $\rho = 0$, c'est-à-dire $\exp[-N\pi(0)]$, et le temps de survie de l'état métastable est supérieur à $\exp[-N\pi(0)]$ (à un facteur près; on confond ici comme souvent temps d'attente d'un événement et inverse de la probabilité de cet événement, en utilisant le fait que la cinétique possède une durée de corrélation τ finie et que l'on peut raisonner sur des événements successifs séparés par des durées nettement supérieures à τ comme l'on raisonnerait sur des événements statistiquement indépendants). Réciproquement, si le nombre de sites contaminés est fini (ou en tout cas subextensif, très petit devant le nombre total de sites N), la probabilité p que tous guérissent avant une certaine durée fixée t est finie. Donc la probabilité que l'épidémie cesse avant une durée donnée ($\geq t$) est supérieure ou égale à la probabilité que ce petit nombre de sites soit atteint multipliée par p , et cette probabilité devient proche de un pour une durée de l'ordre de $\exp[-N\pi(0)] + t$. Bien entendu, ce raisonnement ne livre pas directement la durée exacte (les bornes inférieure et supérieure ci-dessus ont de nombreux préfacteurs inconnus et ne coïncident donc pas forcément), mais il indique déjà la contribution la plus importante à cette durée à la limite $N \rightarrow +\infty$, à savoir $\exp[-N\pi(0)]$ (en particulier, la durée de corrélation τ n'est pas plus grande que cette contribution, car la vidange de la plupart des sites malades et leur réapparition suffit à décorrélérer le système, donc il serait absurde que la durée de corrélation soit plus grande que le temps d'atteinte de $\rho = 0$). C'est pourquoi le calcul de π à venir nous permet de donner une estimation de la durée de vie de l'état métastable du processus de contact. Encore une fois, cette durée de vie augmente exponentiellement avec la taille N du système considéré, comme pour dans la théorie de champ moyen de la métastabilité [100], alors que la durée de vie d'une phase métastable dans un système de dimension finie avec interactions à courte portée diminue avec la taille du système à cause du mécanisme de nucléation expliqué p. 127.

Comportement critique. Quand $\lambda = \lambda_c$, c'est-à-dire au point critique, la densité moyenne $\rho(t)$ décroît vers zéro comme une fonction algébrique de t (comparer la vitesse de décroissance des séries pour $\lambda = 0.5$ et $\lambda = 1$ fig. 7.2 : la première est exponentielle, la seconde en $1/t$). L'exposant caractéristique de cette décroissance est un exposant critique universel (décroissance en $1/t$ en champ moyen et au-dessus de la dimension critique supérieure 4). On sait que

cette transition de phase fait partie de la classe d'universalité dite de la percolation dirigée (et appelée dans les années 1970 et 1980 classes d'universalité de la théorie des champs de Reggeon [110, 111, 112, 113]).

L'effet du désordre gelé sur la classe d'universalité a fait l'objet d'études depuis une vingtaine d'années; il est acquis qu'un désordre fort fait passer de la classe d'universalité de la percolation dirigée vers celle du modèle d'Ising à champ aléatoire (avec activation), mais pour un désordre faible plusieurs auteurs trouvent une variation continue des exposants critiques avec l'intensité du désordre tandis que des simulations Monte Carlo plaident en faveur d'un passage brutal au nouveau comportement critique, si faible le désordre soit-il [114].

En l'absence de désordre, la classe d'universalité de la percolation dirigée est très vaste (son mécanisme critique est très robuste) [115]. Un moyen d'en sortir est d'ajouter des contraintes supplémentaires, par exemple remplacer la règle de guérison spontanée du processus de contact par la règle : « deux sites malades voisins immédiats ont le taux de probabilité 1 de guérir ». Le modèle issu de ce remplacement (appelé *processus de contact à parité conservée*, PCPC) possède une quantité conservée que n'a pas le processus de contact, à savoir la parité du nombre de sites malades, et sa classe d'universalité n'est pas celle de la percolation dirigée. Voir [115] pour une discussion des différentes variantes de cette classe d'universalité que l'on peut obtenir en ajoutant des contraintes. Le cas du processus de contact par paires avec diffusion (PCPC où l'on ajoute la possibilité pour les sites malades de diffuser sur le réseau) fait l'objet d'un vaste débat (voir les références de [115]). Un autre moyen de « sortir » de la classe d'universalité de la percolation dirigée est de modifier le processus stochastique de sorte que le nombre d'états absorbants soit infini [116].

Systèmes bien mélangés. Les réalisations expérimentales concrètes des processus stochastiques sont bien entendu tridimensionnelles (parfois bi- ou mono-dimensionnelles). Par « concrètes », nous entendons « où une réaction entre des entités élémentaires physiques a physiquement lieu », comme en chimie, à l'exclusion des réalisations où les interactions sont abstraites, indirectes, comme dans les cas des réseaux d'interactions entre individus ou entre gènes, qui peuvent avoir une géométrie quelconque. Dans quelle mesure peut-on alors justifier les approches, très courantes, où l'on modélise l'évolution d'un système expérimental uniquement par l'évolution des densités moyennes, ce qui est valide en champ moyen à cause de l'auto-moyennance, mais pas *a priori* en dimension finie? Le critère habituellement avancé est qu'une telle approche est correcte quand le système est « bien mélangé », de sorte que chaque particule a une probabilité non négligeable d'interagir avec toutes les autres. Pouvons-nous quantifier ce critère? Nous pouvons représenter par la pensée un système tridimensionnel mélangé (par exemple un bécher de solution avec un agitateur magnétique qui provoque un écoulement hydrodynamique turbulent dans la solution) comme un système sur réseau tridimensionnel où, à chaque pas de temps, l'on réalise une permutation de certains sites du réseau (ou une permutation de groupes de sites, ou une permutation de plans de sites, *etc.*). Cela définit une constante de temps : la durée de corrélation du mélange (si le processus de mélange est représenté par une matrice d'évolution, comme pour les processus de Markov, cette durée de corrélation τ est définie par $\exp(1/\tau) = |\lambda_0|/|\lambda_1|$ où $|\lambda_0|$ et $|\lambda_1|$ sont respectivement le plus grand et le deuxième plus grand modules de valeurs propres de la matrice d'évolution). Cette constante de temps possède vraisemblablement un équivalent asymptotique à la limite où le nombre de sites N du système diverge. Il est plausible que les résultats du champ moyen sont valables si et seulement si cette constante de temps de mélange est strictement inférieure (asymptotiquement) à la constante de temps du processus stochastique sur réseau complet (sachant que la constante de temps du processus stochastique est forcément plus petite, à nombre de sites égaux, sur réseau complet qu'en dimension finie, car l'isolement relatif de régions du réseau de dimension finie les préserve de l'évolution globale et ralentit la cinétique). Intuitivement, si la durée de mélange est asymptotiquement plus grande que la durée caractéristique du processus, le processus a le temps de se « rendre compte » qu'il est en dimension finie avant d'avoir été mélangé. Inversement, si elle est plus petite, un site donné n'a pas le temps de nouer des corrélations

avec les sites de son voisinage avant que ce voisinage ait été étiré dans tout le système et que le site se soit vu juxtaposer de nouveaux voisins. Pour le cas du processus de contact, la durée caractéristique du processus est la durée d'équilibrage vers l'état métastable (si $\lambda > \lambda_c$) ou de relaxation vers l'état absorbant (si $\lambda < \lambda_c$), et elle croît comme $\ln N$ sur réseau complet. Donc les résultats de champ moyen devraient être valables si la durée caractéristique de mélange est strictement inférieure à $\ln N$. Pour ce qui est des propriétés critiques, on peut probablement relâcher cette contrainte : nous savons que, sur réseau complet, la densité de sites malades décroît comme $1/t$ (et cette décroissance est plus lente en dimension finie d'après le même argument que ci-dessus), donc, en dimension finie, si le mélange fait décroître toutes les fonctions de corrélation temporelles plus vite que $1/t$, la cinétique est la même qu'en champ moyen (au voisinage du point critique $\lambda = \lambda_c$) et les exposants critiques et fonctions d'échelles y sont les mêmes (voir la section 2.2 pour une définition de ces concepts). En revanche, les quantités non universelles ne prendront leur valeur de champ moyen que si la durée de corrélation est inférieure à $1/\ln N$. (En termes de matrice d'évolution (du mélange), la décroissance en $1/t$ des corrélations signifie que les valeurs propres de plus grands modules ont le même module — elles peuvent être asymptotiquement dégénérées, par exemple [71], donc le terme dominant de la décroissance de la fonction de corrélation, exponentiel en t , est ici égal à un, et c'est le préfacteur non exponentiel qui gouverne la décroissance).

Chapitre 8

Formalisme

CE chapitre est dévolu au formalisme que nous avons introduit pour étudier les grandes déviations du processus de contact, et dont nous pensons qu'il peut être utile pour beaucoup d'autres calculs. Il est dans l'esprit de celui connu sous le nom de *théorie de champ moyen dynamique* (DMFT en anglais) [117] et utilisé pour étudier les systèmes quantiques à électrons fortement corrélés typiques de la physique du solide (notamment le modèle de Hubbard). Nous rappelons d'abord le principe de la construction d'une intégrale de chemins pour un processus stochastique défini par des règles cinétiques — c'est cette intégrale de chemins qu'il s'agira ensuite de calculer à l'aide d'une méthode connue dans le cas du modèle d'Ising [118]. Le calcul pour le modèle d'Ising est rappelé dans un but pédagogique au deuxième paragraphe, et nous l'étendons ensuite à différents cas qui apparaissent dans des processus stochastiques définis par leur cinétique. Le cas des variables aléatoires à trois valeurs ou plus constitue un résultat original non publié ailleurs.

Il s'agit schématiquement d'approximer une somme d'un grand nombre de termes (par exemple la fonction de partition d'un modèle, et pour nous une intégrale de chemins) par son ou ses plus grands termes, comme dans la méthode du point col (ou méthode de Laplace) :

1. Comme on ne sait pas quels sont ces termes dominants, on regroupe d'abord les termes par ensembles ayant les mêmes valeurs moyennes de paramètres d'ordre (c'est-à-dire d'observables dont on pense qu'elles ont une valeur caractéristique de l'état « thermodynamique » du système). Concrètement, cela veut dire que l'on sélectionne les termes par transformée de Legendre, à l'aide de multiplicateurs de Lagrange (*i.e.* de « champs extérieurs ») conjugués de ces observables.
2. On calcule la contribution de chaque regroupement à la somme totale en sommant simplement les termes ainsi repondérés par les multiplicateurs de Lagrange. Comme cette sommation est impossible à faire de façon exacte (sans quoi l'on pourrait calculer directement la somme totale sans utiliser de regroupements), on repère un ou plusieurs champs tels que les degrés de liberté du modèle soient découplés quand ces champs sont nuls, et l'on fait un développement de Taylor de la somme en fonction de ces champs (par exemple, dans le cas de la fonction de partition du modèle d'Ising, on peut utiliser la température inverse β : quand $\beta = 0$, la somme sur les configurations se factorise en produits de sommes sur un spin — voir plus loin). Le découplage des degrés de liberté permet de calculer les dérivées successives de façon exacte.
3. On détermine enfin quel(s) regroupement(s) apportent les contributions dominantes, et on approxime la somme totale par les contributions de ces regroupements. Cette détermination peut consister simplement à dériver les contributions des regroupements par rapport aux valeurs moyennes imposées des paramètres d'ordre et à chercher les points stationnaires en demandant que ces dérivées soient nulles (si l'on est sûr qu'un maximum existe et qu'il est unique).

Bien entendu, cette méthode repose fortement sur le phénomène de concentration de la mesure (ou auto-moyennance) pour qu'il y ait un ou des regroupements dominants. Elle n'est donc valable qu'à la limite thermodynamique.

8.1 Construction d'une intégrale de chemins pour un processus stochastique markovien

8.1.1 Motivation

Pour calculer les propriétés statistiques d'un processus stochastique, il est nécessaire de manipuler des *distributions* statistiques. En effet, comme les règles d'évolution d'un tel processus présentent en général des alternatives (« telle configuration devient telle autre *ou* telle autre »), si l'on essaie de suivre le devenir d'une configuration initiale on est très rapidement confronté à construire un arbre ayant un nombre de ramifications exponentiel en la taille du système, autrement dit à manipuler la distribution de probabilité des configurations du système.

À première vue, cela semble infaisable : pour un système de N variables bivaluées comme dans le processus de contact, il y a 2^N configurations dont il faut donner la probabilité en fonction du temps. Cependant, l'on est en général intéressé par la valeur moyenne (ou la distribution) d'un petit nombre d'observables, et l'on peut regrouper les configurations qui partagent les mêmes valeurs de ces observables, exactement comme en mécanique statistique on regroupe toutes les configurations microscopiques qui partagent les mêmes valeurs des paramètres macroscopiques (volume, énergie, *etc.*), et l'on peut définir une entropie comme le logarithme du nombre de configurations regroupées. Nous voilà ramenés au calcul de la distribution (densité de probabilité) d'un ou de quelques paramètres (et du temps). La question est donc maintenant : « quelle est la probabilité que telle observable ait telle valeur à l'instant t sachant que la configuration initiale était telle ? » plutôt que « quelle est la probabilité d'observer telle configuration... ? ».

Cette probabilité elle-même est bien sûr la somme des probabilités à l'instant t des configurations qui partagent cette valeur de l'observable, et la probabilité à t d'une configuration est la somme des probabilités des chemins qui y mènent, c'est-à-dire des séquences de configurations compatibles avec les règles cinétiques du processus étudié, qui partent de la (ou de l'une des) configuration(s) initiale(s) à l'instant initial et qui arrivent à cette configuration à t . Ici encore, le calcul paraît infaisable vu le nombre exponentiel de chemins. Mais, quand le système est grand,

- On peut faire un regroupement selon la valeur des observables macroscopiques, et décrire les chemins non pas en termes des configurations individuelles visitées aux différents instants, mais en termes des valeurs prises par les observables macroscopiques. Un chemin (fonction du temps à valeurs dans l'ensemble des configurations) est donc remplacé par une ou quelques fonctions du temps indiquant la valeur des observables le long de ce chemin.
- La plupart des chemins décrits par la valeur des observables macroscopiques ont une probabilité exponentiellement petite, même en tenant compte de leur entropie, donc on peut se ramener à l'étude du ou des chemins dominants et approximer la probabilité cherchée par celle des chemins dominants (approximation de point col ou de Laplace).

Cette somme sur les chemins évoque bien sûr l'intégrale de chemins bien connue depuis les travaux de R. P. Feynman en mécanique quantique, et nous allons utiliser une construction similaire. Cependant, il nous semble que dans le cadre des processus stochastiques on peut faire cette construction de manière presque rigoureuse, et justifier les considérations plutôt vagues ci-dessus (comment regroupe-t-on les configurations ? Ce regroupement est-il justifié ? Y a-t-il vraiment un ou des chemins dominants ?).

Avant d'aborder la construction proprement dite, nous souhaiterions préciser trois points. Le premier concerne la simplification par regroupement des configurations. À l'issue du calcul, nous disposerons d'une somme sur les chemins décrits par les valeurs des observables macroscopiques dont nous tirerons des équations du mouvement pour ces valeurs. Bien entendu, les valeurs des observables macroscopiques ne sont qu'un résumé grossier des configurations microscopiques (il faudrait une infinité d'observables macroscopiques pour décrire complètement les

configurations). Et pourtant, ce résumé suffit dans une large mesure à décrire la physique des processus (comme en mécanique statistique) ; nous ne verrons apparaître une trace de l'existence des configurations microscopiques que quand nous étudierons un processus stochastique en dimension finie : dans ce cas, les équations du mouvement pour les valeurs des observables macroscopiques ne sont pas de simples équations différentielles mais des équations intégro-différentielles, à *noyaux* de mémoire ; et encore, car ces intégrales à noyaux sont affectées de coefficients petits quand la dimension d'espace est grande. Il est probable que la situation est ainsi favorable quand les observables macroscopiques sont bien choisies et reflètent la physique du système (par exemple quand elles sont des paramètres d'ordre), d'où l'importance d'une intuition ou d'une compréhension qualitative du modèle avant de commencer les calculs. L'approche de la mécanique statistique est en tout cas remarquablement puissante même dans le contexte des processus stochastiques.

Ces noyaux de mémoire apparaissent même quand le processus stochastique est *markovien*, c'est-à-dire quand les règles de transition ne font appel qu'à la configuration actuelle où le système se trouve pour dicter son évolution — c'est le cas du processus de contact. On comprend ce phénomène en voyant un exemple minimal : soit le processus (déterministe) défini par les équations différentielles

$$\frac{dx(t)}{dt} = -x(t) + \beta y(t) \quad (8.1)$$

$$\frac{dy(t)}{dt} = -\alpha y(t) + \gamma x(t) \quad (8.2)$$

avec les conditions initiales $x(0) = 1$ et $y(0) = 0$. La façon la plus commode de résoudre ce système est d'utiliser des combinaisons linéaires des deux équations différentielles ou de l'écrire en utilisant une matrice que l'on diagonalise, en tout cas de se ramener à des degrés de liberté découplés $u(t)$ et $v(t)$ qui satisfont tous deux à une équation différentielle linéaire du premier ordre et sans second membre. Si au contraire nous traitons $y(t)$ comme une variable cachée et cherchons quelle équation régit $x(t)$ seul, nous résolvons l'équation pour $y(t)$ en fonction de $x(t)$ et reportons le résultat dans l'équation pour $x(t)$, d'où

$$\frac{dx(t)}{dt} = -x(t) + \beta\gamma \int_0^t dt' \left[e^{-\alpha(t-t')} x(t') \right]. \quad (8.3)$$

Quand le couplage $\beta\gamma$ entre x et y est non nul, l'équation intégro-différentielle pour $x(t)$ a un noyau de mémoire dont la constante de temps α est la durée de relaxation de $y(t)$. Le même phénomène est à l'œuvre dans le processus de contact en dimension finie (voir le chapitre suivant).

La deuxième précision a trait aux observables macroscopiques. En fait, nous verrons que ces observables viennent par couples, l'une étant une quantité « statique », c'est-à-dire mesurable sur une configuration donnée (ou à un instant donné), l'autre mesurant en quelque sorte le changement entre deux configurations successives. Ceci n'est pas sans rappeler la description en termes de *positions* et de *vitesses* de la mécanique statistique, et d'ailleurs nous retrouverons cette analogie quand nous écrirons des équations semblables aux équations de Hamilton-Jacobi. Le doublement du nombre de champs utiles pour décrire un modèle hors d'équilibre est un fait bien connu et constaté pour la première fois semble-t-il par L. V. Keldysh dans le contexte de la mécanique quantique [119], puis par P. C. Martin, E. Siggia et H. Rose dans celui de modèles classiques [120].

La troisième précision est justement d'ordre historique : l'utilisation d'opérateurs « quantiques », comme nous allons le voir, et d'une intégrale de chemins pour étudier un processus stochastique n'a rien de nouveau (l'originalité de nos travaux réside dans la façon dont nous construisons, calculons et exploitons l'intégrale de chemins, voir ci-dessous). L'un des premiers travaux dans la lignée desquels le nôtre s'inscrit est celui de Martin, Siggia et Rose en 1973 [120]. L'utilisation d'opérateurs « quantiques », c'est-à-dire de matrices, est présente dans les travaux de L. Kadanoff et J. Swift dès 1968 [121], puis de B. U. Felderhof en 1971 [122, 123],

de Harvey A. Rose en 1979 [124], de P. Grassberger et M. Scheunert en 1980 [125]. La première construction d'une intégrale de chemins pour étudier les processus stochastiques est due, semble-t-il, à M. Doi en 1976 [126]. Cette même année, une intégrale de chemins a été construite (en partie) à partir de l'approche de Martin, Siggia et Rose par H.-K. Janssen *et al.* [127, 128] et C. de Dominicis [129], qui s'en servent pour étudier les propriétés critiques de certains modèles hors d'équilibre à l'aide du groupe de renormalisation. L. Peliti perfectionne le formalisme en 1984 [130] et il est, depuis, connu dans la littérature sous le nom de formalisme de Doi-Peliti. À partir du milieu des années 1990, un regain d'activité s'attache de nouveau à utiliser le groupe de renormalisation [131, 132, 133, 134]. Depuis, les travaux dans ce domaine sont très nombreux (voir par exemple [135] pour un autre méthode récente de construction du formalisme de Doi-Peliti) ; beaucoup s'attachent à étudier les propriétés critiques des transitions de phases hors équilibre [136] et à les classifier en appliquant la théorie du groupe de renormalisation aux théories des champs construites par le formalisme dit de Doi-Peliti [137]. Voir [115] pour une tentative récente de classification des transitions de phases des modèles de réaction-diffusion fondée sur la discussion du portrait de phase de hamiltonien effectif que l'on trouve à partir des techniques de construction de l'intégrale de chemins. Notre propre contribution se distingue de ces travaux en ce que nous ne cherchons pas à utiliser le groupe de renormalisation sur le lagrangien obtenu pour en déduire des propriétés critiques, mais que nous *calculons effectivement* le poids des chemins qui dominent cette intégrale pour en déduire la distribution de probabilité de l'observable qui nous intéresse (et donc en particulier, *via* l'utilisation d'un chemin instantonique, la durée de vie de l'état métastable du processus de contact comme expliqué au chapitre précédent, p. 131 — voir aussi la référence [138] pour une méthode similaire dans l'esprit, où l'approximation WKB bien connue en mécanique quantique est utilisée pour le calcul de probabilités d'événements rares pour des systèmes de particules en interaction sur réseau complet). Nous avons ainsi accès à la fonction de grandes déviations complète du processus de contact, et pas seulement aux fluctuations gaussiennes autour de l'état le plus probable [139]. De plus, notre construction d'une théorie des champs pour un processus stochastique hors équilibre est différente de l'approche usuelle qui utilise des états cohérents et, nous l'espérons donc, à la fois plus claire et moins loin d'une construction rigoureuse (voir la discussion p. 153). Elle apporte un éclairage supplémentaire sur le sens des champs duaux introduits par la construction de l'intégrale de chemins. Enfin, elle peut se généraliser à bien d'autres processus que le processus de contact.

8.1.2 Des opérateurs « quantiques » pour représenter une équation maîtresse

La distribution de probabilité que nous devons calculer d'après ce qui a été dit se ramène aux probabilités $p(\mathcal{C}, t)$ des configurations \mathcal{C} aux dates t . Nous nous restreignons dans toute la suite aux processus stochastiques markoviens à taux de transition indépendants du temps, c'est-à-dire dont les règles d'évolution ne changent pas dans le temps et ne font appel qu'à la configuration actuelle pour décrire vers quelle(s) configuration(s) le système peut évoluer. Dans ce cas, connaissant les probabilités $p(\mathcal{C}, t)$ à la date initiale, nous pouvons les calculer à tout instant ultérieur en utilisant *l'équation maîtresse* [82]

$$\frac{dp(\mathcal{C}, t)}{dt} = \sum_{\mathcal{C}'} [w(\mathcal{C} \leftarrow \mathcal{C}')p(\mathcal{C}') - w(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C})p(\mathcal{C})] \quad (8.4)$$

où $w(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1)$ est le *taux de transition* (par unité de temps) de la configuration \mathcal{C}_1 à la configuration \mathcal{C}_2 . Cette équation peut se généraliser aux cas où les taux de transition w varient dans le temps et/ou à des cas où le processus n'est pas markovien.

Lois de probabilité. Pour les calculs ultérieurs, il s'avère commode de représenter la distribution de probabilité comme combinaison linéaire de vecteurs, un peu comme en mécanique quantique. Prenons tout d'abord l'exemple d'un système de N variables aléatoires à deux états

(variables booléennes ou spins d'Ising ± 1 , ou encore « bosons à cœur dur »). Chaque variable peut être dans deux états auxquels nous associons deux vecteurs, disons $|0\rangle$ et $|1\rangle$. Une distribution de probabilité pour une variable est représentée par le vecteur $|v\rangle := p|1\rangle + (1-p)|0\rangle$, combinaison linéaire des deux précédents, qui s'interprète comme : « la variable a la probabilité p d'être dans l'état 1 [et donc la probabilité complémentaire $1-p$ d'être dans l'état 0] ». Bien entendu, p est un nombre réel entre zéro et un. Le vecteur $|v\rangle$ est un élément de l'espace vectoriel \mathcal{E} de dimension deux engendré par $|0\rangle$ et $|1\rangle$ (et même, plus précisément, d'une partie convexe fermée de l'hyperplan d'équation $x + y = 1$ de cet espace vectoriel, du fait que les probabilités sont positives et normées). En prenant N copies de cet espace vectoriel et en en faisant le produit tensoriel, $\mathcal{E}^{\otimes N}$, nous obtenons un espace vectoriel de dimension 2^N , dont les vecteurs compatibles avec la positivité et la conservation des probabilités peuvent décrire une distribution de probabilité sur les N variables à deux états. Donnons deux exemples pour $N = 2$. Si les deux variables sont statistiquement indépendantes (*i.e.* non corrélées), la loi de la première (prise seule) s'écrit forcément $p_1|1\rangle + (1-p_1)|0\rangle$ et celle de la deuxième $p_2|1\rangle + (1-p_2)|0\rangle$, et la loi (jointe) du couple de variables s'écrit

$$p_1 p_2 |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + (1-p_1) p_2 |0\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + p_1 (1-p_2) |1\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 + (1-p_1)(1-p_2) |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \quad (8.5)$$

ou encore

$$[p_1 |1\rangle_1 + (1-p_1) |0\rangle_1] \otimes [p_2 |1\rangle_2 + (1-p_2) |0\rangle_2]. \quad (8.6)$$

Si au contraire les deux variables sont totalement corrélées et prennent toujours la même valeur (lors d'un tirage aléatoire), la loi du couple s'écrit

$$p |1\rangle_1 \otimes |1\rangle_2 + (1-p) |0\rangle_1 \otimes |0\rangle_2 \quad (8.7)$$

et ce vecteur ne peut *pas* s'écrire comme produit tensoriel de deux vecteurs des deux copies de \mathcal{E} , contrairement au précédent. Cette possibilité de « factorisation » est caractéristique des lois jointes des variables non corrélées.

Dans le cas où une variable aléatoire peut prendre un nombre fini n de valeurs, la construction précédente se généralise facilement en choisissant n vecteurs et en en construisant l'espace vectoriel engendré \mathcal{E} . De même si la variable peut prendre un nombre infini (dénombrable ou non) d'états. Un cas particulier important est celui d'une variable pouvant prendre comme valeurs les entiers naturels et qui suit une loi de Poisson (de paramètre c) $p(n) = e^{-c} c^n / n!$; on peut écrire cette loi comme

$$e^{-c} \sum_n \frac{c^n}{n!} |n\rangle. \quad (8.8)$$

Pour écrire formellement la probabilité d'un événement, il est utile de représenter cet événement comme un vecteur de l'espace dual de \mathcal{E} . Par exemple, dans le cas d'une variable à deux valeurs, l'espace dual est engendré par les vecteurs $\langle 0|$ et $\langle 1|$. Pour un couple de variables à deux valeurs, on peut écrire l'événement « la première variable prend la valeur 1 tandis que la deuxième prend la valeur 0 » comme $\langle e| := \langle 1|_1 \otimes \langle 0|_2$, et, si la loi de probabilité du couple est représentée par le vecteur $|v\rangle$, la probabilité de cet événement est le « produit scalaire » $\langle e|v\rangle$. Un élément particulier de l'espace dual est *l'état-projection*

$$\langle O| := (\langle 0| + \langle 1|)^{\otimes N} \quad (8.9)$$

qui correspond à l'événement trivial qui arrive toujours. La normalisation d'une loi de probabilité $|v\rangle$ s'écrit

$$\langle O|v\rangle = 1. \quad (8.10)$$

Observables. Pour représenter le calcul de la moyenne d'une observable, on peut introduire un opérateur dont la matrice dans la base canonique des configurations est diagonale, chaque élément de matrice étant égal à la valeur prise par l'observable dans cette configuration. Par

exemple, dans le cas d'une variable aléatoire prenant les valeurs 4, 5 et 6, l'observable « valeur de la variable aléatoire » est représentée par l'opérateur

$$\hat{A} := 4|4\rangle\langle 4| + 5|5\rangle\langle 5| + 6|6\rangle\langle 6| \quad (8.11)$$

et sa moyenne dans la distribution $|v\rangle$ par

$$\langle O|\hat{A}|v\rangle. \quad (8.12)$$

On pourrait aussi représenter cette moyenne par le produit scalaire de $|v\rangle$ et de la forme linéaire $\langle O|\hat{A}$.

Équation maîtresse. Fixons maintenant un ensemble de configurations d'un modèle statistique représentées par un espace vectoriel \mathcal{E} (par exemple, $(|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes N}$ pour le processus de contact ou le modèle d'Ising à N sites : la configuration où tous les sites sont vides est $\bigotimes_{i=1}^N |0\rangle_i$ etc.) et un processus stochastique markovien de taux de transition w sur ces configurations. Soit \hat{W} l'opérateur (endomorphisme de \mathcal{E}) dont les coefficients de matrice hors diagonale sont égaux aux taux des transitions :

$$\langle \mathcal{C}_2|\hat{W}|\mathcal{C}_1\rangle := w(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1) \quad (8.13)$$

et dont les coefficients diagonaux assurent la conservation de la probabilité :

$$\langle \mathcal{C}|\hat{W}|\mathcal{C}\rangle := -\sum_{\mathcal{C}'} w(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}). \quad (8.14)$$

(Dans notre exemple, \hat{W} a $2^N \times 2^N = 4^N$ coefficients). Nous pouvons écrire l'équation maîtresse comme :

$$\frac{d}{dt}|v(t)\rangle = \hat{W}|v(t)\rangle \quad (8.15)$$

où $|v(t)\rangle$ est la loi de probabilité à la date t des configurations. La conservation de la probabilité par \hat{W} s'écrit

$$\langle O|\hat{W} = 0 \quad (8.16)$$

de sorte que

$$\langle O|\frac{d}{dt}|v(t)\rangle = \frac{d}{dt}\langle O|v(t)\rangle = \frac{d1}{dt} = 0. \quad (8.17)$$

Comme il décrit l'évolution temporelle d'un système, l'opérateur \hat{W} est souvent appelé *liouwillien* par analogie avec la mécanique classique, même pour un processus non déterministe [125].

Soit $|v(0)\rangle$ la distribution de probabilité à l'instant $t = 0$, supposée connue. Comme \hat{W} ne dépend pas du temps (nous avons supposé les w constants), la solution formelle de l'équation maîtresse peut s'écrire

$$|v(t)\rangle = \exp(\hat{W}t)|v(0)\rangle, \quad (8.18)$$

où $\exp(\hat{W}t)$ vaut, par définition de l'exponentielle d'un opérateur,

$$\mathbb{I} + \hat{W}t + \frac{1}{2!}\hat{W}^2t^2 + \frac{1}{3!}\hat{W}^3t^3 + \dots \quad (8.19)$$

où \mathbb{I} est l'opérateur identité. Quand l'opérateur \hat{W} dépend du temps (nous rencontrerons ce cas dans la suite), $\hat{W}(t)$ et $\hat{W}(t')$ ne commutent en général pas si $t \neq t'$, donc ceci ne se généralise pas en

$$|v(t)\rangle = \exp\left[\int_0^t dt' \hat{W}(t')\right]|v(0)\rangle \quad (8.20)$$

comme on peut le voir en développant l'exponentielle en somme de série (à l'ordre deux, on trouve formellement $\left(\int_0^t \hat{W}\right)^2$ dont la dérivée par rapport à t est $\hat{W}\left(\int \hat{W}\right) + \left(\int \hat{W}\right)\hat{W}$ alors

qu'il faudrait $2\hat{W} \int \hat{W}$). Il faut utiliser ce que les physiciens de la théorie des champs nomment *produit-T* ou *produit ordonné en temps* (voir une définition par exemple dans [140]) et écrire

$$|v(t)\rangle = T \exp \left[\int_0^t dt' \hat{W}(t') \right] |v(0)\rangle. \quad (8.21)$$

En particulier, on remarquera que la propriété

$$\exp \left[\int_{t_2}^{t_3} dt' \hat{W}(t') \right] \exp \left[\int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{W}(t') \right] = \exp \left[\int_{t_1}^{t_3} dt' \hat{W}(t') \right] \quad (8.22)$$

est fautive. En revanche, il est bien évident que le résultat de l'évolution de $|v(t)\rangle$ de t_1 à t_3 est le même que celui d'une évolution de t_1 à t_2 suivie d'une évolution de t_2 à t_3 , et ce fait correspond à la propriété suivante du produit-T d'exponentielles :

$$\left(T \exp \left[\int_{t_2}^{t_3} dt' \hat{W}(t') \right] \right) \left(T \exp \left[\int_{t_1}^{t_2} dt' \hat{W}(t') \right] \right) = T \exp \left[\int_{t_1}^{t_3} dt' \hat{W}(t') \right]. \quad (8.23)$$

Par abus de notation, nous omettrons le produit-T dans toute la suite (comme dans la publication P3 reproduite en annexe), mais ce n'est pas gênant car, en pratique, nous ne calculerons jamais directement d'exponentielle ni de produit-T d'exponentielle comme somme de série quand \hat{W} dépend du temps. Au lieu de cela, nous résoudrons le système d'équations différentielles $d|v(t)\rangle/dt = \hat{W}|v(t)\rangle$ ou bien $d\langle v(t)|/dt = \langle v(t)|\hat{W}$ et nous déduirons les éléments de matrice de l'opérateur $\hat{W}(t_2, t_1) := T \exp \left(\int_{t_1}^{t_2} \hat{W} \right)$ de la solution trouvée (sachant que l'opérateur \hat{W} est linéaire car les équations différentielles le sont).

Opérateurs élémentaires. Les processus étudiés sont généralement composites (c'est le cas du processus de contact où les composants sont les différents sites) et l'on peut alors écrire leur opérateur \hat{W} en s'aidant d'opérateurs élémentaires. Pour des variables à deux états (notons-les 0 et 1), il est commode de définir quatre opérateurs élémentaires :

$$\hat{a}^{=1} := |1\rangle\langle 1|, \quad \hat{a}^{=0} := |0\rangle\langle 0|, \quad \hat{a}^{0\leftarrow 1} := |0\rangle\langle 1|, \quad \hat{a}^{1\leftarrow 0} := |1\rangle\langle 0| \quad (8.24)$$

où nous avons emprunté les notations de Dirac, comme plus haut, à la mécanique quantique (chaque opérateur est défini comme le produit matriciel d'un vecteur et d'une forme linéaire de l'espace dual). Les deux premiers opérateurs sont des projecteurs ; moralement, ils « testent » si la distribution de probabilité qu'on leur propose est dans l'état 1 resp. 0 : si oui, ils la laissent inchangée, si non, ils « renvoient » le vecteur nul (à ne pas confondre avec l'état $|0\rangle$). Les deux derniers modifient la distribution (pour le dernier par exemple, l'état 0 est changé en 1 et l'état 1 est annihilé, remplacé par le vecteur nul). Aucun de ces opérateurs ne conserve la probabilité.

Nous utiliserons toujours les conventions suivantes : un opérateur est désigné par un accent circonflexe (\hat{a} par exemple, tandis que a est un scalaire), son action est indiquée de façon symbolique en exposant, son indice (quand il y en a un) indique sur quelle variable il agit. Dans la littérature, usage est souvent fait de notations inspirées de la mécanique quantique : $\hat{a}^{0\leftarrow 1}$ est noté a , $\hat{a}^{1\leftarrow 0}$ est noté a^\dagger , et donc $\hat{a}^{=1}$ peut être noté $a^\dagger a$ (M. Scheunert et P. Grassberger [125] et L. Peliti [130] notent cet opérateur π). a^\dagger et a satisfont à la relation d'anticommutation de fermions $a^\dagger a + a a^\dagger = 1$, ce qui traduit le fait qu'un site est vide ou plein, mais ne peut « accueillir deux particules ou plus » (remarquer que, comme les opérateurs qui agissent sur des sites distincts commutent : $a_i a_j^\dagger - a_j^\dagger a_i = 0$, a et a^\dagger ne sont pas pour autant des opérateurs de fermions — on appelle cela des opérateurs de « bosons à cœur dur »). Mais il ne faut pas oublier que les opérateurs utilisés pour représenter les processus stochastiques ne possèdent pas toutes les propriétés des opérateurs quantiques : les coefficients sont toujours réels, il n'existe pas de produit hermitien, et un opérateur noté a^\dagger n'est pas en général l'adjoint de a . Les notations des opérateurs introduites ici nous sont propres, évitent la confusion avec la

mécanique quantique et nous semblent aptes à être généralisées à des variables à un nombre quelconque d'états.

Donnons tout de suite des exemples. Pour un système de N atomes excités (ou radioactifs) qui retombent (sans corrélations entre atomes) dans l'état fondamental (ou se désintègrent) avec une durée caractéristique τ , l'opérateur d'évolution peut être écrit

$$\hat{W} = \tau^{-1} \sum_{i=1}^N (\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\bar{=}1}). \quad (8.25)$$

(Dans cette expression, nous écrivons \hat{a}_i , qui n'est défini à proprement parler que dans l'espace de l'atome n° i , au lieu de l'expression rigoureuse

$$\mathbb{I}_1 \otimes \mathbb{I}_2 \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_{i-1} \otimes \hat{a}_i \otimes \mathbb{I}_{i+1} \otimes \dots \otimes \mathbb{I}_N \quad (8.26)$$

mais le sens est clair et l'allègement des expressions substantiel — nous commettrons toujours cet abus de notation dans la suite). Remarquer que le terme en $\hat{a}^{\bar{=}1}$, qui ne traduit pas l'évolution proprement dite, est nécessaire pour la conservation de la probabilité. Pour le processus de contact, \hat{W} s'écrit $\hat{W} = \hat{W}_{\text{ann}} + \lambda \hat{W}_{\text{cre}}$ avec

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\text{ann}} &:= \sum_i (\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\bar{=}1}) \\ \hat{W}_{\text{cre}} &:= \frac{1}{z} \sum_i \sum_{j \in i} (\hat{a}_i^{1 \leftarrow 0} - \hat{a}_i^{\bar{=}0}) \hat{a}_j^{\bar{=}1} \end{aligned} \quad (8.27)$$

où l'on reconnaît la règle de guérison spontanée (\hat{W}_{ann}) et la règle de contamination (\hat{W}_{cre}).

Pour des variables aléatoires prenant n valeurs, on peut définir de même des opérateurs

$$\hat{a}^{\bar{=}\alpha} := |\alpha\rangle\langle\alpha| \quad \text{et} \quad \hat{a}^{\beta \leftarrow \alpha} := |\beta\rangle\langle\alpha|. \quad (8.28)$$

Pour des variables prenant des valeurs entières positives (par exemple, la variable aléatoire qui décrit le nombre d'arêtes d'un sommet d'un graphe aléatoire d'Erdős et Rényi), on peut introduire des opérateurs tels que

$$\hat{a}^\times := \sum_n n |n\rangle\langle n| \quad \text{et} \quad \hat{a}^{-\times} := \sum_{n \geq 1} n |n-1\rangle\langle n|. \quad (8.29)$$

Ainsi, l'opérateur d'évolution d'une variable qui décrit le nombre d'atomes radioactifs dans une population où la durée typique de désintégration est τ peut s'écrire

$$\hat{W} = \tau^{-1} \hat{a}^{-\times} - \hat{a}^\times \quad (8.30)$$

et le nombre moyen d'atomes dans la distribution $|v(t)\rangle$ vaut

$$\langle O | \hat{a}^\times | v(t) \rangle. \quad (8.31)$$

Probabilités de chemins. Soit $\langle E |$ un événement (tel que « tous les sites du processus de contact sont vides » ou bien l'événement toujours réalisé $\langle O |$). La probabilité de cet événement à la date T est

$$\langle E | \exp(\hat{W}T) | v(0) \rangle, \quad (8.32)$$

et cette quantité peut être vue comme une somme sur tous les chemins qui mènent d'un événement possible dans la distribution initiale $|v(0)\rangle$ à l'événement E . Pour caractériser les chemins qui contribuent le plus à cette somme, et donc décrire les mécanismes physiques qui font passer le système d'un état initial à un état final, nous aurons recours au calcul de

moyennes d'observables à un instant t donné, conditionnées aux états initial et final. Si \hat{A} est la matrice de l'observable comme définie plus haut, cela s'écrit

$$\frac{\langle E|e^{\hat{W}(T-t)}\hat{A}|v(t)\rangle}{\langle E|v(T)\rangle} = \frac{\langle E|e^{\hat{W}(T-t)}\hat{A}e^{\hat{W}t}|v(0)\rangle}{\langle E|e^{\hat{W}T}|v(0)\rangle}. \quad (8.33)$$

Nous noterons cette quantité $\langle \hat{A}(t) \rangle$ (où le « (t) » ne signifie pas que l'opérateur \hat{A} dépend du temps, mais que l'on calcule sa moyenne à la date t). Le dénominateur vaut un quand l'événement $\langle E|$ est l'événement trivial $\langle O|$; en particulier, on retrouve l'expression (8.12) quand, de plus, on calcule la moyenne à $t = T$. Dans le cas du processus de contact, un cas naturel et intéressant est celui où \hat{A} est l'observable « nombre de sites malades » (on calcule ainsi le nombre moyen de sites malades en fonction du temps, conditionné à l'événement E). On peut aussi utiliser des opérateurs \hat{A} dont la matrice dans la base des configurations n'est pas diagonales, ce qui sert à calculer la réponse du système. Dans le même exemple, si E est l'état où tous les sites sont sains et si \hat{A} est l'opérateur $\hat{a}_{i_0}^{1-0}$ pour un site i_0 fixé, la moyenne conditionnée de \hat{A} à l'instant t est égale à la probabilité que le site i_0 soit sain juste avant l'instant t et que tous les sites soient sains à l'instant T sachant que le site i_0 était malade juste après l'instant t . En comparant cette probabilité avec la moyenne à t de $\hat{a}_{i_0}^{-0}$ (qui est la probabilité que le site i_0 soit sain à l'instant t sachant que tous les sites sont sains à l'instant T), on en déduit l'influence (à t) du site i_0 sur le système entier (conditionné à la guérison avant T) — ce qui est similaire au calcul des fonctions de réponse ou fonctions de Green dans les systèmes d'électrons fortement corrélés en mécanique du solide [140].

Voyons comment cette notion de probabilité ou de propriétés des chemins se généralise dans la construction d'une intégrale de chemins.

8.1.3 Construction heuristique d'une intégrale de chemins à l'aide d'états cohérents

Pour caractériser systématiquement les chemins (stochastiques) d'un processus entre un état initial et un état final donnés, nous allons (formellement) introduire des mesures de moyennes d'observables non pas à un instant donné comme au paragraphe précédent, mais à tous les instants, dans une construction semblable à la formule de Trotter [140, 141]. Nous demandons ainsi : « quelle est la probabilité qu'au long de l'évolution du système la valeur moyenne des observables ait été donnée par les fonctions de t suivantes ? » Et nous pourrions alors remplacer les vecteurs décrivant les distributions de probabilité par des fonctions (continues) à valeurs réelles du paramètre t , ou plus précisément par des champs, car il y aura une telle fonction par site dans un modèle sur graphe. Cela permet de bénéficier des techniques usuelles de théorie des champs (groupe de renormalisation par exemple).

Formellement, nous introduisons d'abord des « relations de complétude »

$$\sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}\rangle\langle\mathcal{C}| \quad (8.34)$$

(la somme porte sur toutes les configurations) à un nombre fini d'instants $t_1 < t_2 < \dots < t_n$ dans l'expression de la probabilité totale $\langle O|\exp(\hat{W}T)|v(0)\rangle$:

$$1 = \langle O|e^{\hat{W}(T-t_n)} \sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}\rangle\langle\mathcal{C}| e^{\hat{W}(t_n-t_{n-1})} \sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}\rangle\langle\mathcal{C}| \dots \sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{C}\rangle\langle\mathcal{C}| e^{\hat{W}(t_1-0)} |v(0)\rangle. \quad (8.35)$$

Le nombre n d'instants est destiné à tendre vers $+\infty$, l'écart entre les instants devenant infinitésimal. Dans ce cas, $e^{\hat{W}(t_i-t_{i-1})}$ peut être approximé par $\mathbb{I} + (t_i - t_{i-1})\hat{W}$, et, si le système est dans la configuration \mathcal{C} à t_{i-1} , il sera dans une configuration voisine à t_i . Pour exploiter ce fait, il est intéressant d'utiliser un paramétrage continu des configurations.

Un candidat naturel est celui des *états cohérents* empruntés à la mécanique quantique [142, 143, 144] (cette appellation est un peu ambiguë ; « état cohérent » désigne souvent un vecteur

propre de l'opérateur d'annihilation en mécanique quantique [140], mais parfois aussi, comme ici, un vecteur membre d'une famille paramétrée continûment pour laquelle il existe une relation de fermeture [143]). Pour des variables à deux états, on peut utiliser le paramétrage

$$\begin{aligned}\langle\phi, \theta| &= (1-\phi)^{\frac{1}{2}}\langle 0| + \phi^{\frac{1}{2}} \exp(-\hat{i}\theta) \langle 1|, \\ |\phi, \theta\rangle &= (1-\phi)^{\frac{1}{2}} |0\rangle + \phi^{\frac{1}{2}} \exp(\hat{i}\theta) |1\rangle\end{aligned}\quad (8.36)$$

où $\phi \in [0, 1]$, $\theta \in [0, 2\pi]$ et $\hat{i}^2 = -1$. Ces états satisfont à la relation de fermeture

$$\frac{1}{\pi} \int_0^1 d\phi \int_0^{2\pi} d\theta |\phi, \theta\rangle\langle\phi, \theta| = \mathbb{1}. \quad (8.37)$$

On appelle une telle famille d'états un jeu *surcomplet*, car les vecteurs $|\phi, \theta\rangle$ ne sont pas linéairement indépendants. Pour des variables à valeurs entières positives, on peut utiliser le paramétrage des états cohérents bosoniques

$$\langle z| := e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} z^{*n} \langle n|, \quad |z\rangle := e^{-\frac{1}{2}|z|^2} \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{z^n}{n!} |n\rangle \quad (8.38)$$

où z est un nombre complexe et z^* son conjugué. Ces états satisfont à la relation de complétude

$$\iint \frac{dx dy}{\pi} |z\rangle\langle z| = \mathbb{1}. \quad (8.39)$$

Enfin, pour des variables qui prennent un nombre fini de valeurs, on peut utiliser les états cohérents de spins [145, 143] (voir aussi [146] où les auteurs calculent des fonctions de corrélation à deux ou plusieurs temps de manière très similaire à ce que nous ferons plus loin). Pour une construction encore plus générale (états cohérents construits à l'aide des générateurs d'un groupe de Lie quelconque), voir [147].

Dans la suite de ce paragraphe, nous nous restreignons au cas de variables à deux états (voir par exemple l'article de L. Peliti [130] pour le cas de variables à valeurs entières positives). Avant d'insérer la relation de fermeture des états cohérents dans l'expression (8.35), faisons un changement de variable : nous posons $\psi := -\frac{1}{2} \ln[\phi/(1-\phi)] + \hat{i} \theta$ et notons

$$\begin{aligned}\langle\phi, \psi| &= \pi^{-n} (1-\phi)^{\frac{1}{2}} \left(\langle 0| + \exp(-\psi) \langle 1| \right), \\ |\phi, \psi\rangle &= (1-\phi)^{-\frac{1}{2}} \left((1-\phi) |0\rangle + \phi \exp(\psi) |1\rangle \right).\end{aligned}\quad (8.40)$$

(Dans le cas de N variables à deux états, les vecteurs adéquats sont les $|\vec{\phi}, \vec{\psi}\rangle := \otimes_{i=1}^N |\phi_i, \psi_i\rangle$). Avec ces états, (8.35) s'écrit

$$\begin{aligned}1 &= \iint \dots \int d\phi_1 d\psi_1 d\phi_2 d\psi_2 \dots d\phi_n d\psi_n \\ &\quad \langle O| e^{\hat{W}(T-t_n)} |\phi_n, \psi_n\rangle \langle\phi_n, \psi_n| e^{\hat{W}(t_n-t_{n-1})} |\phi_{n-1}, \psi_{n-1}\rangle \times \\ &\quad \langle\phi_{n-1}, \psi_{n-1}| \dots |\phi_1, \psi_1\rangle \times \langle\phi_1, \psi_1| e^{\hat{W}(t_1-0)} |v(0)\rangle.\end{aligned}\quad (8.41)$$

Voyons en détail le facteur $\langle\phi_i, \psi_i| e^{\hat{W}(t_i-t_{i-1})} |\phi_{i-1}, \psi_{i-1}\rangle$ à la limite $n \rightarrow +\infty$. Il vaut, en approximant l'exponentielle à l'ordre affine :

$$\begin{aligned}(1-\phi_i)^{\frac{1}{2}} (1-\phi_{i-1})^{-\frac{1}{2}} \left\{ 1 - \phi_{i-1} + \phi_{i-1} e^{-\psi_i + \psi_{i-1}} + \right. \\ \left. (t_i - t_{i-1}) \left[\langle 0| + e^{-\psi_i} \langle 1| \right] \hat{W} \left[(1-\phi_{i-1}) |0\rangle + \phi_{i-1} e^{\psi_{i-1}} |1\rangle \right] \right\}.\end{aligned}\quad (8.42)$$

Comme les valeurs de l'intégrand de (8.41) sont faibles (et négligeables à la limite $n \rightarrow +\infty$) quand (ϕ_i, ψ_i) n'est pas proche de (ϕ_{i-1}, ψ_{i-1}) (c'est-à-dire à distance d'ordre $t_i - t_{i-1}$), nous pouvons nous restreindre à cette hypothèse et simplifier notre facteur en :

$$(1 - \phi_i)^{\frac{1}{2}}(1 - \phi_{i-1})^{-\frac{1}{2}} \left[1 + \phi_{i-1}(-\psi_i + \psi_{i-1}) + (t_i - t_{i-1})\tilde{W}(\phi_i, \psi_i) \right] \quad (8.43)$$

où nous avons introduit l'élément de matrice

$$\tilde{W}(\phi, \psi) := \left[\langle 0| + e^{-\psi} \langle 1| \right] \hat{W} \left[(1 - \phi)|0\rangle + \phi e^{\psi}|1\rangle \right] \quad (8.44)$$

de \hat{W} entre deux états cohérents. Les facteurs en $(1 - \phi_i)^{\frac{1}{2}}$ s'éliminent en cascade quand on reporte l'expression précédente dans (8.41). Il reste, à la limite $n \rightarrow +\infty$, en voyant le produit dans (8.41) comme le développement d'une exponentielle et passant à la limite continue à partir des différences finies, l'objet

$$\iint \mathcal{D}\phi(t) \mathcal{D}\psi(t) \langle O|\phi(T), \psi(T)\rangle e^{\int_{t=0}^T dt [-\phi(t) \frac{d\psi(t)}{dt} + \tilde{W}(\phi(t), \psi(t))]} \langle \phi(0), \psi(0)|v(0)\rangle \quad (8.45)$$

appelé intégrale de chemins. Par analogie avec la mécanique classique, nous appelons *action* S l'opposé de l'argument de l'exponentielle (y compris le logarithme des facteurs de bord : $\ln \langle O|\phi(T), \psi(T)\rangle$ et $\ln \langle \phi(0), \psi(0)|v(0)\rangle$), et *partie cinétique* le terme de l'action qui reste quand le processus est trivial ($\hat{W} = \tilde{W} = 0$). Les facteurs $1/\pi$ des relations de fermeture sont compris dans la définition de la mesure d'intégration. Cet objet n'a de sens mathématique que comme limite $n \rightarrow +\infty$ des expressions à n fini, mais cette écriture est compacte et aide le raisonnement. On peut bien entendu la généraliser au cas de N variables en prenant des produits tensoriels d'états cohérents.

Que le lecteur frustré par les nombreuses approximations et le manque de rigueur dans la construction ci-dessus ne s'emporte pas (les bornes et chemins d'intégration sur ϕ et ψ ne sont pas claires (d'ailleurs, ces variables sont-elles réelles ? Sont-elles complexes ?), les erreurs dans les approximations successives ne sont pas quantifiées, *etc.*). Il est notoire [140] qu'une intégrale de chemins est un objet mathématique mal défini, et nous n'allons de toute façon pas l'utiliser directement. Au contraire, nous utiliserons une construction différente, annoncée au début de ce chapitre et fondée sur des transformées de Legendre, et qui nous semble plus rigoureuse. L'intérêt de l'intégrale de chemins est d'une part d'établir une connexion avec un usage répandu dans la littérature, où elle est le point de départ de l'étude d'un processus stochastique à l'aide d'une théorie de champs, et d'autre part de permettre des dérivations heuristiques de résultats que nous retrouverons. En particulier, si l'on fait — formellement — une approximation de point col (ou approximation de la phase quasi stationnaire) dans l'intégrale de chemins, on trouve les équations dites *du mouvement*

$$\begin{aligned} \frac{d\psi(t)}{dt} &= \partial_{\phi} \tilde{W}[\phi(t), \psi(t)] \\ \frac{d\phi(t)}{dt} &= -\partial_{\psi} \tilde{W}[\phi(t), \psi(t)] \end{aligned} \quad (8.46)$$

qui ressemblent beaucoup aux équations de Hamilton-Jacobi de la mécanique classique (7.1). Autrement dit, bien qu'aucune énergie ne soit définie dans ce problème, il semble que les trajectoires en un certain sens typiques soient comme les trajectoires d'une particule classique de position $\phi(t)$ et de vitesse $\psi(t)$ qui se déplace dans le champ d'énergie $\tilde{W}(\phi, \psi)$, et cette énergie est conservée (la dérivée temporelle de $\tilde{W}(\phi(t), \psi(t))$ le long d'une trajectoire est nulle). L'analogie a ses limites : il n'y a pas ici d'énergie cinétique et d'énergie potentielle bien séparées, mais une énergie « mélangée ». Mais le hamiltonien effectif \tilde{W} est très utile pour permettre une compréhension qualitative des modèles définis par leur cinétique grâce à la discussion du portrait de phases (voir la section 9.2 pour le cas du processus de contact ou l'article récent [115] pour des cas plus généraux).

Avant de voir l'autre construction de la théorie de champs, prenons un exemple pour entrevoir ce que signifient ces trajectoires. Soit une nouvelle fois N atomes radioactifs qui se désintègrent en une durée caractéristique τ . \hat{W} s'écrit, pour chaque atome i , $\tau^{-1}(\hat{a}_i^{0-1} - \hat{a}_i^{-1})$, donc, ici, $\tilde{W}(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \sum_i \tau^{-1} \phi_i [\exp(\psi_i) - 1]$. Alors les équations du mouvement sont (en omettant les indices i communs) :

$$\begin{aligned} \tau \frac{d\psi(t)}{dt} &= e^{\psi(t)} - 1 \\ \tau \frac{d\phi(t)}{dt} &= -\phi(t)e^{\psi(t)}. \end{aligned} \quad (8.47)$$

Quand $\psi(0)$ est nul initialement, il le reste à tout instant, et $\phi_i(t)$ obéit à

$$\frac{d\phi_i(t)}{dt} = -\tau^{-1} \phi_i(t), \quad (8.48)$$

donc $\phi_i(t)$ indique la probabilité que l'atome i soit encore radioactif à t s'il l'était à $t = 0$. Pris collectivement, les atomes forment un système auto-moyennant (la loi des grands nombres s'applique car les atomes sont statistiquement indépendants) et l'intégrale de chemins est dominée par les chemins où les champs ϕ_i, ψ_i ont tous quasiment la même valeur. Pour de tels chemins, il vient un facteur N dans l'exponentielle dans l'intégrale, et sa valeur est bien approximée par la valeur de l'intégrand au point col, c'est-à-dire par les $\phi_i(t)$ et $\psi_i(t)$ solutions des équations du mouvement. La solution à $\psi = 0$ a en particulier une « énergie » \tilde{W} nulle, donc l'intégrand vaut 1 pour elle, et elle contribue donc de manière notable, alors qu'un chemin pour lequel « l'action » $S := -\int_{t=0}^T [-\phi(t)d\psi(t)/dt + \tilde{W}(\phi, \psi)]$ n'est pas nulle contribue de manière exponentiellement petite en N (en admettant que l'action est positive). Nous verrons au chapitre suivant que les poids des autres chemins sont bel et bien inférieurs à celui-ci.

8.2 Préliminaire : développement à haute température et à magnétisation fixée de la fonction de partition du modèle d'Ising

Il s'agit maintenant de calculer l'intégrale de chemins que nous venons de construire (ou encore, de calculer les probabilités $\langle E | \exp(\hat{W}T) | v(0) \rangle$). Comme c'est un objet compliqué, arrêtons-nous un instant sur le cas du modèle d'Ising, et voyons comment on peut en calculer la fonction de partition. Le calcul de notre intégrale de chemins pourra ensuite être vu comme une généralisation.

Le modèle d'Ising (vu en introduction) attribue à chaque configuration \mathcal{C} des variables S_i , appelées *spins*, à valeurs dans $\{-1, 1\}$ et situées sur un graphe \mathcal{G} , le poids statistique $\exp[-\beta H(\mathcal{C})]$, où β est la température inverse et où l'énergie H de la configuration \mathcal{C} est

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j.$$

La somme porte sur les paires $\{i, j\}$ de sites du graphe \mathcal{G} reliés par une arête, que l'on note $\langle i, j \rangle$; les nombres réels J_{ij} sont les constantes de couplage entre spins.

Nous allons calculer la fonction de partition $Z = \sum_{\mathcal{C}} \exp[-\beta H(\mathcal{C})]$ selon le schéma indiqué plus haut : nous regroupons les termes de Z selon la valeur moyenne de la magnétisation de chaque spin, qui est ici le paramètre d'ordre, puis nous cherchons parmi eux le(s) terme(s) dominant(s). Le développement de Taylor se fera au voisinage d'un point où Z (et ses dérivées par rapport aux champs extérieurs) se calcule de façon exacte. En pratique, si le système n'est pas intégrable (voir la définition au chapitre 12), cela n'est possible que quand le système est *libre*, c'est-à-dire quand les interactions entre sites sont nulles. Ceci (n'est) réalisé (que) quand

toutes les constantes de couplage J_{ij} sont nulles. Nous introduisons donc un facteur λ devant chaque J_{ij} et nous développons en série de Taylor

$$Y(\lambda) = \sum_{\mathcal{C}} e^{\lambda \beta \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j} \quad (8.49)$$

au voisinage du point $\lambda = 0$, où les interactions sont nulles. À la fin, nous prendrons $\lambda = 1$ pour obtenir la valeur de $Z = Y(1)$ qui nous intéresse.

Remarquer que nous pourrions aussi utiliser β comme paramètre de développement, puisque β et λ jouent le même rôle dans Z . On dit donc que nous effectuons un *développement à hautes températures à magnétisation fixée*. Cette idée, apparue semble-t-il dans les années 1960 (où les développements en séries ont été beaucoup utilisés, en partie parce que les méthodes Monte Carlo étaient peu utiles faute d'ordinateurs rapides) [148], se révèle en fait très puissante, car elle permet de calculer des quantités caractéristiques du modèle à *basse température aussi* [149]. Mais ne perdons pas de vue que la température ne joue pas de rôle particulier dans le développement : ce qui compte physiquement est que les interactions soient nulles au point autour duquel nous développons. Pour alléger les calculs, nous allons dans la suite fixer $\beta = 1$ et prendre à la fin $\lambda = \beta$ au lieu de $\lambda = 1$.

Nous suivrons une approche fortement inspirée de celle d'Antoine Georges et de Jonathan Yedidia, qui ont utilisé cette méthode de calcul pour les modèles d'Ising ferromagnétique [118], complètement frustré [150] et verre de spins [151], puis pour le modèle de Hubbard [152].

Étape 1. Le point de départ du calcul est de remplacer la fonction de partition Z par

$$Y(\lambda) = \sum_{\{S_i\}} \exp \left[\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i(\lambda) (S_i - m_i) \right]. \quad (8.50)$$

Le multiplicateur de Lagrange h_i est ainsi défini : il contraint la magnétisation du spin i (*i.e.* la moyenne de S_i) à valoir le nombre réel fixe m_i . Physiquement, il s'agit d'un champ magnétique extérieur qui ne s'exerce que sur le spin $n^\circ i$. Il n'est aucunement évident que le lien entre h_i et m_i soit bijectif ; néanmoins nous allons faire cette hypothèse dans toute la suite et espérer, comme souvent en physique, que quand elle est fautive nous nous en apercevrons grâce à des indices dans le résultat de nos calculs. Formellement, la contrainte qui définit h_i s'écrit

$$\partial_{h_i} \ln Y|_{m_i} = 0, \quad (8.51)$$

ou encore :

$$\frac{\sum_{\{S_i\}} S_i \exp \left[\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i(\lambda) (S_i - m_i) \right]}{\sum_{\{S_i\}} \exp \left[\lambda \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_i h_i(\lambda) (S_i - m_i) \right]} = m_i, \quad (8.52)$$

ce que nous écrirons plus brièvement $\langle S_i \rangle = m_i$. h_i dépend des m_i et de λ (nous explicitons cette dernière dépendance pour des raisons de clarté ultérieure).

Lorsque tous les multiplicateurs de Lagrange h_i sont nuls (ce qui est réalisé, pour une intensité des interactions λ donnée, quand on demande à la magnétisation de chaque spin de prendre précisément la valeur « naturelle » qu'elle aurait prise spontanément à cette intensité λ , autrement dit quand il n'y a pas besoin de forcer le système), Y coïncide avec la fonction de partition Z . Quand nous connaissons la valeur de Y en fonction des m_i , nous pourrions calculer la valeur des h_i :

$$\partial_{m_i} \ln Y = -h_i(\lambda, m_1, m_2, \dots) + (\langle S_i \rangle - m_i) \partial_{m_i} h_i(\lambda, m_1, m_2, \dots) \quad (8.53)$$

soit, en tenant compte du fait que Y a été calculé sous les contraintes $\langle S_i \rangle = m_i$,

$$h_i = -\partial_{m_i} \ln Y, \quad (8.54)$$

puis nous pourrions calculer la valeur « naturelle » des m_i en résolvant l'équation $h_i = 0$ et la reporter dans l'expression de Y pour en déduire Z . La condition $h_i = 0$ peut aussi être lue comme $\partial_{m_i} \ln Y = 0$; autrement dit, l'on cherche le regroupement de termes de même magnétisation qui apporte la plus grande contribution $\ln Y(m_1, m_2, \dots)$ à $\ln Z$, comme annoncé au début de ce chapitre.

Étape 2. Pour l'instant, il s'agit déjà de calculer $\ln Y$ en faisant un développement de Taylor en puissances de λ (étape 2). L'ordre zéro de ce développement se calcule facilement ¹ :

$$\begin{aligned} Y(\lambda = 0) &= \sum_{\{S_i\}} e^{\sum_i h_i(0)(S_i - m_i)} = \prod_i \sum_{S_i = \pm 1} e^{h_i(0)(S_i - m_i)} \\ &= \prod_i 2e^{-h_i(0)m_i} \cosh[h_i(0)]. \end{aligned} \quad (8.55)$$

Pour $\lambda = 0$, les spins sont découplés et la fonction de partition est le produit des fonctions de partitions individuelles de chaque spin.

À l'ordre un, nous devons calculer :

$$\partial_\lambda \ln Y|_{\lambda=0, m_1, m_2, \dots} = \left\langle \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} S_i S_j \right\rangle_{\lambda=0} + \langle S_i - m_i \rangle_{\lambda=0} \partial_\lambda h_i|_{\lambda=0}. \quad (8.56)$$

Les indices rappellent que les différentes dérivées et moyennes sont à calculer au point $\lambda = 0$. Le deuxième terme ci-dessus est nul car $\langle S_i - m_i \rangle$ est nul pour tout λ par définition de $h_i(\lambda)$, et donc en particulier pour $\lambda = 0$. Le premier terme se calcule facilement car, en $\lambda = 0$, le produit $S_i S_j$ n'est pas corrélé (pour $j \neq i$). En effet,

$$\begin{aligned} \langle S_i S_j \rangle_{\lambda=0} &= \frac{\sum_{\{S_k\}} S_i S_j e^{\sum_k h_k(0)(S_k - m_k)}}{Y(\lambda = 0)} \\ &= \frac{(\sum_{S_i = \pm 1} S_i e^{h_i(0)(S_i - m_i)}) (\sum_{S_j = \pm 1} S_j e^{h_j(0)(S_j - m_j)})}{(\sum_{S_i = \pm 1} e^{h_i(0)(S_i - m_i)}) (\sum_{S_j = \pm 1} e^{h_j(0)(S_j - m_j)})} \times \\ &\quad \frac{\prod_{k \notin \{i, j\}} \sum_{S_k = \pm 1} e^{h_k(0)(S_k - m_k)}}{\prod_{k \notin \{i, j\}} \sum_{S_k = \pm 1} e^{h_k(0)(S_k - m_k)}} \\ &= \tanh[h_i(0)] \tanh[h_j(0)] = \langle S_i \rangle_{\lambda=0} \langle S_j \rangle_{\lambda=0} = m_i m_j. \end{aligned} \quad (8.57)$$

Plus généralement, dans toutes les fonctions de corrélation évaluées en $\lambda = 0$ les sites du graphe \mathcal{G} seront ainsi découplés, et le calcul se ramènera au calcul facile de produits de moyennes de polynômes d'un *seul* spin S .

À ce stade,

$$\ln Y = \sum_i \{\ln 2 - h_i(0)m_i + \ln \cosh[h_i(0)]\} + \lambda \sum_{\langle i, j \rangle} J_{i, j} m_i m_j + \mathcal{O}(\lambda^2) \quad (8.58)$$

Cette expression sera peu commode plus loin, car elle fait intervenir les $h_i(0)$ qui dépendent des m_i . Il est donc préférable de tout exprimer en fonction des m_i — ou bien, si cela s'avère plus commode, de tout exprimer en fonction des $h_i(0)$, puisqu'après tout il existe une bijection entre m_i et $h_i(0)$ du fait de la transformée de Legendre. L'équation $\langle S_i \rangle = m_i$ s'écrit explicitement, pour $\lambda = 0$, $\tanh[h_i(0)] = m_i$, d'où

$$\begin{aligned} \ln Y(\lambda; m_1, m_2, \dots) &= - \sum_i \left[\frac{1 + m_i}{2} \ln \left(\frac{1 + m_i}{2} \right) + \frac{1 - m_i}{2} \ln \left(\frac{1 - m_i}{2} \right) \right] + \\ &\quad \lambda \sum_{\langle i, j \rangle} J_{i, j} m_i m_j + \mathcal{O}(\lambda^2) \end{aligned} \quad (8.59)$$

¹Le facteur 2 manque (sous forme de $\ln 2$) dans l'équation (6) de [118].

en utilisant $\operatorname{arctanh}(m) = \ln(1+m)/2 - \ln(1-m)/2$ et $\ln \cosh(h) = -\ln(1 + \tanh h)/2 - \ln(1 - \tanh h)/2$. Le premier terme est la somme des entropies des spins d'Ising sans interaction et contraints à avoir les magnétisations m_i (le spin $n^{\circ}i$ est dans l'état $+1$ avec probabilité $p_+ = (1+m_i)/2$ et dans l'état -1 avec probabilité $p_- = (1-m_i)/2$; l'entropie est la somme des $-p \ln p$). Le deuxième terme est l'énergie de spins d'Ising dans la théorie de champ moyen (approximation de Curie-Weiss). On sait que ces deux termes sont les seuls si le graphe \mathcal{G} est complet et à la limite thermodynamique; de fait, nous trouverons plus loin que les termes suivants seront tous nuls dans ce cas.

Faisons une pause et voyons ce que nous trouverions si nous nous arrêtons ici; nous reprendrons le développement de $\ln Y$ plus tard.

Étape 3. Nous remplaçons λ par sa valeur physiquement intéressante β puis, comme annoncé, nous exprimons h_i à l'aide de l'équation (8.54) et demandons qu'il soit nul ou, ce qui revient au même, nous demandons que les dérivées de $Y(\lambda, m_1, m_2, \dots)$ par rapport aux m_i soient nulles. Il vient

$$0 = h_i(\lambda = \beta) = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+m_i}{1-m_i} \right) - \beta \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} m_j \quad (8.60)$$

d'où les équations familières qui gouvernent la magnétisation des spins du modèle de Curie-Weiss (modèle d'Ising sur réseau complet) :

$$\forall i \quad \tanh m_i = \beta \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} m_j. \quad (8.61)$$

La solution de ces équations nous indique la valeur la plus probable de la magnétisation de chaque spin. Sur réseau complet et dans le cas où les constantes de couplage J_{ij} sont uniformes et *positives*, on tire de ces équations $\tanh m_i + \beta J m_i = \beta J \sum_k m_k$ où le second membre *ne dépend pas de i* , donc tous les m_i sont égaux (car la fonction $m \mapsto \tanh m + \beta J m$ est une bijection — ce n'est pas vrai si $J < 0$). La magnétisation la plus probable, commune, m de tous les N spins est donnée par $\tanh m = \beta J (N-1)m$. Comme, dans ce modèle, tous les spins sont interchangeable (chaque spin joue exactement le même rôle, a le même nombre de voisins, *etc.*), la mesure d'équilibre de Gibbs sur les configurations est une mesure produit, il y a concentration de la mesure et la magnétisation est auto-moyennante. Donc la magnétisation la plus probable des spins est représentative du comportement macroscopique d'un système de nombreux spins (les fluctuations sont négligeables), et l'on peut tirer des conclusions *macroscopiques* à partir des solutions *microscopiques* des équations précédentes (il y a des systèmes où l'on peut fort bien calculer ces résultats microscopiques, mais ils ne donnent pas un accès direct au comportement macroscopique). Ici, l'équation qui gouverne m a une ou trois solutions selon que β est plus grand que $J(N-1)$ (phase de haute température où $m = 0$) ou plus petit (phase de basse température où la magnétisation nulle $m = 0$ est instable et bascule vers une valeur strictement positive ou strictement négative). Entre deux a lieu la transition de Curie du ferromagnétisme. Enfin, en reportant le résultat pour les m_i dans Y on trouve l'expression de Z , d'où la valeur de l'énergie libre $-\ln Z/\beta$; en particulier l'on peut trouver quelle(s) solution(s) pour m sont stables en cherchant celle(s) qui minimise(nt) l'énergie libre.

Bien entendu nous aurions pu calculer tout cela directement sans faire un développement de Taylor. Mais voyons la suite de ce développement.

Calcul des dérivées successives. La dérivée seconde $\partial_\lambda^2 \ln Y$ est déjà plus difficile à calculer, et il est utile de recourir au formalisme de [118]. On définit l'opérateur U par

$$U := H - \langle H \rangle - \sum_i \partial_\lambda h_i(\lambda) (S_i - m_i) \quad (8.62)$$

(le terme $\langle H \rangle$ est un simple nombre). Il permet de calculer simplement les dérivées par rapport à λ des différentes moyennes que l'on rencontre. En effet, on trouve par un calcul élémentaire que, pour une observable A (c'est-à-dire en pratique une fonction polynôme des spins S_i),

$$\partial_\lambda \langle A \rangle = \langle \partial_\lambda A \rangle - \langle AU \rangle. \quad (8.63)$$

(L'ordre des opérateurs ne joue ici pas de rôle : $AU = UA$ — ce ne sera pas le cas quand nous utiliserons ce formalisme pour l'intégrale de chemins).

U a les propriétés suivantes : $\langle U \rangle = 0$, puis $\langle US_i \rangle = -\partial_\lambda \langle S_i \rangle = 0$ car $\langle S_i \rangle$ est le nombre m_i indépendant de λ , ou encore $\langle U(S_i - m_i) \rangle = 0$, puis $\langle U^2 \rangle = \langle HU \rangle$.

Le calcul des dérivées successives de $\ln Y$ par rapport à λ se fait en deux étapes. D'abord, on évalue formellement ces dérivées à l'aide de U pour λ quelconque :

$$\partial_\lambda \ln Y = -\langle H \rangle + \sum_i \partial_\lambda h_i(\lambda) \langle S_i - m_i \rangle = -\langle H \rangle \quad (8.64)$$

(calcul direct), d'où en utilisant (8.63)

$$\partial_\lambda^2 \ln Y = -\langle HU \rangle = -\langle U^2 \rangle \quad (8.65)$$

$$\partial_\lambda^3 \ln Y = -2\langle U \partial_\lambda U \rangle + \langle U^3 \rangle. \quad (8.66)$$

On voit ici apparaître $\partial_\lambda U$, que l'on calcule directement :

$$\partial_\lambda U = \langle HU \rangle - \sum_i \partial_\lambda^2 h_i(\lambda) (S_i - m_i) = \langle U^2 \rangle - \sum_i \partial_\lambda^2 h_i(\lambda) (S_i - m_i). \quad (8.67)$$

Ainsi, en utilisant les propriétés $\langle U \rangle = \langle U(S_i - m_i) \rangle = 0$, on trouve

$$\partial_\lambda^3 \ln Y = \langle U^3 \rangle. \quad (8.68)$$

Et ainsi de suite, en dérivant itérativement l'expression des dérivées de $\ln Y$ obtenues ; par exemple,

$$\partial^4 \ln Y = -\langle U^4 \rangle + 3\langle U^2 \rangle^2 - 3 \sum_i \partial_\lambda h_i^2(\lambda) \langle U^2 (S_i - m_i) \rangle. \quad (8.69)$$

La deuxième étape consiste à faire itérativement le calcul en $\lambda = 0$. Un calcul itératif est nécessaire car les dérivées successives de $\ln Y$ font apparaître les dérivées successives de h_i , et l'on ne peut calculer celles-ci qu'en utilisant une relation de Schwarz :

$$\partial_\lambda^k h_i(0) = -\partial_\lambda^k \partial_{m_i} \ln Y|_{\lambda=0} = -\partial_{m_i} \partial_\lambda^k \ln Y|_{\lambda=0} \quad (8.70)$$

d'après (8.54) — donc si $\partial_\lambda^k \ln Y|_{\lambda=0}$ est connu (et exprimé en fonction des m_i) on peut en déduire la dérivée k ème de h_i qui intervient dans les dérivées d'ordre supérieur de $\ln Y$. Par exemple,

$$\partial_\lambda h_i(0) = -\partial_{m_i} (-\langle H \rangle)|_{\lambda=0} = -\sum_j J_{ij} m_j \quad (8.71)$$

étant donné que $\langle S_i S_j \rangle = m_i m_j$ (vu à l'étape 2).

Comme nous l'avons dit plus haut, le calcul en $\lambda = 0$ est facile car tous les sites sont découplés : tout se ramène à des calculs de moyennes de fonctions polynômes d'un spins. Cependant, la combinatoire des moyennes comme $\langle U^4 \rangle$ peut être très compliquée si l'on n'y prend garde, et il est salutaire d'introduire l'expression explicite factorisée de l'opérateur U pris en $\lambda = 0$, que nous notons U_0 . Connaissant maintenant $\partial_\lambda h_i(0)$,

$$U_0 = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (S_i - m_i)(S_j - m_j) =: -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} L_{ij} \quad (8.72)$$

où l'on a défini les « opérateur de liens » L_{ij} de façon transparente. Ces opérateurs satisfont à

$$\langle L_{ij} \rangle = \langle L_{ij} (S_i - m_i) \rangle = 0, \quad (8.73)$$

$$\langle L_{ij}L_{kl} \rangle = (1 - m_i^2)(1 - m_j^2)\delta_{\{i,j\},\{k,l\}}. \quad (8.74)$$

Les dérivées successives de $\ln Y$ sont des sommes de moyennes (prises en $\lambda = 0$) de produits de puissances de l'opérateur U et de facteurs en $S_i - m_i$. Chaque terme de ces sommes peut être développé (on développe l'expression de U en L_{ij}), et le résultat peut être interprété comme une somme sur des diagrammes : on représente un « L_{ij} » comme un lien entre les sites i et j , et un « $S_i - m_i$ » comme une décoration sur le site i . La valeur d'un diagramme est le produit des moyennes sur les sites, donc le diagramme est nul si un site au moins possède un seul lien ou bien une seule décoration. De plus, comme dans tout développement du *logarithme* d'une fonction de partition, les diagrammes non connexes se simplifient (voir par exemple [153], chapitre 4). Ceci permet de réduire considérablement le travail pour calculer $\ln Y$ à des ordres assez élevés. De surcroît, A. Georges et J. Yedidia observent que, dans le cas du modèle d'Ising qui nous occupe, seuls les diagrammes « fortement irréductibles » sont non nuls, c'est-à-dire ceux qui restent connexes même si l'on en retire un site (et tous les liens qui le joignent aux autres). Mais ce n'est pas une propriété générale [118].

Nous pouvons maintenant calculer en particulier $\partial_\lambda^2 \ln Y|_{\lambda=0}$:

$$\partial_\lambda^2 \ln Y|_{\lambda=0} = -\langle U^2 \rangle_{\lambda=0} = -\sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\langle k,l \rangle} J_{ij}J_{kl}L_{ij}L_{kl} = -\sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij}^2(1 - m_i^2)(1 - m_j^2), \quad (8.75)$$

ce qui nous donne accès à l'expression de $\ln Y$ à l'ordre λ^2 inclus.

Développement à grandes dimensions d'espace. Quand le modèle est défini sur réseau \mathbb{Z}^D de dimension D , où chaque spin interagit avec $2D$ voisins, on écrit souvent J_{ij} comme $\tilde{J}_{ij}/(2D)$ avec \tilde{J}_{ij} indépendant de D et d'ordre un dans le hamiltonien pour que l'énergie reste extensive et finie à la limite $D \rightarrow +\infty$. *A fortiori*, sur un réseau complet de N spins, où chaque spin a $N - 1$ voisins, on prend $\tilde{J}_{ij}/(N - 1)$. Autrement dit, dans la limite des grandes dimensions d'espace, l'intensité des interactions est naturellement petite (d'ordre $1/D$ resp. $1/N$), et le développement de Taylor en puissances de λ est une bonne approximation de la fonction de partition (on utilise les \tilde{J}_{ij} en lieu et place des J_{ij} et l'on prend à la fin du calcul $\lambda = \beta/(2D)$ ou $\lambda = \beta/(N - 1)$). Dans le cas du réseau complet, le terme d'ordre λ^2 (8.75) est d'ordre $N^2/N^2 = 1$, donc négligeable devant les deux premiers termes (qui sont d'ordre N , extensif), et nul à la limite thermodynamique où l'on s'intéresse à l'énergie libre par spin $-\ln Z/\beta N$. De même sur réseau hypercubique de dimension D pour $D \rightarrow +\infty$. On peut voir en dessinant les diagrammes des termes d'ordres supérieurs qu'ils sont eux aussi subextensifs.

A. Georges et J. Yedidia font un tel développement à l'ordre $1/D^3$ inclus sur réseau hypercubique \mathbb{Z}^D . Ils en déduisent (sous l'hypothèse implicite qu'il y a concentration de la mesure et que les solutions des équations pour les magnétisations m_i sont les mêmes : $\forall i m_i = m$) des expressions précises de la magnétisation, de la chaleur spécifique, et même des exposants critiques grâce à un réarrangement du développement de $\ln Z$ qui transforme le développement que nous venons de faire, qui n'est qu'asymptotique, en développement convergent. Nous allons maintenant faire de même pour le processus de contact sur réseau \mathbb{Z}^D .

8.3 Action pour un processus de variables à deux valeurs : partie cinétique

Quelque éclatante que soit une action, elle ne doit pas passer pour grande lorsqu'elle n'est pas l'effet d'un grand dessein.

La Rochefoucauld, *Maximes*

Revenons maintenant au cas des processus stochastiques et utilisons la méthode précédente pour calculer la somme sur les chemins qui mènent d'un état initial à $t = 0$ (pris dans la distribution initiale supposée connue $|v(0)\rangle$) à un état final à la date T . Il s'agit de calculer

la somme $\langle O | \exp(\hat{W}T) | v(0) \rangle$ (dont on sait qu'elle vaut un si \hat{W} conserve la probabilité) en y distinguant les contributions des différents chemins. Dit autrement, après que nous aurons ajouté des champs extérieurs, cette somme va servir de fonction génératrice pour les trajectoires du processus stochastique, de même que la fonction de partition Z du modèle d'Ising avec champs extérieurs h_i sert de fonction génératrice pour les fonctions de corrélation des spins.

Le calcul de ce qui correspond à l'ordre zéro en λ pour le modèle d'Ising (et qui donnait l'entropie de spins à magnétisation fixée) est l'objet de cette section et va nous livrer la partie cinétique de l'action (c'est-à-dire $-\phi(t)d\psi(t)/dt$ et les termes de bord dans la formule (8.45)). Formellement, il s'agit du cas où l'opérateur d'évolution \hat{W} est nul. Nous faisons le calcul d'abord pour des variables aléatoires bivaluées (bosons à cœur dur ou spins d'Ising) puis nous généraliserons dans les sections suivantes. Comme, à ce stade, les éventuels sites du processus stochastique sont découplés, nous n'en considérerons qu'un (sauf mention explicite du contraire) et il nous suffira *en principe* de sommer à la fin les parties cinétiques de chaque site dans l'action. Le cas de plusieurs variables stochastiques sera abordé à la section 8.5.

8.3.1 Calcul avec un premier jeu de contraintes

Dans le cas d'un processus stochastique, les spins d'Ising S_i sont remplacés par les opérateurs élémentaires. Pour une variable aléatoire à deux valeurs (notons-les comme précédemment 0 et 1), ces opérateurs sont $\hat{a}^{=0}$, $\hat{a}^{=1}$, $\hat{a}^{1\leftarrow 0}$ et $\hat{a}^{0\leftarrow 1}$, et ce sont eux dont nous allons imposer les moyennes. En fait, leurs moyennes sont liées. Prouvons-le. La moyenne $\langle \hat{A}(T) \rangle$ de l'opérateur \hat{A} à T est $\langle E | \hat{A} | v(T) \rangle$ (dans le cas général d'un état final $\langle E |$) ou encore, en écrivant explicitement les distributions dans la base canonique,

$$\frac{\left[(1-p_f)\langle 0 | + p_f\langle 1 | \right] \hat{A} \left[(1-p_i)|0\rangle + p_i|1\rangle \right]}{\left[|0\rangle + p_f|1\rangle \right] \left[(1-p_i)|0\rangle + p_i|1\rangle \right]} \quad (8.76)$$

Comme $\hat{a}^{=0} + \hat{a}^{=1} = \mathbb{I}$, nous trouvons déjà $\langle \hat{a}^{=0} \rangle + \langle \hat{a}^{=1} \rangle = 1$. Puis :

$$\langle \hat{a}^{=0} \rangle \langle \hat{a}^{=1} \rangle = Z^{-2}(1-p_i)(1-p_f)p_i p_f = Z^{-2}(1-p_i)p_f p_i(1-p_f) \langle \hat{a}^{1\leftarrow 0} \rangle \langle \hat{a}^{0\leftarrow 1} \rangle \quad (8.77)$$

où Z désigne le dénominateur des moyennes conditionnées, $(1-p_i)(1-p_f) + p_i p_f$. Donc il suffit d'imposer la moyenne de l'un des opérateurs « de mesure » $\hat{a}^{=}$ et de l'un des opérateurs « de changement » \hat{a}^{\leftarrow} pour que les quatre moyennes soient imposées — et, réciproquement, il est impossible d'imposer séparément les moyennes de trois opérateurs ou plus ou de deux opérateurs du même type.

Voyons ce qui se passe si l'on choisit d'imposer, à l'aide de multiplicateurs de Lagrange respectifs $\check{a}^{=1}(t)$ et $\check{a}^{0\leftarrow 1}$, les contraintes $\langle \hat{a}^{=1}(t) \rangle = a^{=1}(t)$ et $\langle \hat{a}^{0\leftarrow 1}(t) \rangle = a^{=1}(t) \exp[\hat{a}^{0\leftarrow 1}(t)]$ (ici encore, $\langle a(t) \rangle$ ne signifie par que l'opérateur \hat{a} dépend du temps, mais que l'on prend sa moyenne à la date t — voir la définition de la moyenne (8.33)). Comme toujours, les opérateurs sont dénotés à l'aide d'un accent circonflexe comme dans \hat{a} . Le symbole $\hat{\ }^{\circ}$ dénote un champ « de déviations », c'est-à-dire un champ qui n'intervient que dans les valeurs moyennes des opérateurs de changement mais pas dans celles des opérateurs de mesure. Nous verrons plus loin qu'un tel champ permet d'accéder aux grandes déviations des valeurs des observables d'un processus stochastique (quand ce champ est nul, il sélectionne les valeurs les plus probables des observables), d'où son nom et sa notation (le symbole $\hat{\ }^{\circ}$ rappelle la forme de la courbe de la densité de probabilité d'une grandeur au voisinage de sa valeur la plus probable). Les multiplicateurs de Lagrange (ou champs extérieurs ou sources) sont notés à l'aide d'un accent « tchèque » (accent circonflexe renversé) comme dans \check{a} . Le mnémonique est ici que les multiplicateurs de Lagrange fixent la valeur de leur observable conjuguée comme un potentiel en V (qui contraint une particule pesante à rester dans le fond de la vallée) ou une flèche \downarrow . Ce paramétrage des moyennes est inspiré des résultats heuristiques de la page 144 ; $a^{=1}(t)$ correspond à $\phi(t)$ et $\hat{a}^{0\leftarrow 1}(t)$ à $\psi(t)$ (d'autres paramétrages sont possibles [154]). Nous trouverons

automatiquement $\langle \hat{a}^{-1}(t) \rangle = 1 - a(t)$ et $\langle \hat{a}^{1 \leftarrow 0} \rangle = [1 - a(t)] \exp[-\hat{a}(t)]$ du fait des relations entre moyennes. Ces notations ne sont pas celles de la publication P3, où $a(t)$ était noté $\phi(t)$ et $\hat{a}(t)$ $\psi(t)$. Nous avons préféré utiliser celles-ci dans ce mémoire car elles se généralisent plus facilement au cas de variables aléatoires à plus de deux valeurs.

Calcul de la fonction de partition. Ce qui tient lieu de fonction de partition avec champs extérieurs (Y pour le modèle d'Ising) est ici

$$Z := \langle E | e^{\int_0^T dt \{ \tilde{a}^{-1}(t) [\hat{a}^{-1} - a^{-1}(t)] + \tilde{a}^{0 \leftarrow 1}(t) [\hat{a}^{0 \leftarrow 1} - a^{-1}(t) e^{\tilde{a}^{0 \leftarrow 1}(t)}] \}} | v(0) \rangle. \quad (8.78)$$

Comme nous l'avons remarqué p. 140, il ne s'agit pas ici d'une exponentielle d'opérateur mais d'un produit- T et nous omettons de l'écrire. Toujours pour alléger les notations, nous écrirons dans ce paragraphe $a(t)$ pour $a^{-1}(t)$ et $\hat{a}(t)$ pour $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}(t)$. On peut mettre les champs scalaires de côté dans Z et l'écrire comme

$$Z = \langle E | e^{\int_0^T dt \hat{W}'(t)} | v(0) \rangle e^{\int_0^T dt W''(t)} \quad (8.79)$$

où

$$\begin{aligned} \hat{W}'(t) &:= \tilde{a}^{-1}(t) \hat{a}^{-1} + \tilde{a}^{0 \leftarrow 1}(t) \hat{a}^{0 \leftarrow 1} \\ W''(t) &:= -\tilde{a}^{-1}(t) a(t) - \tilde{a}^{0 \leftarrow 1}(t) a(t) e^{\hat{a}(t)}. \end{aligned} \quad (8.80)$$

Nous calculons d'abord le facteur en \hat{W}' en résolvant le système d'équations différentielles

$$\frac{d|v(t)\rangle}{dt} = \hat{W}'(t)|v(t)\rangle. \quad (8.81)$$

Posons $|v(t)\rangle =: x(t)|0\rangle + y(t)|1\rangle$. Dans la base $|0\rangle, |1\rangle$,

$$\begin{pmatrix} \frac{dx(t)}{dt} \\ \frac{dy(t)}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{a}^{0 \leftarrow 1}(t) \\ 0 & \tilde{a}^{-1}(t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x(t) \\ y(t) \end{pmatrix}. \quad (8.82)$$

Comme la matrice de $\hat{W}'(t)$ est triangulaire supérieure, on peut résoudre ce système par substitution. Il vient

$$y(t_2) = y(t_1) e^{\int_{t_1}^{t_2} dt' \tilde{a}^{-1}(t')}, \quad x(t_2) = x(t_1) + y(t_1) \int_{t_1}^{t_2} dt' \tilde{a}^{1 \leftarrow 0}(t') e^{\int_{t_1}^{t'} dt'' \tilde{a}^{-1}(t'')} \quad (8.83)$$

d'où l'on tire la matrice de l'opérateur d'évolution intégré $\hat{W} := \exp(\int \hat{W})$:

$$\hat{W}'(t_2, t_1) = \begin{pmatrix} 1 & \int_{t_1}^{t_2} dt' \tilde{a}^{1 \leftarrow 0}(t') e^{\int_{t_1}^{t'} dt'' \tilde{a}^{-1}(t'')} \\ 0 & e^{\int_{t_1}^{t_2} dt' \tilde{a}^{-1}(t')} \end{pmatrix} \quad (8.84)$$

elle aussi triangulaire supérieure comme il se doit. On vérifie par des calculs simples que cet opérateur a les propriétés naturelles $\hat{W}'(t_1, t_1) = \mathbb{I}$ et

$$\hat{W}'(t_3, t_2) \hat{W}'(t_2, t_1) = \hat{W}'(t_3, t_1). \quad (8.85)$$

En reportant l'expression de $\hat{W}'(T, 0)$ dans (8.79), nous trouvons l'analogie de la fonction de partition du modèle d'Ising à l'ordre zéro en λ , (8.58). De même que pour le modèle d'Ising, il n'est pas commode d'avoir dans cette expression à la fois les multiplicateurs de Lagrange \tilde{a} et les moyennes imposées a et \hat{a} , puisque ces quantités sont liées. Nous allons exprimer explicitement les multiplicateurs de Lagrange en utilisant les contraintes qu'ils imposent.

Calcul des multiplicateurs de Lagrange. Pour cela, écrivons $\langle E | =: \langle 0 | q + \langle 1 | r$ et

$$\hat{W}'(t_2, t_1) =: \begin{pmatrix} 1 & a(t_2, t_1) \\ 0 & b(t_2, t_1) \end{pmatrix}. \quad (8.86)$$

Alors

$$Z' := \langle E | \hat{\mathcal{W}}'(T, 0) | v(0) \rangle = q x(0) + a(T, 0) q y(0) + b(T, 0) r y(0) \quad (8.87)$$

et

$$\begin{aligned} Z' a(t) = Z' \langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t) \rangle &= \langle E | \hat{\mathcal{W}}'(T, t) \hat{a}^{\leftarrow 1}(t) \hat{\mathcal{W}}'(t, 0) | v(0) \rangle \\ &= [q a(T, t) + r b(T, t)] b(t, 0) y(0) \\ Z' a(t) e^{\hat{a}(t)} = Z' \langle \hat{a}^{0 \leftarrow 1}(t) \rangle &= \langle E | \hat{\mathcal{W}}'(T, t) \hat{a}^{0 \leftarrow 1}(t) \hat{\mathcal{W}}'(t, 0) | v(0) \rangle \\ &= q b(t, 0) y(0) \end{aligned} \quad (8.88)$$

d'où, en faisant le rapport de ces deux dernières équations,

$$\exp[-\hat{a}(t)] = [q a(T, t) + r b(T, t)] / q \quad (8.89)$$

puis

$$b(t, 0) = a(t) \exp[\hat{a}(t)] Z' / q / y(0) \quad (8.90)$$

et plus généralement

$$b(t_2, t_1) = a(t_2) / a(t_1) \exp[a(t_2) - a(t_1)]. \quad (8.91)$$

En dérivant le logarithme de ces expressions par rapport à t ou t_2 nous trouvons

$$\check{a}^{\leftarrow 1}(t) = \frac{d \ln a(t)}{dt} + \frac{d \hat{a}(t)}{dt}. \quad (8.92)$$

Sachant que $a(t_2, t_1)$ satisfait à

$$\frac{d}{dt_1} a(t_2, t_1) = -\check{a}^{\leftarrow 1}(t_1) a(t_2, t_1) - \check{a}^{0 \leftarrow 1}(t_1), \quad (8.93)$$

nous trouvons, en dérivant la relation (8.89) par rapport à t ,

$$-q \frac{d \hat{a}(t)}{dt} e^{-\hat{a}(t)} = -q \check{a}^{\leftarrow 1}(t) a(T, t) - q \check{a}^{0 \leftarrow 1}(t) - r \check{a}^{\leftarrow 1}(t) b(T, t)$$

et en substituant (8.89)

$$\frac{d \hat{a}(t)}{dt} e^{-\hat{a}(t)} = e^{-\hat{a}(t)} \check{a}^{\leftarrow 1}(t) + \check{a}^{0 \leftarrow 1}(t)$$

d'où

$$\check{a}^{0 \leftarrow 1}(t) = -e^{-\hat{a}(t)} \frac{d \ln a(t)}{dt}. \quad (8.94)$$

Liens avec l'intégrale de chemins. Ainsi, la partie cinétique de l'action fait intervenir l'expression

$$\ln Z'' := - \int_0^T dt \left[\check{a}^{\leftarrow 1}(t) a(t) + \check{a}^{0 \leftarrow 1}(t) a(t) e^{\hat{a}(t)} \right] = - \int_0^T dt a(t) \frac{d \hat{a}(t)}{dt} \quad (8.95)$$

où nous retrouvons la partie cinétique trouvée de manière heuristique avec les états cohérents p. 144. L'autre terme de la partie cinétique de l'action, $\ln Z'$, est un terme de bords. Il vaut, d'après les expressions précédentes,

$$\ln Z' = \ln q + \ln \left[x(0) + y(0) e^{-\hat{a}(0)} \right]. \quad (8.96)$$

Remarquer que, jusqu'ici, notre construction est parfaitement rigoureuse. En particulier, manipuler le temps t continu ne pose aucun problème : tout repose sur la résolution du système d'équations différentielles d'opérateur d'évolution \hat{W}' , et l'existence et l'unicité des solutions peuvent être discutées de manière rigoureuse en mathématiques. Nous manipulons des objets bien définis. *A contrario*, dans la construction de l'intégrale de chemins il est nécessaire d'avoir

recours à une discrétisation et à la formule de Trotter, et l'intégrale de chemins elle-même n'est définie que comme limite d'un produit d'opérateurs dans la formule de Trotter [140]. Son écriture comme *intégrale* avec la mesure d'intégration \mathcal{D} n'est qu'une aide pour les calculs mais l'objet ainsi dénoté est mal défini (il est souvent nécessaire de distinguer les règles de discrétisation d'Itô et de Stratonovitch [82]).

Régularité des multiplicateurs de Lagrange et valeurs initiales et finales des champs.

Remarquons que les valeurs des champs $a(t)$ et $\hat{a}(t)$ aux dates initiale et finale ne sont pas complètement libres, comme on le voit en prenant $t = T$ dans (8.89) et $t = 0$ dans (8.90) :

$$\exp[-\hat{a}(T)] = r/q \quad \text{et} \quad a(0)e^{\hat{a}(0)}/[1 - a(0)] = y(0)/x(0), \quad (8.97)$$

ce qui livre en passant l'expression plus simple pour Z'

$$Z' = qx(0)/[1 - a(0)]. \quad (8.98)$$

Autrement dit, les multiplicateurs de Lagrange réguliers $\check{a}(t)$ ne peuvent pas imposer aux moyennes de prendre n'importe quelles valeurs : le vecteur $[1 - a(0), a(0)e^{\hat{a}(0)}]$ doit être parallèle au vecteur $[x(0), y(0)]$ et le vecteur $[1, e^{-\hat{a}(T)}]$ à $[q, r]$. Si l'on veut se libérer de ces contraintes, il faut introduire dans les champs $\check{a}(t)$ des singularités (distributions δ) aux dates 0 et T . Entre ces instants, les relations (différentielles) que nous venons de calculer entre champs $\check{a}(t)$ et champs $a(t)$, $\hat{a}(t)$ montrent que les champs $\check{a}(t)$ ont la même régularité que les dérivées de $a(t)$ et $\hat{a}(t)$. Cela signifie en particulier qu'imposer une discontinuité finie dans ces moyennes requiert d'introduire des pics δ dans les multiplicateurs de Lagrange, comme aux dates initiale et finale.

Enfin, nous pouvons exprimer $a(t_2, t_1)$ car ce sera utile pour la suite. En combinant la relation

$$a(t_3, t_1) = a(t_2, t_1) + b(t_2, t_1)a(t_3, t_2) \quad (8.99)$$

pour $t_1 \leq t_2 \leq t_3$ qui découle de la « relation de Chasles » pour $\hat{\mathcal{W}}'$ (8.85) avec les résultats précédents, on arrive à

$$a(t_2, t_1) = e^{-\hat{a}(t_1)} \left[1 - \frac{a(t_2)}{a(t_1)} \right]. \quad (8.100)$$

Dans le cas particulier où $t_1 = 0$:

$$a(t, 0) = \exp[-\hat{a}(0)] - a(t)Z'/q/y(0). \quad (8.101)$$

Fonctions de corrélation. Dans le calcul du développement de Taylor de Z , nous aurons besoin de calculer des fonctions de corrélation, c'est-à-dire des moyennes de produits d'opérateurs, avec des dates différentes (par exemple $\langle \hat{a}^{1 \leftarrow 0}(t_2)\hat{a}^{\hat{=1}}(t_1) \rangle$). Donnons tout de suite un algorithme pour ce faire. Le point de départ est la définition d'une telle moyenne :

$$\langle \hat{a}_n(t_n) \hat{a}_{n-1}(t_{n-1}) \dots \hat{a}_1(t_1) \rangle := Z'^{-1} \langle E | \hat{\mathcal{W}}'(T, t_n) \hat{a}_n \hat{\mathcal{W}}'(t_n, t_{n-1}) \dots \hat{a}_1 \hat{\mathcal{W}}'(t_1, 0) | v(0) \rangle. \quad (8.102)$$

Le dénominateur Z' est connu ; nous calculons le numérateur en l'évaluant de gauche à droite et en le simplifiant au fur et à mesure. Le premier « facteur », $\langle E | \hat{\mathcal{W}}'(T, t_n)$ fait intervenir (en reprenant les notations précédentes) q , r , $a(T, t_n)$ et $b(T, t_n)$, mais pas n'importe comment : uniquement sous la forme de q et de la combinaison $qa(T, t_n) + rb(T, t_n)$. On peut donc le simplifier pour ne faire apparaître que q et $\exp[-\hat{a}(t_n)]$ en utilisant (8.89). La multiplication à droite par $\hat{a}_n(t_n)$ ne pose pas de problème, puisque cette matrice a des coefficients constants. Vient ensuite $\hat{\mathcal{W}}'(t_n, t_{n-1})$ qui fait intervenir $a(t_n, t_{n-1})$ et $b(t_n, t_{n-1})$. Nous remplaçons ces quantités par leurs expressions (8.100) et (8.91). Il se produit en général un certain nombre de simplifications, en conséquence de la relation de composition (« de Chasles ») (8.85). En particulier, si nous avons choisi $\hat{a}_n = \mathbb{1}$ (peu passionnant mais pourquoi pas!), ces simplifications

éliminent toutes les occurrences de $a(t_n)$ et $\hat{a}(t_n)$ car le résultat doit être le même que si nous n'avions pas inséré d'opérateur à la date t_n . Nous poursuivons sur le même schéma, multipliant tour à tour par la matrice de l'opérateur puis par celle de $\hat{\mathcal{W}}'(t_i, t_{i-1})$, en remplaçant au fur et à mesure les $a(t_i, t_{i-1})$ et $b(t_i, t_{i-1})$ qui apparaissent par leurs expressions en $a(t)$ et $\hat{a}(t)$ et en simplifiant. À la fin, il nous reste à multiplier le vecteur de l'espace dual ainsi calculé par $|v(0)\rangle$ et à faire les substitutions particulières à la date initiale (8.90) et (8.101) — ce qui élimine le facteur q . Il reste, outre les champs a et \hat{a} pris aux différentes dates t_n, t_{n-1}, \dots , le facteur Z' qui se simplifie avec le dénominateur. Toute cette procédure se met facilement en œuvre à l'aide d'un logiciel de calcul formel.

On trouve ainsi par exemple : $\langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t_2) \hat{a}^{\leftarrow 0}(t_1) \rangle = 0$, ce qui est logique car, si la variable aléatoire est dans l'état 0 à t_1 , à l'instant ultérieur $t_2 > t_1$ elle ne peut pas être passée dans l'état 1 puisque le pseudo-opérateur d'évolution \hat{W}' (qui sert à imposer les valeurs moyennes $a(t)$ et $\hat{a}(t)$) ne peut que faire passer de l'état 1 à l'état 0. Ou encore : $\langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t_2) \hat{a}^{\leftarrow 1}(t_1) \rangle = a(t_2)$ — pour la même raison, si la variable est dans l'état 1 à t_2 , elle y était forcément à t_1 donc c'est comme si nous calculions $\langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t_2) \rangle$ qui vaut, comme nous l'avons imposé, $a(t_2)$. Le résultat ne se devine par toujours : par exemple,

$$\langle \hat{a}^{1 \leftarrow 0}(t_2) \hat{a}^{\leftarrow 0}(t_1) \rangle = [a(t_1) - a(t_2)] \exp[-\hat{a}(t_2)], \quad (8.103)$$

$$\langle \hat{a}^{\leftarrow 0}(t_2) \hat{a}^{1 \leftarrow 0}(t_1) \rangle = [1 - a(t_1)] \exp[-\hat{a}(t_1)] a(t_2) / a(t_1). \quad (8.104)$$

D'où l'intérêt de dresser une table de ces fonctions à l'aide d'un ordinateur.

8.3.2 Calcul avec un deuxième jeu de contraintes

En quoi les calculs précédents seraient-ils changés si nous n'avions pas imposé les moyennes de $\hat{a}^{\leftarrow 1}$ et $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}$, mais celles d'autres opérateurs ? Pour le savoir, refaisons le calcul en imposant cette fois

$$\langle \hat{a}^{\leftarrow 0}(t) \rangle = 1 - a(t) \quad \text{et} \quad \langle \hat{a}^{1 \leftarrow 0}(t) - \hat{a}^{\leftarrow 0}(t) \rangle = [1 - a(t)] \{ \exp[-\hat{a}(t)] - 1 \}. \quad (8.105)$$

La méthode est la même : on écrit Z comme le produit de l'élément de matrice Z' de l'opérateur $\hat{\mathcal{W}}'(T, 0)$ qui correspond à ces nouvelles contraintes et de l'exponentielle de l'intégrale de champs scalaires Z'' . Le nouvel opérateur $\hat{W}'(t)$ a une matrice triangulaire inférieure dans la base canonique, donc on peut une nouvelle fois résoudre le système différentiel qui définit $\hat{\mathcal{W}}'(T, 0)$ par substitution. On en déduit les expressions des coefficients de $\hat{\mathcal{W}}'(t_2, t_1)$ et des multiplicateurs de Lagrange en fonction des champs $a(t)$ et $\hat{a}(t)$. Ces expressions ne sont pas les mêmes que précédemment. Mais l'expression de $Z = Z'Z''$ qui en résulte est exactement la même, avec la partie cinétique (8.95) et le terme de bord (8.98). Autrement dit, à l'ordre zéro du développement de Taylor, le choix des contraintes imposées ne joue pas. Et, en anticipant, à l'ordre un non plus, car l'ordre un est donné par la moyenne de l'opérateur d'évolution du processus stochastique \hat{W} , donc son calcul ne fait intervenir que des moyennes « à une date » que nous avons imposées. En revanche, aux ordres supérieurs, nous verrons apparaître des moyennes « à plusieurs dates » (des fonctions de corrélation) qui dépendent du choix des contraintes. Par exemple, la fonction de corrélation $\langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t_2) \hat{a}^{\leftarrow 0}(t_1) \rangle$ pour $t_2 > t_1$ était nulle avec les choix du paragraphe précédent, mais ici elle vaut $a(t_2) - a(t_1)$.

8.4 Partie cinétique de l'action pour d'autres variables

Voyons comment généraliser la construction précédente à des variables aléatoires qui prennent plus de deux valeurs. La méthode est essentiellement la même.

8.4.1 Variables stochastiques à nombre fini de valeurs

Soit une variable stochastique qui peut prendre n valeurs, disons $0, 1, 2, \dots, n-1$. Comme nous l'avons vu au paragraphe 8.1.2, il faut ici introduire un espace vectoriel de dimension n pour représenter les distributions de probabilité. Soit $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n-1\rangle$ la base canonique. Les opérateurs élémentaires sont les opérateurs « de mesure » $\hat{a}^{\leftarrow i} := |i\rangle\langle i|$ et les opérateurs « de changement » $\hat{a}^{j\leftarrow i} = |j\rangle\langle i|$. Combien faut-il, et combien peut-on, imposer de moyennes indépendantes pour faire le calcul de la fonction génératrice des trajectoires Z ?

Choix des opérateurs. Étudions les relations entre moyennes des opérateurs élémentaires en calculant, comme pour les bosons de cœur dur, les moyennes entre deux vecteurs fixes $\langle E|$ et $|v\rangle$. Parmi les n moyennes $a^{\leftarrow i}(t)$ des opérateurs $\hat{a}^{\leftarrow i}$, $n-1$ sont indépendantes (la seule contrainte est que la somme des moyennes vaille un pour la normalisation). On observe de plus une relation qui généralise immédiatement (8.77) :

$$\langle \hat{a}^{\leftarrow i} \rangle \langle \hat{a}^{\leftarrow j} \rangle = \langle \hat{a}^{j\leftarrow i} \rangle \langle \hat{a}^{i\leftarrow j} \rangle \quad (8.106)$$

donc la moyenne d'un opérateur de changement est fixée quand la moyenne de son opérateur réciproque (celui dont la matrice est transposée) et les moyennes des opérateurs de mesure sont fixées. Introduisons les champs \hat{a} tels que

$$\langle \hat{a}^{j\leftarrow i}(t) \rangle = a^{\leftarrow i}(t) \exp [\hat{a}^{j\leftarrow i}(t)]. \quad (8.107)$$

Ils satisfont, d'après la relation précédente, à

$$\hat{a}^{j\leftarrow i} = -\hat{a}^{i\leftarrow j}. \quad (8.108)$$

Les opérateurs de changement obéissent à une loi de composition : $\hat{a}^{k\leftarrow i} = \hat{a}^{k\leftarrow j} \hat{a}^{j\leftarrow i}$, et cela se traduit dans leurs moyennes par une « relation de Chasles » :

$$\hat{a}^{k\leftarrow i}(t) = \hat{a}^{k\leftarrow j}(t) + \hat{a}^{j\leftarrow i}(t). \quad (8.109)$$

À ce stade, il ne reste plus que $2(n-1)$ champs indépendants — les champs viennent à nouveau par paires, un champ de déviation $\hat{a}(t)$ pour une moyenne $a(t)$. Réciproquement, si nous essayons d'imposer les moyennes de $n-1$ opérateurs de mesure indépendants (c'est-à-dire en pratique de $n-1$ matrices diagonales linéairement indépendantes) et de $n-1$ opérateurs de changement indépendants parmi les opérateurs $\hat{a}^{j\leftarrow i}$ avec $j > i$ (c'est-à-dire en pratique de $n-1$ opérateurs de changement dont les champs $\hat{a}^{j\leftarrow i}$ associés sont linéairement indépendants malgré les relations (8.109)), nous ne rencontrons pas de difficulté, donc ces $2(n-1)$ opérateurs sont bien « indépendants » (nous distinguons « indépendants » au sens où l'on peut imposer séparément leurs moyennes et *linéairement indépendants* ; par exemple, $\hat{a}^{2\leftarrow 0}$, $\hat{a}^{2\leftarrow 1}$ et $\hat{a}^{1\leftarrow 0}$ sont linéairement indépendants mais l'on ne peut pas imposer séparément leurs moyennes). En particulier, comme les matrices dans la base canonique de tous ces opérateurs sont triangulaires inférieures, nous pouvons calculer explicitement, par quadrature, $\hat{\mathcal{W}}'$ puis les multiplicateurs de Lagrange et donc la partie cinétique de l'action.

On peut remarquer que si l'on représente une famille d'opérateurs de changement comme les liens d'un graphe orienté dont les sommets correspondent aux valeurs $0, 1, \dots, n-1$, ces opérateurs sont « indépendants » si et seulement si le graphe est un arbre (*i.e.* un graphe sans boucle, avec au plus un lien de moins qu'il n'y a de sommets). De tels graphes sont représentés fig. 8.1.

Au lieu de prendre les opérateurs de changement parmi les $\hat{a}^{j\leftarrow i}$ avec $j > i$, on peut choisir $n-1$ opérateurs de matrices toutes triangulaires supérieures (ou toutes triangulaires inférieures) tels que l'orbite de tout vecteur non nul sous tous les produits de ces opérateurs ne reste pas confinée dans un sous-espace vectoriel strict (il faut qu'il y ait une sorte d'ergodicité). Par ailleurs, ces choix d'opérateurs sont des maxima. Si cela suffit pour le processus étudié, il est possible d'imposer strictement moins de $2(n-1)$ moyennes d'opérateurs (on peut aussi

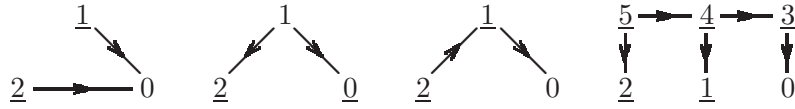


FIG. 8.1 – Quelques graphes représentant les moyennes d'opérateurs imposées dans le calcul de l'action de variables à un nombre fini de valeurs. Chaque sommet correspond à une valeur (ou état) de la variable. On impose la moyenne des opérateurs de mesure dont l'état est souligné et celle des opérateurs de changement qui correspondent aux flèches. Seuls les deux graphes de gauche sont « étoilés » au sens défini plus loin.

commencer le calcul avec les $2(n-1)$ moyennes des opérateurs élémentaires imposées puis ajouter les identités sur les multiplicateurs de Lagrange qui correspondent à l'expression des opérateurs qui nous intéressent en fonction des opérateurs élémentaires, par exemple $\check{a}^{0 \leftarrow 1}(t) = \check{a}^{1 \leftarrow 2}(t)$ si l'opérateur qui nous intéresse est $|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 2|$. En particulier, dans le cas où les lois de probabilité à représenter sont des lois binomiales « p parmi n » avec n constant, un bon choix consiste à utiliser des opérateurs qui ressemblent aux opérateurs de spins S_+ , S_- et S_z de la mécanique quantique (et un espace vectoriel de dimension $n+1$ car p prend les valeurs 0 à n , donc cela correspond à un spin $n/2$). Et il est possible de changer de base pour se ramener à des matrices triangulaires si besoin est. En revanche, il semble impossible de faire le calcul quand il n'existe pas de base où tous les opérateurs dont on impose les moyennes ont une matrice diagonale, alors que ce cas peut se présenter en pratique. Par exemple, pour une variable à deux valeurs, l'opérateur \hat{r} qui « renverse » la valeur de la variable, $|1\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle 1|$, n'a pas de vecteur propre commun avec les opérateurs de mesure \hat{a}^{-1} et \hat{a}^0 donc il n'existe pas de base où leurs matrices sont triangulaires toutes les trois. Il faut se résoudre à imposer la valeur moyenne d'un autre opérateur et à calculer la moyenne de \hat{r} indirectement.

Partie cinétique de l'action. Comme pour les variables aléatoires à deux valeurs, l'expression de l'action à l'ordre zéro (et même un) de son développement de Taylor est indépendante du choix des moyennes imposées (tout au moins quand on a bien imposé $2(n-1)$ moyennes). En revanche, la valeur des fonctions de corrélation (moyennes à plusieurs dates) dépend de ce choix, et il s'avère donc crucial quand on veut calculer les ordres supérieurs du développement de Taylor.

Le calcul de l'action à l'ordre zéro ne présente pas de différence majeure avec le calcul fait pour les variables à deux valeurs (il est évidemment un peu plus long car les matrices sont plus grandes). Un point important, quand on a imposé des opérateurs de changement « en cascade », c'est-à-dire quand le graphe qui représente le choix de contraintes selon la convention donnée ci-dessus n'est pas « étoilé » (n'a pas un sommet relié à tous les autres par des flèches toutes de même sens), est qu'il faut *d'abord* calculer les multiplicateurs de Lagrange (en exprimant les contraintes qu'ils imposent à l'aide des moyennes imposées $a(t)$ et $\hat{a}(t)$ et des éléments de matrice des $\hat{\mathcal{W}}'(t_2, t_1)$ puis en dérivant les expressions obtenues par rapport au temps, avec éventuellement re-substitution des expressions non dérivées dans les expressions dérivées), et *ensuite* en déduire les expressions des éléments de matrice des $\hat{\mathcal{W}}'(t_2, t_1)$ en fonction des champs $a(t)$ et $\hat{a}(t)$. Nous ne reproduisons pas ici les calculs et nous donnons simplement le résultat :

$$\ln Z = \ln\langle E|0\rangle + \ln\langle 0|v(0)\rangle - \ln a^{=0}(0) - \int_0^T dt \sum_{i=1}^{n-1} a^{=i}(t) \frac{d\hat{a}^{0 \leftarrow i}(t)}{dt} \quad (8.110)$$

avec les conditions de parallélisme des vecteurs suivants aux dates initiale et finale :

$$\langle E| \quad || \quad \langle 0| + \sum_{i=1}^{n-1} \langle i| e^{-\hat{a}^{0 \leftarrow i}(T)} \quad (8.111)$$

et

$$\langle v(0) \rangle \quad || \quad a^{=0}(0)|0\rangle + \sum_{i=1}^{n-1} a^{=i}(0)e^{\hat{a}^{0 \leftarrow i}(0)}|i\rangle. \quad (8.112)$$

(Ces restrictions peuvent être levées en ajoutant aux multiplicateurs de Lagrange des pics de Dirac δ aux dates 0 et T). On constate que ce résultat généralise le cas de variables à deux états (où nous écrivions $\langle E|0\rangle = q$ et $\langle 0|v(0)\rangle = x(0)$). L'expression ci-dessus correspond au cas où l'on a imposé les moyennes de $\hat{a}^{=i}(t)$ et de $\hat{a}^{0 \leftarrow i}(t)$ avec $1 \leq i \leq n-1$, mais on la transforme facilement en une expression qui fait intervenir d'autres champs en utilisant la conservation de la probabilité

$$\sum_{i=0}^{n-1} a^{=i}(t) = 1 \quad (8.113)$$

et les « relations de Chasles » (8.109) et de symétrie $\hat{a}^{j \leftarrow i} = -\hat{a}^{i \leftarrow j}$. Par exemple, quand $n = 3$, on peut écrire

$$\begin{aligned} a^{=2}(t) \frac{d\hat{a}^{0 \leftarrow 2}}{dt} + a^{=1}(t) \frac{d\hat{a}^{0 \leftarrow 1}(t)}{dt} = \\ a^{=2}(t) \left[-\frac{d\hat{a}^{2 \leftarrow 1}}{dt} + \frac{d\hat{a}^{0 \leftarrow 1}}{dt} \right] + [1 - a^{=0}(t) - a^{=2}(t)] \frac{d\hat{a}^{0 \leftarrow 1}}{dt} \end{aligned} \quad (8.114)$$

pour ramener le cas où l'on a imposé les moyennes de $\hat{a}^{=0}(t)$, $\hat{a}^{=2}(t)$, $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}(t)$ et $\hat{a}^{2 \leftarrow 1}(t)$ au cas ci-dessus (sur la figure 8.1, passage du premier graphe à gauche au deuxième).

Pour être précis, nous avons fait explicitement le calcul pour des variables à trois, quatre et six états avec différents choix de moyennes imposées (entre autres ceux de la figure 8.1) et nous trouvons le résultat indiqué ci-dessus. Mais, pour un nombre d'états n quelconque, ce n'est à proprement parler qu'une conjecture.

Fonctions de corrélation. L'algorithme de calcul des fonctions de corrélation pour les variables à deux valeurs de la p. 154 s'adapte de façon transparente à notre cas plus général (et l'usage d'un ordinateur soulage encore davantage des calculs).

8.4.2 Cas des bosons (à cœur mou)

Voyons brièvement comment traiter les variables aléatoires qui prennent des valeurs entières positives arbitrairement grandes (ce sont des objets qui rappellent les bosons « normaux », « pénétrables » où « à cœur mou » en seconde quantification en mécanique quantique — ils ont été beaucoup étudiés à l'aide de l'intégrale de chemins de Doi-Peliti, voir par exemple [155]). Ici, on peut en théorie imposer les valeurs moyennes d'une infinité d'opérateurs (par exemple les opérateurs « de mesure » $\hat{a}^{=i} := |i\rangle\langle i|$ et les opérateurs « de changement » $\hat{a}^{i \leftarrow i-1} := |i\rangle\langle i-1|$ pour $i \geq 1$) mais c'est rarement nécessaire en pratique. Il vaut mieux essayer d'imposer au cas par cas les valeurs moyennes des opérateurs qui apparaissent dans l'opérateur d'évolution \hat{W} du processus stochastique que l'on veut étudier.

À titre d'exemple, nous donnons les résultats pour le cas où l'on se restreint à l'ensemble des vecteurs de la forme

$$x(t) \sum_{i \geq 0} y(t)^i |n\rangle / n! \quad (8.115)$$

(qui représentent les lois de probabilité de Poisson quand ils sont normés). Cet ensemble est stable si l'on impose uniquement les moyennes des opérateurs $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^{\times} introduits en (8.29) ou encore \hat{a}^{\times} et $\hat{a}^{+} := \sum_{i \geq 0} |i+1\rangle\langle i|$ (sachant qu'on ne peut pas imposer à la fois $\langle \hat{a}^{-\times} \rangle$ et $\langle \hat{a}^{+} \rangle$ car cela rendrait la matrice de \hat{W}' dans la base canonique non triangulaire).

Partie cinétique de l'action. La relation entre moyennes

$$\langle \hat{a}^{\times} \rangle = \langle \hat{a}^{-\times} \rangle \langle \hat{a}^{+} \rangle \quad (8.116)$$

nous conduit à choisir le paramétrage des valeurs moyennes

$$\langle \hat{a}^\times \rangle = a^\times, \quad \langle \hat{a}^{-\times} \rangle = a^\times \exp[\hat{a}^\times], \quad \langle \hat{a}^+ \rangle = \exp[-\hat{a}^\times]. \quad (8.117)$$

Le calcul de la partie cinétique de l'action se fait d'une manière similaire à celle que nous avons vue. Il faut paramétrer les vecteurs de l'espace dual comme $\langle v| = \sum_n y^*(t)^n |n\rangle$ et, quand la matrice de l'opérateur \hat{W}' est triangulaire « dans le mauvais sens », c'est-à-dire quand on a à résoudre par substitution un système d'équations infini où l'inconnue x_i dépend des inconnues d'ordre supérieur x_{i+1}, x_{i+2}, \dots , et non des inconnues d'ordre inférieur, en nombre fini, x_0, x_1, \dots, x_{i-1} , on peut utiliser des fonctions génératrices pour traiter les inconnues $x_i(t)$ ensemble et arriver à un système d'équations « fermé ». Nous trouvons

$$\ln Z = a^\times(0) \left[1 - e^{\hat{a}^\times(0)} \right] - \int_0^T dt a^\times(t) \frac{d\hat{a}^\times(t)}{dt}. \quad (8.118)$$

Cette expression est la même que l'on impose les moyennes de $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^\times ou celles de \hat{a}^\times et \hat{a}^+ . L'analogie avec le cas des variables qui prennent un nombre fini de valeurs est frappante. Les conditions aux limites sont

$$\exp[-\hat{a}^\times(T)] = 1 \quad \text{et} \quad a^\times(0) \exp[\hat{a}^\times(0)] = \langle O|\hat{a}^\times|v(0)\rangle. \quad (8.119)$$

On peut s'en affranchir comme d'habitude en ajoutant des pics de Dirac δ aux multiplicateurs de Lagrange $\check{a}^\times(t)$ etc.

Fonctions de corrélation. Le calcul des moyennes à plusieurs temps présente une petite difficulté : il oblige à considérer l'ensemble plus général des vecteurs

$$|v(t)\rangle = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} d_i(t) \sum_{n \geq \max(-i, 0)} \frac{b(t)^n}{n!} |n+i\rangle \quad (8.120)$$

quand on impose les moyennes de \hat{a}^\times et \hat{a}^+ et

$$\langle v(t)| = \sum_{i=-\infty}^{+\infty} d_i(t) \sum_{n \geq i} b^*(t)^{n-i} \frac{n!}{(n-i)!} |n\rangle \quad (8.121)$$

quand on impose celles de $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^\times . Dans les deux cas, on peut donner un algorithme de calcul composé de règles qui donnent l'expression des $d_i(t)$ et de règles de simplifications comme pour les variables à deux valeurs. On trouve par exemple $\langle \hat{a}^\times(t_2) \hat{a}^\times(t_1) \rangle = [1 + a^\times(t_2)] a^\times(t_1)$ si l'on a imposé \hat{a}^+ et \hat{a}^\times et $a^\times(t_2)[1 + a^\times(t_1)]$ si l'on a imposé $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^\times (ici encore, les termes d'ordre deux et plus du développement de Taylor de l'action dépendent du choix des moyennes imposées).

On peut facilement imaginer des variantes à ces calculs. Par exemple, le traitement de lois de probabilité « poissonniennes à partir d'un certain rang », où les probabilités des valeurs 0, 1, ..., n (n étant fixé) dévient de la loi de Poisson car \hat{W} fait intervenir, outre les opérateurs \hat{a}^\times , $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^+ , des opérateurs qui agissent sélectivement sur les premières valeurs, comme l'opérateur de mesure $|0\rangle\langle 0|$ et l'opérateur de changement $|0\rangle\langle 1|$. Ce genre de construction est utile pour étudier notamment l'algorithme de décimation qui recherche le cœur- K d'un graphe aléatoire [74].

8.5 Action pour plusieurs variables

Jusqu'ici nous avons calculé la partie cinétique de l'action pour une variable aléatoire (de différents types). Voyons brièvement comment traiter le cas de N variables identiques ; nous nous affranchissons du couplage induit par les conditions initiale et/ou finale en passant dans l'ensemble statistique grand-canonique. Cela nous permettra en particulier de dégager une interprétation des champs \hat{a} (autre que celle de fonctions de réponse déjà mentionnée). Nous ajoutons aussi une remarque sur une erreur de raisonnement à ne pas faire dans le cas d'objets corrélés.

8.5.1 Action pour N objets identiques ; passage à l'ensemble grand-canonique

Si les N variables sont parfaitement décorrélées (soit que l'opérateur d'évolution du processus \hat{W} s'exprime comme un produit tensoriel sur les espaces vectoriels qui représentent chaque variable, soit que l'on traite l'ordre zéro du développement de Taylor de l'action en puissances du coefficient λ placé devant \hat{W}), la fonction de partition pour les N variables ensemble est le produit des fonctions de partition de chaque variable (comme dans le théorème de Fubini pour les intégrales multiples). Cependant, quand on étudie macroscopiquement ces variables on les décrit par un ou quelques paramètres, par exemple le nombre de variables à 1 pour des variables à valeurs dans $\{0, 1\}$, et cela conduit à un couplage effectif par la distribution initiale $|\rho(0)\rangle$ et l'événement étudié $\langle E|$.

Prenons l'exemple de N variables à deux valeurs. Nous supposons qu'à l'instant initial $t = 0$ elles sont dans l'un des états où le nombre de variables à 1 est $\rho_0 N$ (mais nous ne savons pas lequel et nous supposons que tous ces états sont équiprobables) et nous cherchons la probabilité qu'elles soient à l'instant final $t = T$ dans l'un des états où le nombre de variables à 1 est $\rho_T N$. Pour obtenir le terme cinétique de l'action, nous devons déjà calculer

$$Z' := \langle \rho_T | \exp \left[\int_0^T dt \hat{W}'(t) \right] | \rho_0 \rangle \quad (8.122)$$

où \hat{W}' est l'opérateur produit tensoriel des \hat{W}'_i qui imposent les moyennes (de \hat{a}_i^{-1} et $\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1}$ par exemple) sur chaque site et où

$$|\rho_0\rangle := \frac{1}{\binom{N}{N_0}} \sum_{\vec{s}} \otimes_{i=1}^N \left((1-s_i) |0\rangle + s_i |1\rangle \right), \quad \langle \rho_T | := \sum_{\vec{s}} \otimes_{i=1}^N \left((1-s_i) \langle 0| + s_i \langle 1| \right). \quad (8.123)$$

\vec{s} désigne ci-dessus les états $(s_1, s_2, \dots, s_N) \in \{0, 1\}^N$ où $\rho_0 N$ (resp. $\rho_T N$) entiers s_i valent un. Cependant, Z' ci-dessus ne s'écrit pas comme produit tensoriel (si $\rho_0 N$ sites donnés sont à un, il forcent en quelque sorte les autres sites à être à zéro), et la matrice de \hat{W}' dans la case canonique $\otimes_{i=1}^N (|0\rangle_i, |1\rangle_i)$ n'est pas triangulaire, donc nous ne savons pas comment calculer Z' . Une solution est de rajouter des multiplicateurs de Lagrange supplémentaires pour découpler les sites. Ces multiplicateurs de Lagrange sont des potentiels chimiques : au lieu de faire le calcul dans l'ensemble [statistique] canonique comme dans la formule (8.122), nous passons dans l'ensemble grand-canonique où le nombre initial (resp. final) de sites dans l'état 1 peut fluctuer mais où sa moyenne est imposée par les champs extérieurs que sont les potentiels chimiques. Les résultats sont les mêmes à la limite thermodynamique grâce à la concentration de la mesure (auto-moyennance) : pour un nombre de sites N grand, les fluctuations du nombre de sites à 1 deviennent négligeables, et les propriétés d'ensemble ne sont pas affectées par l'existence de quelques rares configurations où le nombre de sites à 1 s'écarte de sa valeur moyenne. Ainsi, nous allons en fait calculer

$$Z'_{\text{gc}} = \langle O | \exp \left[\nu_T \sum_{i=1}^N (\rho_T - \hat{a}_i^{-1}) + \int_0^T dt \hat{W}'(t) + \nu_0 \sum_{i=1}^N (\hat{a}_i^{-1} - \rho_0) \right] | O \rangle \quad (8.124)$$

où $|O\rangle$ désigne $\otimes_{i=1}^N (|0\rangle_i + |1\rangle_i)$ et \exp un produit- T comme d'habitude, puis nous optimiserons l'action résultante sur ν_T et ν_0 pour retrouver, à la limite thermodynamique, le même résultat que si nous avons pu faire le calcul dans l'ensemble canonique (il peut être nécessaire de diviser Z'_{gc} par sa valeur pour $\hat{W}' = 0$ afin que la probabilité totale Z soit normalisée). Cela revient à introduire des pics de Dirac dans les multiplicateurs de Lagrange $\check{a}^{-1}(t)$ aux instants T et 0 pour s'affranchir des contraintes de parallélisme (8.97). L'amplitude de ces pics de Dirac est, respectivement,

$$\check{a}_{i,T}^{-1} = \nu_T - \hat{a}_i(T) \quad \text{et} \quad \check{a}_{i,0}^{-1} = \hat{a}_i(0) + \ln \left[\frac{a_i(0)}{1 - a_i(0)} \right] - \nu_0. \quad (8.125)$$

À la limite thermodynamique $N \rightarrow +\infty$ avec les densités ρ_T et ρ_0 fixées, la partie cinétique de l'action s'écrit alors

$$\begin{aligned} \ln Z = & \sum_{i=1}^N \left\{ \int_0^T dt \hat{a}_i(t) \frac{da_i(t)}{dt} + \nu_T [\rho_T - a_i(T)] - \nu_0 [\rho_0 - a_i(0)] \right. \\ & \left. - a_i(0) \ln a_i(0) - [1 - a_i(0)] \ln [1 - a_i(0)] \right\} + \\ & N [\rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln (1 - \rho_0)]. \end{aligned} \quad (8.126)$$

Cette expression est normalisée; nous avons utilisé la formule de Stirling pour éliminer les coefficients binomiaux. Remarquer que, comme pour le modèle d'Ising, nous voyons apparaître l'entropie de variables à deux valeurs à moyenne fixée (comparer avec (8.59)).

L'expression ci-dessus éclaire le sens de $\hat{a}(t)$. Quand, à la fin du calcul de $\ln Z$ (avec le nombre voulu de termes dans son développement de Taylor), on optimise $\ln Z$ par rapport aux champs $a_i(t)$ et $\hat{a}_i(t)$ et par rapport à ν_T , ν_0 et ρ_T , il vient en particulier $a_i(T) = \rho_T$, $a_i(0) = \rho_0$, $\hat{a}_i(T) = \nu_T$ (donc tous les $a_i(0)$ et tous les $\hat{a}_i(T)$ sont égaux) et $\nu_T = \partial_{\rho_T} \ln Z$. Or, après optimisation et report dans $\ln Z$ des trajectoires $a_i(t)$ et $\hat{a}_i(t)$ optimales, Z est égal à la probabilité $P(\rho_T|\rho_0)$ que nous voulions calculer, à savoir que la densité de variables à 1 à T soit ρ_T sachant que la densité à 0 était ρ_0 (à condition, comme toujours, que $\ln Z$ puisse être approximée par son point col). Autrement dit,

$$\hat{a}(T) = \partial_{\rho_T} \ln P(\rho_T|\rho_0). \quad (8.127)$$

C'est-à-dire que $\hat{a}(T)$ permet d'explorer la distribution de probabilité P (et en particulier ses grandes déviations) par transformée de Legendre : la courbe de $\ln P(\rho_T|\rho_0)$ est paramétrée par sa pente \hat{a} . D'où le nom de *champs de déviation(s)* que nous leur donnons. Le programme de calcul de la fonction de grandes déviations P est donc : fixer une densité initiale ρ_0 et une pente ν_T , chercher les solutions $a_i(t)$ et $\hat{a}_i(t)$ compatibles avec les conditions initiale $a_i(0) = \rho_0$ et finale $\hat{a}_i(T) = \nu_T$, calculer l'action $\ln Z$ pour cette solution : elle donne la valeur de P qui correspond à ν_T et ρ_0 . Dans le cas de variables à n valeurs $0, 1, \dots, n-1$, tout ceci se généralise en

$$\hat{a}^{i_0 \leftarrow i}(T) = \partial_{\rho_i} P[\rho_0, \rho_1, \dots, \rho_{i_0-1}, \rho_{i_0+1}, \dots, \rho_{n-1}, T] \quad (8.128)$$

où P est la loi de probabilité d'observer à l'instant T les valeurs ρ_0, ρ_1, \dots de $n-1$ densités (la n^{e} densité ρ_{i_0} étant contrainte par les $n-1$ autres). Nous mettons en œuvre ce programme de calcul au chapitre suivant, notamment dans le cas du processus de contact.

Remarquer le cas particulier intéressant où $\hat{a}(t)$ est identiquement nul. On constate en pratique que, quand \tilde{W} conserve la probabilité, l'expression de $\tilde{W}(a, \hat{a})$ ne fait intervenir \hat{a} qu'à travers les facteurs $\exp(\hat{a}) - 1$ et $\exp(-\hat{a}) - 1$, donc s'annule quand $\hat{a} = 0$, et l'équation du mouvement pour \hat{a} admet la solution identiquement nulle $\hat{a}(t) = 0$. Dans $\ln Z$, aussi bien le terme cinétique que le terme en \tilde{W} sont nuls, donc cette solution contribue de manière importante à la probabilité totale (son poids dans Z ne décroît pas, quand $N \rightarrow +\infty$, comme $\exp(-SN)$ avec $S > 0$, contrairement à ce que l'on observe pour la plupart des solutions des équations du mouvement). On comprend facilement pourquoi : quand il y a concentration de la mesure (auto-moyennance), la fonction de grandes déviations $\ln P(\rho_T|\rho_0)$ admet un maximum unique (qui correspond à la valeur de ρ_T la plus probable) et elle prend forcément la valeur zéro en ce maximum car la probabilité totale doit valoir un. Or une solution des équations du mouvement qui possède la propriété

$$\hat{a}(T) = \partial_{\rho_T} \ln P(\rho_T|\rho_0) = 0 \quad (8.129)$$

sélectionne précisément ce maximum unique. Plus généralement, quand $\hat{a}(t) = 0$ à tout instant, elle sélectionne la trajectoire la plus probable, et il est logique que son poids dans Z vaille un. Les auteurs de [115] confirment que les solutions des équations du mouvement *qui correspondent à $\tilde{W} = 0$* jouent un rôle particulier et structurent « l'espace des phases » du hamiltonien effectif \tilde{W} .

8.5.2 Remarque à propos de variables corrélées

Soit le processus (d'intérêt purement académique) défini sur l'espace produit tensoriel de deux variables à deux valeurs, dont la base canonique est $(|0\rangle_a, |1\rangle_a) \otimes (|0\rangle_b, |1\rangle_b)$, par l'opérateur

$$\hat{W} = \hat{a}^{0\leftarrow 1} \hat{b}^{0\leftarrow 1} - \hat{a}^{\leftarrow 1} \hat{b}^{\leftarrow 1} \quad (8.130)$$

et avec la condition initiale $|v(0)\rangle = |1_a, 1_b\rangle$. Chaque intervalle infinitésimal de temps dt , les deux variables, qui sont à $t = 0$ toutes deux dans l'état 1, ont la probabilité dt de passer dans l'état 0 *en même temps*, si elles étaient *toutes deux* dans l'état 1. Il est bien évident que, dans ce processus, les deux variables aléatoires prendront exactement les mêmes valeurs à chaque instant (elles ont la même valeur à $t = 0$), et que le processus est strictement équivalent au processus d'opérateur $\hat{W} = c^{0\leftarrow 1} - c^{\leftarrow 1}$ sur une seule variable c (c'est le processus de désintégration radioactive déjà pris comme exemple).

Soit à calculer avec notre formalisme la probabilité d'observer l'événement E à l'instant T , c'est-à-dire en langage mathématique

$$Z = \langle E | \exp(\lambda \hat{W} T) | 1_a, 1_b \rangle. \quad (8.131)$$

Nous avons introduit un facteur λ devant l'opérateur d'évolution pour pouvoir faire le développement perturbatif de $\ln Z$ en puissances de λ (qui coïncide ici avec un développement en puissances de T) et prendre $\lambda = 1$ à la fin. Nous remarquons que les deux variables sont couplées par leur valeur initiale; qu'à cela ne tienne, passons dans l'ensemble grand-canonique et calculons

$$Z_{\text{gc}} \langle E | \exp(\lambda \hat{W} T) \exp[\nu (\hat{a}^{\leftarrow 1} \hat{b}^{\leftarrow 1} - 1)] | O \rangle \quad (8.132)$$

où $|O\rangle := (|0\rangle_a + |1\rangle_a)/2 \otimes (|0\rangle_b + |1\rangle_b)/2$. Il est tentant d'écrire que l'action vaut, à l'ordre un en λ où la moyenne de l'opérateur de l'évolution est découplée : $\langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t) \hat{b}^{\leftarrow 1}(t) \rangle_0 = \langle \hat{a}^{\leftarrow 1}(t) \rangle_0 \langle \hat{b}^{\leftarrow 1}(t) \rangle_0 = a(t)b(t)$,

$$\ln Z = \int_0^T dt \left\{ \hat{a}(t) \frac{da(t)}{dt} + \hat{b}(t) \frac{db(t)}{dt} + \lambda a(t)b(t) \left(e^{\hat{a}(t)+\hat{b}(t)} - 1 \right) \right\} + \text{termes de bord.} \quad (8.133)$$

Une mauvaise action trouve toujours sa récompense.

Michel Audiard, *Les Lions sont lâchés*

Si tel était le cas, les équations du mouvement s'écriraient (en $\lambda = 1$)

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{db(t)}{dt} = -a(t)b(t)e^{\hat{a}(t)+\hat{b}(t)} \quad (8.134)$$

et

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = b(t) \left(e^{\hat{a}(t)+\hat{b}(t)} - 1 \right), \quad \frac{d\hat{b}(t)}{dt} = a(t) \left(e^{\hat{a}(t)+\hat{b}(t)} - 1 \right) \quad (8.135)$$

donc le comportement le plus probable du système, obtenu comme d'habitude pour $\hat{a}(t) = \hat{b}(t) = 0$ et compte tenu du fait que $a(0) = b(0)$, serait gouverné par

$$\frac{da(t)}{dt} = \frac{db(t)}{dt} = -a(t)b(t) = -a(t)^2 \quad (8.136)$$

alors que l'on sait bien que, pour le processus à une seule variable auquel celui-ci est équivalent, on doit avoir $\frac{dc(t)}{dt} = -c(t)$ (sans exposant deux dans le membre de droite). L'erreur ne vient pas de ce que nous avons tronqué le développement de Taylor à l'ordre un en λ , mais de ce

que nous avons indûment repris l'expression de la partie cinétique de l'action valable pour des variables décorréliées. En effet, contrairement au facteur

$$\exp \left[\nu_0 \sum_{i=1}^N (\hat{a}_i^{=1} - \rho_0) \right] \quad (8.137)$$

de l'expression (8.124) qui s'écrit comme un produit tensoriel sur les sites i , le facteur

$$\exp \left[\nu \left(\hat{a}^{=1} \hat{b}^{=1} - 1 \right) \right] \quad (8.138)$$

ne s'écrit *pas* comme un produit tensoriel, donc il ne suffit *pas* à découpler les sites, et l'expression de la partie cinétique de l'action ne se ramène pas à la somme de deux actions, une dans l'espace a et une dans l'espace b . Il faut donc prendre soin de calculer explicitement la partie cinétique de l'action, ou plus précisément ce qui pose problème :

$$Z' = \langle E | \exp \left[\int_0^T dt \hat{W}'(t) + \nu \left(\hat{a}^{=1} \hat{b}^{=1} - 1 \right) \right] | O \rangle \quad (8.139)$$

(avec le sens habituel de \hat{W}'). Ce qui n'est pas possible tel quel, en imposant dans \hat{W}' les moyennes des quatre opérateurs $\hat{a}^{=1}$, $\hat{b}^{=1}$, $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}$ et $\hat{b}^{0 \leftarrow 1}$, car la matrice de \hat{W}' n'est pas triangulaire ni factorisée comme produit tensoriel de matrices triangulaires, mais cela devient possible si l'on se restreint au cas où l'on impose uniquement les moyennes de $\hat{a}^{=1} \hat{b}^{=1}$ et $\hat{a}^{0 \leftarrow 1} \hat{b}^{0 \leftarrow 1}$ — l'on est alors ramené au modèle équivalent sur l'*unique* variable c introduit au début de ce paragraphe, puisqu'il ne reste plus que deux degrés de liberté (les deux moyennes imposées) identifiables à $c(t)$ et $\hat{c}(t)$.

Cette remarque peut sembler aller de soi dans le cas simple du processus étudié ci-dessus. Mais elle prend toute son ampleur quand on veut étudier un processus plus compliqué et où l'on peut être tenté, pour simplifier l'écriture de l'opérateur d'évolution \hat{W} , d'introduire des variables redondantes. Prenons l'exemple de l'algorithme de recherche du cœur- k sur un graphe aléatoire d'Erdős et Rényi (voir la définition p. 122). Il s'agit de retirer répétitivement du graphe les arêtes adjacentes aux sommets qui possèdent strictement moins de k arêtes. On peut penser à au moins trois algorithmes [74] : à chaque pas de temps, on choisit un des sommets ayant strictement moins de k arêtes (uniformément au hasard) et l'on efface *toutes* ses arêtes, ou bien : à chaque pas de temps on choisit un des sommets ayant strictement moins de k arêtes (uniformément au hasard) et l'on efface *l'une* de ses arêtes au hasard uniformément, ou encore : à chaque pas de temps on choisit uniformément au hasard une arête dans l'ensemble des arêtes adjacentes à un sommet ayant strictement moins de k arêtes et on efface *cette* arête. Pour étudier ces algorithmes, il est naturel d'introduire deux jeux de variables, un jeu de variables bivaluées a_{ij} indiquant, pour chaque arête $i \leftrightarrow j$, si elle est présente ou absente, et un jeu de variables à valeurs entières positives s_i indiquant le nombre d'arêtes de chaque sommet i (ce nombre d'arêtes possède une loi statistique de Poisson si l'on se place à la limite thermodynamique pour les grandes d'Erdős et Rényi). Les opérateurs d'évolution des trois algorithmes s'écrivent facilement à l'aide des opérateurs associés à ces variables ; pour le deuxième, par exemple :

$$\hat{W} = \sum_i \sum_j \left(\hat{a}_{ij}^{0 \leftarrow 1} \hat{s}_i^{-|0 < \cdot < k} \hat{s}_j^{-\times} - \hat{a}_{ij}^{=1} \hat{s}_i^{0 < \cdot < k} \hat{s}_j^{\times} \right) \quad (8.140)$$

avec les notations du paragraphe 8.4.2, en sus de $\hat{s}_i^{-|0 < \cdot < k} := \sum_{n=1}^{k-1} |n-1\rangle \langle n|$ et $\hat{s}_i^{0 < \cdot < k} := \sum_{n=1}^{k-1} |n\rangle \langle n|$. Les opérateurs sur j prennent en compte le fait que l'algorithme choisit un sommet i puis une arête qui en part, et non pas un sommet i puis un sommet j uniformément parmi les sommets restants, ce qui fait qu'un sommet j a d'autant plus de chances d'être choisi qu'il lui reste d'arêtes, d'où les exposants \times . Comme les deux jeux de variables des

arêtes et des sommets sont corrélés (ils contiennent la même information, ou, dit autrement, la valeur prise par les variables d'un jeu contraint la valeur prise par les variables de l'autre jeu), nous ne pouvons pas, dans le développement de Taylor de $\ln Z$, écrire que les moyennes de produits d'opérateurs appartenant à ces deux jeux sont égaux aux produits des moyennes. Donc ces algorithmes semblent difficiles à étudier. Mais, pour le premier, nous n'avons pas besoin d'utiliser les opérateurs d'arêtes. En effet, ces derniers servent à marquer quelles arêtes sont encore présentes ou ont déjà été effacées, de sorte que l'algorithme ne décrémente pas deux fois les compteurs de nombre d'arêtes de sommets pour une même arête (si i et j ont encore des nombres d'arêtes compris strictement entre zéro et k , on ne peut pas savoir s'il existe une arête entre eux ou pas sans utiliser les \hat{a}_{ij}). Or, pour le premier algorithme, il n'y a pas de risque de décrémente deux fois un compteur d'arêtes, car, quand on retire une arête, l'un des sommets à ses extrémités voit son compteur passer à zéro et ne peut plus être choisi par l'algorithme ensuite. Il n'est pas besoin de savoir si une arête a été retirée, il suffit de savoir si elle était initialement présente, et nous pouvons écrire l'opérateur d'évolution comme

$$\hat{W} = \sum_i \sum_j a_{ij} \left(\hat{s}_i^{0 \leftarrow 0 < \cdot < k} \hat{s}_j^{-\times} - \hat{s}_i^{0 < \cdot < k} \hat{s}_j^{\times} \right) \quad (8.141)$$

où les *nombres scalaires* a_{ij} valent un ou zéro selon que les arêtes respectives $i \leftrightarrow j$ étaient initialement présentes ou non (nous avons utilisé la notation $\hat{s}^{0 \leftarrow 0 < \cdot < k} := \sum_{n=1}^{k-1} |0\rangle \langle n|$). Ici, la moyenne de \hat{W} s'écrit comme somme sur i, j de moyennes de factorisées, et, après un traitement adéquat du désordre gelé (les a_{ij} sont, par définition d'un graphe d'Erdős et Rényi, décorrélés et de moyenne c/N ; par ailleurs les distributions de nombres d'arêtes des sommets ne sont des lois de Poisson qu'après que l'on a moyenné sur le désordre gelé), nous devrions pouvoir écrire les équations du mouvement de champ moyen pour les champs $s(t)$ (il est nécessaire de prendre $k+1$ couples de champs (mesure, déviation) pour chaque sommet i du fait que l'opérateur \hat{W} ne conserve le caractère poissonnien des nombres d'arêtes que tant que ce nombre d'arêtes est au moins égal à k). Le statut remarquable du premier algorithme vis-à-vis des deux autres a été remarqué par B. Pittel, J. Spencer et N. Wormald [74], qui l'étudient précisément parce qu'il est « markovien », contrairement aux deux autres.

Chapitre 9

Applications

VOYONS des applications du formalisme introduit au chapitre précédent. Nous reprenons les mêmes notations. La première application est un exemple qui peut être traité de façon exacte sans le formalisme, mais que nous donnons pour des raisons pédagogiques (le lecteur voit comment faire les calculs) et pour vérifier que nous retrouvons bien les résultats attendus. La deuxième application concerne le processus de contact, dont l'étude était un objectif de cette partie du mémoire. La troisième indique des pistes d'études pour des modèles intéressants, issus de la biologie des populations, mais plus compliqués que le processus de contact. Une autre application intéressante serait les algorithmes de recherche locale de solutions aux problèmes combinatoires, comme l'algorithme WalkSAT mentionné p. 123.

9.1 Processus de désintégration radioactive

Pour commencer, étudions le modèle très simple où N atomes radioactifs identiques se désintègrent de façon statistiquement indépendante avec une constante de temps τ . Le processus de contact se ramène à ce processus quand le taux de contamination λ est nul. Rappelons l'opérateur d'évolution pour ce problème où les N variables stochastiques peuvent prendre deux valeurs (1 : l'atome est encore radioactif, 0 : il s'est déjà désexcité) :

$$\hat{W} = \tau^{-1} \sum_{i=1}^N (\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\overline{1}}). \quad (9.1)$$

Nous voulons calculer la probabilité $P(\rho_T, T | \rho_0, 0)$ d'observer $\rho_T N$ atomes radioactifs à T sachant qu'il y en avait $\rho_0 N$ à $t = 0$. τ^{-1} est en facteur dans \hat{W} donc nous allons faire le développement de Taylor de $\ln Z$ en puissances de ce paramètre. Après application du raisonnement du paragraphe 8.5.1, nous arrivons à l'action

$$\frac{\ln Z}{N} = [\text{termes de bord}] + \int_0^T dT \left\{ \hat{a}(t) \frac{da(t)}{dt} + \tau^{-1} \tilde{W}[a(t), \hat{a}(t)] \right\} \quad (9.2)$$

à l'ordre un en τ^{-1} , avec

$$\tilde{W}(a, \hat{a}) := a(\exp \hat{a} - 1). \quad (9.3)$$

En prenant les dérivées fonctionnelles par rapport à $a(t)$ et $\hat{a}(t)$, nous trouvons les équations du mouvement

$$\begin{aligned} \tau \frac{da(t)}{dt} &= -a(t) e^{\hat{a}(t)} \\ \tau \frac{d\hat{a}(t)}{dt} &= e^{\hat{a}(t)} - 1. \end{aligned} \quad (9.4)$$

La quantité \tilde{W} est conservée, notons-la E . Ce système de deux équations avec une intégrale première (E) peut être résolu analytiquement par quadrature. Prenons $\tau = 1$ dans la suite, quitte à redéfinir l'échelle de temps. En posant $y(t) := \exp \hat{a}(t)$, nous trouvons notamment

$$\exp t = \ln [1 - 1/y(t)] - \ln [1 - 1/y(0)]. \quad (9.5)$$

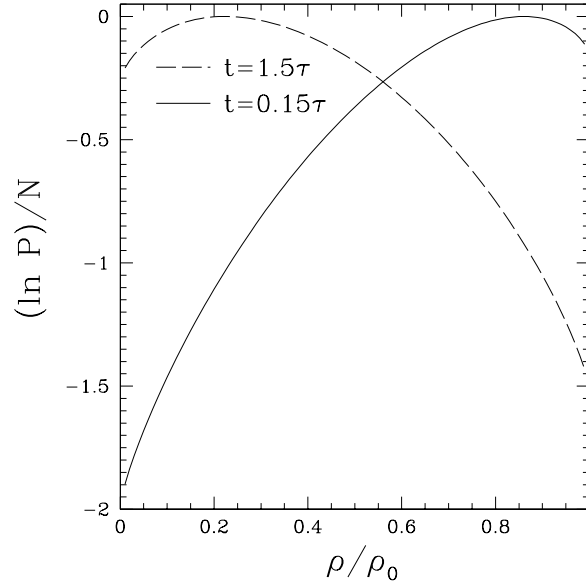


FIG. 9.1 – La fonction de grandes déviations $\ln P(\rho_T, T|\rho_0, 0)$ pour N atomes radioactifs qui se désintègrent (c'est-à-dire la densité de probabilité d'observer $\rho_T N$ atomes radioactifs à T s'il y en avait $\rho_0 N$ à $t = 0$), pour les dates $t = 0.15\tau$ et $t = 1.5\tau$. Nous avons porté ρ_T/ρ_0 en abscisses et $\ln P/N$ en ordonnées.

Les termes de bord, quand nous les optimisons, imposent $a(T) = \rho_T$ et $a(0) = \rho_0$. Après report de la solution des équations du mouvement, il reste

$$\ln P(\rho_T, T|\rho_0, 0)/N = \ln Z/N = ET + \hat{a}(T)a(T) - \hat{a}(0)a(0) - \int_0^T dt a(t) \frac{d\hat{a}(t)}{dt} \quad (9.6)$$

car le terme de bord est nul et car \tilde{W} est conservé, soit, comme

$$\frac{d\hat{a}(t)}{dt} = \frac{1}{y(t)} \frac{dy(t)}{dt} \quad \text{et} \quad a(t) = \frac{E}{y(t) - 1}, \quad (9.7)$$

$\ln Z = \hat{a}(T)\rho_T - \hat{a}(0)\rho_0$. On peut exprimer $\hat{a}(T)$ et $\hat{a}(0)$ en fonction de E , ρ_T et ρ_0 , puis E en fonction de T et ρ_T et ρ_0 grâce à (9.5). Il vient finalement

$$\ln P(\rho_T, T|\rho_0, 0)/N = (\rho_T - \rho_0) \ln(e^T - 1) - \rho_0 T + S_{\rho_0 - \rho_T} + S_{\rho_T} - S_{\rho_0} \quad (9.8)$$

où $S(\rho) := -\rho \ln \rho$. Cette expression est tracée pour deux valeurs de la date T fig. 9.1.

À titre de vérification, on déduit de l'expression de $\ln P$ un certain nombre de résultats que l'on retrouve facilement :

- $P = 0$ si $\rho_T > \rho_0$ — il ne peut pas y avoir plus d'atomes radioactifs à T qu'à 0.
- La densité la plus probable à T s'obtient en dérivant P par rapport à ρ_T ; il vient $\rho_T = \rho_0 \exp(-T)$, résultat bien connu.
- La probabilité qu'aucun atome ne se soit désintégré à T , $P(\rho_0|\rho_0) = \exp(-N\rho_0 T)$ et celle que tous les atomes se soient désintégrés à T , $P(0|\rho_0) = [1 - \exp(-T)]^{\rho_0}$, se retrouvent comme produits de N événements indépendants.

Plus généralement, comme les N atomes sont statistiquement indépendants et que la probabilité qu'un atome donné ne se soit pas encore désintégré à t est $\exp(-t)$, un calcul direct exact nous redonne la formule de $\ln P$ écrite ci-dessus. Remarquer que, dans cette formule, nous avons simplifié les coefficients binomiaux à l'aide de la formule de Stirling (et ce dès le paragraphe 8.5.1 en fait, quand nous avons traité les termes de bord) donc elle n'est valable

qu'asymptotiquement à la limite $N \rightarrow +\infty$, mais si nous n'avions pas fait cette simplification des termes de bord (et donc calculé P dans l'ensemble statistique canonique) nous aurions trouvé l'expression exacte même à N fini.

Ici, le calcul de $\ln Z$ est exact dès le premier ordre du développement en puissances de τ^{-1} . On peut s'en rendre compte de deux manières : soit on décide d'imposer la moyenne des opérateurs $\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1}$ et $\hat{a}_i^{\leftarrow 1}$ et l'on se rend compte que l'opérateur \hat{W}' qui intervient dans le calcul de la partie cinétique de l'action n'est autre que \hat{W} avec des coefficients différents, donc la partie cinétique de l'action contient déjà le résultat final si l'on donne la bonne valeur à ces coefficients, soit l'on fait le développement de Taylor de $\ln Z$ suivant la méthode d'A. Georges et J. Yedidia, auquel cas on introduit l'opérateur \hat{U} qui sert à calculer les dérivées des moyennes :

$$\partial_{\tau^{-1}} \langle \hat{A} \rangle = \langle \partial_{\tau^{-1}} \hat{A} \rangle + \langle \hat{U} \hat{A} \rangle \quad (9.9)$$

pour un opérateur \hat{A} quelconque, avec

$$\hat{U} := \int_0^T dt \left\{ \tau \hat{W} - \tau \langle \hat{W} \rangle + \sum_{i=1}^N \left[\check{a}_i^{(1)} (\hat{a}_i^{(1)} - a_i^{(1)}(t)) + \check{a}_i^{(2)} (\hat{a}_i^{(2)} - a_i^{(2)}(t)) \right] \right\} \quad (9.10)$$

où $\hat{a}_i^{(1)}$ et $\hat{a}_i^{(2)}$ sont les deux opérateurs dont on a choisi d'imposer les moyennes, et l'on trouve par calcul que \hat{U} est nul ou que les moyennes de ses puissances $\langle \hat{U}^n \rangle|_{\tau^{-1}=0}$ sont nulles, donc les termes d'ordre deux et plus du développement de $\ln Z$ sont nuls. Ceci est une conséquence de l'indépendance statistique des atomes.

Variables bosoniques. Dans le processus stochastique précédent, regroupons les N atomes en paquets d'un grand nombre d'atomes (par exemple, N paquets de N) et supposons qu'initialement, dans chaque paquet, seule une fraction c/N des atomes est radioactive. La loi de probabilité du nombre d'atomes radioactifs d'un paquet est alors, asymptotiquement quand $N \rightarrow +\infty$, une loi de Poisson de moyenne c . Munissons chaque paquet i d'une variable aléatoire A_i bosonique (c'est-à-dire qui peut prendre toutes les valeurs entières positives) qui prend la valeur égale au nombre d'atomes radioactifs dans son paquet. Elle a initialement une loi de Poisson de moyenne c . Avec les notations du paragraphe 8.4.2, l'opérateur d'évolution pour les N variables de paquets s'écrit

$$\hat{W} = \sum_{i=1}^N (\hat{a}_i^{-\times} - \hat{a}_i^{\times}). \quad (9.11)$$

Il conserve le caractère poissonnien des N variables aléatoires, et, comme les moyennes respectives de $\hat{a}^{-\times}$ et \hat{a}^{\times} sont $a^{\times} \exp(\hat{a}^{\times})$ et a^{\times} , c'est-à-dire les mêmes expressions que pour les opérateurs des bosons de cœur dur $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}$ et $\hat{a}^{\leftarrow 1}$ en changeant simplement $a^{\leftarrow 1}$ en a^{\times} et $\hat{a}^{0 \leftarrow 1}$ en \hat{a}^{\times} , les équations du mouvement sont les mêmes que (9.4) ci-dessus. La fonction de grandes déviations a donc, en fonction du temps, la même allure que celle du processus de désintégration radioactive des N atomes : pour le prix d'un calcul, nous avons deux résultats. Il faut bien garder à l'esprit la signification de $\hat{a}^{\times}(t)_i$: c'est la *moyenne* du nombre A_i d'atomes radioactifs dans le paquet i à l'instant t ; autrement dit, la fonction de grandes déviations indique la probabilité que la *moyenne* de A_i prenne une valeur loin de la moyenne des moyennes, et non pas directement la probabilité que A_i prenne une certaine valeur. La probabilité que A_i prenne la valeur n à t s'obtient en sommant les probabilités que A_i prenne cette valeur conditionnées aux différentes valeurs de la moyenne de A_i à t . Pour le processus de désintégration radioactive simple, c'était la même chose, mais la loi de probabilité de l'équivalent de A_i était une loi à deux valeurs donc le calcul était plus simple.

9.2 Processus de contact

Le processus de contact, défini et présenté à la section 7.3, possède l'opérateur d'évolution introduit p. 141 $\hat{W} = \mu \hat{W}_{\text{ann}} + \lambda \hat{W}_{\text{cre}}$ avec

$$\begin{aligned}\hat{W}_{\text{ann}} &:= \sum_i (\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\leftarrow 1}) \\ \hat{W}_{\text{cre}} &:= \frac{1}{z} \sum_i \sum_{j \in i} (\hat{a}_i^{1 \leftarrow 0} - \hat{a}_i^{\leftarrow 0}) \hat{a}_j^{\leftarrow 1}\end{aligned}\tag{9.12}$$

où l'on reconnaît la règle de guérison spontanée (\hat{W}_{ann}) et la règle de contamination (\hat{W}_{cre}). Le facteur μ a été ajouté pour des raisons techniques qui apparaîtront plus loin, mais seule la valeur $\mu = 1$ nous intéresse. Nous calculons sa distribution quasi stationnaire à l'aide de la méthode précédente, d'abord dans le cas (simple) du champ moyen ou d'un graphe complet.

9.2.1 Calcul en champ moyen

Nous reprenons les notations du chapitre précédent. Il s'agit de calculer $\Pi(\rho_T, T; \rho_0, 0) := \langle \rho_T | \exp[\hat{W}T] | \rho_0 \rangle$, c'est-à-dire la probabilité d'observer une densité ρ_T de sites malades à l'instant T sachant qu'il y en avait ρ_0 au départ.

Pour cela nous calculons Z , probabilité Π où nous avons ajouté les champs extérieurs comme au chapitre précédent, en effectuant un double développement de Taylor de $\ln Z$ en puissances de μ et de λ (ou plutôt, de μ et de λ/z car λ est toujours accompagné d'un z ; z sera constant sur les graphes réguliers que nous étudierons). Ce développement est détaillé plus loin, mais disons tout de suite que chaque terme du développement en puissances de λ d'ordre au moins deux en λ/z peut se représenter comme un diagramme non vide connexe (les diagrammes non connexes s'éliminent car $\ln Z$ est le *logarithme* d'une fonction de partition [153]) dont les sommets sont des sites du réseau où le processus est défini et dont les arêtes sont orientées. Les diagrammes où un site possède strictement moins de deux arêtes sont nuls. Chaque arête correspond à une puissance de λ/z dans le développement. Nous regroupons les diagrammes de même forme en un terme (par exemple, tous les diagrammes à deux sites reliés par deux arêtes).

Dans le cas du réseau complet à N sites où chaque site est relié aux $z = N - 1$ autres, un argument de comptage des diagrammes similaire à celui du modèle d'Ising (section 8.2) montre que tous les diagrammes contribuent à $\ln Z$ (noté dans le cas du réseau complet ou de champ moyen $\ln Z_{\text{CM}}$) de manière finie voire nulle à la limite grand N . Par exemple, les diagrammes à deux sites et deux arêtes sont chacun d'ordre $\lambda^2/(N-1)^2$, et il y en a $2N(N-1)$, donc leur contribution est d'ordre un. Les termes correspondants du développement de $\ln Z_{\text{CM}}$ sont donc négligeables devant le terme cinétique, d'ordre N car on somme N actions de sites découplés. Restent les termes d'ordre zéro et un en λ . Nous verrons que, pour ceux-là, les termes d'ordre total en μ et λ au moins deux sont nuls. Il nous reste donc :

$$\ln Z_{\text{CM}} = \ln Z(\lambda = \mu = 0) + \mu \partial_\mu \ln Z|_{\lambda=\mu=0} + \lambda \partial_\lambda \ln Z|_{\lambda=\mu=0}\tag{9.13}$$

soit encore

$$\ln Z_{\text{CM}} = \ln Z(\lambda = \mu = 0) + \mu \int_0^T dt \langle \hat{W}_{\text{ann}}(t) \rangle_0 + \lambda \int_0^T dt \langle \hat{W}_{\text{cre}}(t) \rangle_0,\tag{9.14}$$

où les moyennes $\langle \cdot \rangle$ sont calculées en $\lambda = \mu = 0$, où les sites sont découplés. Explicitons ces moyennes :

$$\begin{aligned}\langle \hat{W}_{\text{ann}}(t) \rangle_0 &= \sum_i a_i(t) \left[e^{\hat{a}_i(t)} - 1 \right] \\ \langle \hat{W}_{\text{cre}}(t) \rangle_0 &= \frac{1}{z} \sum_i \sum_{j \in i} [1 - a_i(t)] \left[e^{-\hat{a}_i(t)} - 1 \right] a_j(t).\end{aligned}\tag{9.15}$$

Comme chaque terme ne fait intervenir qu'au plus un des opérateurs élémentaires \hat{a}_i^{-1} , $\hat{a}_i^{0 \leftarrow -1}$ et $\hat{a}_i^{1 \leftarrow 0}$ sur un même site, les valeurs moyennes des termes ne dépendent pas du choix des moyennes imposées dans $\ln Z_{\text{CM}}$ et, à ce stade, nous n'avons pas besoin de préciser ce choix. La partie cinétique de l'action, $\ln Z(\lambda = \mu = 0)$, est donnée par la formule (8.126).

Le calcul de $\ln Z_{\text{CM}}$ avec contraintes est achevé. Nous avons face à nous une forme semblable à l'intégrale de chemins (8.45) avec un « hamiltonien effectif » (la somme des deux moyennes ci-dessus avec coefficients μ et λ), ou encore à celle que nous avons rencontrée dans l'exemple de la désintégration radioactive. Optimisons $\ln Z_{\text{CM}}$ par rapport aux champs $a_i(t)$ et $\hat{a}_i(t)$ pour trouver les trajectoires dominantes dans l'intégrale de chemins. Comme au paragraphe 8.5.1, il vient en particulier que tous les $a_i(0)$ sont égaux et que tous les $\hat{a}_i(T)$ sont égaux. Les équations du mouvement (8.47) étant invariantes sous les permutations des indices i des sites, il est naturel de chercher une solution où les fonctions $a_i(t)$ d'une part et $\hat{a}_i(t)$ d'autre part sont les mêmes. Une telle solution existe (nous allons la calculer). Si nous pouvions montrer que le système a une unique solution, notre hypothèse sur la symétrie de cette solution deviendrait rigoureuse. Mais une telle preuve n'est pas automatique, car le système différentiel que nous avons à résoudre n'est pas un système de Cauchy (les valeurs *initiales* $a_i(0)$ sont imposées, mais pour les \hat{a}_i ce sont les valeurs *finales*). Sous cette hypothèse, nous sommes ramenés à optimiser

$$\frac{\ln Z_{\text{CM}}}{N} = [\text{termes de bord}] + \int_0^T dT \left\{ \hat{a}(t) \frac{da(t)}{dt} + \tilde{W}_{\text{CM}}[a(t), \hat{a}(t)] \right\} \quad (9.16)$$

avec

$$\tilde{W}_{\text{CM}}[a, \hat{a}] := a(\exp \hat{a} - 1) + \lambda a(1 - a) [\exp(-\hat{a}) - 1]. \quad (9.17)$$

Les termes de bord ont la même expression que dans (8.126) et imposent quand on les optimise $\hat{a}(T) = \nu_T$ et $a(0) = \rho_0$. Le reste livre les équations du mouvement analogues à (8.47), dont les solutions conservent, comme nous l'avons vu, la valeur de \tilde{W}_{CM} . Notons cette intégrale première E . Comme pour le processus de désintégration radioactive (le calcul est très semblable à celui vu à la section 9.1), il est possible, grâce à cette quantité conservée, de résoudre analytiquement par quadrature les équations du mouvement. Nous renvoyons le lecteur intéressé à la discussion détaillée de l'allure des solutions et du « portrait de phases » de ce système différentiel dans la publication P3 (figure 3 p. 016126-8; nous rappelons que $a(t)$ et $\hat{a}(t)$ sont notés, dans cette publication, $\phi(t)$ et $\psi(t)$); voir [115] pour une discussion générale des « portraits de phases » des hamiltoniens effectifs des modèles de réaction-diffusion. On observe en particulier que, quelle que soit la solution, sa contribution à $\ln Z_{\text{CM}}$ est une fonction négative et décroissante (même quand $a(t)$ oscille). Le signe négatif est une condition nécessaire puisque la contribution de la solution est le logarithme d'une probabilité.

Des solutions particulièrement intéressantes sont celles où \hat{a} est uniformément nul — elles correspondent, nous l'avons vu, aux maxima de la distribution de probabilité de ρ à T . Il vient en ce cas

$$\frac{da(t)}{dt} = -\lambda a(t) \left[a(t) - 1 + \frac{1}{\lambda} \right] \quad (9.18)$$

et $a(t)$ tend vers zéro, ou bien vers $\rho^* := 1 - 1/\lambda$ si $\lambda \geq 1$ et $a(0) > 0$. Nous en déduisons le comportement qualitatif du modèle sur réseau complet à la limite thermodynamique : si $\lambda \leq 1$, le processus meurt ; sinon, il dure indéfiniment avec une densité moyenne de sites malades ρ^* .

La tragédie doit renfermer la durée de son action dans un tour de soleil.

Aristote, *Poétique*, chapitre V

Une autre famille de solutions intéressantes est celle où $\hat{a}(0) > 0$ avec $E > 0$ très petit. Ces solutions ont une *durée de vie finie* : après une durée de l'ordre de $\ln E$, $a(t)$ atteint la région de l'état absorbant $\rho = 0$ et $\hat{a}(t)$ diverge, mais l'action S est finie. Ces grandes déviations ne sont donc pas aussi rares que les autres. En effet, la probabilité d'observer $\rho = 0$ au bout d'une

durée T est au moins égale à $\exp(-NS)$ où S est l'action (sans le facteur N) qui correspond à cette solution (les termes de bord s'annulent). Cette action comporte entre autres les termes $\int \hat{a}(t) da(t)/dt$ et ET . Ce dernier est d'ordre $E \ln E \rightarrow 0$ quand $E \rightarrow 0$, et l'autre est fini. Donc S est finie, et la probabilité d'observer $\rho = 0$ est certes exponentiellement faible en N , mais non nulle (contrairement à la probabilité d'observer $\rho = 1$ par exemple). Ces solutions peuvent être appelées *instantons* par analogie avec les solutions des équations du mouvement associées à une intégrale de chemins en mécanique quantique et qui permettent de calculer la probabilité de traverser une barrière de potentiel par effet tunnel. Il y a une analogie bien connue entre quitter un état métastable grâce à une fluctuation (thermique ou autre) très ample qui franchit une barrière de potentiel et franchir cette barrière de potentiel par effet tunnel. On rencontre des instantons même dans des problèmes d'informatique théorique [156] ; voir aussi [138] pour une utilisation de la méthode d'approximation WKB au calcul de statistiques d'événements rares (grandes déviations) dans des systèmes de particules en interaction sur réseau complet.

Nous pouvons plus généralement calculer la distribution quasi stationnaire π^* de ρ dans l'état métastable à partir de ces solutions instantoniques où $|E|$ est très petit. Pour chaque valeur de $\hat{a}(0)$, nous calculons l'action $-S$ de la solution des équations du mouvement et cela nous livre

$$\pi^*(\rho) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \lim_{N \rightarrow +\infty} N^{-1} \ln \Pi[\rho, T; \rho_0, 0] \quad (9.19)$$

où ρ est la valeur observée de $a(T)$ (paramétrée par $\hat{a}(0)$). La densité initiale ρ_0 est contrainte, connaissant $\hat{a}(0)$, par la condition $E = 0$, mais de toute façon le système « oublie » rapidement sa condition initiale : $a(t)$ se rapproche rapidement de ρ^* avant s'en détacher lentement pour atteindre la valeur $\rho(T)$ demandée. Nous trouvons ainsi

$$\pi^*(\rho) = -\frac{1}{\lambda} + (1 - \rho)[1 - \ln \lambda - \ln(1 - \rho)]. \quad (9.20)$$

La courbe de cette fonction de grandes déviations $\pi^*(\rho)$ est donnée fig. 7.3. $\pi^*(\rho)$ est maximale en la densité $\rho^* = 1 - 1/\lambda$ et y vaut $\pi^*(\rho^*) = 0$, donc la probabilité totale de la distribution $\pi^*(\rho)$ vaut un. Ceci n'est observé qu'à la limite thermodynamique $N \rightarrow +\infty$ puis $t \rightarrow +\infty$, où l'état métastable est en fait stable (du moment que la densité initiale de sites infectés est strictement positive). Pour un système de taille finie, on observerait que la partie régulière de $\pi^*(\rho, t)$ a un maximum (sur ρ) qui dépend du temps et décroît et qu'il existe une partie singulière (un pic de Dirac en $\rho = 0$ dont le poids augmente au cours du temps).

Une façon plus rapide de trouver la valeur de $\pi^*(\rho)$ est de ne pas calculer explicitement l'action, mais d'utiliser l'interprétation de $\hat{a}(T)$ trouvée au paragraphe 8.5.1 : on sait que $\hat{a}(T) = \partial_{\rho_T} \Pi$. Par ailleurs, le long de la trajectoire, $a(t)$ et $\hat{a}(t)$ sont liés par $E = 0$, donc en particulier à l'instant final T , où $a(T) = \rho_T$. Cette contrainte s'écrit, à la limite $T \rightarrow +\infty$ où Π converge vers π^* ,

$$\tilde{W}_{\text{CM}}[\rho, \partial_{\rho} \pi^*(\rho)] = 0 \quad \text{soit} \quad \frac{d\pi^*}{d\rho} = \ln [\lambda(1 - \rho)] \quad (9.21)$$

et nous retrouvons l'expression de $\pi^*(\rho)$ en résolvant cette équation (la constante d'intégration étant déterminée par la normalisation de π^* : $\max_{0 \leq \rho \leq 1} \pi^*(\rho)$ doit valoir zéro).

À titre de vérification, le calcul de π^* est fait de façon élémentaire à partir de l'équation maîtresse en champ moyen dans la publication P3 — le même résultat est obtenu. La référence [109] indique une autre manière de faire le calcul de la distribution quasi stationnaire, en tirant de l'équation maîtresse des équations de récurrence pour les probabilités d'observer 1, 2, ... sites malades dans cette distribution. Les auteurs semblent résoudre ces équations uniquement par une méthode numérique, sans donner d'expression analytique et sans passer à la limite continue π^* . Ils signalent aussi la possibilité d'obtenir une approximation de π^* en cherchant, pour un nombre de sites N fini, une solution indépendante du temps de l'équation maîtresse, qu'ils nomment « pseudo-stationnaire », sachant qu'une telle solution n'est pas normale et possède une probabilité infinie que tous les sites soient sains, ce qui n'est pas correct

— l'approximation n'est bonne que pour $\lambda \gg \lambda_c$ et pour les probabilités d'observer un grand nombre de sites malades.

9.2.2 Développement en $1/z$

Le calcul des termes d'ordre supérieur de l'action utilise une méthode calquée sur celle d'A. Georges et J. Yedidia pour le modèle d'Ising, vue à la section 8.2. Les difficultés supplémentaires sont les suivantes :

- Les champs dépendent du temps. Un terme d'ordre total n en μ et λ fait intervenir $n - 1$ intégrales, et les fonctions de corrélation font intervenir plusieurs dates (il faut les ordonner en temps avant de les évaluer).
- Le développement est double (λ et μ).
- Les liens des diagrammes sont orientés, car l'interaction entre sites est asymétrique (il y a un site contaminant et un site contaminé).
- Il faut bien réfléchir à quelles moyennes d'opérateurs imposer.

Ce dernier point est crucial, traitons-le tout de suite.

Choix des moyennes d'opérateurs à imposer. Le développement de Taylor de $\ln Z$ s'exprime à l'aide de l'opérateur \hat{V} qui généralise, pour le processus de contact, l'opérateur U d'A. Georges et J. Yedidia. Cet opérateur a la propriété fondamentale

$$\partial_\lambda \langle \hat{A} \rangle = \langle \partial_\lambda \hat{A} \rangle + \langle \hat{V} \hat{A} \rangle \quad (9.22)$$

et son expression fait intervenir \hat{W}_{cre} , donc il s'agit d'une somme sur les couples de sites voisins (i, j) . Il y a aussi un opérateur \hat{U} pour les dérivées par rapport à μ :

$$\partial_\mu \langle \hat{A} \rangle = \langle \partial_\mu \hat{A} \rangle + \langle \hat{U} \hat{A} \rangle, \quad (9.23)$$

dont l'expression fait intervenir \hat{W}_{ann} , donc il s'agit d'une somme sur les sites i . On voit facilement, en suivant les calculs faits pour le modèle d'Ising, que les coefficients de Taylor de $\ln Z$ font intervenir des moyennes de produits d'opérateurs \hat{U} et \hat{V} et de leurs dérivées (entre autres). Ces opérateurs étant des sommes, les moyennes à calculer en sont aussi, et l'on peut représenter les termes obtenus en développant les produits tels que $\hat{V} \times \hat{V}$ dans ces moyennes par des diagrammes, graphes où les sommets sont des sites du réseau et chaque lien représente un terme de l'opérateur \hat{V} (les termes de \hat{U} peuvent être représentés comme des décorations sur les sites). Nous devons calculer ces moyennes en $\lambda = \mu = 0$ où les sites sont découplés, donc nous sommes ramenés à calculer des produits de moyennes sur les sites des diagrammes. Pour le modèle d'Ising, U avait une expression comme somme sur les liens du réseau d'un *produit* de facteurs, un sur chaque site au bout du lien :

$$\sum_i \sum_{j \in i} J_{ij} (S_i - m_i) (S_j - m_j) \quad (9.24)$$

où la moyenne sur un site de chaque facteur pris séparément est nulle ($\langle S_i \rangle = m_i$). En conséquence, si un site n'était couvert que par un lien, la moyenne de son facteur dans le diagramme était nulle, et donc tout le diagramme avec. Cette propriété est cruciale, car le nombre de diagrammes connexes à deux liens $i - j - k$ est de l'ordre de N^3 sur réseau complet (on peut choisir les trois sites), et ces diagrammes auraient une contribution de l'ordre de $N^3 \lambda^2 / N^2$ (une puissance de λ/N pour chaque lien), c'est-à-dire une contribution extensive, s'ils n'étaient pas nuls pour la plupart : dans un tel diagramme, les sites i et k aux extrémités ne sont couverts que par une seule arête, donc ils contribuent par le facteur $\langle S_i - m_i \rangle_0 \langle S_k - m_k \rangle_0 = 0 \times 0$ au diagramme total, sauf quand i et k sont confondus (vrai seulement pour N^2 diagrammes). Seuls les diagrammes à double lien entre i et k sont non nuls, et ils contribuent tout ensemble de manière subextensive. De même, pour le processus de contact, l'ordre λ^2 du développement

de Taylor de $\ln Z$ ne sera subextensif, donc négligeable à la limite thermodynamique sur réseau complet, que si l'opérateur \hat{V} se factorise et annule les diagrammes $i - j - k$ avec $k \neq i$. Rappelons l'expression de U pour le modèle d'Ising :

$$U := H - \langle H \rangle - \sum_i \partial_\lambda h_i(\lambda)(S_i - m_i). \quad (9.25)$$

U_0 (pour $\lambda = 0$) s'écrit comme une somme sur les liens du réseau de termes factorisés car H est lui-même une telle somme ($H \propto \sum S_i S_j$) donc sa moyenne en $\lambda = 0$ aussi ($\langle H \rangle |0 \propto \sum m_i m_j$) et car H et sa moyenne $\langle H \rangle$ se combinent harmonieusement avec $S_i - m_i$. Pour le processus de contact, la première condition est remplie : le terme qui couple les sites, \hat{W}_{cre} , est une somme de facteurs $\hat{a}_i^{1 \leftarrow 0} - \hat{a}_i^{=0}$ (notons cet opérateur \hat{b}_i) et $\hat{a}_j^{=1}$. Reste à remplir la seconde. Pour cela, il suffit de choisir d'imposer les moyennes des opérateurs facteurs de \hat{W}_{cre} , \hat{b}_i et $\hat{a}_i^{=1}$, plutôt que d'autres, comme au paragraphe 8.3.2. On trouve alors, pour l'opérateur \hat{V}_0 en $\lambda = 0$, l'expression

$$\hat{V} = \int_0^T dt \sum_{i=1}^N \sum_{j \in i} [\hat{b}_j - b_j(t)] [\hat{a}_i^{=1} - a_i^{=1}(t)] \quad (9.26)$$

où $b_j(t)$ désigne

$$\langle \hat{b}_j(t) \rangle = [1 - a_j^{=1}(t)] \{ \exp[-\hat{a}_j^{0 \leftarrow 1}(t)] - 1 \}. \quad (9.27)$$

Le lecteur a peut-être remarqué que, puisque le terme en \hat{W}_{ann} de l'opérateur d'évolution ne couple pas les sites, nous aurions pu l'intégrer à la partie cinétique de l'action et calculer, au paragraphe 8.3.2, non pas $\exp \int dt \hat{W}'$ mais $\exp \int dt (\hat{W}' + \mu \hat{W}_{\text{ann}})$, ce qui nous aurait évité de faire un développement de Taylor double. L'action eût été exacte à tous les ordres en μ dès le calcul en champ moyen. Hélas, avec les choix de moyennes imposées que nous venons de faire pour assurer la factorisation des termes de \hat{V} , cette manipulation est impossible : la matrice de \hat{W}_{ann} dans la base $|0\rangle, |1\rangle$ est triangulaire supérieure tandis que celle de \hat{W}' est triangulaire inférieure — impossible alors de calculer explicitement \hat{W} , ce qui est pourtant nécessaire pour le calcul à venir des fonctions de corrélation à plusieurs dates. Nous sommes donc obligés de traiter \hat{W}_{ann} perturbativement aussi, et c'est plus qu'un problème technique. En effet, si \hat{W}_{ann} avait été traité de façon non perturbative dans la partie cinétique de l'action, nous n'aurions pas trouvé les noyaux de mémoire qui vont apparaître plus loin dans les fonctions de corrélation de \hat{U} et \hat{V} .

Les bases du calcul sont maintenant posées. Nous pouvons exprimer les opérateurs \hat{U}_0 et \hat{V}_0 en $\mu = \lambda = 0$ puis, en suivant la méthode d'A. Georges et J. Yedidia, calculer les termes du développement de Taylor de $\ln Z$. Comme le facteur λ est toujours accompagné d'un facteur $1/z$, ce développement de Taylor est en fait un développement en puissances de $1/z$, c'est-à-dire de $1/(2D)$ sur réseau hypercubique de dimension D et de $1/(d+1)$ sur l'arbre de Cayley T_d . Sur réseau \mathbb{Z}^D ,

$$\begin{aligned} \frac{\ln Z}{N} &= \frac{\ln Z_{\text{CM}}}{N} + \frac{\lambda^2}{2!(2D)^2} D \text{ (diagramme à 2 sites)} + \\ &\frac{\lambda^3}{3!(2D)^3} D \text{ (diagramme à 3 sites)} + \frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} D(2D-1)6 \text{ (diagramme à 4 sites)} + \frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} \frac{D(D-1)}{2} 4! \square + \\ &\frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} D \text{ (diagramme à 4 sites)} + \dots \end{aligned} \quad (9.28)$$

où $\ln Z_{\text{CM}}$ est l'expression valable en champ moyen définie en (9.16), et où chaque diagramme représente la somme des fonctions de corrélation ayant le même support sur le réseau mais qui diffèrent par l'orientation des liens (pour un diagramme à \uparrow liens, il faut sommer 2^{\uparrow} fonctions de corrélation). Le réseau hypercubique et l'arbre T_d se distinguent à l'ordre deux du développement, car ce développement fait intervenir un diagramme à quatre sites distincts

en carré qui ne peut pas exister sur un arbre (aucun sous-graphe d'un arbre n'a de boucles). Plus généralement, on peut obtenir le développement de $\ln Z$ sur arbre T_d à moindre frais en annulant, dans le développement sur réseau \mathbb{Z}^D , tous les diagrammes qui possèdent des boucles.

\hat{U}_0 possède la propriété suivante : toute fonction de corrélation

$$\langle \hat{A}_1(t_1) \hat{A}_2(t_2) \dots \hat{A}_n(t_n) \hat{U}(t) \rangle$$

est nulle si t est la dernière ou la première date de t, t_1, t_2, \dots, t_n (les \hat{A}_i désignent des opérateurs quelconques). En particulier, ceci assure que les termes d'ordre μ^k avec $k \geq 2$ et $\mu^k \lambda^1$ avec $k \geq 1$ du développement de $\ln Z$ sont nuls. C'est pourquoi nous avons dit que les seuls termes à l'ordre un en λ inclus qui sont non nuls dans $\ln Z$ sont ceux de l'expression (9.13). Par ailleurs, nous trouvons que le développement en puissances de μ peut se ressommer de manière exacte diagramme par diagramme (nous pouvons donc utiliser des valeurs de μ arbitrairement grandes sans perte de précision, et en particulier prendre la valeur $\mu = 1$ de la définition du processus de contact). Cette resommation fait apparaître des noyaux de mémoire ; nous renvoyons le lecteur intéressé à la publication P3 pour des détails supplémentaires. Pour le calcul en pratique, un ordinateur est très utile pour traiter la combinatoire des termes qui apparaissent et calculer les fonctions de corrélation à n temps.

Donnons ici l'expression du terme d'ordre $1/z$ de l'action $\ln Z$, pour montrer l'apparition d'un phénomène de mémoire que nous avons annoncé et discuté p. 136. Il vient, après que l'on s'est restreint au cas symétrique $a_i = a$, $\hat{a}_i = \hat{a}$:

$$(\ln Z)|_1 = -\frac{2N\lambda^2}{z} \int_0^T dt_2 (1 - a(t_2))^2 \left(e^{-\hat{a}(t_2)} - 1 \right) \int_0^{t_2} dt_1 a(t_1) \left((1 - a(t_1)) e^{-\hat{a}(t_1)} + a(t_1) \right) \exp \left(2 \int_{t_1}^{t_2} dt'' \xi(t'') \right) \quad (9.29)$$

où

$$\xi(t) := -\frac{\exp \hat{a}(t)}{1 - a(t)}. \quad (9.30)$$

Le facteur en $\exp \int \xi$ est un exemple de « noyau de mémoire ». Quand on prend les dérivées fonctionnelles de $\ln Z$ pour obtenir les équations du mouvement, on trouve des équations intégral-différentielles et non plus de simples équations différentielles comme dans le cas du champ moyen ou du processus de désintégration radioactive (voir la discussion p. 136).

Résultats. À partir de l'expression de $\ln Z$ à l'ordre voulu en $1/z$, on peut faire les mêmes calculs qu'en champ moyen : établir les équations du mouvement (qui ne sont plus des équations différentielles mais des équations intégral-différentielles), en tirer le seuil λ_c en deçà duquel le processus n'a pas d'état métastable à la limite thermodynamique ou encore la distribution quasi stationnaire $\pi^*(\rho)$. À l'ordre $1/z^2$, nous n'avons fait le calcul que dans le cas particulier où les champs de déviation $\hat{a}(t)$ sont uniformément nuls. Cela permet d'exprimer la densité la plus probable dans l'état métastable :

$$\rho^* = 1 - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2 z} - \frac{6\lambda^2 + 11\lambda + 3}{6\lambda^4 z^2} + O(1/z^3) \quad (9.31)$$

sur \mathbb{Z}^D et, sur T_d ,

$$\rho^* = 1 - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2 z} - \frac{6\lambda^2 + 11\lambda - 3}{6\lambda^4 z^2} + O(1/z^3) \quad (9.32)$$

où $z = d + 1$ puis, en résolvant les équations $\rho^* = 0$, les valeurs critiques λ_c en deçà desquelles le processus meurt presque sûrement mais au delà desquelles il survit globalement :

$$\lambda_c = 1 + \frac{1}{z} + \frac{7}{3z^2} + O(1/z^3) \quad (9.33)$$

avec $z = 2D$ sur \mathbb{Z}^D et

$$\lambda_c = 1 + \frac{1}{z} + \frac{4}{3z^2} + O(1/z^3) \quad (9.34)$$

avec $z = d + 1$ sur T_d . Ces expressions sont comparées avec un excellent accord, dans la publication P3, aux valeurs de λ_c obtenues par simulation numérique du processus de contact conservé [108], qui est en quelque sorte la version canonique du processus de contact normal, grand canonique [157, 158]. À l'ordre $1/z$, nous avons utilisé les solutions des équations du mouvement pour calculer la distribution quasi stationnaire (le calcul est en partie analytique et en partie numérique, un logiciel de calcul formel étant nécessaire pour évaluer certaines intégrales). C'est le résultat de ce calcul qui est montré figure 7.3. Il est lui aussi comparé avec succès à des simulations numériques (sur réseau \mathbb{Z}^6) dans la publication P3.

9.3 Modèles oscillants de biologie des populations

En biologie, on observe fréquemment des oscillations de populations dans les écosystèmes. Nous donnons ici deux modèles stochastiques qui reproduisent des oscillations, et nous écrivons leur action et leurs équations du mouvement en champ moyen. Notre but est d'illustrer notre formalisme sur un cas où les variables ne sont pas bivaluées comme pour le processus de contact. Il serait intéressant de poursuivre cette étude et d'étudier les deux processus en dimension finie (il semble qu'ils ont surtout été étudiés dans la limite de champ moyen). On peut aussi se demander si de tels modèles peuvent expliquer les oscillations remarquablement stables (leur synchronisme persiste même après les divisions cellulaires) récemment observées dans l'oscillateur circadien des cyanobactéries [159].

9.3.1 Modèle papier-caillou-ciseaux

Le modèle « papier-caillou-ciseaux » (PCC) peut être défini comme le processus de contact sur un graphe. Chaque sommet du graphe est, à tout instant, dans l'un des trois états 0, 1, 2, et l'état de chaque sommet évolue selon la règle stochastique : une arête reliant un sommet dans l'état $\alpha \in \mathbb{Z}_3$ à un sommet dans l'état $\alpha - 1$ a la probabilité λ_α par unité de temps de faire passer ce dernier sommet dans l'état α . Les états α sont ici identifiés aux éléments du groupe additif \mathbb{Z}_3 . On peut écrire cette règle sous la forme de réactions chimiques : $0 + 1 \rightarrow 1 + 1$, $1 + 2 \rightarrow 2 + 2$ et $2 + 0 \rightarrow 0 + 0$. On comprend le nom du modèle : chacun des trois états a un avantage sur un autre et peut le remplacer mais est remplacé par le troisième, comme dans le jeu du même nom (« le papier emballe le caillou, le caillou casse les ciseaux, les ciseaux coupent le papier »). Ce modèle est étudié notamment en économie et en biologie des populations (voir par exemple l'introduction de [160]). Il a la remarquable propriété de manifester des oscillations cycliques entre les trois populations, même si la condition initiale est parfaitement symétrique (le bruit stochastique induit une brisure spontanée de la symétrie entre les trois états). La fréquence des oscillations est déterminée par un mécanisme de résonance [161]. Cependant, ces oscillations ne sont qu'un « état » métastable du modèle, car il possède trois états absorbants (ceux où tous les sites sont dans le même état α) où les fluctuations stochastiques finissent par mener tout système de taille finie. De fait, les réalisations expérimentales de ce modèle à l'aide de trois sortes de bactéries dans une solution (voir les références dans [160]) observent que l'une des trois populations l'emporte rapidement sur les deux autres, et ce fait est confirmé par l'étude en champ moyen [160]. Cependant, une simulation numérique grossière montre que le temps de survie des oscillations est nettement plus long sur un réseau à deux dimensions que sur un réseau complet (champ moyen) — voir la différence qualitative frappante fig. 9.2 (il semble que l'amplitude des oscillations soit contrainte en dimension finie mais qu'elle fluctue beaucoup en champ moyen). Nous pensons qu'il serait intéressant d'étudier ce phénomène plus en détail et d'utiliser un développement en $1/D$ pour étudier les effets de la dimension finie. On sait que, pour le processus de contact, la durée de vie de l'état métastable est plus faible en dimension finie qu'en champ moyen (voir la figure 7.3). Est-ce donc le contraire pour le

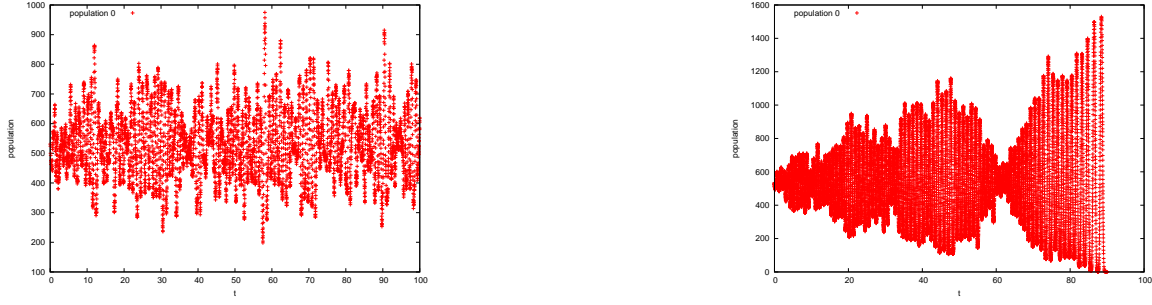


FIG. 9.2 – Deux séries temporelles pour les populations de sites 0 obtenues par simulation Monte Carlo du modèle PCC symétrique ($\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$). Le temps t est normalisé de telle manière que la durée moyenne d'une oscillation soit $\Delta t = 1$. Les populations de sites 1 et 2 suivent des évolutions semblables, mais déphasées de $\pm 2\pi/3$. À gauche : simulation sur réseau bidimensionnel avec conditions aux limites périodiques de $40 \times 40 = 1600$ sites. À droite : simulation sur réseau complet de 1600 sites (champ moyen). On remarque que, bien que les populations initiales soient parfaitement équilibrées, des oscillations d'une fréquence assez bien déterminée se mettent rapidement en place. Sur la durée simulée (8,2 millions d'oscillations dont nous montrons les 100 premières), le processus bidimensionnel n'a pas atteint d'état absorbant, contrairement au processus sur réseau complet qui a franchi la transition après seulement 90 oscillations. Pour des réseaux de $20 \times 20 = 400$ sites, le processus bidimensionnel franchit la transition après une centaine d'oscillations tandis que le processus sur réseau complet la franchit après une trentaine.

modèle PCC ? Et la durée de vie de l'état métastable est-elle exponentielle en le nombre N de sites comme pour le processus de contact ?

Nous ne répondons pas ici à ces questions, mais donnons le point de départ d'une étude possible. Cela fournit aussi une illustration de notre formalisme dans le cas de variables aléatoires à trois valeurs. L'opérateur d'évolution pour N sites est

$$\hat{W} = \sum_{i=1}^N \sum_{j \in i} \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}_3} \lambda_{\alpha+1} \left(\hat{a}_j^{\alpha+1 \leftarrow \alpha} - \hat{a}_j^{\alpha} \right) \hat{a}_i^{\alpha+1} \quad (9.35)$$

selon les notations du paragraphe 8.4.1. Pour l'action, nous nous limitons à l'ordre linéaire en λ (nous avons vérifié que le résultat est exact à la limite thermodynamique sur réseau complet si l'on fait tendre les constantes de réactions λ vers 0 comme $1/N$ à cette limite), si bien qu'il n'est pas nécessaire de préciser quelles moyennes d'opérateurs nous avons imposées. Nous trouvons, en omettant les termes de bord [...],

$$\ln Z = [\dots] + \int_0^T dt \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\hat{a}_i^{0 \leftarrow 1}(t) \frac{da_i^{\bar{1}}(t)}{dt} + \hat{a}_i^{0 \leftarrow 2}(t) \frac{da_i^{\bar{2}}(t)}{dt} \right] \right. \\ \left. \sum_{i=1}^N \sum_{j \in i} \sum_{\alpha \in \mathbb{Z}_3} \lambda_{\alpha+1} a_j^{\alpha}(t) \left(e^{\hat{a}_j^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}(t)} - 1 \right) a_i^{\alpha+1}(t) \right\}. \quad (9.36)$$

En optimisant cette action par rapport aux quatre champs qui apparaissent dans la partie cinétique (les deux autres champs s'en déduisant comme nous l'avons vu au paragraphe 8.4.1), on trouve quatre équations du mouvement. Nous donnons ici les six pour préserver la symétrie du problème : pour $\alpha \in \mathbb{Z}_3$,

$$\frac{da_j^{\bar{\alpha}}(t)}{dt} = \sum_{i \in j} \left[\lambda_{\alpha} a_j^{\alpha-1}(t) e^{\hat{a}_j^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)} a_i^{\bar{\alpha}}(t) - \lambda_{\alpha+1} a_j^{\alpha}(t) e^{\hat{a}_j^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}(t)} a_i^{\alpha+1}(t) \right] \quad (9.37)$$

(on vérifie que, quand les champs de déviation $\hat{a}_i(t)$ sont identiquement nuls, on retrouve les équations d'évolution pour les moyennes $a^{=\alpha}(t)$ que l'on aurait écrites naïvement) et

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{a}_j^{\alpha \leftarrow \alpha - 1}(t)}{dt} &= \sum_{i \in j} \left\{ a_i^{=\alpha+1}(t) \left[\lambda_{\alpha-1} \left(e^{\hat{a}_i^{\alpha-1 \leftarrow \alpha+1}(t)} - 1 \right) - \lambda_{\alpha+1} \left(e^{\hat{a}_j^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}(t)} - 1 \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. \lambda_{\alpha} a_i^{=\alpha}(t) \left(e^{\hat{a}_j^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)} - 1 \right) - \lambda_{\alpha} a_i^{=\alpha-1}(t) \left(e^{\hat{a}_i^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)} - 1 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Les solutions des équations du mouvement conservent la moyenne \tilde{W} de \hat{W} comme toujours. En champ moyen et en changeant l'échelle des constantes de réaction λ de manière qu'elles soient proportionnelles à l'inverse du nombre de sites N , ces équations s'écrivent :

$$\begin{aligned} \frac{da^{=\alpha}}{dt} &= a^{=\alpha}(t) \left(\lambda_{\alpha} a^{=\alpha-1}(t) e^{\hat{a}^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)} - \lambda_{\alpha+1} a^{=\alpha+1}(t) e^{\hat{a}^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}(t)} \right) \\ \frac{d\hat{a}^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)}{dt} &= a^{\alpha+1}(t) \left[\lambda_{\alpha-1} \left(e^{\hat{a}^{\alpha-1 \leftarrow \alpha+1}(t)} - 1 \right) - \lambda_{\alpha+1} \left(e^{\hat{a}^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}(t)} - 1 \right) \right] + \\ &\quad \lambda_{\alpha} \left(a^{=\alpha}(t) - a^{=\alpha-1}(t) \right) \left(e^{\hat{a}^{\alpha \leftarrow \alpha-1}(t)} - 1 \right). \end{aligned} \quad (9.39)$$

L'unique intégrale première

$$\tilde{W} = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha+1} a^{=\alpha}(t) a^{=\alpha+1}(t) \left[\exp(\hat{a}^{\alpha+1 \leftarrow \alpha}) - 1 \right] \quad (9.40)$$

ne suffit pas pour résoudre analytiquement quatre équations indépendantes. Mais voyons l'allure de solutions particulières obtenues numériquement, dans le cas où toutes les constantes de réaction λ sont égales. Quand les champs de déviation \hat{a} sont nuls (équivalent à chercher le comportement typique), on trouve que le point fixe $(1/3, 1/3, 1/3)$ est solution. C'est un point d'équilibre indifférent, car si la condition initiale s'en écarte un peu, la solution se met à tourner autour de ce point (les densités $a^{=\alpha}(t)$ oscillent autour de $1/3$ avec une fréquence qui dépend de l'amplitude, voir la figure 9.3A) : il n'est ni stable ni instable au sens strict. Les points $(1, 0, 0)$, $(0, 1, 0)$ et $(0, 0, 1)$ (états absorbants) sont des points fixes instables : on s'en écarte pour faire des oscillations très amples qui reviennent en leur voisinage. Voyons maintenant l'effet des fluctuations sur ces points fixes, en prenant un champ de déviation $\hat{a}^{1 \leftarrow 0}(0)$ initial petit mais non nul. Les points fixes absorbants ne sont pas perturbés (si le système en part, il y reste pour toujours, même si $\hat{a}^{1 \leftarrow 0}(0) \neq 0$). Tous les autres points, et notamment le point fixe $(1/3, 1/3, 1/3)$, sont affectés de la même manière : la solution oscille avec une amplitude grandissante et a une durée de vie finie (courbe C) ; elle atteint l'un des points fixes absorbants en une durée qui augmente quand $|\hat{a}^{1 \leftarrow 0}(0)|$ diminue — ceci rappelle les instants du processus de contact, qui le faisaient basculer de l'état métastable vers l'état absorbant ; une différence est qu'ici le signe de la valeur initiale de $\hat{a}^{1 \leftarrow 0}$ n'a pas d'effet sur l'allure de la solution. La valeur initiale des champs de déviation fixe, outre la durée de vie de la solution, la valeur finale des densités de sites occupés par chaque espèce, et donc en particulier quelle espèce s'éteint la première. Remarquer la similitude frappante de la solution des équations du mouvement C avec la courbe de simulation Monte Carlo sur réseau complet (courbe D) : dans cette simulation, on observe des oscillations qui vont *crescendo* jusqu'à ce que l'une des populations s'éteigne.

9.3.2 Un modèle d'interactions prédateur-proie oscillant

La référence [161] propose un modèle stochastique (appelons-le PP pour prédateurs-proies) donnant lieu à des oscillations avec deux espèces seulement, un prédateur 2 et une proie 1, mais il y a aussi trois états en comptant l'« état vide » 0. L'enjeu est d'expliquer les oscillations de populations fréquemment observées par les biologistes. Les réactions qui définissent le processus sont $1 \rightarrow 0$, $2 \rightarrow 0$ (mort naturelle des prédateurs et des proies), $1 + 0 \rightarrow 1 + 1$

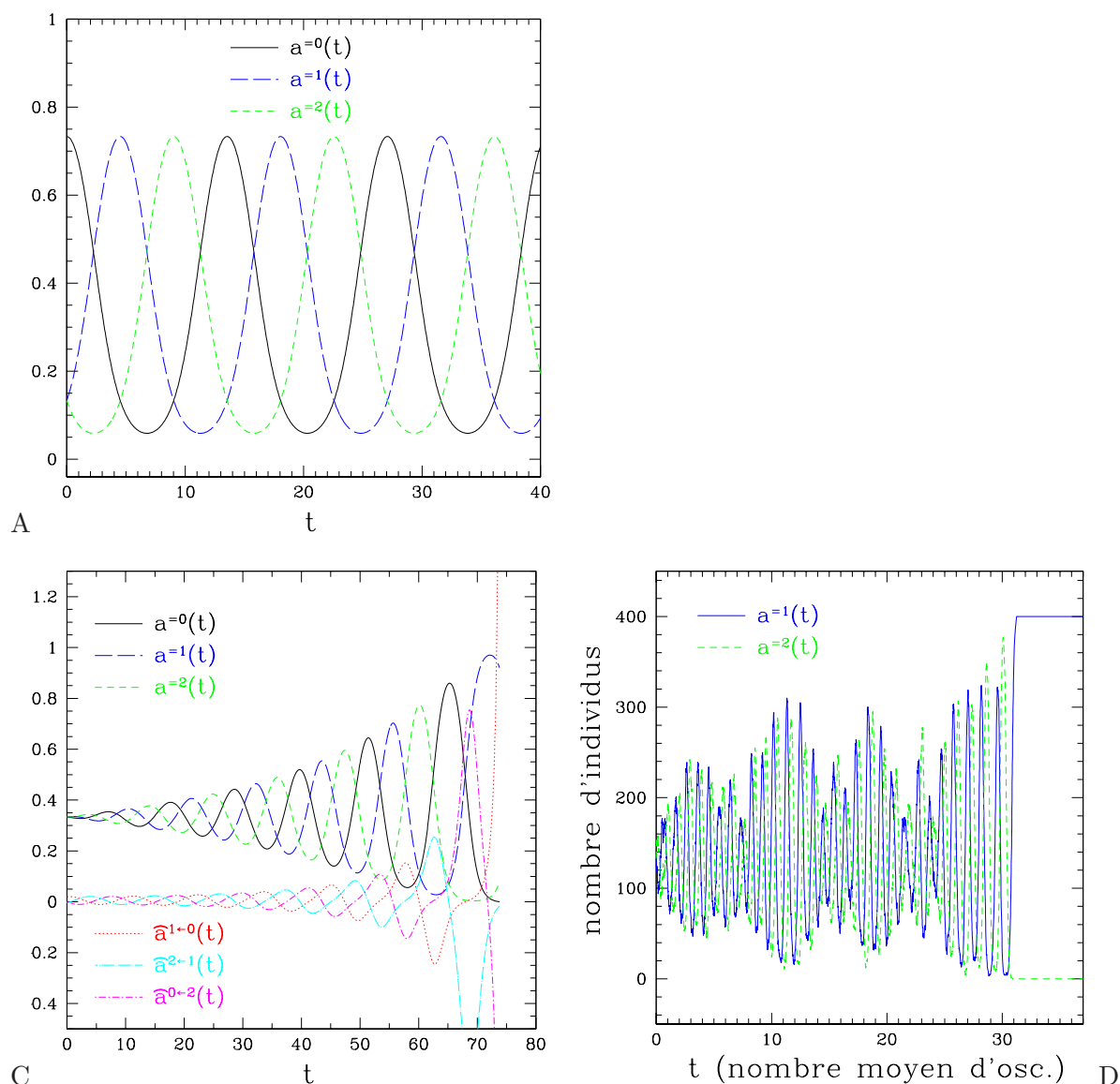


FIG. 9.3 – **A et C** : Solutions numériques des équations du mouvement (9.39) pour le modèle PCC dans le cas du champ moyen et pour $\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$. Les ordonnées indiquent la proportion des sites occupés par chacune des espèces 0, 1 et 2. **A** : cas où les champs de déviation $\hat{a}(t)$ sont initialement nuls (ils le restent). Les populations, initialement en déséquilibre, se mettent à osciller. **C** : cas où les populations sont initialement à l'équilibre ($1/3, 1/3, 1/3$) mais où les champs de déviation sont non nuls. La solution a une durée de vie finie : en $t \approx 73.816$, $a^{=0}$ atteint zéro tandis que $\hat{a}^{1 \leftarrow 0}$ diverge vers $+\infty$. **D** : Simulation numérique du modèle PCC sur un réseau complet de $N = 400$ sites (les ordonnées indiquent le nombre de sites occupés par une espèce donnée, et les abscisses indiquent la date en unités « période moyenne d'une oscillation »). L'allure de la série temporelle rappelle la solution C (oscillations d'amplitude croissante jusqu'à ce qu'une population s'éteigne).

(reproduction des proies), $2 + 1 \rightarrow 2 + 0$ et $2 + 1 \rightarrow 2 + 2$ (consommation d'une proie par un prédateur avec ou sans reproduction du prédateur). En champ moyen, on observe que les oscillations disparaissent à la limite thermodynamique, mais elles sont présentes pour tout système de taille finie. C'est pourquoi l'étude des seules équations pour les tailles de population à la limite thermodynamique (*rate equations* en anglais) mène à la conclusion fautive que les populations n'oscillent pas. Ce n'est pas le cas pour PCC, où les oscillations perdurent pour des systèmes infinis. Que se passe-t-il pour PP à la limite thermodynamique mais en dimension finie ? PP a un état absorbant, comme le processus de contact, donc les oscillations sont métastables. De plus, les fluctuations peuvent conduire à l'extinction de la population des prédateurs sans celle des proies (auquel cas le système devient équivalent au processus de contact, avec les règles $1 \rightarrow 0$ et $1 + 0 \rightarrow 1 + 1$), donc le modèle PP a plusieurs états métastables. Quelle est leur durée de vie ?

Nous ne répondrons pas non plus à ces questions. Donnons l'opérateur d'évolution du processus :

$$\hat{W} = \sum_i \left\{ d_1(\hat{a}_i^{0\leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\leftarrow 1}) + d_2(\hat{a}_i^{0\leftarrow 2} - \hat{a}_i^{\leftarrow 2}) + \sum_{j \in i} [b(\hat{a}_i^{1\leftarrow 0} - \hat{a}_i^{\leftarrow 0})\hat{a}_j^{\leftarrow 1} + p_1(\hat{a}_i^{2\leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\leftarrow 1})\hat{a}_j^{\leftarrow 2} + p_2(\hat{a}_i^{0\leftarrow 1} - \hat{a}_i^{\leftarrow 1})\hat{a}_j^{\leftarrow 2}] \right\}. \quad (9.41)$$

On peut facilement, comme nous l'avons fait pour PCC, en déduire l'action à l'ordre linéaire puis les équations du mouvement. En revanche, ici nous ne savons pas si l'action à l'ordre linéaire est exacte à la limite thermodynamique sur réseau complet.

Chapitre 10

Appendice : publication P3

Christophe Deroulers et Rémi Monasson,
Field-theoretic approach to metastability in the contact process.

Physical Review E **69**, 016126 (2004)

cond-mat/0309637

PHYSICAL REVIEW E **69**, 016126 (2004)**Field-theoretic approach to metastability in the contact process**Christophe Deroulers^{1,*} and Rémi Monasson^{2,3,†}¹*Laboratoire de Physique Théorique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75231 Paris CEDEX 05, France*²*CNRS–Laboratoire de Physique Théorique de l'ENS, 24 rue Lhomond, 75231 Paris CEDEX 05, France*³*CNRS–Laboratoire de Physique Théorique, 3 rue de l'Université, 67000 Strasbourg, France*

(Received 26 September 2003; published 30 January 2004)

A “quantum” field-theoretic formulation of the dynamics of the contact process on a regular graph of degree z is introduced. A perturbative calculation in powers of $1/z$ of the effective potential for the density of particles $\phi(t)$ and an instantonic field $\psi(t)$ emerging from the formalism is performed. Corrections to the mean-field distribution of densities of particles in the out-of-equilibrium stationary state are derived in powers of $1/z$. Results for typical (e.g., average density) and rare fluctuation (e.g. lifetime of the metastable state) properties are in very good agreement with numerical simulations carried out on D -dimensional hypercubic ($z=2D$) and Cayley lattices.

DOI: 10.1103/PhysRevE.69.016126

PACS number(s): 05.70.Ln, 02.50.–r, 64.60.My, 82.20.–w

I. INTRODUCTION**A. Motivations**

Recent years have seen an upsurge of interest for the dynamical properties of out-of-equilibrium systems in statistical physics [1]. Systems of interacting elements are ubiquitous in physics and other fields, e.g., biology, computer science, economy, etc. Most of the time the dynamical rules do not obey detailed balance or similar criteria which would ensure the existence of a well defined stationary distribution at large times. In other cases, a Gibbs measure does exist but is out of reach on experimental time scales, and all phenomena of interest, e.g., the occurrence of dynamical phase transitions take place when the system is truly out of equilibrium. An example of such out-of-equilibrium phenomena, frequently encountered in condensed matter, in cellular automata or even in computationally motivated problems is the occurrence of metastable states, or regions in phase space in which trapping may take place for a very long time before further evolution becomes possible.

The calculation of the temporal properties of these systems often turns out to be very hard, even when dynamical rules look like innocuously simple. Over the past decade, however, various models and problems have been successfully investigated, e.g., Refs. [2–6]. Among the analytical methods used to tackle these systems, some rely on the observation that the master equation for a system of classical degrees of freedom may be seen as a Schrödinger equation (in imaginary time) where the quantum Hamiltonian encodes the evolution operator. Exact, e.g., Bethe ansatz [3] or approximate, e.g., variational or semiclassical techniques developed in the context of quantum field theory may be used to understand the dynamical properties of the original system [7]. One important achievement made possible by this approach once combined with renormalization group techniques has been the calculation of decay exponents and the

identification of universality classes in reaction-diffusion models [8,9].

The range of this “quantum” procedure is however not limited to the calculation of universal quantities. In this work, we show how it can be combined with diagrammatic techniques developed in the contexts of field theory and the statistical physics of disordered systems to quantitatively characterize the metastable properties of a well-known example of out-of-equilibrium system, the so-called contact process (CP) [10]. In spite of its technicalities, this approach allows us to make predictions that can be successfully compared to numerical simulations. It is expected that it will permit to investigate metastability [11,12], or other properties of various dynamical models.

B. The contact process: Definition and phenomenology

We consider a regular graph G with vertex degree z and size N (number of vertices). Each vertex (or node, or site) may be empty or occupied by one particle. Hereafter, we focus on the continuous time version of CP where a particle is spontaneously annihilated with rate 1 independently from other sites, and an empty site becomes occupied with rate $\lambda n_{\text{occ}}/z$ where n_{occ} is the number of its occupied nearest neighbors [10].

The value of the parameter λ strongly affects the behavior of CP. For infinite size graphs, e.g., infinite hypercubic lattices, there exists a critical value λ_C of λ such that [13] the following hold.

(1) If $\lambda < \lambda_C$, the number of particles (occupied sites) quickly decreases towards zero. Later, the system remains trapped in this empty configuration.

(2) If $\lambda > \lambda_C$, the density ρ of particles reaches a plateau value $\rho^*(\lambda)$ independently on the initial density [14].

(3) At criticality, that is, when $\lambda = \lambda_C$, the density eventually relaxes to zero with a slow algebraic decay $\rho(t) \sim t^{-a}$. This critical behavior falls into the directed percolation universality class [15–17]. Exponent a is equal to 1 in dimensions larger than $D_c=4$, and approximate expressions in powers of $D_c - D$ in lower dimensions have been obtained

*Electronic address: Christophe.Deroulers@ens.fr

†Electronic address: monasson@lpt.ens.fr

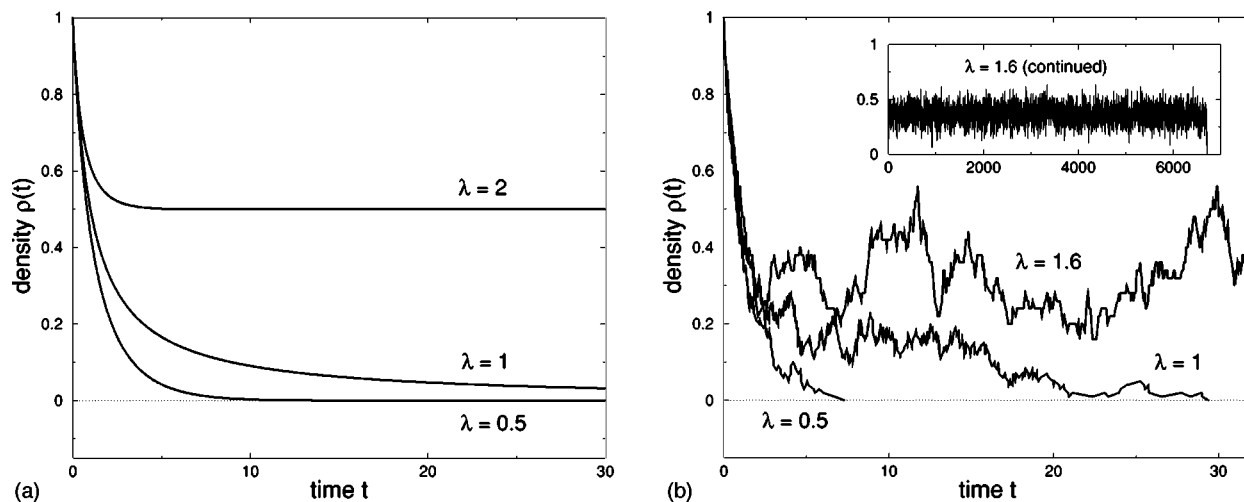


FIG. 1. Profiles of the density ρ of particles vs time t for the contact process over a complete graph of N vertices, initially filled with particles [$\rho(0)=1$]. (a). Thermodynamic limit, $N \rightarrow \infty$. From bottom to top: subcritical ($\lambda < \lambda_C=1$, the density exponentially relaxes toward zero), critical ($\lambda = \lambda_C$, the density algebraically decays to zero as $\rho(t) \sim t^{-1}$), and supercritical ($\lambda > \lambda_C$, the density exponentially relaxes to a finite value, $\rho^* = 1 - 1/\lambda$) cases. The density obeys a deterministic evolution equation (36), and no fluctuation is present. (b). Finite size lattice, with $N=100$ sites. CP is a stochastic process, and the density profiles vary from run to run (we show here one run for each value of λ). The density quickly relaxes to zero (subcritical regime) or a finite value (supercritical regime). In the latter case, the system is trapped in a metastable regime where the density fluctuates for a very long time around its plateau value (inset: notice the difference of time scale), till a large fluctuation drives the density to the zero value.

through the use of renormalization group techniques [7–9,15–18].

These behaviors are displayed in Fig. 1(a). The exact value of the critical parameter λ_C is unknown in any dimension D , but rigorous bounds and estimates have been derived [13(b)].

For finite-size graphs, the empty configuration, referred to as vacuum in the following, is an absorbing state for the dynamics. Starting from any initial configuration, e.g., fully occupied state, CP will eventually end up in the vacuum configuration after a finite time t_{vac} . This forces the above infinite-size picture to be smeared out by fluctuations in the case of large but finite lattices [11,13(b),19]. λ_C locates a cross-over between fast [$t_{vac}(N, \lambda < \lambda_C) = O(\ln N)$] and very slow [$t_{vac}(N, \lambda > \lambda_C) \sim \exp O(N)$] relaxations towards the vacuum configuration. In the latter regime, the plateau height ρ^* merely defines an average value around which the density exhibits fluctuations until the system is driven to the vacuum through a very large fluctuation [Fig. 1(b)]. On time scales $1 \ll t \ll t_{vac}(N, \lambda > \lambda_C)$, the system is trapped into a metastable state [20]. A (pseudo)equilibrium probability measure for the density can be defined,

$$P(\rho, N) = \exp[N \pi^*(\rho) + o(N)]. \quad (1)$$

Function π^* , which depends on λ and other parameters, e.g., the dimension D for hypercubic lattices, describes rare fluctuations from the average density ρ^* . Its maximal value is zero for $\rho = \rho^*$. Densities ρ distinct from the average one are exponentially (in N) unlikely to be reached, and $\pi^*(\rho) < 0$, see Fig. 2. In particular, the probability of a very large fluctuation annihilating all particles scales as $\exp[N \pi^*(0)]$, and thus,

$$t_{vac}(N) = \exp[-N \pi^*(0) + o(N)]. \quad (2)$$

The calculation of the large deviation function $\pi^*(\rho)$ is the main scope of this paper. For this purpose we use a path-

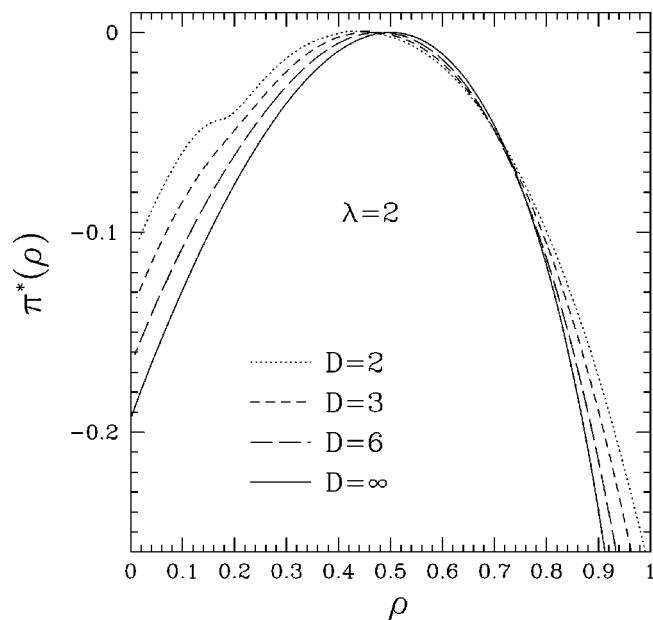


FIG. 2. The large deviation function π^* for the density of particles in CP with parameter $\lambda=2$ for the D -dimensional hypercubic lattice. The $D \rightarrow \infty$ curve corresponds to the mean-field limit, and coincides with the case of the complete graph over $N \rightarrow \infty$ sites. Plots of the predicted value of $\pi^*(\rho)$ at the order $1/D$ for $D=6, 3$, and 2 are obtained with the expansion of Sec. IV. The non-convexity of the curve for $D=2$ shows the inaccuracy of the truncation to first order of our $1/D$ expansion in this range of densities.

integral representation of π^* where particles are encoded into quantum hard-core bosons, or $\frac{1}{2}$ spins, and develop a diagrammatic self-consistent evaluation of the path integral which allows us to write a systematic expansion of π^* in powers of $1/z$ (Sec. II). In the infinite connectivity limit ($z \rightarrow \infty$), this formalism reduces to the mean-field theory of CP, analyzed in Sec. III. Finite connectivity corrections to π^* are calculated in Sec. IV. As a by-product, we obtain an expansion for the critical parameter $\lambda_c(z)$ in powers of $1/z$. The validity of our calculation, effectively carried out up to order $1/z^2$ (and $1/z$ for π^*), is confirmed by numerical simulations performed on D -dimensional hypercubic ($z=2D$) and Cayley lattices.

II. FIELD-THEORETIC FRAMEWORK

A. Path-integral formulation of the evolution operator

We start by writing the master equation of CP using a quantum formalism, according to the familiar procedure of Felderhof, Doi, and successors [21,22]. For each site i of the graph we define a hard-core boson with associated state vectors $|0\rangle_i$ (empty) and $|1\rangle_i$ (occupied), and creation and annihilation operators a_i^\dagger and a_i that anticommute on a single site but commute on different sites: $[a_i, a_i^\dagger]_+ = 1$, $[a_i^\dagger, a_j^\dagger] = [a_i, a_j] = 0$ (alternately, we could use spins $1/2$ with a mere rewriting of the equations). To each occupation number $s_i = 0, 1$ of site i is associated a vector $|s_i\rangle$. Then, to each state \vec{s} of the graph [set (s_1, s_2, \dots, s_N) of occupation numbers of all the sites] corresponds [23] a basis vector of a 2^N -dimensional vector space, $|\vec{s}\rangle = |s_1\rangle \otimes |s_2\rangle \otimes \dots \otimes |s_N\rangle$, and, to the time-dependent probability distribution $P(\vec{s}, t)$, the state vector $|P(t)\rangle = \sum_{\vec{s}} P(\vec{s}, t) |\vec{s}\rangle$. The master equation for $P(\vec{s}, t)$ is now equivalent to the evolution equation of the state vector

$$\frac{d}{dt} |P(t)\rangle = \hat{W} |P(t)\rangle, \quad (3)$$

where the evolution operator \hat{W} is the infinitesimal generator of the transitions. For CP, $\hat{W} = \hat{W}_{\text{ann}} + \lambda \hat{W}_{\text{cre}}$ with

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\text{ann}} &= \sum_i (1 - a_i^\dagger) a_i, \\ \hat{W}_{\text{cre}} &= \frac{1}{z} \sum_i \sum_{j \in i} [a_j^\dagger (1 + a_j) - 1] a_i^\dagger a_i, \end{aligned} \quad (4)$$

where $j \in i$ means that site j is one of the z nearest neighbors of site i .

To map the stochastic process onto a path integral or field-theoretic formulation [8,9,24], we introduce [25,26] continuously parametrized states suitable for hard-core bosons [27]. On each site of the graph, the state bra and ket are, respectively,

$$\begin{aligned} \langle \phi, \theta | &= (1 - \phi)^{1/2} \langle 0 | + \phi^{1/2} \exp(-\hat{t}\theta) \langle 1 |, \\ | \phi, \theta \rangle &= (1 - \phi)^{1/2} | 0 \rangle + \phi^{1/2} \exp(\hat{t}\theta) | 1 \rangle, \end{aligned} \quad (5)$$

TABLE I. Translation table from operators in \hat{W} into Lagrangian contribution to \tilde{W} . We have added aa^\dagger in the left column though this operator is not in normal order to show the consistency of the translation rules with the anticommutation relation.

| Operator in \hat{W} | Expression in \tilde{W} |
|-----------------------|---------------------------|
| 1 | 1 |
| a | $\phi \exp(\psi)$ |
| a^\dagger | $(1 - \phi) \exp(-\psi)$ |
| $a^\dagger a$ | ϕ |
| aa^\dagger | $1 - \phi$ |

where $\phi \in [0, 1]$, $\theta \in [0, 2\pi]$, and $\hat{t}^2 = -1$. These states satisfy the closure relation

$$\frac{1}{\pi} \int_0^1 d\phi \int_0^{2\pi} d\theta |\phi, \theta\rangle \langle \phi, \theta| = 1. \quad (6)$$

To allow a simplification of the expressions in the translation table given below, we make use of $\psi := -\frac{1}{2} \ln[\phi/(1-\phi)] + \hat{t}\theta$ instead of θ , and introduce the following notations:

$$\langle \phi, \psi | = (1 - \phi)^{1/2} [\langle 0 | + \exp(-\psi) \langle 1 |],$$

$$| \phi, \psi \rangle = (1 - \phi)^{-1/2} [(1 - \phi) | 0 \rangle + \phi \exp(\psi) | 1 \rangle]. \quad (7)$$

For the whole graph, a state is the tensor product of the states over all sites: $|\vec{\phi}, \vec{\psi}\rangle = \otimes_{i=1}^N |\phi_i, \psi_i\rangle$. Making use of Trotter formula [28] and of the closure identity (6), we obtain a path-integral expression for the matrix elements of the evolution operator $\exp(T\hat{W})$ between times 0 and T [8,24],

$$\begin{aligned} \langle \vec{\phi}_T, \vec{\psi}_T | \exp(T\hat{W}) | \vec{\phi}_0, \vec{\psi}_0 \rangle \\ = \int_{\vec{\phi}(0)=\vec{\phi}_0, \vec{\psi}(0)=\vec{\psi}_0}^{\vec{\phi}(T)=\vec{\phi}_T, \vec{\psi}(T)=\vec{\psi}_T} \mathcal{D}\vec{\phi}(t) \mathcal{D}\vec{\psi}(t) \exp(-\mathcal{S}[\{\vec{\phi}, \vec{\psi}\}]), \end{aligned} \quad (8)$$

where the action reads

$$-\mathcal{S}[\{\vec{\phi}, \vec{\psi}\}] = - \int_0^T dt \left\{ \sum_{i=1}^N \phi_i(t) \frac{d\psi_i(t)}{dt} - \tilde{W}(\vec{\phi}(t), \vec{\psi}(t)) \right\}, \quad (9)$$

and the integral runs over all field configurations $\vec{\phi}(t), \vec{\psi}(t)$ over the time interval $t \in [0, T]$ matching the required boundary conditions at initial and final times.

Function \tilde{W} encodes the action of the evolution operator \hat{W} on the states. Its expression is obtained by first writing \hat{W} in normal order form thanks to the (anti)commutation relations, then using the translation Table I, see Refs. [8,9,24]. For CP, we obtain $\tilde{W} = \tilde{W}_{\text{ann}} + \lambda \tilde{W}_{\text{cre}}$ with

$$\tilde{W}_{\text{ann}}(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \sum_{i=1}^N \phi_i [\exp(\psi_i) - 1],$$

$$\tilde{W}_{\text{cre}}(\vec{\phi}, \vec{\psi}) = \frac{1}{z} \sum_{i=1}^N \phi_i \sum_{j \in i} (1 - \phi_j) [\exp(-\psi_j) - 1]. \quad (10)$$

The previous quantum formalism allows us to express the expectation value of any observable of interest. For instance, we may start at time $t=0$ from a random state $|\rho_0\rangle$ with exactly $N_0 = \rho_0 N$ occupied sites and project at the end on a state $\langle \rho_T |$ with exactly $N_T = \rho_T N$ occupied sites:

$$|\rho_0\rangle := \frac{1}{\binom{N}{N_0}} \sum_s \otimes_{i=1}^N [(1-s_i)|0\rangle + s_i|1\rangle],$$

$$\langle \rho_T | := \sum_s \otimes_{i=1}^N [(1-s_i)\langle 0| + s_i\langle 1|], \quad (11)$$

where the sums run over all states \vec{s} with N_0 (N_T) occupation numbers s_i equal to 1, and the remaining $N - N_0$ ($N - N_T$) ones equal to 0. The probability that the density of particles equals ρ_T at time $t=T$ given that it was equal to ρ_0 at time $t=0$ is thus $P(\rho_T, T | \rho_0, 0) = \langle \rho_T | \exp(T\hat{W}) | \rho_0 \rangle$. Using the path-integral formalism developed in this section, the logarithm Π of this probability reads

$$\Pi(\rho_T, T | \rho_0, 0) = \ln \left[\int \mathcal{D}\vec{\phi}(t) \mathcal{D}\vec{\psi}(t) \exp(-\mathcal{S}[\{\vec{\phi}, \vec{\psi}\}]) \right. \\ \left. \times \langle \rho_T | \vec{\phi}(T), \vec{\psi}(T) \rangle \langle \vec{\phi}(0), \vec{\psi}(0) | \rho_0 \rangle \right], \quad (12)$$

where the boundary conditions for the fields at initial and final times are now free. Knowledge of the above function gives access to the large deviations function defined in Eq. (1) through

$$\pi^*(\rho) = \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \Pi(\rho, T | \rho^*, 0). \quad (13)$$

Notice that, although there is no notion of energy nor Hamiltonian in CP, the form of its path-integral formulation closely looks like a classical mechanics Lagrangian, with a kinetic energy term and an effective potential energy term.

Calculation of the path integral on the right-hand side of Eq. (12) will be done through a perturbative expansion (in λ) of the effective potential for the average values of the fields $\vec{\phi}(t), \vec{\psi}(t)$, following an approach used in the context of classical statistical mechanics [29,30]. This expansion allows us to calculate quantities of interest, e.g., $\phi^*(\rho), \lambda_C, \rho^*, \dots$, in powers of $1/D$. In the following, we will closely follow the technique and notations of Ref. [30] which makes use of this perturbation expansion scheme to calculate equilibrium properties of the Ising model in large dimensions. The main difference (and complication) is that, here, fields depend on time. An application of this approach to the study of the dynamics of continuous spins models can be found in Ref. [31].

B. Diagrammatic expansion of the effective potential

1. Constrained fields and conjugated sources

Let $\vec{\phi}_i(t)$ and $\vec{\psi}_i(t)$ be two arbitrary functions depending on time t and site i , with $\vec{\phi}_i \in [0,1]$, from which we define $\vec{\chi}_i(t) := [1 - \vec{\phi}_i(t)] \{ \exp[-\vec{\psi}_i(t)] - 1 \}$. We choose as elementary (site-attached) operators $\mathbb{1} - \hat{\phi}_i := \mathbb{1} - a_i^\dagger a_i$ and $\hat{\chi}_i := a_i^\dagger (\mathbb{1} + a_i) - \mathbb{1}$ [32], and impose the constraints

$$\langle \mathbb{1} - \hat{\phi}_i(t) \rangle = 1 - \vec{\phi}_i(t), \quad \langle \hat{\chi}_i(t) \rangle = \vec{\chi}_i(t), \quad (14)$$

where

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \rho_T | \exp(\int_0^T dt' \hat{W}) \hat{A} \exp(\int_0^t dt' \hat{W}) | \rho_0 \rangle}{\langle \rho_T | \exp(\int_0^T dt' \hat{W}) | \rho_0 \rangle}$$

is the average value of operator A at time t . This can be done through the introduction of Lagrange multipliers (sources) in the evolution operator: \hat{W} is changed to $\hat{W}'(t) + W''(t)\mathbb{1}$ in the definition of $\langle \hat{A} \rangle$ where

$$\hat{W}'(t) := \mu \hat{W}_{\text{ann}} + \lambda \hat{W}_{\text{cre}} - \sum_i [h_i(t)(\mathbb{1} - \hat{\phi}_i) - g_i(t)\hat{\chi}_i],$$

$$W''(t) := \sum_i \{ h_i(t)(1 - \vec{\phi}_i(t)) - g_i(t)\vec{\chi}_i(t) \}. \quad (15)$$

Fields $h_i(t)$ and $g_i(t)$ are expected to be as regular as the imposed order parameters $\phi_i(t)$ and $\chi_i(t)$, and are assumed to be (at least) once differentiable with continuous derivatives over the time interval $t \in]0; T[$. However, to match with the components of the final bra and initial ket, Dirac's δ -singularities may be present at $t=0$ and $t=T$. Note the introduction of a new parameter μ in front of the annihilation operator in the expression of \hat{W}' . This parameter will result convenient for technical reasons only, and we will ultimately be interested in calculating quantities for $\mu=1$. This biased evolution operator allows us to express the logarithm of the probability that the final density equals ρ_T for a fixed set of order parameters,

$$\Pi[\rho_T, T; \{\vec{\phi}, \vec{\chi}\} | \rho_0, 0] = \ln \langle \rho_T | \hat{\mathcal{V}}(T, 0) | \rho_0 \rangle + \int_0^T dt W''(t), \quad (16)$$

and our task will be to compute $\hat{\mathcal{V}}(T, 0) := \exp[\int_0^T dt \hat{W}'(t)]$. Requiring that Eq. (16) be extremal with respect to $\vec{\phi}_i(t)$ and $\vec{\chi}_i(t)$ in addition to the constraints above ensures that $h_i(t) = g_i(t) = 0$ at the extremum of Π . Therefore, at the saddle point, Π in Eq. (16) will coincide with Π defined in Eq. (12).

The effective potential Π can be expanded in a double power series in λ, μ ,

$$\Pi = \sum_{a,b \geq 0} \lambda^a \mu^b \Pi_{a,b} \quad \text{with} \quad \Pi_{a,b} \\ := \frac{1}{a!} \frac{1}{b!} (\partial_\lambda)^a (\partial_\mu)^b \Pi |_{\lambda=\mu=0}. \quad (17)$$

We calculate below $\Pi_{0,0}$, that is, the effective potential in the absence of any evolution process albeit the one resulting

from the kinetic constraint over the order parameters, and then expose how to obtain higher orders in a, b through a systematic diagrammatic expansion. A nice feature of this expansion scheme is that, at any given order a in λ , we are able to resum the whole series in powers of μ and, thus, to express our result as a unique power series,

$$\Pi = \sum_{a \geq 0} \lambda^a \Pi_a(\mu) \quad \text{with} \quad \Pi_a := \sum_{b \geq 0} \mu^b \Pi_{a,b}, \quad (18)$$

and set $\mu=1$ in the above expression.

2. Calculation of $\Pi_{0,0}$

We set $\lambda=0$. \hat{W}' decouples into a tensor product over the sites. The latter remain however coupled by the constraints that the bra $\langle \rho_T |$ and the ket $|\rho_0\rangle$ correspond to configurations including exactly $N_T = \rho_T N$ and $N_0 = \rho_0 N$ particles, respectively. We thus introduce two further Lagrange multipliers, ν_T and ν_0 , to select the initial and final densities of particles. We replace $\langle \rho_T |$ and $|\rho_0\rangle$ in Eq. (16) with, respectively, $\langle \nu_T, \rho_T | := \langle O | \exp[\nu_T \sum_i (\rho_T - a_i^\dagger a_i)]$ and $|\nu_0, \rho_0\rangle := (\binom{N}{N_0})^{-1} \exp[\nu_0 \sum_i (a_i^\dagger a_i - \rho_0)] |O\rangle$, where $|O\rangle = (|0\rangle + |1\rangle)^{\otimes N}$ is the sum of all possible configurations. Note that $|\nu_0, \rho_0\rangle$ is normalized so as to represent a probability distribution. Once sites are decoupled, Π may be expressed as a sum of site-dependent effective potentials, each depending upon $\bar{\phi}_i(t)$, $\bar{\chi}_i(t)$, $h_i(t)$, $g_i(t)$, ν_T , and ν_0 . We will eventually optimize the resulting Π over ν_T and ν_0 to ensure that the final and initial densities are the requested ones.

We send μ to zero to make \hat{W}' diagonal in the basis $(|0\rangle, |1\rangle)$. This allows us to compute exactly the evolution operator $\hat{\mathcal{W}}(t_2, t_1) := \exp[\int_{t_1}^{t_2} \hat{W}'(t) dt]$, and then any average of operators or correlation function (CF), e.g., $\langle a_i(t_2) a_i^\dagger(t_1) \rangle := \langle \nu_T, \rho_T | \hat{\mathcal{W}}(T, t_2) a_i \hat{\mathcal{W}}(t_2, t_1) a_i^\dagger \hat{\mathcal{W}}(t_1, 0) | \nu_0, \rho_0 \rangle$. Evaluating $\langle (1 - \bar{\phi}_i)(t) \rangle$ and $\langle \bar{\chi}_i \rangle$, and imposing constraints (14), we find back the rules listed in Table I with overbarred fields [33]. The expressions for the sources $h_i(t)$ and $g_i(t)$ are then [34], for times $0 < t < T$,

$$h_i(t) = \frac{d}{dt} \bar{\psi}_i(t) + (e^{\bar{\psi}_i(t)} - 1) \frac{d}{dt} \ln[1 - \bar{\phi}_i(t)],$$

$$g_i(t) = -e^{\bar{\psi}_i(t)} \frac{d}{dt} \ln[1 - \bar{\phi}_i(t)], \quad (19)$$

from which we obtain $h_i(t)[1 - \bar{\phi}_i(t)] - g_i(t)\bar{\chi}_i(t) = [1 - \bar{\phi}_i(t)] d/dt \bar{\psi}_i(t)$. In other words, the term in W'' of Eq. (16) gives back, aside boundary terms involving initial and final values, the ‘‘kinetic’’ term of the action \mathcal{S} (9).

It appears that constraints (14) at times $t=0$ and $t=T$ can be imposed by nonsingular sources $h_i(t)$ and $g_i(t)$ only if the required state vectors $\langle \bar{\phi}_i(T), \bar{\psi}_i(T) |$ and $|\bar{\phi}_i(0), \bar{\psi}_i(0)\rangle$ are parallel to the initial bra $\langle \nu_T, \rho_T |$ and ket $|\nu_0, \rho_0\rangle$, respectively. To bypass this constraint, we introduce a singular term $h_{i,0} \delta(t-0) + h_{i,T} \delta(t-T)$ in the source $h_i(t)$ —it is sufficient to modify $h_i(t)$ only and let $g_i(t)$ be regular, and we have

also verified that singularities in $h_i(t)$ and $g_i(t)$ at times $t \in]0, T[$ are absent unless $\bar{\phi}_i(t)$ or $\bar{\psi}_i(t)$ are discontinuous, and that a discontinuity of the order parameters is not favorable in terms of action and can be discarded. Optimization of $\Pi_{0,0}$ with respect to $h_{i,0}$ and $h_{i,T}$ yields

$$h_{i,0} = \bar{\psi}_i(0) + \ln \left[\frac{\bar{\phi}_i(0)}{1 - \bar{\phi}_i(0)} \right] - \nu_0, \quad h_{i,T} = \nu_T - \bar{\psi}_i(T), \quad (20)$$

and allows one to fulfill constraints (14) at initial and final times.

Gathering all contributions to $\Pi_{0,0}$ and using Stirling’s formula, we find after some algebra

$$\begin{aligned} \Pi_{0,0} = \sum_i \left[\int_0^T dt \bar{\psi}_i(t) \frac{d\bar{\phi}_i(t)}{dt} + \nu_T [\rho_T - \bar{\phi}_i(T)] \right. \\ \left. - \nu_0 [\rho_0 - \bar{\phi}_i(0)] - \bar{\phi}_i(0) \ln \bar{\phi}_i(0) - [1 - \bar{\phi}_i(0)] \right. \\ \left. \times \ln[1 - \bar{\phi}_i(0)] \right] + N [\rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0)]. \end{aligned} \quad (21)$$

Notice that the sum of the last two terms in $\bar{\phi}_i(0)$ in Eq. (21) is equal to the entropy of N noninteracting particles at density $\bar{\phi}_i(0)$.

3. Perturbative expansions in powers of λ and μ

For the rest of this section, we call average of an operator \hat{A} , and denote by $\langle \hat{A} \rangle$, the ratio $\langle \nu_T, \rho_T | \hat{A} \hat{\mathcal{W}}(T, 0) | \nu_0, \rho_0 \rangle$ over $\langle \nu_T, \rho_T | \hat{\mathcal{W}}(T, 0) | \nu_0, \rho_0 \rangle$. Let us introduce the operators $\hat{S}_1 = -\int_0^T dt \hat{W}_{\text{ann}}$ and $\hat{S}_2 = -\int_0^T dt \hat{W}_{\text{cre}}$. These are directly related to Π through the relations $\partial_\mu \Pi = \langle -\hat{S}_1 \rangle$ and $\partial_\lambda \Pi = \langle -\hat{S}_2 \rangle$, valid for any λ and μ . The average values of the operators \hat{S}_1 and \hat{S}_2 are $\langle \hat{S}_1 \rangle = -\int_0^T dt \sum_i \bar{\phi}_i(t) (\exp[\bar{\psi}_i(t)] - 1)$ (for all λ, μ) and $\langle \hat{S}_2 \rangle_{\lambda=0} = -\int_0^T dt \sum_i \bar{\phi}_i(t) \sum_{j \in i} \bar{\chi}_j(t) / z$ (only for $\lambda=0$), respectively, and give the beginning of the expansion of Π . The sequel is obtained by iterative application of the following identities true for any (differentiable) operator \hat{A} :

$$\partial_\mu \langle \hat{A} \rangle = \langle \partial_\mu \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \hat{U} \rangle, \quad \partial_\lambda \langle \hat{A} \rangle = \langle \partial_\lambda \hat{A} \rangle + \langle \hat{A} \hat{V} \rangle \quad (22)$$

with

$$\begin{aligned} \hat{U} = -\hat{S}_1 + \langle \hat{S}_1 \rangle + \int_0^T dt \sum_i [\partial_\mu h_i(t) \{ \hat{\phi}_i - \bar{\phi}_i(t) \} \\ + \partial_\mu g_i(t) \{ \hat{\chi}_i - \bar{\chi}_i(t) \}], \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \hat{V} = -\hat{S}_2 + \langle \hat{S}_2 \rangle + \int_0^T dt \sum_i [\partial_\lambda h_i(t) \{ \hat{\phi}_i - \bar{\phi}_i(t) \} \\ + \partial_\lambda g_i(t) \{ \hat{\chi}_i - \bar{\chi}_i(t) \}]. \end{aligned} \quad (24)$$

Though sites are coupled by \hat{V} through \hat{S}_2 , successive applications of operators \hat{U}, \hat{V} permit to evaluate the (derivatives of) CFs required to compute the expansion in powers of μ and λ at $\lambda=0$ where these CFs are factorized over sites. Notice that \hat{U}, \hat{V} , and their derivatives with respect to μ and λ that will appear in higher orders of perturbation involve the derivatives of the fields h and g . These can be expressed in a convenient way from the identities $h_i(t) = -\partial_{\bar{\phi}_i(t)}\Pi$, $g_i(t) = -\partial_{\bar{\chi}_i(t)}\Pi$, $h_{i,T} = -\partial_{\bar{\phi}_i(T)}\Pi$ and $h_{i,0} = -\partial_{\bar{\phi}_i(0)}\Pi$. In particular, $\partial_\lambda h_{i,T} = \partial_{\bar{\phi}_i(T)}\langle\hat{S}_2\rangle = 0$ and $\partial_\lambda h_{i,0} = \partial_{\bar{\phi}_i(0)}\langle\hat{S}_2\rangle = 0$, allowing us to remove all terms involving δ 's in h_i in the expressions of \hat{U} and \hat{V} . Also, $\partial_\lambda h_i(t) = \partial_{\bar{\phi}_i(t)}\langle\hat{S}_2\rangle$ and $\partial_\lambda g_i(t) = \partial_{\bar{\chi}_i(t)}\langle\hat{S}_2\rangle$, so that the operator \hat{V} writes in a convenient form when λ vanishes: $\hat{V}_{\lambda=0} = \int_0^T dt \sum_i \sum_{j \in i} \bar{\phi}_i(t) \bar{\chi}_j(t) / z$, where $\bar{\phi}_i(t) = \hat{\phi}_i - \bar{\phi}_i(t)$ and $\bar{\chi}_i(t) = \hat{\chi}_i - \bar{\chi}_i(t)$ express the deviations of the elementary operators with respect to their average values: $\langle\bar{\phi}_i(t)\rangle = \langle\bar{\chi}_i(t)\rangle = 0$ for all λ, μ . Finally, let us give some useful properties of \hat{U} and \hat{V} .

(1) $\langle\hat{U}\rangle = \langle\hat{V}\rangle = 0$ (and if we write these operators in a natural way as sums over the graph sites, each summand $\langle\hat{U}_i\rangle$ and $\langle\hat{V}_i\rangle$ also vanishes).

(2) $\langle\hat{U}\bar{\phi}_i(t)\rangle = \langle\hat{V}\bar{\phi}_i(t)\rangle = \langle\hat{U}\bar{\chi}_i(t)\rangle = \langle\hat{V}\bar{\chi}_i(t)\rangle = 0$.

(3) Any CF of the type $\langle\hat{A}_1 \hat{A}_2 \cdots \hat{A}_k \hat{U}\rangle$ vanishes if the time attached to the \hat{U} operator is smaller or larger than all other times attached to the \hat{A}_ℓ operators. Indeed, a direct evaluation of $\langle\nu_T, \rho_T | \hat{U}$ and $\hat{U} | \nu_0, \rho_0\rangle$ after explicitly expressing \hat{U} in a similar way as we did for $\hat{V}_{\lambda=0}$ shows that both vectors vanish.

We now apply the above scheme to the calculation of Π .

III. MEAN-FIELD THEORY ($z \rightarrow \infty$ LIMIT)

In this section, we first expose the analysis of the contact process on a complete graph. We then explain how this mean-field theory can be found back through the formalism developed in Sec. II.

A. A simple derivation of mean-field theory: The contact process on the complete graph

Consider CP on the complete graph with N sites. As any two sites are adjacent, an exact account of the dynamics can be obtained from tracking the probability $p_n(t)$ that n sites are occupied at time t [35]. The master equation for these probabilities reads,

$$\frac{dp_n}{dt}(t) = (n+1)p_{n+1}(t) + \frac{\lambda}{N-1}(n-1)(N-n+1)p_{n-1}(t) - \left(n + \frac{\lambda}{N-1}n(N-n)\right)p_n(t), \quad (25)$$

with the conventions $p_{-1}(t) = p_{N+1}(t) = 0$. In the large N limit, we expect from the considerations of Sec. I B the following scaling behavior for the probabilities [36]:

$$p_n(t) = \exp[N\pi_{MF}(n/N, t)]. \quad (26)$$

Inserting this scaling ansatz into the master equation (25) yields the equation of motion for the large deviation function $\pi_{MF}(\rho, t)$ of the density ρ of particles,

$$\partial_t \pi_{MF}(\rho, t) = \tilde{W}_{MF}[\rho, \partial_\rho \pi_{MF}(\rho, t)], \quad (27)$$

where

$$\tilde{W}_{MF}[\phi, \psi] := \phi[\exp(\psi) - 1] + \lambda\phi(1-\phi)[\exp(-\psi) - 1]. \quad (28)$$

The very strong analogy between the above definition and the expression for the matrix elements of the creation and annihilation operators in Eq. (10) will be explained in the following section.

After a transient depending on the initial condition, e.g., all sites are initially occupied and all densities but $\rho=1$ have zero probability, the large deviation function π_{MF} relaxes to its stationary value,

$$\pi_{MF}^*(\rho) = -\frac{1}{\lambda} + (1-\rho)[1 - \ln\lambda - \ln(1-\rho)]. \quad (29)$$

It is maximal and equal to zero in $\rho=\rho^*$. The value in $\rho=0$ gives immediate access to the average lifetime of the metastable state with density ρ^* , that is, the time it takes to the system to reach the empty state, see Eq. (2),

$$t_{vac}(\lambda, N) \sim \exp\left[N\left(\frac{1}{\lambda} + \ln\lambda - 1\right)\right]. \quad (30)$$

This value may be successfully compared to the results of Fig. 4 in Ref. [35]. A direct numerical simulation of the evolution of the $p_n(t)$ with N up to ≈ 100 has allowed us to check the validity of scaling hypothesis (26) and to obtain a perfect agreement of the experimental distribution with Eq. (29).

B. Mean-field theory from the ‘‘quantum’’ formalism

The first term $\Pi_{0,0}$ in the expansion of the effective potential Π in powers of λ and μ is given by Eq. (21). Then $\Pi_{1,0} = -\langle\hat{S}_1\rangle_{0,0}$ and $\Pi_{0,1} = -\langle\hat{S}_2\rangle_{0,0}$, the expressions of which in terms of $\bar{\phi}$ and $\bar{\chi}$ are given above. These are sufficient to establish the expressions of $\Pi_0(\mu)$ and $\Pi_1(\mu)$, due to the third property of Sec. II B 3. Indeed, we have the following.

(1) $\Pi_{a,0} = 0$ for all $a \geq 2$. *Proof:* $\partial_\mu \Pi = -\langle\hat{S}_1 \hat{U}\rangle$ since $\partial_\mu \hat{S}_1 = 0$. The expression of $\langle\hat{S}_1 \hat{U}\rangle$ involves a double sum over the sites, say, i, j , of terms of the form $\langle\hat{A}_i \hat{U}_j\rangle$. Any such CF vanishes for all μ as stated in Sec. II B 3.

(2) $\Pi_{a,1} = 0$ for all $a \geq 1$. *Proof:* $\partial_\mu \partial_\lambda \Pi = -\langle\hat{S}_2 \hat{U}\rangle$ which, for $\lambda=0$ and all μ , reduces to a triple sum over the sites, say, $i, j \in i$ and k , of CF of the type $\langle\hat{A}_i \hat{B}_j \hat{U}_k\rangle$ where the times attached to \hat{A}_i and \hat{B}_j coincide. Again, these CF vanish due to the presence of the \hat{U} operator.

As a result, setting $\mu=1$, we obtain

$$\begin{aligned} & \Pi[\rho_T, T; \{\phi, \chi\} | \rho_0, 0] \\ &= \sum_i \left[\nu_T [\rho_T - \bar{\phi}_i(T)] - \nu_0 [\rho_0 - \bar{\phi}_i(0)] \right. \\ & \quad - \bar{\phi}_i(0) \ln[\bar{\phi}_i(0)] - [1 - \bar{\phi}_i(0)] \ln[1 - \bar{\phi}_i(0)] \\ & \quad + \rho_0 \ln \rho_0 + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0) + \int_0^T dt \left(\bar{\psi}_i(t) \frac{d\bar{\phi}_i}{dt}(t) \right. \\ & \quad \left. \left. + \bar{\phi}_i(t) \left\{ \exp[\bar{\psi}_i(t)] - 1 \right\} + \frac{\lambda}{z} \bar{\phi}_i(t) \sum_{j \in i} \bar{\chi}_j(t) \right) \right] \\ & \quad + O(\lambda^2). \end{aligned} \quad (31)$$

For $\lambda=0$ (for $\mu=0$), we are able to compute action (31) directly, without using such a perturbative expansion as Eq. (17), since the matrix of \hat{W}' is upper (lower) triangular in the basis $(|0\rangle, |1\rangle)$. However, when both λ and μ are nonzero, we do not know how to proceed without the perturbative expansion.

In search for a translationally invariant, i.e., site-independent evolution, we choose all quantities to be site independent and remove site indices. We also drop the bars over the fields to simplify notations. Equation (31) then becomes $\pi_{\text{MF}} = \Pi/N$ with

$$\begin{aligned} & \pi_{\text{MF}}[\rho_T, T; \{\phi, \chi\} | \rho_0, 0] \\ &= -\phi(0) \ln[\phi(0)] - [1 - \phi(0)] \ln[1 - \phi(0)] + \rho_0 \ln \rho_0 \\ & \quad + (1 - \rho_0) \ln(1 - \rho_0) + \nu_T [\rho_T - \phi(T)] - \nu_0 [\rho_0 - \phi(0)] \\ & \quad + \int_0^T dt \left(\psi(t) \frac{d\phi}{dt}(t) + \bar{W}_{\text{MF}}[\phi(t), \psi(t)] \right), \end{aligned} \quad (32)$$

where \bar{W}_{MF} is defined in Eq. (28). The above expression suffices to the study the mean-field (MF) case, i.e., when the site connectivity z goes to infinity. This may happen for large complete graphs, where each site is connected to all other sites ($z=N-1$), or in the $D \rightarrow \infty$ limit of a D -dimensional regular lattice ($z=2D$). As shown in Sec. IV A, higher-order terms in the λ expansion give $O(1/z)$ additive contributions to Π (within a site-independent ansatz), and vanish in the $z \rightarrow \infty$ limit. Therefore, π_{MF} is the exact mean-field expression for the action. To obtain the (exponentially in N) dominant trajectory of the order parameters $\phi(t), \psi(t)$, we first extremize Eq. (32) with respect to ν_T, ν_0 , to get the expected relations $\phi(T) = \rho_T$ and $\phi(0) = \rho_0$. Notice that, if the initial state were a superposition of configurations with various densities, e.g., $\int_0^1 d\rho_0 \exp[Nq(\rho_0)] |\rho_0\rangle$, Eq. (32) would include an additive contribution $q(\rho_0)$; the most probable initial density ρ_0 would then be given by the solution of $\partial_\rho q(\rho_0) = \psi(0)$. The resulting expression,

$$\pi_{\text{MF}} = \int_0^T dt \left\{ \psi(t) \frac{d\phi}{dt}(t) + \bar{W}_{\text{MF}}[\phi(t), \psi(t)] \right\} \quad (33)$$

has then to be functionally extremized over the fields $\phi(t)$ and $\psi(t)$. The equations of motion (EM) for the fields are the Hamilton-Jacobi equations associated to Lagrangian (33),

$$\begin{aligned} \frac{d\psi}{dt}(t) &= \partial_\phi \bar{W}_{\text{MF}}[\phi(t), \psi(t)], \\ \frac{d\phi}{dt}(t) &= -\partial_\psi \bar{W}_{\text{MF}}[\phi(t), \psi(t)] \end{aligned} \quad (34)$$

along with the already established initial and final conditions: $\phi(T) = \rho_T$ and $\phi(0) = \rho_0$.

The solution of the EM yields the logarithm $N\pi_{\text{MF}}$ of the probability to go from a configuration with density $\phi(0)$ at time 0 to another configuration with density $\phi(T)$ at time T . To solve these equations, we make use of the fact that \bar{W}_{MF} is a conserved quantity from Eq. (34), which we denote by E . Then, the density ϕ and the time t can be expressed as functions of $y := \exp(\psi)$,

$$t = \int_{y(0)}^y dy' [(y' - \lambda)^2 (y' - 1)^2 + 4E\lambda y' (y' - 1)]^{-1/2}. \quad (35)$$

The action of the trajectory equals the large deviation function, $\pi_{\text{MF}}(\rho, T) = \int_{y(0)}^{y(T)} dy' \ln(y') \partial_y \phi(y') + TE$. The shape of the solutions of Eq. (34) depends on the sign of $\psi(0)$. As shown in Fig. 3, if we exclude solutions where $\phi(t)$ is always zero [37], three cases have to be distinguished.

(1) If $\psi(0)=0$, the solutions have an infinite lifetime. $\psi(t)$ remains zero at all times [38], and the field $\phi(t)$ obeys the first-order ordinary differential equation

$$\frac{d\phi}{dt}(t) = -\lambda \phi(t) \left(\phi(t) - 1 + \frac{1}{\lambda} \right). \quad (36)$$

This equation coincides with the mean-field equation for the density $\rho(t)$, straightforwardly obtained when neglecting correlations between occupation numbers of neighboring sites. At large times, $\phi(t)$ tends to 0 or $\rho^* = 1 - 1/\lambda$ depending on whether λ is smaller or larger than the critical value $\lambda_c = 1$ as shown in Fig. 1(a). Notice that the action π_{MF} vanishes as $\psi=0$.

(2) If $\psi(0) < 0$, the solutions have a finite lifetime and $\phi(t) \rightarrow 1$ while $\psi(t) \rightarrow -\infty$ [see Figs. 3(a,c)].

(3) If $\psi(0) > 0$, the sign of the conserved quantity E matters. If $E > 0$ (which is necessary if $\lambda < 1$), the lifetime is finite [see Fig. 3(b)]. If $E < 0$, the solutions are periodic [see Fig. 3(d)]. If $E = 0$, the situation is the natural intermediate between the two cases. In all cases, the lifetime (or the period) $T(E)$ increases as $|E|$ diminishes.

Nonzero fields ψ select instantonic solutions allowing the system to escape the typical behavior described by the $\psi=0$ solution. These solutions have an extensive action, and are therefore exponentially suppressed when the system size increases. However, they are the solutions giving rise to large deviations of the density for a finite volume [Fig. 1(b)]. The most probable fluctuations correspond to long times solutions, i.e., $E \rightarrow 0$. In this case, $T(E)$ diverges like $\log E$, and

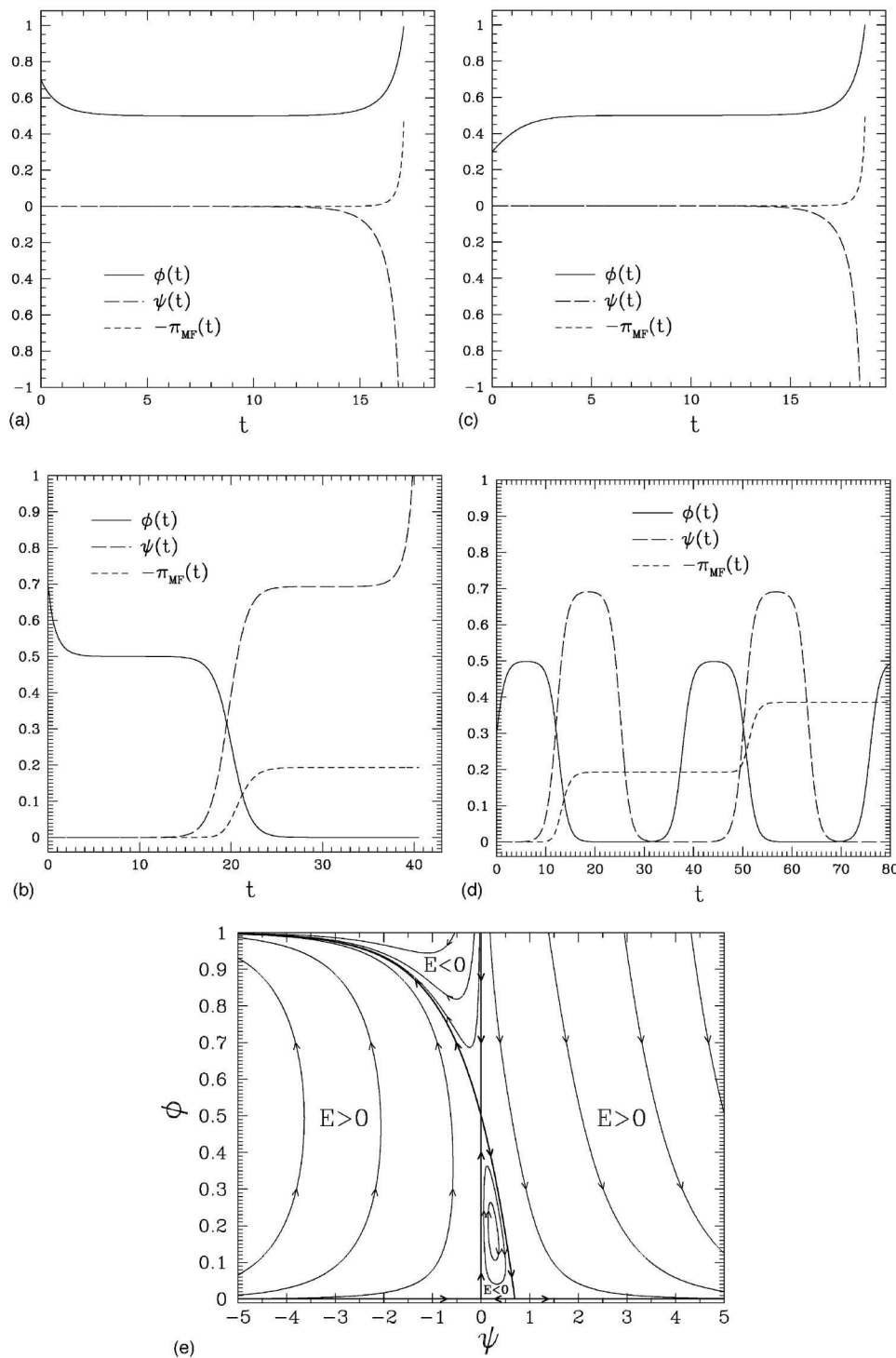


FIG. 3. Solutions of the mean-field equations of motion (34) for $\lambda=2$ ($\rho^*=1/2$) (A and C). For negative $\psi(0)$ ($= -10^{-7}$ here), the solutions have a finite lifetime. After quickly reaching the most probable value of the density of particles, ρ^* , $\phi(t)$ stays for a long time in the neighborhood of ρ^* but finally reaches unity, while $\psi(t) \rightarrow -\infty$. The action π_{MF} tends to a negative finite value; the main contribution to it comes from the final jump of ϕ from ρ^* to 1. (B) For positive $\psi(0)$ ($= 10^{-8}$ here) and $E > 0$, the lifetime is finite. After quickly reaching ρ^* , $\phi(t)$ stays for a long time in its neighborhood but finally transits to the neighborhood of 0 where it stays again for a long time, while $\psi(t)$ transits to $\ln \lambda$ and stays close to it. Finally $\psi(t) \rightarrow +\infty$ while $\phi(t) \rightarrow 0$. π_{MF} tends to a negative finite value, the main contribution of which is accumulated during the transit. (D) For positive $\psi(0) > 0$ ($= 10^{-8}$ here) and $E < 0$, the solution is periodic. $\phi(t)$ and $\psi(t)$ oscillate between two values inside the $[0, \rho^*]$ and $[0, \ln(\lambda)]$ intervals, respectively, and the action diverges to $-\infty$ by hops. (E) Phase portrait with all types of solutions (oriented according to the time evolution). The phase space divides into four regions delimited by the solutions for which $E=0$ (represented in thick lines); in each region the sign of E is indicated. The quasistationary state appears on this diagram as the crossing point ($\psi=0, \phi=\rho^*$) of two solutions with $E=0$: it is stable along the ϕ direction but unstable along the ψ direction.

the TE term vanishes. When $\lambda > 1$, we have the simple identity $\phi(y) = 1 - y/\lambda$ if $0 \leq y \leq \lambda$, 0 if $y \geq \lambda$. In particular, the weight of the instantonic solution that goes from $\phi(0) = \rho^*$ to $\phi(+\infty) = \rho$ coincides with the stationary large deviation function for the density $\pi_{MF}^*(\rho)$ defined in Eq. (29).

The large deviation function can be obtained at any finite time t too. To do so, we use expression (32) to express the probability of going from the state with distribution $\pi(\rho, t)$ at time t to the one the state with $\pi(\rho, t + dt)$ at time $t + dt$. Special care must be paid to discretizing the term involving time derivations in a symmetric way between t and $t + dt$ as requested for path integrals [28]. The resulting evolution equation for the large deviation function coincides with Eq. (27) as expected.

C. Relationship with Martin-Siggia-Rose and Janssen–de Dominicis formalisms

The above formalism is, to some extent, related to the treatment of Langevin equations by Martin, Siggia, and Rose (MSR) [39] and Janssen and de Dominicis [40–42]. If $x(t)$ is a classical (scalar or vector) field, the Langevin equation

$$\frac{dx}{dt}(t) = -V'(x(t)) + \eta(t) \quad (37)$$

describes its evolution in the potential V (V' denotes $\partial_x V$) under the random Gaussian force η . η is specified by its first two moments: $\overline{\eta(t)} = 0$, $\overline{\eta(t)\eta(t')} = 2T\delta(t-t')$, where T is the temperature and the overbars denote the noise average. Let $P(x_T, T|x_0, 0)$ be the probability that x equals x_T at time T conditioned to its initial value. This probability can be expressed as a path integral through the introduction of a response variable \hat{x} conjugated to x [39–42],

$$P(x_T, T|x_0, 0) = \int_{x(0)=x_0}^{x(T)=x_T} \mathcal{D}x(\tau) \mathcal{D}\hat{x}(\tau) \exp \left[\int_0^T d\tau \left\{ i\hat{x}(\tau) \times \left(\frac{dx}{dt}(\tau) + V'(x(\tau)) \right) - T\hat{x}^2(\tau) \right\} \right]. \quad (38)$$

Functional optimization of Eq. (38) with respect to x, \hat{x} yields the classical equations of motion,

$$\frac{dx(t)}{dt} = -V'(x(t)) - i2T\hat{x}(t), \quad \frac{d\hat{x}(t)}{dt} = \hat{x}(t)V''(x(t)) \quad (39)$$

from which we obtain that $dx/dt(t)^2 - V'(x(t))^2$ is a constant of motion.

These EMs are formally identical to those derived for CP (34) in Sec. III (x playing the role of ϕ and \hat{x} that of $-i\psi$) when $|\psi| \ll 1$, with the following choice of potential and temperature:

$$V'(\phi) = \lambda\phi(\phi - \phi^*), \quad 2T(\phi) = \phi(1 + \lambda(1 - \phi)). \quad (40)$$

Therefore, in the weakly fluctuating regime where ψ is small and ϕ close to its most probable value ρ^* , the system evolves in an effective potential V with fluctuations that can

be described by a Langevin equation at temperature T [43]. This description breaks down as soon as we consider large deviations, or transitions from the metastable to the empty state, as can be seen from the numerical comparison of the true solutions of Eq. (34) with the solutions of Eq. (39).

Extending the validity of the Langevin equation approach to the full domain of ϕ and ψ would require the use of a MSR-like formalism [39–42]. Interestingly, MSR stated in their original work that the knowledge of the physical field ϕ alone is not sufficient to compute all quantities of interest beyond the Gaussian approximation, and that the introduction of a second operator (corresponding to our ψ , or to a and a^\dagger , whereas ϕ corresponds to $a^\dagger a$) to express the response functions of the physical field was required.

IV. FINITE-DIMENSION THEORY (1/z EXPANSION)

A. Analytical calculation

Calculation of the corrections to mean-field theory requires the knowledge of higher-order terms in the expansion of Π in powers of λ and μ . Strictly speaking, our expansion is, after we resum the μ -expansion, an expansion in powers of λ , or, more precisely, of λ/z . It naturally gives access to an expansion of Π in powers of $1/z$ as shown below.

1. The diagrammatic expansion

To show how this expansion works in practice, let us consider the first correction to Eq. (32), $2\Pi_{2,0} = \partial_\lambda^2 \Pi|_{0,0} = -\partial_\lambda \langle \hat{S}_2 \rangle_{0,0} = -\langle \hat{S}_2 \hat{V} \rangle_{0,0} = \langle \hat{V}^2 \rangle_{0,0}$ since $\partial_\lambda \hat{S}_2 = 0$ and $\langle \hat{S}_2 \hat{V} \rangle = -\langle \hat{V}^2 \rangle$. $\hat{V}_{0,0}$ involves a sum over couples of neighboring sites that can be written as a sum over oriented links. The term $\tilde{\phi}_i \tilde{\chi}_j$ will be represented by a link going from site i to site j . Therefore $\langle \hat{V}^2 \rangle_{0,0}$ writes as a sum over couples of oriented links. When $\lambda = 0$, sites decouple and terms where a site carries a single operator $\tilde{\phi}$ or $\tilde{\chi}$ vanish (Sec. II B 3). We are thus left with terms where two parallel links loop over two neighboring sites i, j on the lattice,

$$i \leftrightarrow j = \int_0^T dt \int_0^T dt' \langle \tilde{\phi}_i(t) \tilde{\chi}_j(t) \tilde{\phi}_i(t') \tilde{\chi}_j(t') \rangle_{0,0}, \quad (41)$$

and terms with the same structure but links pointing in opposite directions. As $\lambda = 0$, this four-point CF factorizes into a product of two two-point CFs:

$$\begin{aligned} & \langle \tilde{\phi}_i(t) \tilde{\chi}_j(t) \tilde{\phi}_i(t') \tilde{\chi}_j(t') \rangle_{0,0} \\ &= \langle \tilde{\phi}_i(t) \tilde{\phi}_i(t') \rangle_{0,0} \langle \tilde{\chi}_j(t) \tilde{\chi}_j(t') \rangle_{0,0}. \end{aligned}$$

Each of these CFs can be straightforwardly computed, e.g., $\langle \tilde{\phi}_i(t) \tilde{\phi}_i(t') \rangle_{0,0} = \tilde{\phi}_i(t_1) [1 - \tilde{\phi}_i(t_2)]$ where $t_1 = \min(t, t')$ and $t_2 = \max(t, t')$. The final result reads

$$i \rightleftarrows j = -2 \int_0^T dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \bar{\phi}_i(t_1) (1 - \bar{\phi}_i(t_2)) (1 + \bar{\chi}_j(t_1)) \bar{\chi}_j(t_2). \quad (42)$$

The antiparallel two-site loop diagram may be evaluated in the same way. Notice that the final outcome does not depend on the indices i, j of the sites, provided these are neighbors on the lattice. We will therefore drop site indices in the following. Then, we count the multiplicity of each diagram, equal to Nz for both parallel and antiparallel two-sites loops. Finally, each diagram gets a factor $1/z^2$ coming from the $(\lambda/z)^2$ factor in \hat{W}_{cre} . As a result, the net contribution will be of the order of $1/z$, that is, $1/D$ on a D -dimensional hypercubic lattice.

We are now able to write the general expression of the $1/z$ expansion in a graphical way. For instance, for a hypercubic lattice of dimension D (and site connectivity $z = 2D$),

$$\begin{aligned} \pi = & \pi_{\text{MF}} + \frac{\lambda^2}{2!(2D)^2} D \text{ (loop) } + \\ & \frac{\lambda^3}{3!(2D)^3} D \text{ (loop) } + \frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} D(2D-1)6 \text{ (loop) } + \frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} \frac{D(D-1)}{2} 4! \square + \\ & \frac{\lambda^4}{4!(2D)^4} D \text{ (loop) } + \dots \end{aligned} \quad (43)$$

Each undirected diagram in the above expansion represents the sum of the correlation functions (like the one entering $\Pi_{2,0}$ and evaluated above) that share the same support on the graph but differ by the orientations of the links. There are 2^ℓ link orientations for an undirected diagram with ℓ links. The coefficients in front of the diagrams take into account the power of λ/z (equal to the number of links in the diagram), the inverse factorial from the Taylor formula, and a combinatorial factor. This combinatorial coefficient is the product of the multiplicity of the undirected diagram (number of times it can be drawn on the lattice, divided by the lattice size N) and of the number of ways to associate a time t to each link of the diagram when evaluating the CF [44]. As one may infer from the first diagrams, there is only a finite number of terms contributing to a given order in $1/z$.

2. Summation of the μ -expansion and memory kernels

Π being the logarithm of a generating function of the fields, all the diagrams entering expansion (43) are connected. Moreover, for $\mu=0$ all nonirreducible diagrams, i.e., which may be cut into two, or more, pieces by removal of a vertex vanish, as in the virial expansion [45] and possibly the Ising model [30]. This statement does unfortunately not extend to nonzero μ . To get the μ -expansion we make repeated uses of the leftmost identity in Eq. (22). As $\partial_\mu \hat{U} = \partial_\mu \hat{V} = 0$, this amounts to insert \hat{U} operators (one for each power of μ) in the CFs, yielding contributions of the form

$$\begin{aligned} D_n := & \int_0^T dt_1 \int_0^T dt_2 \cdots \int_0^T dt_{n+2} \langle \bar{\phi}_i(t_1) \\ & \times \hat{U}_i(t_2) \hat{U}_i(t_3) \cdots \hat{U}_i(t_{n+1}) \bar{\phi}_i(t_{n+2}) \rangle. \end{aligned} \quad (44)$$

As stated in Sec. II B 3, such a term vanishes if one of the times t_2, t_3, \dots, t_{n+1} associated to the \hat{U} operators is the minimum or maximum of all times. If not, the integrand is the product of factors

$$\bar{\xi}(t_k) := - \frac{\exp \bar{\psi}(t_k)}{1 - \bar{\phi}(t_k)} \quad (45)$$

for each $\hat{U}(t_k)$ and a factor depending on the other operators involved in the CF. If there are strictly less than four other operators in the CF or no \hat{U} operator between the second and the second last times, this latter factor is equal to the CF where all \hat{U} have been removed; for instance, the term D_n defined in Eq. (44) reads

$$D_n = 2 \int_0^T dt \int_0^t dt' \langle \bar{\phi}_i(t) \bar{\phi}_i(t') \rangle \left(\int_{t'}^t dt'' \bar{\xi}_i(t'') \right)^n. \quad (46)$$

If the original CF involves more operators or a “badly” located \hat{U} , there appears a kind of disentanglement of the original operators. Consider, for instance, the four-field CF $D' := \langle \bar{\phi}_i(t_1) \bar{\phi}_i(t_2) \bar{\phi}_i(t_3) \bar{\phi}_i(t_4) \rangle$ with $t_1 < t_2 < t_3 < t_4$. A direct evaluation shows that D' equals $-\bar{\phi}_i(t_1)[-1 + \bar{\phi}_i(t_4)][-\bar{\phi}_i(t_3) + 1 + 3\bar{\phi}_i(t_2)\bar{\phi}_i(t_3) - 2\bar{\phi}_i(t_2)]$ and cannot be expressed as a product of four factors, each of which would be associated to a time t_j . We shall say that D' is entangled, here due to the t_2, t_3 term. Insertion of at least one \hat{U}_i between t_2 and t_3 , as in

$$\begin{aligned} D'' := & \langle \bar{\phi}_i(t_1) \hat{U}_i(t'_1) \hat{U}_i(t'_2) \cdots \hat{U}_i(t'_n) \bar{\phi}_i(t_2) \hat{U}_i(t'_{n+1}) \\ & \times \hat{U}_i(t'_{n+2}) \cdots \hat{U}_i(t'_n) \bar{\phi}_i(t_3) \hat{U}_i(t'_{n_2+1}) \\ & \times \hat{U}_i(t'_{n_2+2}) \cdots \hat{U}_i(t'_{n_3}) \bar{\phi}_i(t_4) \rangle \end{aligned}$$

with

FIELD-THEORETIC APPROACH TO METASTABILITY . . .

PHYSICAL REVIEW E **69**, 016126 (2004)

$t_1 < t'_1 < \dots < t'_{n_1} < t_2 < t'_{n_1+1} < \dots < t'_{n_2} < t_3 < t'_{n_2+1} < \dots < t'_{n_3} < t_4$ removes this entanglement. D'' is the product of factors $\bar{\xi}_i(t'_k)$, one for each $\hat{U}(t'_k)$, and of the disentangled (factorized) expression $-\bar{\phi}_i(t_1)[-1 + \bar{\phi}_i(t_4)][-1 + 2\bar{\phi}_i(t_2)][-1 + 2\bar{\phi}_i(t_3)]$. We conclude that a CF of the type

$$D''_n := \int_0^T dt_4 \int_0^T dt_3 \int_0^T dt_2 \int_0^T dt_1 \int_0^T dt'_1 \int_0^T dt'_2 \dots \int_0^T dt'_n \times \langle \bar{\phi}_i(t_1) \bar{\phi}_i(t_2) \bar{\phi}_i(t_3) \bar{\phi}_i(t_4) \hat{U}_i(t'_1) \hat{U}_i(t'_2) \dots \hat{U}_i(t'_n) \rangle \quad (47)$$

can be expressed as

$$D''_n = 24 \int_0^T dt_4 \int_0^{t_4} dt_3 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \langle \bar{\phi}_i(t_1) \bar{\phi}_i(t_2) \times \bar{\phi}_i(t_3) \bar{\phi}_i(t_4) \rangle_{\text{dis}} \left(\int_{t_1}^{t_4} dt \bar{\xi}_i(t) \right)^n + 24 \int_0^T dt_4 \int_0^{t_4} dt_3 \int_0^{t_3} dt_2 \int_0^{t_2} dt_1 \times [\langle \bar{\phi}_i(t_1) \bar{\phi}_i(t_2) \bar{\phi}_i(t_3) \bar{\phi}_i(t_4) \rangle - \langle \bar{\phi}_i(t_1) \bar{\phi}_i(t_2) \bar{\phi}_i(t_3) \bar{\phi}_i(t_4) \rangle_{\text{dis}}] \times \left(\int_{t_1}^{t_2} dt \bar{\xi}_i(t) + \int_{t_3}^{t_4} dt \bar{\xi}_i(t) \right)^n, \quad (48)$$

where the ‘‘dis’’ subscript means that the disentangled expression for the CF integrand $\langle \dots \rangle$ must be taken.

It appears that, at any given order in λ , the series expansion in powers of μ can be easily summed up, yielding memory kernels in the resulting $\Pi_a(\mu)$ with $a \geq 2$. For instance, $\int_0^T dt \int_0^T dt' \langle \bar{\phi}_i(t) \bar{\phi}_i(t') \rangle$ is replaced with

$$\sum_{n \geq 2} \frac{\mu^n}{n!} D_n = \int_0^T dt \int_0^T dt' \langle \bar{\phi}_i(t) \bar{\phi}_i(t') \rangle \times \exp \left(\mu \int_{\min(t,t')}^{\max(t,t')} dt'' \bar{\xi}_i(t'') \right), \quad (49)$$

the memory kernel being the exponential term, where μ is eventually set to 1. Due to the presence of the kernel, the CF between two operators at times t and t' decreases with a time difference $|t - t'|$ (remember $\bar{\xi} < 0$).

This property extends to more than two operators. The contribution of a diagram with n links, thus of order λ^n in the λ -expansion of Π , may be written as the sum of a finite number of terms of the form

$$F := \int_0^T dt_n \int_0^{t_n} dt_{n-1} \dots \int_0^{t_2} dt_1 P \times \exp \left(i_1 \int_{t_1}^{t_2} dt \bar{\xi}(t) + \dots + i_n \int_{t_{n-1}}^{t_n} dt \bar{\xi}(t) \right), \quad (50)$$

where P is a polynomial in $\phi(t_1), \exp[-\psi(t_1)], \dots, \phi(t_n)$ and $\exp[-\psi(t_n)]$ and i_1, i_2, \dots, i_n are positive integers. The presence of the memory kernels ensures that the integrand sharply decreases as $t_n - t_1$ increases.

One may wonder why memory kernels appear in the expressions above, whereas CP is a Markovian stochastic process. This is the consequence of the projection of the complete distribution of states, $|P(t)\rangle$, that is, the knowledge of the probability of occupation or vacancy of all sites, onto a partial description where we keep track of the order parameters $\phi(t), \psi(t)$ only. Beyond mean field, the degrees of freedom which were discarded pop up as non-Markovian contributions to the dynamical evolution of the order parameters. This phenomenon is well known, and can be illustrated with an elementary example proposed in the Appendix.

B. Results and comparison with simulations

Following the above recipes, the effective potential π may be expanded in powers of $1/z$, see Eq. (43). The explicit expression for the first correction to mean field, coming from the two-site loop diagram, reads

$$\pi_1 = -\frac{2\lambda^2}{z} \int_0^T dt_2 [1 - \phi(t_2)]^2 (e^{-\psi(t_2)} - 1) \int_0^{t_2} dt_1 \phi(t_1) \times \{ [1 - \phi(t_1)] e^{-\psi(t_1)} + \phi(t_1) \} \exp \left(2 \int_{t_1}^{t_2} dt'' \xi(t'') \right). \quad (51)$$

The $O(1/z^2)$ corrections to π required the calculation of the diagrams listed in Eq. (43). The resulting expression, π_2 , for the D -dimensional hypercubic lattice (where $z = 2D$) is too lengthy to be given here, but can be obtained with the help of a computer algebra software. This gives, as a by-product, the expression π_2 for the Cayley lattice (infinite graph without loops where all sites have exactly z neighbors) after removal of the square diagram $i \square_k^j$.

Functional optimization of the resulting expression for π with respect to $\phi(t)$ and $\psi(t)$ yields EMs which include corrections of orders $1/z$ and $1/z^2$ to the Hamilton-Jacobi equations (34). These corrections involve terms with multiple integrals on the time.

1. Corrections to the density ρ^* of particles and the critical parameter λ_C

We first concentrate on the solution to the EM with vanishing $\psi(t)$ at all times t . The equation for $\phi(t)$ then simplifies; for instance, to the first order in $1/z$, we obtain

$$\frac{d\phi}{dt}(t) = -\lambda\phi(t)\left(\phi(t) - 1 + \frac{1}{\lambda}\right) - \frac{2\lambda^2}{z}[1 - \phi(t)]^2 \times \int_0^t dt' \phi(t') \exp\left(-2 \int_{t'}^t \frac{dt''}{1 - \phi(t'')}\right). \quad (52)$$

With the help of computer algebra, the EM for $\phi(t)$ can be written up to order $1/z^2$, and its asymptotic behavior analyzed. We find that $\phi(t \rightarrow \infty)$ equals 0 or $\rho^* > 0$ depending on the value of the parameter λ with respect to its critical value λ_C . The asymptotic density reads

$$\rho^* = 1 - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2 z} - \frac{6\lambda^2 + 11\lambda + 3}{6\lambda^4 z^2} + O(1/z^3) \quad (53)$$

on the D -dimensional hypercubic lattice ($z = 2D$), and

$$\rho^* = 1 - \frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda^2 z} - \frac{6\lambda^2 + 11\lambda - 3}{6\lambda^4 z^2} + O(1/z^3) \quad (54)$$

on the Cayley tree where all sites have z neighbors. The critical value λ_C can be easily obtained from the above equations as the value of the parameter λ below which no state with a finite density of particles can survive. This is intended to be the lower critical value $\lambda_{C_{\text{lower}}}$ on the Cayley tree [13(b)], where there exists an intermediate range $[\lambda_{C_{\text{lower}}}, \lambda_{C_{\text{upper}}}]$ of values of λ where nonuniform metastable states can survive without invading the whole graph while, above $\lambda_{C_{\text{upper}}}$, there is a single uniform metastable state—on hypercubic lattices, both thresholds coincide. Setting $\rho^* = 0$, we obtain

$$\lambda_C = 1 + \frac{1}{z} + \frac{7}{3z^2} + O(1/z^3) \quad (55)$$

on a the hypercubic lattice, and

$$\lambda_C = 1 + \frac{1}{z} + \frac{4}{3z^2} + O(1/z^3) \quad (56)$$

on the Cayley tree. These results are compatible with the rigorous bounds $[1 - 1/(2D)]^{-1} \leq \lambda_C \leq 4$ (hypercubic lattice) and $1 \leq \lambda_C \leq (1 - 2/z)^{-1}$ (on the Cayley tree) [13]. Notice that the lower bound $\lambda_C \geq [1 - 1/(2D)]^{-1}$ was obtained [13(a)] through a two-site calculation. When discarding all diagrams but the two-site loops, we find $\lambda_C = 1 + 1/(2D) + 1/(2D)^2 + O(1/(2D)^3)$, that is, the same bound. For small dimensions, our asymptotic results are of poor quality. We refer the interested reader to the various works that give

more precise estimates for λ_C , e.g., for hypercubic lattices in $1 \leq D \leq 5$ Ref. [46], for $D = 1$ through series expansions Refs. [47,48].

Our values of ρ^* are in good agreement with numerical simulations carried out on hypercubic lattices in dimensions up to $D = 10$ for several values of $\lambda (= 1.5, 2, 3)$. Simulating large size lattices in higher dimensions would require prohibitive memory space. Instead, we have performed simulations of the conserved contact process (CCP) [49]. This is a canonical counterpart of CP where the number of occupied sites is kept constant, but λ fluctuates. The stationary properties of both processes are, in the limit of infinite lattice size, equivalent [50,51]. In particular, simulating CCP with a (not too large) number N of particles on an almost infinite lattice (in our simulation, of size $L = 2^{32}$) amounts to simulate CP with a vanishing density. The average value of λ in CCP then coincides with the critical λ_C in CP. We have been able to simulate CCP on hypercubic lattices with up to $N = 4000$ sites and in dimensions up to $D = 80$ or up to $z = 81$ on the Cayley tree [52]. Results are displayed in Fig. 4, and are in very good agreement with our theoretical predictions for λ_C , Eqs. (55), (56), and previous simulations [46].

2. Corrections to the distribution of particle densities

The analytical resolution of the EM when $\psi(t) \neq 0$ is difficult. We have restricted ourselves to a first order in $1/z$ expansion around the infinite lifetime solutions for which we have an analytical expression in the mean-field case. It is convenient to parametrize the real time t in terms of y_0 introduced in Eq. (35): $y_0 = \exp[\psi_0(t)]$, where $\psi_0(t)$ is the mean-field expression for $\psi(t)$. In the thermodynamic limit $N \rightarrow \infty$ with $E \rightarrow 0$ (infinite lifetime), the $t \rightarrow +\infty$ limit translates into the $y_0 \rightarrow \lambda$ limit.

In this setting, we may write $\phi(y_0) = \phi_0(y_0) + \phi_1(y_0)/z + O(1/z^2)$ and similarly $\psi(y_0) = \psi_0(y_0) + \psi_1(y_0)/z + O(1/z^2)$, where ϕ_0 and ψ_0 were computed previously for the mean-field case. From the EM, we derive two coupled first-order linear differential equations for ϕ_1 and ψ_1 :

$$(y_0 - 1)(\lambda - y_0) \frac{d}{dy_0} \begin{pmatrix} \phi_1(y_0) \\ \psi_1(y_0) \end{pmatrix} = \frac{1}{y_0} \begin{pmatrix} -(y_0 - 1)^2 - \lambda + 1 & \frac{-y_0}{\lambda} (\lambda - y_0)(y_0 + 1) \\ 2\lambda(y_0 - 1) & (y_0 - 1)^2 + \lambda - 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \phi_1(y_0) \\ \psi_1(y_0) \end{pmatrix} + B(y_0), \quad (57)$$

with

$$B(y_0) := \begin{pmatrix} \lambda^{-2}[-y_0 I_1 + (\lambda - y_0) I_2 + 2\lambda I_1 I_2] \\ -\lambda^{-1} \left[2(y_0 - 1) I_1 + \left(\frac{\lambda}{y_0} - 2(\lambda + 1 - y_0) \right) I_2 + \frac{2}{y_0} I_1 I_2 \right] \end{pmatrix} \quad (58)$$

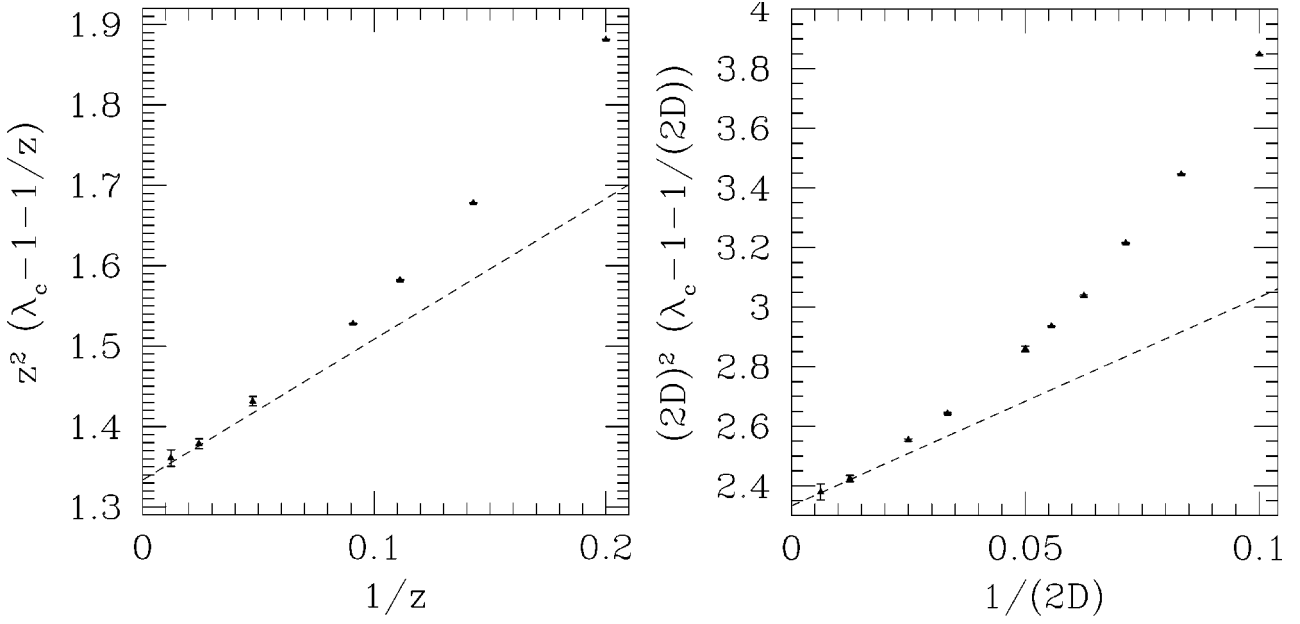


FIG. 4. Numerical data for the second-order correction in $1/z$ to $\lambda_c(z)$ for the Cayley tree (left panel) and the hypercubic lattice (right panel). The critical value λ_c is obtained from numerical experiments on the conserved contact process (CPP), see main text. Data are plotted as $z^2[\lambda_c(z) - 1 - 1/z]$ vs $1/z$. The intercept a with the vertical axis ($z \rightarrow \infty$) compares very well with the theoretical predictions $a = 4/3$ [Eq. (56), left] and $7/3$ [Eq. (55), right]. Dashed lines are tentative linear fits (with fixed origin at $1/z = 0$) of the data, whose slopes should be given by the $O(1/z^3)$ expansion. The estimate of λ for each z was obtained through an extrapolation of data for finite numbers of particles N (up to 4000) to infinite N . For each value of N , we ran 10 000 simulations and estimated error bars from the statistical fluctuations. The upper and lower values of $\lambda_c(z; N = \infty)$ were then obtained through a linear fit of $\lambda_c(z; 1/N)$, and plotted at the extremities of the error bars.

and

$$I_1 := \left(\frac{\lambda - y_0}{y_0 - 1} \right)^{\alpha+2} \int_1^{y_0} dy_1 \frac{\lambda + 1 - y_1}{y_1 - 1} \left(\frac{y_1 - 1}{\lambda - y_1} \right)^{\alpha+2}, \quad (59)$$

$$I_2 := \left(\frac{y_0 - 1}{\lambda - y_0} \right)^{\alpha+2} \int_{y_0}^{\lambda} dy_1 \frac{y_1}{\lambda - y_1} \left(\frac{\lambda - y_1}{y_1 - 1} \right)^{\alpha+2}, \quad (60)$$

where α is defined by $\lambda = 1 + 2/\alpha$. The solutions of these equations diverge in $y_0 = 1$ for all initial conditions on ϕ_1, ψ_1 in $y_0 = 1$ except for $\phi_1(1) = -1/\lambda^2$, $\psi_1(1) = 0$ which precisely amounts to setting $\psi(y_0 = 1) = 0$ and $\phi(y_0 = 1) = \rho^*$ up to order $1/z^2$. We choose these initial conditions in the following.

The resolution of the equations for ϕ_1 and ψ_1 can be done in part analytically and in part numerically. First, we treat the neighborhood of y_0 to characterize exactly the (nondivergent) singularity in this point. We have calculated the solutions up to the order $(y_0 - 1)^3 \ln|y_0 - 1|$ included, which is sufficient to obtain the values of $\phi_1(1 + \epsilon), \psi_1(1 + \epsilon)$ slightly off (below or above) the singularity (with $\epsilon = \pm 0.001$ to 0.003) with a good numerical accuracy. Such an expansion amounts to a short-time expansion if one starts at $t = 0$ from the typical state where the density of full sites is ρ^* and $y = 1$. Then, we start to solve the differential equations from the value $y_0 = 1 + \epsilon$ using a Runge-Kutta-Fehlberg procedure. Note that the coefficients of the EM for ϕ_1 and ψ_1 are rather simple, but the nonvanishing second member involves, for generic values of λ , hypergeometric functions. To simplify the numerical resolution and to make it more precise,

we restricted ourselves to the case $\lambda = 1 + 2/\alpha$ with α a positive integer, where these hypergeometric functions reduce to polynomials and logarithms.

This perturbative resolution yields a parametric representation of the large deviation distribution, $\pi^*(\rho) = \pi_{\text{MF}}^*(\rho) + \pi_1^*(\rho)/z + O(1/z^2)$ with parameter y_0 . More precisely, we have

$$\begin{aligned} \rho(y_0) &:= \phi(y_0) = \phi_0(y_0) + \frac{\phi_1(y_0)}{z} + O(1/z^2), \\ \pi(y_0) &= \rho \ln y_0 - S_0(y_0) - \frac{\lambda^2}{z} S_1(y_0) + O(1/z^2), \end{aligned} \quad (61)$$

where $S_0(y_0) = \ln y_0 - (y_0 - 1)/\lambda$ and

$$\begin{aligned} S_1(y_0) &= -\frac{1}{\lambda^4} \int_1^{y_0} dy_1 \frac{y_1}{\lambda - y_1} \left(\frac{\lambda - y_1}{y_1 - 1} \right)^{\alpha+2} \\ &\quad \times \int_1^{y_1} dy_2 \frac{\lambda + 1 - y_2}{y_2 - 1} \left(\frac{y_2 - 1}{\lambda - y_2} \right)^{\alpha+2}. \end{aligned} \quad (62)$$

The resulting curves for $\pi^*(\rho)$ are presented in Fig. 2. Apart from $\pi^*(\rho^*) = 0$ given by Eqs. (53) and (54) and reached for $y_0 = 1$, another point of interest may be located analytically, namely $\pi^*(\rho = 0)$, reached for $y_0 = \lambda$. This is related to the lifetime of the metastable state, $t_{\text{vac}} \sim \exp[-N\pi^*(\rho = 0)]$. Some values are listed in Table II for integer α .

To check the accuracy of our perturbative expansion for π^* , we have performed simulations of CP on six-

TABLE II. Some analytical values for the $1/z$ expansion of $\pi(\rho=0)$, the logarithm of the probability of reaching a configuration with vanishing density in the metastable state of the CP on a regular graph of coordination number z . Analytical calculation can be performed for values of $\lambda=1+2/\alpha$ with α a positive integer only, but $\pi(\rho=0)$ can be numerically estimated to order $1/z$ for other values of λ .

| λ | $\pi(\rho=0)$ | Decimal approximation |
|-----------|---|-----------------------|
| 3 | $-\ln 3 + 2/3 + (-53/18 + \pi^2/3)/z$ | $-0.432 + 0.345/z$ |
| 2 | $-\ln 2 + 1/2 + (-107/36 + \pi^2/3)/z$ | $-0.193 + 0.318/z$ |
| 5/3 | $-\ln(5/3) + 2/5 + (-5413/1800 + \pi^2/3)/z$ | $-0.111 + 0.283/z$ |
| 3/2 | $-\ln(3/2) + 1/3 + (-1823/600 + \pi^2/3)/z$ | $-0.072 + 0.252/z$ |
| 7/5 | $-\ln(7/5) + 2/7 + (-270281/88200 + \pi^2/3)/z$ | $-0.051 + 0.225/z$ |

dimensional hypercubic lattices with periodic boundary conditions. Sizes $N=L^6$ with L ranging from 3 to 6 are large enough that the system gets trapped for a time greater than the simulation run into the metastable state. We simulated the system starting from $\rho \ll \rho^*$ or $\rho \gg \rho^*$ until it reached equilibrium. The equilibration times (expressed as the number of elementary steps) was found to correspond to continuous times [53] t_{eq} ranging from 25 to 60. Then we run again the simulation for times $t = Mt_{eq}$ with very large values of M going from $M = 2.5 \times 10^5$ for $L=6$ to $M = 5 \times 10^7$ for $L=3$, and recorded the histogram of ρ over this time interval. This gives a very good approximation of the quasistationary distribution π^* since the system was already equilibrated. Numerical results for $\pi^*(\rho)$ are presented in Fig. 5. The maximum of $\pi^*(\rho)$ vanishes in the thermodynamic limit only, and the value ρ^* at which this maximum is reached is also subject to finite-size corrections. To make the comparison easier, we have vertically and horizontally shifted the experimental curves so that they all reach zero at the same value of ρ . Once this translation was done, the numerical and theoretical curves are in very good agreement, and are easily distinguishable from the mean-field curve (Fig. 5). This shows that the curvature (unaffected by the translations) of $\pi^*(\rho)$ and, hence, the amplitude of the fluctuations in the metastable state and its lifetime, is correctly predicted by our $1/z$ calculation.

V. CONCLUSION

In this paper, we have calculated the out-of-equilibrium distribution of densities of particles in the contact process on large regular lattices with degree z using a quantum field-theoretic formulation for the evolution operator. The calculation is based on a perturbative calculation of the effective potential for the density $\phi(t)$ and an instantonic field $\psi(t)$ as function of time t . Interestingly, this instantonic field naturally emerges from the parametrization of the quantum hard bosonic (or spins- $\frac{1}{2}$) states needed to represent the sets of occupation numbers.

The finite connectivity corrections to the mean-field case ($z=\infty$) lead to the appearance of memory kernels compensating the loss of information due to the tracking with time t of global fields $\phi(t), \psi(t)$ only. Though calculations may rapidly become involved, we have been able to show the very good agreement of the predictions they give with numerical experiments on the average density of particles and,

more generally, the whole distribution of densities in the out-of-equilibrium metastable state of CP.

While the use of a quantum formalism was known to be very efficient to access universal quantities, e.g., the decay exponent of the density with time at criticality, the present study shows that nonuniversal quantities can be calculated too. We hope that this approach will turn out to be useful to the analysis of the numerous far-from-equilibrium systems encountered in physics or related fields. From this point of view, a remote but promising field of applications could be the analysis of algorithms in computer science where out-of-equilibrium dynamics over (discrete) variables abound, and metastability phenomena are present [54,55]. Hopefully our

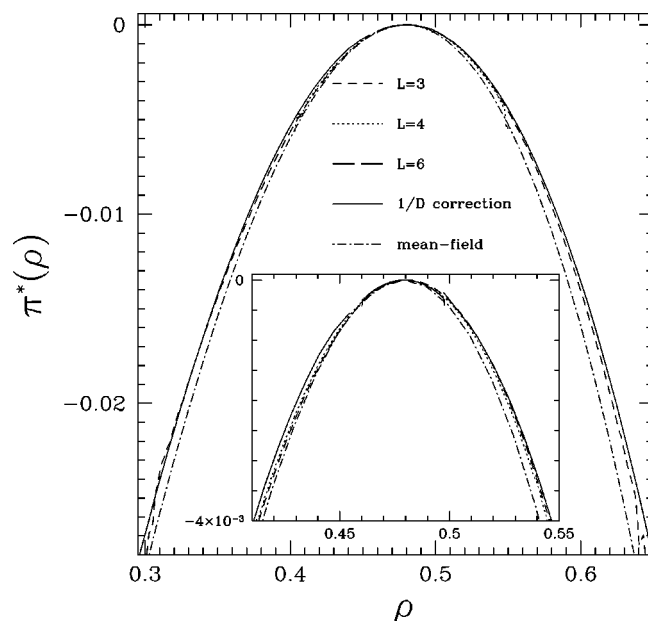


FIG. 5. Comparison, for $D=6$ and $\lambda=2$, between the $1/D$ predictions for the large deviation function $\pi^*(\rho)$ and numerical results for CP on hypercubic lattices with periodic boundary conditions of linear sizes $L=3, 4$, and 6 . All curves were horizontally and vertically translated so that their maxima have the same coordinates $\rho^*, \pi^*=0$. Due to the relatively high dimensionality of these systems, the range of values of ρ explored during the simulations is very concentrated around ρ^* unless L is small. Note that the curves for different lattice sizes, once translated, seem to depend only weakly on L . Inset: enlargement of the top region; data compare well with the $1/D$ theoretical result (continuous line), and are clearly distinct from the mean-field result (dashed-dotted line).

FIELD-THEORETIC APPROACH TO METASTABILITY . . .

PHYSICAL REVIEW E **69**, 016126 (2004)

approach will also permit to complete the average-case analysis of backtracking algorithms initiated in Refs. [56,57] through the systematic control of the non-Markovian effects ignored so far [58].

ACKNOWLEDGMENTS

We thank A. Georges and M. Sellito for useful discussions, and F. van Wijland for useful comments. The present work was partly supported by the French Ministry of Research through the ACI Jeunes Chercheurs “Algorithmes d’Optimization et Systèmes Désordonnés Quantiques.” C.D. acknowledges the hospitality of the Laboratoire de Physique Théorique in Strasbourg where part of this work was realized. We thank the ESF SPHINX network for supporting the present work.

APPENDIX: EMERGENCE OF MEMORY KERNEL WITH HIDDEN DEGREES OF FREEDOM

Consider two variables $x(t), y(t)$ obeying the Markovian evolution equations

$$\frac{dx}{dt}(t) = -x(t) + \beta y(t), \quad (\text{A1})$$

$$\frac{dy}{dt}(t) = -\alpha y(t) + x(t), \quad (\text{A2})$$

with initial conditions $x(0)=1, y(0)=0$. This system can be easily solved to give x and y as functions of time t . Assume instead we want to write an evolution equation for x only. Solving Eq. (A2), and plugging the resulting $y(t)$ in Eq. (A1), we obtain

$$\frac{dx}{dt}(t) = -x(t) + \beta \int_0^t dt' e^{-\alpha(t-t')} x(t'). \quad (\text{A3})$$

As a result of the existence of a hidden degree of freedom y , the effective equation on x is not Markovian when $\beta \neq 0$, and includes a memory kernel whose time constant is that of the y variable.

-
- [1] J. Marro and R. Dickmann, *Non-Equilibrium Phase Transitions in Lattice Models* (Cambridge University Press, Cambridge, 1999).
- [2] F.C. Alcaraz, M. Droz, M. Henkel, and V. Rittenberg, *Ann. Phys. (New York)* **230**, 250 (1994).
- [3] M. Henkel, E. Orlandini, and J. Santos, *Ann. Phys. (New York)* **259**, 163 (1997).
- [4] B. Derrida and J.L. Lebowitz, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 209 (1998).
- [5] B. Derrida, *Phys. Rep.* **301**, 65 (1998).
- [6] S. Majumdar, *Curr. Sci.* **77**, 370 (1999).
- [7] H. Hinrichsen, *Adv. Phys.* **49**, 815 (2000).
- [8] J.L. Cardy, *The Mathematical Beauty of Physics* (World Scientific, Singapore, 1996), pp. 113–125.
- [9] J. Cardy, *Field Theory and Non-Equilibrium Statistical Mechanics* (Lectures presented as part of the Troisième Cycle de la Suisse Romande, 1999), URL <http://www-thphys.physics.ox.ac.uk/users/JohnCardy/notes.ps>
- [10] T.E. Harris, *Ann. Prob.* **2**, 969 (1974).
- [11] R.H. Schonmann, *J. Stat. Phys.* **41**, 445 (1985).
- [12] M. Aizenman and J. Lebowitz, *J. Phys. A* **21**, 3801 (1988).
- [13] (a) T.M. Liggett, *Interacting Particle Systems* (Springer, Berlin, 1985); (b) *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Processes* (Springer, Berlin, 1999).
- [14] More precisely, the probability that the plateau is reached tends to 1 as $N \rightarrow \infty$ for any initial configuration with density $\epsilon > 0$.
- [15] P. Grassberger and K. Sundermeyer, *Phys. Lett.* **77B**, 220 (1978).
- [16] J.L. Cardy and R.L. Sugar, *J. Phys. A* **13**, L423 (1980).
- [17] H.-K. Janssen, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **42**, 151 (1981).
- [18] P. Grassberger, *Z. Phys. B: Condens. Matter* **47**, 365 (1982).
- [19] R. Durrett and R.H. Schonmann, *Probab. Theory Relat. Fields* **77**, 583 (1988).
- [20] A. Simonis, *J. Stat. Phys.* **83**, 1225 (1996).
- [21] B.U. Felderhof, *Rep. Math. Phys.* **1**, 215 (1971).
- [22] M. Doi, *J. Phys. A* **9**, 1465 (1976).
- [23] L.P. Kadanoff and J. Swift, *Phys. Rev.* **165**, 310 (1968).
- [24] L. Peliti, *J. Phys. (France)* **46**, 1469 (1985).
- [25] J.R. Klauder, *Ann. Phys. (New York)* **11**, 123 (1960).
- [26] (a) J.R. Klauder, *Phys. Rev. D* **19**, 2349 (1978); (b) J.R. Klauder and B.-S. Skagerstam, *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, Singapore, 1985).
- [27] Another possibility would be to follow the approach of F. van Wijland, *Phys. Rev. E* **63**, 022101 (2001).
- [28] L.S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration* (Wiley, New York, 1981).
- [29] D.S. Gaunt and J. George A. Baker, Jr., *Phys. Rev. B* **1**, 1184 (1970).
- [30] A. Georges and J. Yedidia, *J. Phys. A* **24**, 2173 (1991).
- [31] G. Biroli, *J. Phys. A* **32**, 8365 (1999).
- [32] A natural choice would have been $\langle a_i^\dagger a_i(t) \rangle = \bar{\phi}_i(t)$ and $\langle a_i(t) \rangle = \bar{\phi}_i(t) \exp[\bar{\psi}_i(t)]$. However this choice gives rise to a more complicated combinatorics in the $1/D$ expansion. $\hat{\chi}$, which appears aside $a^\dagger a$ on a different graph site in the expression of \hat{W} is, in this respect, a better “elementary” operator. Furthermore, we will see that the expectation values of the other elementary operators evaluated with this choice will be consistent.
- [33] This consistency statement holds also for other choices of Lagrange multipliers in \hat{W}' .
- [34] The same expressions are also recovered if one optimizes directly $\Pi_{0,0}$ with respect to $h_i(t)$ and $g_i(t)$.
- [35] R. Dickman and R. Vidigal, *J. Phys. A* **35**, 1147 (2002).
- [36] R.B. Griffiths, C.-Y. Weng, and J.S. Langer, *Phys. Rev.* **149**, 301 (1966).
- [37] If $\phi(t)$ is always zero, $\psi(t)$ goes to 0 in a infinite time if $\psi(0) < \ln(\lambda)$, remains constant if $\psi(0) = 0$ or $\psi(0) = \ln(\lambda)$, and goes to $+\infty$ in a finite time [all the shorter as $\psi(0)$ is large] if

- $\psi(0) > \ln(\lambda)$. All these solutions have a vanishing action π_{MF} .
- [38] The existence of the solution $\psi(t) = 0$ to the EM is true beyond mean field, and is a consequence of the fact that the evolution operator \hat{W} conserves the probability. The latter translates into $(\langle 0| + \langle 1|)\hat{W} = 0$ and, from Eq. (7), into $\tilde{W}(\vec{\phi}, \vec{\psi} = 0) = 0$ for any $\vec{\phi}$.
- [39] P.C. Martin, E.D. Siggia, and H.A. Rose, Phys. Rev. A **8**, 423 (1973).
- [40] H.-K. Janssen, Z. Phys. B **23**, 377 (1976).
- [41] C. de Dominicis, J. Phys. (Paris), Colloq. **37**, 377 (1976).
- [42] R. Bausch, H.-K. Janssen, and H. Wagner, Z. Phys. B **24**, 113 (1976).
- [43] Notice that the condition $|\psi| \ll 1$ demands that the density ϕ stays close to its equilibrium value ϕ^* , and thus T is essentially density independent and equal to $T(\phi^*)$.
- [44] The situation is in fact a bit more complex: for some diagrams, one has to compute several families of CFs (members of a family only differ by the orientations of the links). In addition to the main family where the average of the product of all link operators is taken, one has to compute families where link operators are grouped into separate averages, as if the graph were not connected, and/or families arising from the derivation with respect to $\vec{\phi}$ or $\vec{\chi}$ to obtain the ∂_λ 's in the \hat{V} operator. The combinatorial factor of the undirected diagram is the same for all families (thus the order in $1/z$ is well defined for the diagram) but the number of ways to associate times to links may differ.
- [45] J.-P. Hansen and I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, 2nd ed. (Academic Press, London, 1986).
- [46] M.M.S. Sabag and M.J. de Oliveira, Phys. Rev. E **66**, 036115 (2002).
- [47] R. Dickman, J. Stat. Phys. **55**, 997 (1989).
- [48] I. Jensen and R. Dickman, Physica A **203**, 175 (1994).
- [49] T. Tomé and M.J. de Oliveira, Phys. Rev. Lett. **86**, 5643 (2001).
- [50] H.J. Hilhorst and F. van Wijland, Phys. Rev. E **65**, 035103 (2002).
- [51] M.J. de Oliveira, Phys. Rev. E **67**, 027104 (2003).
- [52] z was restricted to smaller values in the latter case because simulations on the Cayley tree require a slightly more complex computer program to manage the locations of the particles.
- [53] R. Dickman, Phys. Rev. E **60**, R2441 (1999).
- [54] G. Semerjian and R. Monasson, Phys. Rev. E **67**, 066103 (2003).
- [55] W. Barthel, A.K. Hartmann, and M. Weigt, Phys. Rev. E **67**, 066104 (2003).
- [56] S. Cocco and R. Monasson, Phys. Rev. Lett. **86**, 1654 (2001).
- [57] L. Ein-Dor and R. Monasson, J. Phys. A **36**, 11055 (2003).
- [58] Interestingly, the instantonic field ψ was implicitly present in the annealed calculation of Refs. [56,57]; see R. Monasson, *Complex Networks* (Springer-Verlag, Berlin, 2003), for a discussion of this point.



Troisième partie

Deux modèles exactement solubles pour la statique des milieux granulaires

Résumé. Cette partie étudie dans quelle mesure la statique des milieux granulaires peut être modélisée, dans une approche thermodynamique semblable à celle d'Edwards, par des modèles exactement solubles sur réseaux bidimensionnels. Nous donnons d'abord quelques éléments de la physique des milieux granulaires secs et en particulier de leur statique (chapitre 11). Suivent une introduction relativement longue aux modèles exactement solubles (ou *intégrables*) sur réseaux bidimensionnels (chapitre 12), la construction de deux modèles exactement solubles originaux et la discussion de leurs propriétés accessibles analytiquement (chapitre 13), l'exposition et la discussion du principe des simulations Monte Carlo qui ont servi à étudier d'autres propriétés de ces modèles (chapitre 14), et une discussion des éléments de la statique des milieux granulaires que ces modèles reproduisent (chapitre 15).

Chapitre 11

Faits expérimentaux et approches théoriques des milieux granulaires secs

11.1 Généralités et observations expérimentales

POUR nous, un milieu granulaire est un milieu constitué de nombreux grains, c'est-à-dire de particules solides plus ou moins élastiques, dont la taille est notablement plus grande que celle des atomes et des molécules (supérieure à un micron environ) et dont les interactions dans le vide se réduisent essentiellement à une interaction répulsive de contact — les propriétés physiques d'un tel milieu ressemblent donc en principe à celles du sable. Nous ne considérerons pas les *métaux granulaires* qui sont des solides constitués de grains microscopiques (de tailles comprises entre quelques nanomètres et un micron environ) noyés dans une matrice isolante (de silice par exemple), ni les matériaux faits de particules suffisamment petites pour que les forces de type van der Waals jouent un rôle important (l'argile et les colloïdes, par exemple, sont constitués de « grains » nettement plus grands que les atomes, mais encore assez petits pour que les interactions (attractives) à distance entre eux en fassent des solides en phase sèche et des pâtes en phase (faiblement) hydratée (même si ce solide est plus fragile qu'un métal ou qu'un cristal). Au contraire, nous nous intéresserons aux systèmes dont des exemples connus de tous sont les solides pulvérisés (sable, sucre en poudre, sel de table, neige, *etc.*), ou plus généralement les empilements ou collections d'un grand nombre d'objets macroscopiques (*i.e.* distinguables à l'œil nu) : tas de charbon, de blé, de pâtes alimentaires, de pommes-de-terre, de gravier, de terre, de granulés de plastique devant être fondus dans un moule, anneaux de Saturne, grêlons, *etc.* De tels systèmes sont massivement présents dans l'industrie (industrie agro-alimentaire, chimique, du transport, du bâtiment-travaux publics, de l'énergie, des matières plastiques, *etc.*), dans le génie civil, dans la géologie, l'astrophysique et la météorologie [162]. L'éruption du Mont Saint-Helens au États-Unis, où un flanc du volcan s'est littéralement liquéfié, et le phénomène de liquéfaction des sols granulaires observé lors de certains tremblements de terre (par exemple dans le quartier de la Marina de San Francisco aux États-Unis), à cause duquel des immeubles entiers peuvent s'enfoncer dans le sol comme dans des sables mouvants, indiquent que les empilements granulaires sont parfois le siège de phénomènes catastrophiques qu'il peut être utile de connaître, sinon de maîtriser.

Un milieu granulaire ne relève pas directement de la physique de la matière condensée dont on a l'habitude car les interactions attractives entre grains sont, en proportion, beaucoup plus faibles que celles entre atomes et molécules, si bien que les grains ne forment ni un solide cristallin (même polycristallin), ni un solide amorphe (verre par exemple), ni un liquide. On peut faire une analogie avec les gaz quand les grains sont suffisamment éloignés les uns des autres pour que leur ensemble soit fluide et qu'une injection permanente d'énergie (cinétique) contrebalance la dissipation importante qu'on observe dans ces systèmes. Mais, en l'absence de source d'énergie cinétique, les grains relaxent rapidement vers des phases originales. Dans les milieux granulaires dits *secs*, les interactions entre grains sont uniquement des interactions de contact répulsives (avec éventuellement des frottements solides si l'on cisaille l'empilement).

En présence d'un liquide mouillant (c'est-à-dire tel que le contact entre le liquide et les grains soit thermodynamiquement favorisé), il se forme des *ponts capillaires* de liquide entre les grains voisins, et du fait de la tension superficielle du liquide ces ponts capillaires induisent une attraction effective entre grains. C'est ce mécanisme qui est responsable de la cohésion du sable humide et permet aux châteaux de sable de ne pas s'effondrer sous leur poids, alors qu'il est impossible de faire un château avec du sable sec. Remarquer que le mécanisme disparaît (faute d'interface liquide-gaz) si les grains sont complètement immergés. Par ailleurs, même en l'absence de mouillage, les grains peuvent subir une force (d'attraction ou de répulsion) à longue portée à cause des interactions électrostatiques. Ceci s'observe très facilement quand on réunit dans une boîte de plastique de petites billes d'acier (taille environ 1 mm), ou encore dans le cas de grains de polystyrène. Le phénomène s'amplifie encore si les grains sont beaucoup plus petits (voire indistinguables à l'œil nu), comme dans le cas de la farine. De plus, des grains placés dans un solvant polaire comme l'eau sont souvent chargés, et interagissent donc à distance même si leur charge est écrantée par des ions. Nous nous limiterons dans ce mémoire au cas de grains dont les interactions à distance ou les interactions de contact attractives sont assez faibles pour que leur comportement ressemble à celui du sable sec ou du gravier.

Même dans ce cas apparemment simple, des comportements très variés et parfois surprenants sont observés. Donnons-en ici un petit aperçu pour montrer en quoi les milieux granulaires peuvent être fascinants, et motivants pour le théoricien.

Tas et avalanches. Tout le monde sait que si l'on verse des grains sur un plan horizontal, les grains forment un tas (et non une goutte ou une flaque comme pour les liquides). Mais il est encore aujourd'hui très difficile de prédire l'angle de ce tas. Le critère dit de Mohr-Coulomb (ou de Coulomb-Mohr) fait une analogie entre stabilité d'un tas de grains et loi du frottement solide de Coulomb pour expliquer la similitude observée expérimentalement : au-delà d'une certaine inclinaison du plan, un solide posé sur un plan incliné se met forcément à glisser (et il peut y avoir en plus des phénomènes d'hystérésis). De même, on peut définir expérimentalement des angles limites pour un tas, qui séparent différents régimes : pas d'avalanches, puis pour une inclinaison plus grande des avalanches peuvent être déclenchées par une stimulation de la surface, mais s'arrêtent rapidement, puis des avalanches déclenchées qui ne s'arrêtent pas, enfin des avalanches qui se déclenchent spontanément. Cependant l'analogie théorique avec la loi du frottement solide est nettement insuffisante pour construire une théorie des tas granulaires [163].

Dépendance en l'histoire du tas. Une expérience spectaculaire [164] a montré que la répartition de la pression qu'un tas de grains exerce sur le plan horizontal qui lui sert de support est très différente selon que le tas a été formé par écoulement de grains hors d'une source localisée (la bouche d'un silo par exemple) ou par une pluie uniforme de grains. Dans le premier cas, la pression a un minimum au centre du tas que l'on n'observe pas dans le second cas. Plus généralement, les propriétés macroscopiques d'un tas peuvent dépendre notablement de l'histoire de ce tas, c'est-à-dire de la manière dont il a été formé et des transformations qu'il a subies (par exemple le cisaillement entre deux cylindres contrarotatifs, ou le cisaillement dû à l'écoulement). Cela peut être vu comme une conséquence de l'hystérésis et des frottements entre grains. Voir aussi [165] pour une mise en évidence des effets de l'histoire du tas sur sa réponse à une petite perturbation (périodique et répétée).

Formation d'arches. Les empilements granulaires ont tendance à former des arches lorsqu'ils sont dans un récipient, c'est-à-dire des structures qui prennent appui sur les parois du récipient et qui peuvent supporter le poids des grains situés au-dessus (ce qui crée un vide ou une zone de faible densité sous l'arche, et peut bloquer un écoulement des grains vers le bas). Ce phénomène est particulièrement présent dans les sabliers, où la vitesse d'écoulement du sable est en grande partie régie par le phénomène de formation et de rupture d'une arche près de l'étranglement du sablier dans une interaction entre l'écoulement des grains vers le bas et celui de l'air vers le haut. Dans les silos à grains il est source de problèmes si l'écoulement se bloque ; les physiciens des milieux granulaires ont coutume de prendre pour preuve de notre méconnaissance de ces

milieux les marques de coups que l'on voit parfois sur les silos [166] : le propriétaire du silo n'a souvent d'autre choix que de grimper à l'échelle et de donner un bon coup de masse au silo pour débloquer l'écoulement...

Chaînes ou réseaux de forces. De nombreux travaux expérimentaux et numériques ont mis en évidence que la répartition des contraintes dans un milieu granulaire statique est loin d'être uniforme; au contraire, certains grains sont beaucoup plus comprimés que d'autres et les grains plus comprimés que la moyenne dessinent des motifs en réseaux ou en chaînes. Il est expérimentalement possible de visualiser de telles chaînes dans un empilement à deux dimensions en utilisant la propriété de photoélasticité de certains matériaux [167, 168] (la figure 11.1 montre une telle visualisation) et, depuis peu, à trois dimensions aussi, en utilisant la tomographie à rayons X (voir [169] et ses références) ou la microscopie confocale aidée par un phénomène de fluorescence et une technique de spectroscopie [170] (voir la figure 11.3). Ces chaînes de forces sont présentes aussi bien à deux dimensions qu'à trois, et que l'empilement soit ordonné ou désordonné. Voir [171] pour quelques données des paramètres de théorie des graphes des réseaux de forces expérimentaux (par exemple la distribution des degrés des sommets du graphe des chaînes de forces). Le réseau de forces semble se construire et se modifier de manière à résister à une contrainte anisotrope [172, 168]. Les auteurs de [172] ont avancé que les réseaux de forces sont « bimodaux », c'est-à-dire composés de « grandes » forces qui supportent les contraintes et de « petites » forces qui étaient les chaînes de « grandes » forces comme les arcs-boutants; cette distinction est longtemps restée qualitative mais un critère très simple pour la rendre qualitative a été récemment proposé [173, 174] : on peut choisir comme seuil entre petites et grandes forces la force minimale telle que, si l'on retire toutes les forces entre grains d'intensité plus faible que ce seuil, le réseau de forces ne percole plus. Ce critère conduit également à définir des exposants critiques associés à cette percolation, et, comme le réseau de forces obéit à des règles bien particulières (chaque grain doit être en équilibre statique), que l'on peut voir aussi comme l'existence de quantités conservées (voir p. 254), la classe d'universalité de cette percolation n'est pas la même que celle de la percolation de liens « sans contraintes » (de même que la transition de phases du processus de contact à parité conservée, qui possède une contrainte que n'a pas le processus de contact simple, est dans une classe d'universalité différente de celle de la percolation dirigée, voir p. 132).

Distribution des forces entre grains. Des expériences (notamment à l'aide de papier carbone) [175, 176, 177, 178] et des modélisations numériques [172, 179, 180, 181] ont montré que la distribution de probabilité $P(f)$ des forces normales f entre grains dans un empilement statique présente trois caractéristiques frappantes [182] : une queue de distribution très longue, avec une décroissance exponentielle de $P(f)$ (alors que dans les solides élastiques on observe d'habitude des fluctuations gaussiennes autour de la force moyenne [183]), un maximum de $P(f)$ autour de la force moyenne, et une densité de probabilité $P(0)$ non nulle en $f = 0$.

Transition de *jamming*. La forme de la distribution $P(f)$ change d'ailleurs qualitativement quand on fait varier (entre autres) la densité d'un empilement : quand on prépare des empilements de moins en moins tassés, le maximum de $P(f)$ se déplace vers les petites forces, et en un certain point il est situé en $f = 0$ avec une tangente horizontale [184, 180, 185, 181] — voir la figure 11.2. On parle alors de transition (de phase) de *jamming* (ce terme n'est quasiment jamais traduit en français; l'idée est celle de la prise du ciment ou des confitures, quand un milieu fluide cesse subitement de s'écouler à cause de liens qui se sont établis entre ses constituants microscopiques — on pourrait donc peut-être le traduire par « transition de prise »). On sait que, dans le cas des milieux granulaires sans frottements en dimension D , cette transition a lieu quand le nombre moyen z de contacts entre grains atteint $2D$ (cette valeur résulte d'un simple comptage des équations et inconnues dans le système d'équations qui traduit un éventuel équilibre mécanique des grains, voir plus loin); des expériences récentes sur des émulsions tridimensionnelles d'huile dans l'eau ont pu mesurer z par fluorescence et confirmer cette valeur [186]. Le changement dans l'allure de $P(f)$ est en fait observé quand on fait varier d'autres paramètres que la densité des empilements (par exemple le taux de

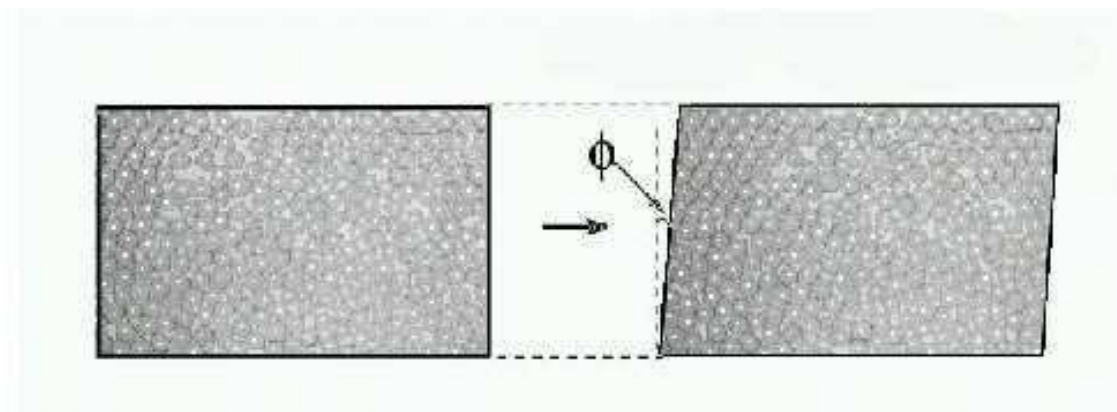
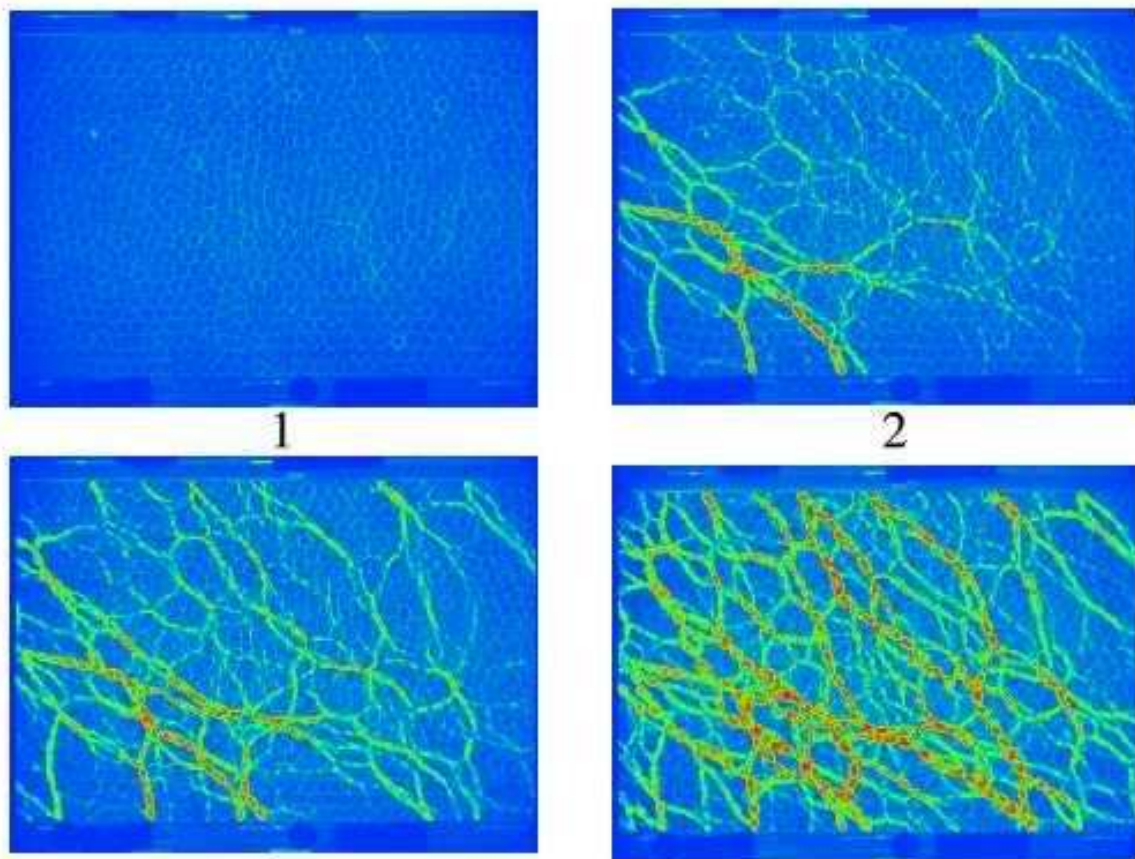
**(a)****(b)**

FIG. 11.1 – (*Figure extraite de [168]*) Visualisation des chaînes ou réseaux de force dans une expérience de photoélasticité : quand l'empilement de particules pentagonales est déformé d'un angle Φ par cisaillement (a), on observe des réseaux de forces (b) dont la structure dépend de Φ (de gauche à droite et de haut en bas, 0° , $2,4^\circ$, $3,2^\circ$ et $4,8^\circ$).

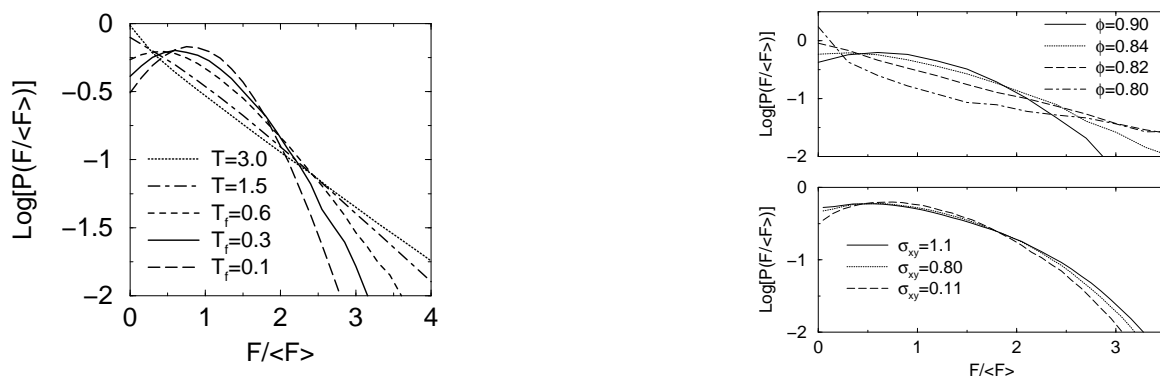


FIG. 11.2 – (Figures extraites de [180]) Changement de l’allure de la densité de probabilité $P(F)$, normalisée par la force moyenne $\langle F \rangle$, lors de la transition de *jamming*. **À gauche** : résultats d’une simulation Monte Carlo pour la distribution des intensités des forces répulsives entre particules dans un modèle bidimensionnel de liquide surfondu (disques bidisperses qui ne peuvent cristalliser avec potentiel de Lennard-Jones). Le paramètre de contrôle est la température T . Quand elle franchit la valeur T_f , la dérivée de $P(F)$, positive à « haute » température, s’annule puis devient négative. Ensuite, $P(F)$ développe un maximum qui se déplace vers les grandes valeurs de F à mesure que T diminue. À $T = T_f$, l’absence de maximum avec dérivée non nulle pour $P(F)$ fait que les forces ont de grandes fluctuations et ne se concentrent pas autour de leur valeur moyenne. **À droite** : le même phénomène pour un modèle numérique de mousse quand la densité Φ varie à taux de cisaillement σ_{xy} nul (en haut) ou quand le taux de cisaillement σ_{xy} varie (en bas).

cisaillement), et même pour d’autres systèmes, comme les liquides surfondus et les systèmes vitreux ou encore les mousses. Par exemple, la figure 11.2 montre l’influence de la température sur la distribution des forces inter-particules dans un modèle numérique de liquide surfondu et l’influence de la compaction et du cisaillement sur cette distribution dans un modèle numérique de mousses. C’est cette ubiquité du phénomène qui a conduit A. Liu et S. R. Nagel à proposer leur scénario global dans [184]. En tout cas, pour les milieux granulaires, la transition de *jamming* est le siège d’un certain nombre de divergences ou de lois d’échelle [187], notamment pour les « modes mous » (modes normaux de vibration d’énergie et de fréquence très faibles qui apparaissent quand la transition est approchée en diminuant la densité d’un empilement) [188, 189].

Compaction/décompaction. On observe facilement que, si l’on verse rapidement des grains dans un récipient puis que l’on tapote le récipient, l’empilement formé a tendance à se compacter lors du tapotement. Inversement, si l’on prépare un tas bien compact en versant quasiment grain après grain le matériau, l’empilement aura tendance à se décompacter légèrement si on le secoue verticalement. On peut observer aussi des effets similaires en exerçant un cisaillement. Des études expérimentales assez systématiques ont quantifié ces phénomènes [190, 191]. Voir aussi les études expérimentales récentes [169, 170].

Démixion ou ségrégation. Sous l’effet des vibrations, un mélange de grains de deux sortes (et de tailles différentes) a tendance à se « démélanger », c’est-à-dire que les grains des deux sortes se séparent et forment deux couches l’une au dessus de l’autre. On observe aussi ce phénomène dans des jouets décoratifs où deux sortes de sable (un blanc et un noir par exemple) sont enfermées entre deux plaques de verre ; lors de l’écoulement des sables se forment des bandes de couleur et non pas un mélange uniforme. Le problème théorique consistant à expliquer la ségrégation lors de vibrations a été appelé « problème des noix du Brésil » (*Brazil nut problem* en anglais) [192]. Ce phénomène de démixion ou ségrégation est particulièrement important dans l’industrie, et il est fréquent que le mélange de plusieurs corps solides pose

problème (dans le cas de la préparation des médicaments ou de mélanges de matériaux de construction), alors qu'il peut sembler intuitivement facile de mélanger des corps.

Dynamique granulaire. De nombreux phénomènes dynamiques intéressants se rencontrent dans les écoulements granulaires, en plus de ceux que nous venons de citer. Ajoutons pêle-mêle et rapidement la formation de motifs complexes lorsque l'on secoue une planche sur laquelle une fine couche de sable est posée : ces motifs sont dûs à l'interaction entre le sable et l'air, ou la formation de rouleaux dans la direction de l'écoulement lors d'un écoulement granulaire rapide sur un plan incliné (on peut tenter de les interpréter en faisant une analogie avec les rouleaux de convection thermique) [193]. La référence [194] met en évidence le fait qu'un écoulement stationnaire de grains à la surface d'un tas fait intervenir en fait le mouvement de grains à des profondeurs arbitraires, mais sur des échelles de durées qui augmentent exponentiellement avec la profondeur : sur des durées d'observation courtes, on a l'impression que seule une fine couche de grains près de la surface est en mouvement. Une brisure d'ergodicité a récemment été mise en évidence expérimentalement dans les mousses soumises à un cisaillement (c'est-à-dire que la moyenne sur le temps d'un système n'est pas égale à la moyenne d'ensemble sur de nombreux systèmes préparés de façon identique) [195], ce qui n'est pas sans rappeler la phénoménologie des verres (les mousses ne sont pas à proprement parler des milieux granulaires mais elles s'en rapprochent par certains aspects). Enfin, les avalanches qui se produisent en surface d'un tas de grains lorsqu'on ajoute des grains au sommet ont conduit des théoriciens à proposer l'existence du phénomène de « criticalité auto-organisée » (le tas de sable reste dans l'état critique où sa surface est à la limite de l'avalanche : il ne peut pas dépasser cet état sous peine de s'effondrer, mais les avalanches qui se produisent ne font pas décroître la pente suffisamment pour que l'ajout de quelques grains ne déclenche pas de nouvelles avalanches), pertinent aussi pour les tremblements de terre [196, 197].

Pour le théoricien, le défi est de modéliser ces comportements. Même si les grains ne forment ni un liquide, ni un solide, on peut penser leur appliquer l'approche habituelle de la physique statistique, puisqu'on a affaire à un grand nombre de particules (pas forcément identiques) : ne se comportent-elles pas comme un gaz de sphères dures mono- ou polydisperses ? En fait, la réponse est non et la physique statistique boltzmannienne de température T finie n'est pas directement utile, car l'énergie potentielle de pesanteur des grains, ou l'énergie mécanique disponible du fait des contraintes, est (en général) très grande devant les énergies mises en jeu dans les fluctuations thermiques. Un grain de sel cubique de masse volumique 2164 kg.m^{-3} et d'arête $0,1 \text{ mm}$ nécessite $0.21 \cdot 10^{-7} \text{ J}$ pour être hissé sur un voisin identique à lui et initialement à la même altitude, tandis que les fluctuations thermiques à 300 K mettent en jeu l'énergie typique $k_B T \approx 0.41 \cdot 10^{-20} \text{ J}$ — la différence est de douze ordres de grandeur. Par ailleurs, la plupart des milieux granulaires secs sont le siège d'importants phénomènes dissipatifs (frottements), si bien que le mouvement des grains s'arrête peu après l'arrêt des stimulations extérieures, et que l'on est loin de l'image physique du gaz dans l'ensemble microcanonique (l'énergie n'est pas du tout conservée) ou canonique (même si un réservoir extérieur très grand fournit l'énergie dissipée dans le système, dès lors que le système n'est pas complètement à l'arrêt, il y a en permanence un flux net d'énergie du réservoir vers le système et l'ensemble système+réservoir n'est jamais à l'équilibre). Une approche théorique originale est donc nécessaire pour appréhender les milieux granulaires. Bien entendu, cette approche devrait être de nature statistique étant donné le grand nombre de particules présentes dans un milieu granulaire typique (il n'est pas question de résoudre individuellement les équations du mouvement, de la statique ou des déformations élastiques des grains).

Les grains sont en général suffisamment gros pour qu'on puisse leur appliquer des lois physiques qui s'appliquent aux corps solides macroscopiques (si bien qu'il n'est en principe pas nécessaire d'investiguer les échelles de longueur plus petites que la taille des grains pour modéliser ou comprendre le comportement des milieux granulaires). En particulier, si les grains sont de vrais morceaux de solides (mono- ou polycristallins ou amorphes), ils ont une certaine élasticité, souvent décrite par la loi de Hertz : si la déformation de deux grains tridimensionnels

en contact est telle que la distance de recouvrement est δ (c'est la distance sur laquelle les grains s'interpénétreraient s'ils ne se déformaient pas, à déplacement identique), la force de répulsion est proportionnelle à $\delta^{3/2}$. Par ailleurs ils peuvent avoir une interaction de frottement solide (suivant la loi de Coulomb par exemple). Dans un tel cas la statique des empilements peut être sous-déterminée (il y a trop d'inconnues et pas assez d'équations) sauf à prendre en compte la déformation des grains, ou à rajouter une loi effective qui apporte l'information manquante. De nombreux travaux théoriques se sont attachés à trouver une telle loi effective; nous y reviendrons au paragraphe suivant.

On se doute bien que l'ubiquité des milieux granulaires dans notre quotidien et notre environnement et la singularité de leur comportement a stimulé de nombreux travaux théoriques, en particulier ces dix ou quinze dernières années (même si les premiers travaux significatifs, dus à Bagnold, datent de la première moitié du vingtième siècle). Cependant, les différents phénomènes décrits brièvement ci-dessus restent en partie mal compris, difficiles à prédire par la théorie et parfois sujets de controverse. Nous allons nous intéresser plus particulièrement à deux aspects expérimentaux et à leur modélisation : d'une part les chaînes de forces et plus généralement la transmission des contraintes dans les milieux granulaires statiques, d'autre part le phénomène de compaction.

11.2 Chaînes de forces et transmission des contraintes à l'équilibre statique

11.2.1 Relations effectives macroscopiques ou modèle de mécanique statistique ?

Le calcul des contraintes que supporte chaque grain dans un milieu granulaire statique est en général impossible dans le cadre de la mécanique newtonienne des solides indéformables. En effet, un calcul élémentaire montre que le nombre d'inconnues (forces et moments) est souvent plus grand que le nombre d'équations pour l'équilibre statique. Considérons un empilement à D dimensions de grains. Il met en jeu $D(D+1)/2$ inconnues (forces et moments; par exemple deux composantes de force et une composante de moment à $D = 2$ dimensions) pour chaque disque. Si l'empilement est *isostatique*, c'est-à-dire si l'on peut calculer toutes les forces par un calcul newtonien, c'est que le nombre moyen \bar{z} de voisins par grain dans l'empilement est suffisamment bas pour que le nombre total d'inconnues soit inférieur ou égal au nombre d'équations. Donnons la borne supérieure d'isostaticité z_c de \bar{z} dans quelques cas :

- Si les grains sont des disques (à deux dimensions) identiques et sans frottements (ou parfaitement lubrifiés), $z_c = 4$: les moments sont tous nuls car les forces de contact sont dirigées d'un centre à l'autre, il reste $4/2 = 2$ forces par disque à calculer pour deux équations. À trois dimensions, un raisonnement identique conduit à la valeur $z_c = D/2 = 6$ qui a été récemment vérifiée dans une expérience sur une émulsion [170] : la figure 11.3 montre la distribution du nombre de contacts z des gouttes d'huile entre elles dans le solvant (eau).
- Si les grains sont sans frottements *et asymétriques* (par exemple ovoïdaux), $z_c = D(D+1)$ [198].
- Si les grains sont au contraire tels que tous les contacts ont des composantes tangentielles de forces (ce qui implique l'existence de frottements entre grains), $z_c = D+1$ [198].

Quand $\bar{z} = z_c$, on peut calculer chaque force de contact entre disques en partant d'un bord de l'empilement et en allant vers l'autre (il faut supposer les forces connues à un bord, par exemple forces nulles à la surface d'un tas, ou forces imposées par l'extérieur pour un empilement comprimé entre deux plaques). Remarquer que l'équation $\bar{z} = z_c$ fait intervenir le nombre *moyen* de contacts \bar{z} ; quand elle est remplie, il est tout à fait possible (et même très probable) que certains grains aient cinq voisins ou plus tandis que d'autres en ont trois ou moins. Mais il reste possible de résoudre *globalement* le système d'équations qui traduit

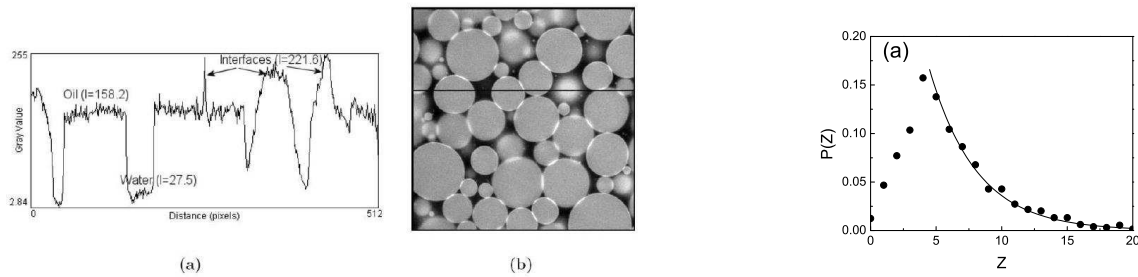


FIG. 11.3 – (Figures extraites de [170]) **À gauche :** (b) Image de l'émulsion étudiée obtenue par combinaison des images à deux gammes de longueurs d'ondes (l'une pour les gouttes d'huile, l'autre pour les interfaces). (a) Allure du niveau de gris le long de la ligne horizontale en noir sur l'image (b). **À droite :** La distribution de probabilité du nombre de contacts z entre les gouttes d'huiles de l'émulsion tridimensionnelle au seuil du *jammings* (de l'isostaticité). La moyenne de z vaut 6,08, proche de la valeur théorique de six en cas d'isostaticité. Les points indiquent les mesures et la ligne continue est la courbe d'une fonction exponentielle ajoutée à titre de comparaison.

l'équilibre statique des grains car ce système compte autant d'inconnues que d'équations. Il se trouve par ailleurs que z_c est la borne inférieure de \bar{z} pour un empilement stable : un empilement ayant un nombre moyen de contacts strictement plus faible que z_c s'effondre — on peut le comprendre en comptant encore une fois équations et inconnues : le système a dans ce cas strictement moins d'inconnues que d'équations ($\bar{z} < z_c$) donc il n'existe pas de solution au problème de *statique*, et certains grains, qui ne peuvent être bloqués par leurs voisins, se mettent en mouvement (l'empilement s'effondre ou tout au moins subit une avalanche).

Dans certains systèmes, le nombre moyen de contacts reste en fait *égal* à z_c pour toute une plage de paramètres : c'est le cas d'un empilement de disques ou de sphères polydisperses et sans frottements (parfaitement lubrifiés) soumis à une contrainte suffisamment faible [199, 200]. Cependant, si l'on s'écarte de cette situation idéale (soit en ajoutant des frottements, soit parce que les contraintes trop fortes déforment les grains de manière anisotrope et que ceux-ci nouent davantage de contacts avec leurs voisins — penser à un empilement de guimauves ou de balles de mousse que l'on comprimerait), \bar{z} devient strictement supérieur à z_c , et le nombre d'inconnues excède strictement le nombre d'équations (le système est *hyperstatique*).

Pour résoudre l'indétermination en cas d'hyperstatice, il est en principe nécessaire et suffisant d'utiliser une description plus complète des grains que celle qui les voit comme des solides indéformables : il faut, suivant ce qui fait défaut, décrire la déformation élastique des grains qu'on avait hâtivement modélisés comme des solides indéformables ou encore le détail du contact entre deux grains dans le cas où il y a frottement. Mais cette approche est bien évidemment illusoire et non pertinente quand il s'agit de connaître le comportement collectif d'un grand nombre de grains, de même que résoudre les équations du mouvement des molécules qui constituent un verre d'eau n'est pas le bon point de départ pour étudier les propriétés macroscopiques de ce corps : si l'on peut résoudre les équations pour un, deux, trois grains, on ne sait pas le faire pour un nombre grand, ni *a fortiori* pour un nombre arbitraire de grains. Pire : les molécules d'eau, même si leurs interactions peuvent être compliquées (ce ne sont pas de simples dipôles électrostatiques!), ont l'avantage d'être identiques. Les grains ont des interactions compliquées et qui de surcroît dépendent fortement du grain : la loi de déformation de Hertz (*cf.* ci-dessus) est relativement simple, mais pour des grains de formes différentes il faut prendre en considération la description détaillée de la forme de chaque grain, et il faut ajouter la description détaillée de l'état microscopique de la surface de chaque grain si l'on doit calculer des forces de frottement (la loi de Coulomb ne donne qu'une borne sur les forces macroscopiques de frottement possibles)! Peut-on alors s'inspirer des approches qui ont fait leurs preuves pour le verre d'eau?

La transmission des contraintes dans un fluide à l'équilibre statique est bien modélisée par le principe fondamental de l'hydrostatique, déjà maîtrisé au dix-septième siècle (avec les travaux de Blaise Pascal notamment). Les molécules du fluide sont suffisamment petites et mobiles pour que l'approximation qui consiste à modéliser le fluide par un milieu continu soit très bonne. La transmission des contraintes dans un solide élastique est aussi bien modélisée par une approximation de milieu continu. Pour les milieux granulaires, il en va autrement. De nombreuses tentatives d'utiliser une approximation de milieu continu ont été faites, notamment par la communauté des physiciens et ingénieurs de la mécanique des sols depuis les années 1960, pour répondre à un besoin crucial de modélisation (pour les applications), et dans l'espoir que l'approche habituelle serait une nouvelle fois couronnée de succès.

Elles se heurtent à plusieurs difficultés : d'une part, elles ne peuvent pas prendre en compte les propriétés de rupture des milieux granulaires secs dues à l'absence d'interactions attractives (le tas peut se fragmenter, se fissurer, s'effondrer, *etc.*). Ensuite, elles conduisent nécessairement à une forme elliptique de la réponse à une contrainte localisée [201, 202], alors que l'on observe dans certaines expériences [168, 203] et certains modèles [204, 205, 206] des réponses hyperboliques ou paraboliques (le modèle- q [207] prédit une réponse parabolique probablement non physique). Cette classification est inspirée de la classification des équations aux dérivées partielles du deuxième ordre linéaires : une équation en $\partial_x^2 f + \partial_y^2 f = 0$ (avec éventuellement des termes supplémentaires en f ou en ses dérivées premières) pour l'inconnue $f(x, y)$ est dite elliptique — c'est le genre d'équations que l'on rencontre dans la théorie de l'élasticité des milieux continus [208]. Une équation en $\partial_x^2 f - \partial_y^2 f = 0$ est dite hyperbolique et une équation en $\partial_x^2 f \pm \partial_y f = 0$ parabolique. Qualitativement, les solutions d'une équation hyperbolique en présence d'une source localisée en un point (par exemple une pression ponctuelle exercée sur le bord d'un milieu granulaire qui serait régi par une telle équation) se propagent le long des droites $x \pm y = 0$ qui se croisent à la source tandis que celles d'une équation elliptique ont des lignes de niveau concentriques, de centre la source. Le caractère elliptique ou hyperbolique d'un milieu granulaire — c'est-à-dire l'allure de sa réponse à une perturbation ponctuelle (surpression sur le bord d'un empilement [209] ou gonflement d'un grain dans l'intérieur [187] par exemple) : atténuation avec lignes de niveau concentriques ou au contraire répercussion à longue portée le long de deux directions privilégiées — semble dépendre fortement de l'anisotropie des contacts et rigidités des grains, de l'échelle à laquelle on considère le milieu granulaire, de la présence ou de l'absence de frottements entre grains, et du caractère cristallin ou aléatoire de l'empilement.

Par ailleurs, il est clair que les approches de milieu continu ne sont pas valables à l'échelle d'un ou de quelques grains, et donc elles utilisent toujours un procédé de moyenne sur une certaine taille mésoscopique du système (*coarse graining* en anglais), et posent quasiment pour principe l'existence d'une longueur de transition entre régimes micro- et macroscopique (*cross-over* en anglais) [202]. Dans les cas où une approche de ce type est valable macroscopiquement, il serait très utile et satisfaisant pour l'esprit d'avoir une évaluation quantitative de cette longueur typique qui sépare les deux régimes — or, à ce jour, seuls des résultats numériques sont disponibles (voir [210, 211] par exemple pour une évaluation à environ dix tailles de grains du diamètre de l'*élément de volume représentatif*, mésoscopique, sur lequel on peut fonder une approche effective pour des lois macroscopiques).

La démarche en quelque sorte inverse consiste à formuler un modèle microscopique et à essayer de trouver ses propriétés à grande échelle, comme on le fait habituellement en mécanique statistique. Au lieu de postuler l'existence de relations effectives, phénoménologiques, valables pour des « paquets » de grains de taille assez mal maîtrisée, comme le font les démarches inspirées de la théorie de l'élasticité, mais qui ont l'avantage d'être simples et parfois suffisantes pour les applications, on remplace les grains par des éléments au comportement caricatural, suffisamment simple pour qu'on puisse déduire le comportement d'une assemblée d'un nombre très grands de ces éléments (c'est-à-dire à la « limite thermodynamique »). L'espoir est que la simplification qui a présidé à l'élaboration du modèle a retenu les caractéristiques vraiment

importantes (ordre ou désordre de l'empilement, dimension de l'espace, anisotropie, nature des degrés de liberté, *etc.*), et que les détails microscopiques qu'il faudrait ajouter à ces caractéristiques pour retrouver la description physique d'un vrai grain (par exemple la loi de déformation de ce grain ou le détail de sa forme) n'ont plus d'influence à la limite thermodynamique. On sait que cette approche, mal justifiée pendant longtemps, a été de nombreuses fois couronnée de succès, et que la théorie du groupe de renormalisation apparue en 1971 permet de lui donner des éléments de justification. Quand ce type d'approche fonctionne, on peut en attendre des prédictions quantitatives pour des quantités universelles (des exposants critiques par exemple [173]) et semi-quantitatives pour les autres quantités. Par exemple, on pourrait savoir si les corrélations décroissent algébriquement ou exponentiellement et, dans ce dernier cas, quel est l'ordre de grandeur de la longueur de corrélation en diamètres de grains. On peut aussi essayer de prédire à partir des propriétés des grains (et pas seulement mesurer) les quantités qui interviennent dans une théorie macroscopiques effective. Cependant, les modèles microscopiques qui retiennent les propriétés physiques des grains pertinentes (*relevant* en anglais — c'est-à-dire les propriétés qui ont une influence même à la limite thermodynamique) et qui sont cependant exploitables analytiquement, sont plutôt rares. On peut toujours utiliser des approches numériques même pour les modèles relativement complexes, mais l'on perd alors en pouvoir prédictif et surtout les effets de taille finie peuvent être un obstacle (ou un piège) redoutable. C'est pourquoi nous nous sommes efforcés de définir puis d'étudier des modèles de mécanique statique qui soient intégrables, donc en partie analytiquement solubles — nous y reviendrons au chapitre 13.

Les modèles de mécanique statistique pour les milieux granulaires statiques (c'est-à-dire les tentatives de modélisation qui suivent les principes que nous venons d'énoncer) sont relativement nombreux, et nous n'allons pas pouvoir en dresser une liste exhaustive. Néanmoins, précisons clairement que les modèles que nous présentons au chapitre 13 sont à notre connaissance originaux, au moins au sens où ils sont intégrables tout en préservant le caractère vectoriel de l'équilibre statique des grains. Nous allons dans le reste de cette section discuter brièvement quelques approches qui nous ont paru particulièrement intéressantes et ont servi d'inspiration à ces modèles.

11.2.2 Le modèle q et ses perfectionnements

L'un des premiers modèles de mécanique statistique introduits pour étudier la transmission des contraintes dans les milieux granulaires est le modèle q (*q-model* en anglais) [207]. On suppose que les grains sont des billes identiques qui forment un arrangement régulier : réseau carré (à liens à 45 degrés de la verticale) à deux dimensions ou hexagonal compact ou cubique face centré à trois dimensions. Notons W_i la composante verticale (comptée positivement) de la somme des forces que la bille i subit de la part des billes qui sont au-dessus d'elle (deux billes à deux dimensions, trois à trois dimensions). Le modèle stipule que la bille i transmet le scalaire W_i (augmenté de son propre poids mg) aux billes situées au-dessous d'elle et en contact avec elle : chaque voisin (indiqué par la direction α relative à i) reçoit le scalaire $q_{i,\alpha}(W_i + mg)$, la somme des fractions $q_{i,\alpha}$ reçues par les voisins α égalant un pour tout i . Ces fractions sont choisies au hasard selon une certaine distribution de q . Suivant la discussion de J. H. Snoeijer [212], nous appellerons W le *poids* et non la *force*. En effet, *poids* porté par chaque grain et *force* entre grains ont des comportements physiques (notamment des distributions, mais aussi des comportements au bord) différents, même dans un modèle à conservation vectorielle ; la distribution des forces est plus robuste que celle des poids, mais les expériences de type « papier carbone » (*cf.* plus haut) accèdent uniquement à celle des poids, et seulement au bord d'un empilement [213, 214]. De plus, il faut garder à l'esprit que le modèle q est un modèle scalaire où seule la composante verticale des forces entre grains suit la loi de conservation imposée par l'équilibre statique : les composantes horizontales peuvent être quelconques. Un avantage de ce modèle est que, pour un certain nombre de distributions de q [207, 215], dont la distribution uniforme, un calcul de type champ moyen donne le résultat exact pour la

distribution stationnaire des poids W reçus par chaque grain, c'est-à-dire la distribution loin des bords, après transmission du poids W à travers de nombreuses couches de grains (on peut montrer que cette distribution est unique). Et, même quand le calcul de champ moyen n'est pas exact, il donne une bonne approximation du résultat [212]. On peut aussi étudier en détail la convergence de la distribution de W vers la distribution stationnaire, et montrer que les corrélations décroissent algébriquement (avec un exposant qui dépend de la dimension de l'espace et de la présence du *terme d'injection* mg dû au poids des particules) [216].

À l'actif de ce modèle simple, on peut mettre la prédiction que la distribution des poids a une queue exponentielle comme celle que l'on observe dans les expériences pour la distribution des forces (cf. ci-dessus). Néanmoins, il prévoit des comportements qui ne sont pas observés expérimentalement, notamment une probabilité nulle que le poids reçu par un grain soit nul (alors que la distribution des forces a une densité de probabilité non nulle en zéro), et une réponse à une force localisée à la surface de l'empilement de forme parabolique (ou diffusive), et non hyperbolique (comme on l'observe expérimentalement sur des longueurs courtes) ou elliptique (comme on l'attend à longue portée). La réponse parabolique est probablement une conséquence du non-respect de la règle d'équilibre des composantes horizontales des forces [217], tandis que l'absence de poids nuls est due à l'impossibilité, dans ce modèle, du phénomène de formation d'arches : un grain a toujours des contacts avec ses voisins, alors qu'en pratique certains contacts sont absents. De plus, l'absence de conservation vectorielle des forces empêche l'émergence de chaînes ou réseaux de forces dans l'empilement [163].

Un certain nombre de tentatives ont cherché à corriger les défauts du modèle q , notamment en tenant compte du caractère vectoriel de la condition d'équilibre statique. Le travail [218], qui retient le principe d'une propagation de ligne à ligne comme dans le modèle q mais avec une quantité vectorielle, trouve des résultats en désaccord avec l'expérience et des considérations de symétrie, et note que la distribution des composantes horizontales de forces est fortement dépendantes des détails microscopiques du modèle (alors que la distribution verticale est robuste, ce qui contribue au succès du modèle q). Le « modèle α » [219] ajoute la condition d'équilibre des moments à celle d'équilibre des forces et prédit (numériquement) l'existence d'arches et de chaînes de forces ; il permet une discussion de critère de Mohr-Coulomb. La figure 11.4 donne une idée de la définition de ce modèle. Le modèle (également étudié numériquement) de [163] réussit lui aussi à retrouver des chaînes de forces et la formation d'arches et à discuter du critère de Coulomb-Mohr, et ce dans une situation où les grains sont rangés sur un réseau régulier, mais au prix d'une certaine complication qui rend une approche analytique très difficile : l'empilement est construit en forme de tas avec des bords latéraux libres (et non une géométrie rectangulaire comme dans le modèle q), certains contacts entre grains peuvent être ouverts, et le tirage au sort d'une configuration de forces qui respecte l'équilibre statique de chaque grain est fait par essais et erreurs (quand une force attractive entre grains est trouvée, on change l'état (ouvert ou fermé) des contacts de ce grain et l'on relance le calcul). Une étude numérique similaire [220] prend comme point de départ les lois du frottement de Coulomb ; une technique numérique élaborée [221] permet de circonvenir le ralentissement des calculs dus aux nombreux essais et erreurs, c'est-à-dire aux réarrangements des contacts. Notons d'ailleurs que les réarrangements (même infinitésimaux) des contacts, s'ils sont possibles aussi lors du changement des contraintes globales auxquelles un empilement est soumis, et pas seulement lors de sa construction, peuvent expliquer la nature elliptique de la réponse à une force extérieure (comme pour les solides élastiques), et ce même si les grains eux mêmes sont infiniment rigides [200].

11.2.3 Des modèles directs pour les chaînes de forces

Une autre approche de la statique des milieux granulaires consiste à ne pas prendre les grains comme point de départ, mais plutôt les forces ou les chaînes de forces. Citons brièvement deux familles d'approches.

La première, due à P. Claudin *et al.* [217, 222, 204, 205], voit les forces comme des rayons

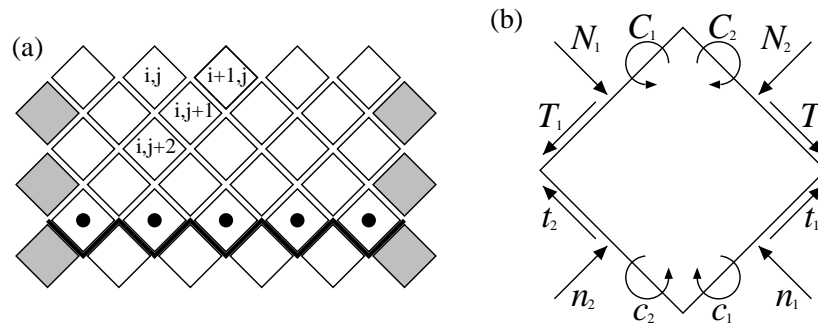


FIG. 11.4 – (Figure extraite de [219]) La construction du « modèle α », très voisine de celle du modèle- q à deux dimensions. (a) Le modèle est défini sur un réseau carré, et l'on calcule les forces et moments subis par une couche de « grains » (cellules ou carrés du réseau) itérativement en fonction des forces et moments subis par les couches inférieures. Les grains marqués par un point forment une couche, et ils reçoivent « leurs » forces et moments par leurs côtés marqués en traits gras. Les carrés colorés constituent le bord du réseau (les conditions aux limites sont périodiques gauche-droite). Le réseau est géométriquement régulier, « cependant l'hypothèse centrale du modèle α est que le hasard géométrique de la position des grains peut être remplacé par le hasard dans le choix de la solution [des équations d'équilibre statique] pour chaque cellule » [219]. (b) Les variables définies pour chaque carré du réseau : composantes normales N_1 , N_2 , n_1 et n_2 et tangentielles T_1 , T_2 , t_1 et t_2 des forces de contact entre grains et couples C_1 , C_2 , c_1 et c_2 .

qui se propagent, et peuvent subir des diffusions ou fusionner. Le modèle prend la forme d'une équation d'onde [217] ou d'une équation de Boltzmann pour ces chaînes [204, 205], indépendamment de l'existence de grains. Dans le deuxième cas, les directions que peuvent prendre les chaînes sont restreintes à un ensemble fini par simplicité. Mais cela correspond aussi au cas d'un empilement régulier à deux dimensions (les chaînes peuvent avoir trois directions). Une conséquence importante des hypothèses (implicites ou explicites) de ces approches est la réponse hyperbolique à une force localisée au bord de l'empilement, et loin du point de stimulation, ce qui comme on l'a vu est contradictoire avec les théories de type « élasticité » [202]. La comparaison avec les expériences peut se révéler délicate si la longueur au delà de laquelle se manifeste l'hyperbolicité est très grande devant la taille typique des dispositifs expérimentaux, et si la géométrie particulière (empilement localement ordonné à cause du bord plan) de l'empilement provoque une bifurcation locale, au voisinage du point de stimulation, des chaînes de forces, ce qui peut être pris à tort pour une réponse hyperbolique (avec un angle du cône de lumière incorrect) [204].

La deuxième, due à R. Blumenfeld *et al.*, est fondée sur l'observation rigoureuse [198] que l'on peut décrire l'état d'un empilement statique à l'aide de *boucles de forces* (que nous ne définissons pas ici) aussi bien qu'avec des forces entre grains. Dans le cas d'un empilement isostatique, où le caractère aléatoire du réseau de forces provient uniquement du placement des grains et de leur forme, il est possible de construire un modèle pour les propriétés macroscopiques des réseaux de forces à partir de la description microscopique rigoureuse en termes de *boucles de forces* [223]. Le modèle qui en résulte, bien qu'il ressemble aux modèles issus de la théorie de l'élasticité, prédit l'existence de réseaux de forces (donc de fluctuations grandes et non gaussiennes comme dans les solides élastiques). Il prédit lui aussi une réponse hyperbolique à grande distance d'une contrainte extérieure localisée. Pour réconcilier cette caractéristique particulière des empilements isostatiques avec la réponse elliptique attendue pour des empilements avec frottements et/ou désordre important, l'auteur spécule qu'un empilement non isostatique est un mélange de deux phases, l'une isostatique et l'autre elliptique.

11.3 L'approche « thermodynamique » d'Edwards

Cette approche des milieux granulaires peut être vue comme une tentative de répondre aux questions du genre : quelle est la hauteur de l'empilement formé par du sable qu'on jette dans un bocal ? Quelles sont alors les valeurs moyennes des différentes observables que l'on peut définir pour l'empilement ? La réponse proposée par Sam F. Edwards *et al.* [224, 225] est très simple : ils postulent qu'il suffit de faire la moyenne des observables sur toutes les configurations des grains à l'équilibre statique, avec une distribution *uniforme*. (Ces configurations sont dites aussi *configurations bloquées* puisque chaque grain ne peut y bouger). Dans le reste de ce mémoire, nous appellerons cette approche « approche d'Edwards » par souci de concision et suivant l'usage.

Formellement, cette approche permet de définir une entropie pour les empilements, à savoir le logarithme du nombre de configurations à l'équilibre statique. Cette entropie S peut être vue comme une fonction $S(V)$ du volume, $S(E)$ de l'énergie potentielle de pesanteur, *etc.* si l'on compte les configurations en les groupant par configurations de même volume, de même énergie potentielle de pesanteur, *etc.* On peut définir les grandeurs intensives conjuguées des grandeurs selon lesquelles on regroupe les configurations, notamment la « compactivité » χ par $\chi^{-1} = \partial_V S(V)$ et la « température » (dite aussi température granulaire) T par $T^{-1} = \partial_E S(E)$.

Qu'après chaque tapotement la configuration des grains soit à l'équilibre statique, personne n'en disconvient (les phénomènes dissipatifs annulent très rapidement l'énergie cinétique que les grains ont acquise lors de leur chute dans le récipient, et les fluctuations thermiques sont quasiment nulles comme nous l'avons vu, si bien que les grains sont individuellement à l'équilibre statique dans l'empilement). Donc si l'on répète le processus de construction de l'empilement (*i.e.* si l'on ressort les grains du récipient et qu'on les y rejette), le matériau explore des configurations parmi toutes les configurations à l'équilibre statique qu'il pourrait réaliser (étant donné l'ensemble des grains et la forme du récipient).

Mais que la distribution des configurations qui résulte de ce processus répété soit la distribution uniforme n'a rien d'évident. F. Lechenault *et al.* font d'ailleurs remarquer [226] qu'il n'est pas besoin de supposer que la distribution est uniforme pour définir une compactivité (par ailleurs, ils donnent des résultats de mesure pour cette compactivité). Sam F. Edwards et ses collaborateurs font bien sûr une analogie avec la mécanique statistique boltzmannienne, où l'on postule qu'un système thermodynamique isolé (et dont l'énergie E se conserve donc) explore toutes les configurations d'énergie E accessibles avec une distribution uniforme. Dans le cas de la thermodynamique, ce postulat est une conséquence du postulat de l'ergodicité et du théorème de Liouville ; l'ergodicité d'un système thermodynamique n'est pas facile à établir rigoureusement (cela a été fait dans le cas particulier d'un gaz de sphères dures par I. Sinai, voir par exemple [227] et les références dans cet ouvrage). Par ailleurs, l'approche de Boltzmann a été validée par plus de cent ans d'études expérimentales, numériques et analytiques. Ce n'est pas le cas de l'approche d'Edwards : l'ergodicité du processus de formation des empilements n'est pas démontrée, on ne peut pas la relier à l'ergodicité de la mécanique statistique habituelle, et les tests expérimentaux ne sont pas (encore ?) légion.

Il se trouve pourtant qu'un certain nombre d'études, surtout numériques, viennent conforter la démarche d'Edwards, justifiant l'hypothèse d'uniformité de la distribution par ses conséquences. Avant de citer quelques unes de ces études, notons que cette démarche est très générale et peut être postulée pour la prédiction de nombreuses quantités macroscopiques des milieux granulaires statiques : quelle est la distribution des forces de contact entre grains ? La réponse d'un empilement à une force extérieure localisée ? *etc.* À chaque fois, on peut tenter de répondre : « C'est la distribution / la réponse à une perturbation / *etc.* données par la moyenne sur les configurations bloquées ». Dans le cas où l'on suppose la géométrie de l'empilement fixée (par exemple un empilement régulier), il faut interpréter « les configurations bloquées » comme « les configurations de forces qui satisfont aux lois de l'équilibre statique de chaque grain » (ces forces étant une manifestation macroscopique de déplacement infinitésimaux des grains [200]). Remarquons aussi que si les configurations bloquées peuvent être regroupées

par familles qui partagent une certaine valeur d'une observable (par exemple la hauteur de l'empilement dans le bocal), la valeur de cette observable prédite par l'approche d'Edwards est celle qui maximise l'entropie, c'est-à-dire celle dont la famille de configurations bloquées est la plus nombreuse.

Un premier jeu de tests de l'approche d'Edwards a concerné des modèles développés initialement pour modéliser les verres de spins ou les verres structuraux, comme le modèle de Sherrington et Kirkpatrick [228, 229], des chaînes de spins d'Ising unidimensionnelles avec différentes cinétiques contraintes [230, 231], le modèle de Kob-Andersen (un autre modèle à contrainte cinétique), le modèle Tetris et le modèle d'Ising en champ aléatoire [232], une variante du modèle de Fredrickson et Andersen (modèle à contraintes cinétiques) ou encore un modèle de spins sur des graphes aléatoires dilués [233]. Ces modèles ne sont pas à proprement parler des modèles de milieux granulaires (sauf le modèle Tetris) mais ils concernent des objets physiques où des phénomènes pertinents sont observés (brisure d'ergodicité, *jamming*, percolation, *etc.*).

En particulier, il est assez naturel de relier les expériences de tapotements de milieux granulaires et celles de refroidissement de modèles de verres [234, 228, 230, 229]. Une *trempe* est un passage très rapide d'une température quasi infinie, c'est-à-dire d'un état de désordre maximal, à une température nulle, et correspond pour un modèle de verre à une cinétique où l'énergie ne peut que diminuer. Comme l'énergie est bornée inférieurement, le système finit par aboutir à une configuration qui est un minimum local d'énergie, c'est-à-dire que l'énergie ne peut qu'augmenter au sens large si l'on change un degré de liberté élémentaire. Pour un milieu granulaire, ceci est très analogue à la chute très rapide dans un récipient des grains initialement en nuage désordonné. Ensuite, les tapotements que l'on peut faire subir à un empilement (avec une certaine amplitude) peuvent correspondre au processus suivant : on fait évoluer le système un court instant avec une cinétique de température élevée, jusqu'à ce que son énergie ait augmenté d'une certaine quantité (analogue de l'amplitude du tapotement du milieu granulaire), puis on laisse l'énergie rediminuer lors d'une cinétique de température nulle, jusqu'à ce qu'un nouveau minimum local soit atteint (les grains retombent). Le paysage d'énergie d'un modèle de verre est en général très complexe du fait de la frustration (toutes les contraintes, par exemple alignement ou antialignement de deux spins suivant leur énergie d'interaction, ne peuvent être satisfaites en même temps), si bien que les configurations atteintes à l'issue de ces procédés sont en grand nombre (souvent extensif), et que l'énergie moyenne atteinte à l'issue de ces procédés est difficile à prévoir en fonction de l'amplitude des tapotements : des tapotements plus amples permettent de franchir des barrières de potentiel plus grandes entre un minimum local d'énergie de départ et un minimum local plus bas, mais en même temps ces tapotements plus amples risquent de déstabiliser un minimum particulièrement bas qui aurait été atteint par le système, où il serait resté bloqué malgré de petits tapotements. De même, dans un modèle d'empilements, le calcul des états stationnaires atteints lors d'un processus de tapotements répétés est *a priori* difficile.

Dans les tests inspirés par les modèles de verres que nous avons mentionnés ci-dessus, l'approche d'Edwards est tantôt validée, tantôt infirmée, suivant le modèle et le mécanisme censé mimer les tapotements du milieu granulaire (mais il est vrai que les confirmations reposent essentiellement sur des simulations numériques dont il est souvent difficile d'extraire des résultats de grande déviation, tandis qu'il existe des cas [231] où l'hypothèse d'Edwards peut être réfuté avec certitude sur la foi de calculs analytiques). Les auteurs de [232] donnent un critère de validité de cette approche : la *chaoticité* du système. L'approximation (que l'on peut qualifier d'ergodique) d'Edwards serait valable, ou tout au moins serait une bonne approximation, quand la cinétique est chaotique au sens où deux configurations initialement proches évoluent de façon divergente (quand, au contraire, elles conservent assez longtemps une certaine ressemblance, l'approche d'Edwards échoue).

Par la suite, des tests (ou des calculs) concernant des systèmes ressemblant davantage à de vrais milieux granulaires ont été proposés. Dans le cas d'empilements ordonnés tout d'abord, une première tentative a été faite par J. H. Snoeijer *et al.* [235, 236], avec notamment le calcul

de la distribution $P(f)$ des forces entre grains dont le résultat est réaliste. Il s'agit ici de la version concernant les configurations de forces de l'hypothèse de distribution uniforme, puisque l'empilement est fixé. La même géométrie (un empilement plan hexagonal de disques rigides sans frottements) [209, 237] prédit une réponse particulière à une force localisée : d'abord deux pics dans la direction du réseau, puis un seul pic à grande distance, avec une influence de l'anisotropie, ce qui rappelle les résultats de [202]. Toujours avec la même géométrie et un nombre de coordination $z = z_c = 4$ qui rend l'empilement isostatique, cette approche prédit une distribution de forces entre grains qui coïncide au moins qualitativement avec celles que l'on observe dans les expériences et les simulations numériques [238, 182]. Et le travail [239] utilise l'approche d'Edwards pour prédire la queue de distribution des forces entre grains, et trouve que cette queue peut décroître plus vite qu'une exponentielle (contrairement à ce qui est souvent rapporté dans les expériences) dans les cas isotropes, la décroissance exponentielle étant retrouvée à la limite d'une anisotropie infinie.

Enfin, en ce qui concerne des empilements non ordonnés, des tests numériques étudiant plus précisément la notion de température granulaire pour des sphères dures cisillées [240] et pour un modèle du type « Tetris » [241] rapportent un succès de l'hypothèse d'Edwards. En revanche, une étude numérique des empilements bidimensionnels de dix disques bidisperses (cinq grands, cinq petits) [242, 243] montre que, pour de si petits systèmes, la probabilité des différents n'est pas du tout uniforme, les empilements compacts étant exponentiellement plus probables que les empilements « aérés » — il faudrait donc être capable de prédire quels empilements sont les plus probables, car prendre la moyenne uniforme sur *tous* les empilements pourrait conduire, au moins dans ce cas, à des résultats faux. Par ailleurs, de premières tentatives pour évaluer l'entropie des empilements, selon ce qui a été proposé dès le départ par S. Edwards *et al.* [224], ont été menées, sur un système d'hexagones mono- et bidisperses sur un réseau triangulaire [244], et pour un empilement plan de disques [245] suivant une approche géométrique inspirée de [198]. Une première tentative de mesure expérimentale de l'entropie a été faite très récemment par fluorescence sur un « empilement » de gouttes d'huile dans une émulsion [186]. Notre contribution s'inscrit en partie dans ce cadre. Les auteurs de [229] estimaient que « le problème du calcul de [l'entropie en fonction du volume] dans un vrai système semble horrible », mais nous aimerions montrer que, dans la lignée des travaux cités ci-dessus, on peut se rapprocher de cet objectif.

Chapitre 12

Éléments d'introduction aux techniques de résolution de modèles intégrables sur réseaux bidimensionnels

Ce chapitre vise à donner, au lecteur non spécialiste, une introduction aux modèles intégrables sur réseaux bidimensionnels. Cette introduction est relativement longue étant donné la richesse physique et mathématique de ces modèles, la complexité technique qu'ils peuvent engendrer, et le sentiment que nous avons eu qu'ils ne sont que peu abordés dans la formation de beaucoup de physiciens. Mais cette longueur ne doit surtout pas masquer la modestie qui prévaut ici ; en effet, les modèles exactement solubles ont fait l'objet d'études nombreuses, poussées et parfois très techniques depuis le dix-neuvième siècle et il n'est pas question pour nous de donner une vue d'ensemble du sujet — encore moins un manuel technique. Nous faisons donc un exposé très partiel, qui prépare le terrain aux calculs et raisonnements du chapitre suivant, et selon un point de vue personnel (en particulier, la distinction entre modèles de particules L et R « denses » et dilués, ainsi que la reformulation du modèle à six vertex comme modèle « dense », nous est propre). Plus précisément, notre motivation est d'abord de donner quelques exemples pour resituer les modèles que nous avons étudiés. En particulier, certains aspects ou phénomènes que nous avons rencontrés dans notre étude, sans toujours bien les comprendre ou tout au moins sans pouvoir les étayer par des démonstrations rigoureuses, se retrouvent dans les autres modèles intégrables (où parfois ils ont fait l'objet de démonstrations). Cette généralité, si elle ne vaut pas une preuve mathématique, est toutefois rassurante pour le lecteur face à certaines hypothèses plus ou moins naturelles, comme elle l'a été pour nous-mêmes quand nous menions les calculs. Par ailleurs, certains des modèles évoqués ici ont servi de source d'inspiration pour ceux que nous avons étudiés. Enfin, nous aimerions donner une vision peu formalisée mais intuitive, en quelque sorte physique, des modèles intégrables sur réseaux à deux dimensions, en espérant qu'elle soit utile à d'autres et contribue à populariser ce sujet qui nous semble passionnant. Nous nous placerons dans le contexte de la mécanique statistique classique uniquement, bien que ces modèles soient aussi très utiles en mécanique quantique ou en théorie des champs.

12.1 Mise en situation

12.1.1 Définition, et commentaires sur la notion d'intégrabilité

Pour nous, un modèle exactement soluble (ou *intégrable*) sera un modèle où toutes les quantités intéressantes peuvent être calculées en résolvant (analytiquement ou numériquement) un nombre d'équations borné par une fonction linéaire du nombre de degrés de liberté — en physique statistique, il s'agit surtout du calcul exact de la fonction de partition (les autres observables s'en déduisent). Nous nous intéresserons ici uniquement aux modèles dont les degrés de liberté sont discrets. La propriété d'intégrabilité est une propriété très remarquable,

comme nous allons essayer de le suggérer à travers quelques exemples, car, en général, le calcul des propriétés d'un modèle nécessite un nombre d'« opérations élémentaires » qui croît exponentiellement avec le nombre de degrés de liberté. La dénomination « exactement soluble » vient du fait que, parfois, les calculs peuvent être poussés assez loin pour donner une expression analytique exacte (et non une approximation) et « fermée » des quantités intéressantes, c'est-à-dire une expression comme fonction des seuls paramètres du modèle — étant entendu que cette expression peut faire intervenir des intégrations ou extractions de racines d'équations algébriques qui ne se réduisent pas aux fonctions usuelles. Exact ne signifie toutefois pas rigoureux : la démonstration mathématique de toutes les étapes des calculs est quasiment toujours fastidieuse, sinon difficile (Yang et Yang [246, 247, 248] et Lieb [249, 250, 251], notamment, ont fait cet effort dans des cas particuliers historiquement importants). Mais les comparaisons avec les résultats numériques sont très probantes, et l'on peut souvent arguer de la similitude des phénomènes observés pour raccrocher (non rigoureusement) un calcul aux cas étudiés rigoureusement. Par ailleurs, même dans les cas où l'on ne veut ou ne peut mener à bien un calcul analytique complet, des résultats numériques de précision élevée pour des systèmes de tailles relativement grandes (disons de dimensions linéaires de l'ordre de quelques milliers) peuvent être obtenus en des temps raisonnables.

Notons tout de suite que cette définition n'est pas sans rappeler la distinction entre problèmes « faciles » et « difficiles » en informatique théorique, que nous avons vue dans la première partie de ce mémoire : on pourrait dire que le problème 2-SAT aléatoire est exactement soluble au sens où il existe un algorithme qui permet de le résoudre en temps linéaire dans tous les cas, alors que, en l'état actuel de nos croyances, pour le problème $2+p$ -SAT aléatoire avec $p > 0$ tout algorithme rencontre des instances qu'il ne sait pas traiter en un temps non polynomial. Cette ressemblance abstraite devient plus concrète quand on s'intéresse aux algorithmes de calcul de l'état fondamental exact d'un échantillon de verre de spins : on sait que trouver l'énergie de l'état fondamental d'un échantillon de verre de spins d'Ising à 3 dimensions (étant donné les énergies d'interactions entre proches voisins) est un problème NP-complet, tandis que, pour le modèle d'Ising ferromagnétique à 2 dimensions – exactement soluble – c'est chose facile. Et il existe probablement des distributions aléatoires des énergies d'interaction de spins d'Ising à 3 dimensions telles que, pour la plupart des échantillons, l'énergie du fondamental peut être trouvée en pratique en temps linéaire (par exemple si cette énergie coïncide avec une borne inférieure simple et que trouver une configuration des spins permet d'atteindre cette borne prend un temps linéaire) tandis que, pour quelques rares échantillons, il faut un temps exponentiel : ceci permet de rapprocher le phénomène d'intégrabilité abordé ici de la transition cinétique pour la complexité calculatoire *moyenne* vue dans la première partie de ce mémoire. En tout cas, dans les deux contextes, complexité algorithmique et modèles physiques, la situation remarquable est celle où l'exploitation d'une structure particulière de l'espace des phases (ou de l'espace des solutions) permet d'arriver au résultat en un temps polynomial (voire linéaire) là où l'exploration systématique de cet espace prendrait un temps exponentiel.

Sur un réseau à 2 dimensions de largeur L , la technique bien connue (et rappelée brièvement au paragraphe 12.2.2) de la matrice de transfert permet de calculer (exactement) la fonction de partition, mais en général au prix d'un nombre exponentiel en L d'opérations « élémentaires ». Par exemple, la matrice de transfert d'une ligne à l'autre d'un modèle de spins d'Ising sur réseau carré est de taille $2^L \times 2^L$ donc le calcul de sa trace (fonction de partition pour un réseau de hauteur $H = 1$) ou sa diagonalisation (la valeur propre de plus grand module donne l'équivalent asymptotique de la fonction de partition pour une hauteur $H \rightarrow +\infty$) requiert en général au moins 2^L opérations. Cependant, pour des interactions bien précises entre spins d'Ising, on peut trouver la valeur propre de plus grand module de la matrice de transfert en résolvant seulement L équations (non linéaires). C'est le cas par exemple pour le modèle d'Ising sur réseau carré en champ nul¹. D'une manière générale, on peut dire

¹Noter que la technique des pfaffiens, très intéressante mais pas expliquée dans ce mémoire, ramène le calcul de la fonction de partition du modèle d'Ising à la limite thermodynamique $L, H \rightarrow +\infty$ au calcul du déterminant d'une matrice 8×8 puis d'une intégrale double sur un compact de \mathbb{R}^2 ; elle est donc plus rapide que celle de la

qu'il est souvent facile de faire un calcul exact de la fonction de partition au prix d'un nombre exponentiel d'« opérations élémentaires », mais cela n'est réaliste en pratique que pour des systèmes de tailles très modestes, même avec l'aide de l'ordinateur, alors que la propriété supplémentaire d'intégrabilité permet d'atteindre des tailles intéressantes. Notons en passant que la dimension de l'espace physique où les configurations sont construites joue un rôle : à une dimension (chaîne de spins d'Ising par exemple), la méthode de la matrice de transfert donne le résultat de façon immédiate (résultat d'Ising dans les années 1920) mais l'intérêt est limité (pas de transitions de phases) ; à 2 dimensions d'espace (ou bien à 1 dimension d'espace pour un système quantique ou un système en évolution dans le temps), on rencontre une distinction entre cas général difficile et cas intégrables, accessibles au calcul et néanmoins riches ; à 3 dimensions et au-delà, la méthode de la matrice de transfert devient inutile et les cas exactement solubles sont rarissimes [252], à moins que l'on se trouve dans la situation du champ moyen (qui coïncide pour certains systèmes avec la limite de dimension infinie). Plus généralement, la plupart des modèles intégrables de mécanique statistique classique intéressants sont bidimensionnels (nous considérons un modèle intégrable tridimensionnel qui se réduit en fait à un modèle bidimensionnel comme inintéressant !), ou alors de type champ moyen.

Les modèles exactement solubles se rencontrent dans bien d'autres contextes, à commencer par celui, historique, de la mécanique classique newtonienne, où les degrés de liberté sont continus. Il s'agit alors de calculer les équations horaires (les lois du mouvement) de N points matériels en interaction. On sait que, dans le cas de la gravitation à trois dimensions d'espace, pour $N = 2$ le calcul analytique est relativement facile, mais pour $N = 3$ Poincaré et ses nombreux successeurs ont montré qu'il est en général impossible : le système est chaotique (c'est-à-dire très dépendant des conditions initiales) et les trajectoires très irrégulières, sauf pour des valeurs bien précises des conditions initiales qui donnent lieu à des trajectoires particulières [253]. On sait aujourd'hui que les modèles intégrables continus se caractérisent par l'existence d'un ensemble de quantités conservées tel qu'on puisse exprimer univoquement tous les paramètres du mouvement (sauf un, par exemple le temps) à partir d'elles. Il faut donc qu'il existe un nombre de quantités conservées au moins égal au nombre de degrés de liberté moins un. Ces quantités conservées permettent le calcul analytique de la solution par quadrature : on se ramène au calcul d'une intégrale par degré de liberté (sauf un) et tous sont *in fine* exprimés en fonction de degré de liberté mis à part — souvent le temps. Par exemple, pour le problème de la gravitation à 2 corps dans l'espace à 3 dimensions, les degrés de liberté sont au nombre de 7 : le temps et deux triplets de positions. La conservation des trois composantes de la quantité de mouvement du système formé de la réunion des deux corps nous ramène déjà à 4 (utilisation du point réduit). Ensuite, celle du moment cinétique (3 composantes, mais d'expressions non linéaires en fonction des 3 positions du point réduit) équivaut à la conservation d'une composante de la position (le mouvement est plan) et de la vitesse aréolaire (loi des aires), restent donc $4 - 2 = 2$ degrés de liberté. Enfin, la conservation de l'énergie mécanique laisse uniquement le temps comme degré de liberté : toutes les autres grandeurs s'expriment en fonction de lui comme des intégrales (ou solutions d'équations différentielles ordinaires). Même si, dans un cas plus général, les intégrales que l'on trouve ne s'expriment pas toujours à l'aide de fonctions connues, des techniques numériques permettent de résoudre facilement le petit nombre d'équations qui subsistent. En comparaison, une approche numérique naïve (par exemple la méthode d'Euler ou ses améliorations comme celle de Runge-Kutta-Fehlberg) du problème à N corps pour la gravitation à 3 dimensions d'espace doit s'attaquer à $3N$ équations du mouvement faisant intervenir chacune $N - 1$ termes d'interaction, donc chaque itération coûte de l'ordre de N^2 opérations élémentaires, et de plus le caractère chaotique du système (une erreur d'ordre ϵ sur une condition initiale augmente comme $\epsilon \exp(\lambda t)$ pour un certain *exposant de Lyapunov* $\lambda > 0$) mène rapidement à une complexité calculatoire exponentielle (voir [254]).

Le problème de la stabilité des trajectoires évoque d'ailleurs le problème de la *généricité*

déjà étudié par Poincaré. La propriété d'intégrabilité est souvent très fragile : augmenter la dimension d'espace, changer légèrement le nombre de corps ou bien les énergies d'interaction entre proches voisins peut suffire à faire perdre cette propriété, de même que l'algorithme de Tarjan *et al.* pour 2-SAT est inefficace pour le problème $2 + \epsilon$ -SAT aléatoire. Les propriétés physiques des systèmes intégrables ne sont-elles pas alors pathologiques et non génériques, c'est-à-dire pas du tout représentatives de celles des vrais systèmes physiques, mais communes seulement à des systèmes bizarres formant une famille « de mesure de probabilité non nulle » ? La réponse est souvent non, ce qui rend l'étude des systèmes intégrables bel et bien utile. Dans le cas des modèles de physique statistique, l'universalité critique garantit que les exposants et autres distributions qui caractérisent les transitions de phases sont robustes vis-à-vis de la perte d'intégrabilité. Le calcul des exposants critiques du modèle d'Ising nous renseigne donc sur tous les modèles de sa classe d'universalité, par exemple la transition liquide-gaz à 2 dimensions. Ensuite, les quantités non universelles (par exemple la température d'une transition de phase) sont souvent des fonctions régulières des paramètres du modèle, donc les modèles intégrables fournissent des points de départ très utiles pour des développements perturbatifs, voire des approximations si on les prend tels quels. La référence [255] discute ce point sur un cas précis en physique de la matière condensée : pour tenter d'expliquer la conductivité thermique anormalement grande de certains matériaux magnétiques, des théoriciens ont fait remarquer qu'un hamiltonien qui modélise ce matériau est proche de celui d'un modèle intégrable. Dans le modèle intégrable, la loi de conservation du flux d'énergie fait que la conductivité thermique est infinie ; dans le vrai modèle du matériau (qui n'est pas intégrable), cette conservation n'est qu'approximative et la conductivité thermique est finie, mais grande : le phénomène est expliqué qualitativement. Plus généralement, les structures de l'espace des phases étant souvent robustes, les calculer dans le cas particulier d'un modèle intégrable suffit pour toute une classe de systèmes : en physique statistique, on pourra ainsi calculer l'allure du diagramme de phases (emplacement relatif des différentes phases et existence de transitions de phases). En mécanique classique, on observe souvent que les trajectoires chaotiques « s'enroulent » autour d'un *attracteur étrange* dont le bassin d'attraction serait l'analogue d'une phase, et les différents attracteurs d'un système sont séparés par des trajectoires fermées « pathologiques », c'est-à-dire improbables, mais dont on peut calculer l'emplacement et où les équations du mouvement peuvent être résolues. La référence [256] discute ce rôle structurant des trajectoires intégrables dans l'espace des phases et indique en quoi la chaotité est nécessaire et suffisante pour rendre un traitement par la mécanique statistique pertinent.

Revenons aux systèmes de mécanique statistique. Bien que les modèles de type « champ moyen », parmi lesquels nous comptons les modèles sur réseaux hiérarchiques (modèles définis sur des arbres notamment), soient souvent exactement solubles, nous n'allons pas les considérer ici. De même, les modèles de matrices, dont certains sont intégrables, seront laissés de côté ; on peut voir ces modèles comme des modèles de physique statistique sur une surface (à deux dimensions) orientable, mais fluctuante. Nous nous restreignons ici aux modèles dans le plan et sur réseau régulier, donc à une géométrie fixe (la topologie sera le plus souvent celle du cylindre, avec des conditions aux limites périodiques dans une direction et libres dans l'autre, ou bien celle du tore, avec des conditions aux limites périodiques dans les deux directions). La raison est double : d'une part, nous cherchons à construire des modèles pour les milieux granulaires où, à première vue, une géométrie aléatoire n'a pas vraiment de sens, et d'autre part la catégorie des modèles sur réseaux plans partage un phénomène fondamental et structurant que l'on peut appeler la *factorisation de la matrice S* , qui n'existe pratiquement que dans le plan, et qui est à la base de la technique de résolution. Les réseaux sont pris réguliers par souci de simplicité ; ce sont ces réseaux qui interviennent le plus souvent en mécanique statistique. Il est parfois possible de traiter le cas de réseaux non réguliers mais tout de même périodiques (par exemple un réseau carré où l'on ajoute une diagonale dans une maille élémentaire de coordonnées (i, j) si, et seulement si, la somme de ses coordonnées $i + j$ est paire — on parle dans des cas semblables à celui-ci de modèle en zigzag (*staggered* en anglais).

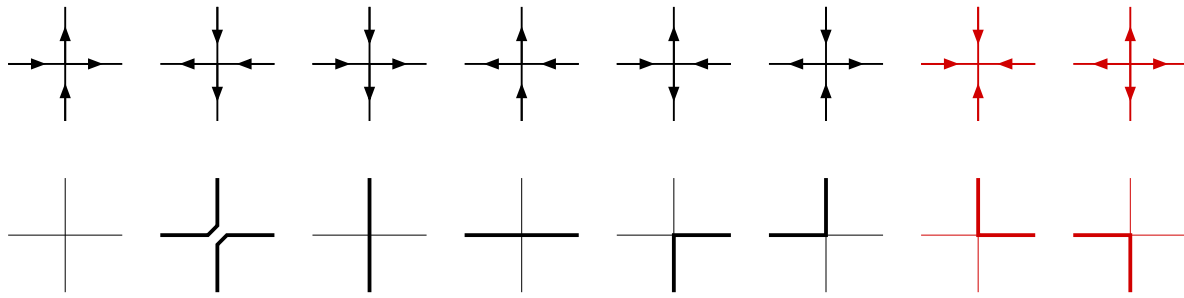


FIG. 12.1 – Les vertex du modèle à huit vertex (en haut), et une interprétation possible en termes de boucles ou de lignes d’univers de particules (en bas). Les six premiers, qui respectent la règle de la glace, sont ceux du modèle à six vertex.

12.1.2 Repères historiques

Brossons à grands traits l’histoire de la technique et de l’étude des modèles exactement solubles en mécanique statistique. On peut considérer qu’elle commence en 1931 quand Hans Bethe introduit son célèbre *Ansatz* pour calculer la fonction de partition du modèle de Heisenberg (quantique) à une dimension. Les fondations de la technique sont alors posées : cet *Ansatz* donne la forme des vecteurs propres de la matrice de transfert dans la situation de *factorisation de la matrice S*, et il est très souvent la clef du calcul. En 1944, Lars Onsager publie [257] son calcul de la fonction de partition du modèle d’Ising sur réseau carré à deux dimensions. Cela constitue une étape importante de la mécanique statistique car le résultat du calcul établit clairement (constructivement, pourrait-on dire) l’existence d’une transition de phase dans un modèle très simple et justifie la démarche qui consiste à étudier des modèles où la réalité microscopique est simplifiée, mais qui préservent les grandes caractéristiques (symétries, dimensions, caractère scalaire ou vectoriel, *etc.*). Son calcul par matrices de transfert utilise l’algèbre des quaternions ; il a été refait par de nombreuses techniques différentes (voir la section 7.1 de [258] pour une brève liste, ou encore [259]). Onsager a ensuite annoncé son résultat pour la magnétisation du même modèle le 23 août 1948 sans préciser comment il l’avait obtenu [260] ; C. N. Yang en a publié une dérivation assez complexe en 1952.

L’étape suivante est l’introduction de l’efficace méthode des pfaffiens. Hurst et Green [261] l’utilisent pour (re)calculer l’énergie libre du modèle d’Ising en 1960, tandis que Montroll, Potts et Ward en déduisent sa magnétisation en 1963 [260]. Simultanément, Kasteleyn [262] et Temperley et Fisher [263] utilisent les pfaffiens pour résoudre le modèle des dimères plans (voir [264] une explication pédagogique et le traitement du cas général). Il s’agit de compter de combien de façons on peut disposer des dimères sur les liens d’un réseau plan régulier de sorte que chaque nœud du réseau soit couvert par un et un seul monomère (chaque dimère est formé de deux monomères et couvre donc les deux nœuds aux extrémités de son arête) ; par exemple, Fisher a calculé qu’il y a 12 988 816 façons de placer des dominos sur un échiquier. Les modèles d’Ising ferromagnétique et antiferromagnétiques, notamment, peuvent être reformulés en termes de dimères. La technique des pfaffiens, remarquablement, ne fait pas appel aux matrices de transfert, ni à l’*Ansatz* de Bethe ; il s’agit d’une méthode purement combinatoire reposant sur un calcul de déterminant.

Dans les années 1960, de nombreux travaux s’attaquent aux modèles exactement solubles à l’aide de l’*Ansatz* de Bethe. En particulier, l’*Ansatz* de Bethe emboîté (en anglais, *nested Bethe Ansatz*) est développé par C. N. Yang [265] et Bill Sutherland [266]. Le modèle à six vertex est résolu par Elliott Lieb [249, 250, 251] à l’aide de l’*Ansatz* de Bethe. Il s’agit d’un modèle sur réseau carré, introduit initialement pour calculer l’entropie de la glace, où chaque lien porte une orientation, de sorte que les quatre orientations autour de chaque nœud forment l’un des six motifs autorisés (d’où le nom du modèle) — *cf.* fig. 12.1. Ces motifs sont ceux où deux liens exactement sont orientés vers le vertex (cette règle est connue sous le nom de règle

de la glace, les nœuds représentant les atomes d'oxygène et les orientations des liens indiquant à quel atome d'oxygène l'atome d'hydrogène présent sur le lien appartient), et chacun est muni d'un certain poids statistique. En étudiant cette solution, R. Baxter se rend compte que les vecteurs propres de la matrice de transfert de ce modèle sont indépendants d'une certaine combinaison v des six poids statistiques. Cela signifie que la matrice de transfert d'un modèle avec un certain jeu de poids statistiques commute avec une famille infinie (paramétrée par v) d'autres matrices. D'une part, cela rappelle l'existence de quantités conservées dans les systèmes intégrables en mécanique classique, et d'autre part cela permet à Baxter de mettre au point la méthode de l'*Ansatz* de Bethe algébrique [258] avec laquelle il résout (en 1971) le modèle à huit vertex en champ nul (il s'agit de la généralisation du modèle à six vertex où les vertex à 4 liens entrants ou 4 liens sortants sont aussi autorisés, avec une restriction de symétrie sur les poids des vertex qui correspond à la nullité d'un certain champ – remarquer que ce modèle est aussi soluble par l'*Ansatz* de Bethe). Cette formalisation, et notamment l'*équation de Yang-Baxter* (EYB) qui apparaît, permet de mieux comprendre l'essence du phénomène d'intégrabilité des modèles discrets. Il semble clair de nos jours que tous ces modèles ont en commun d'être rattachés à une solution de l'EYB (voir [267] pour un exemple non trivial).

Grâce à la meilleure compréhension permise par les travaux de Baxter, de nombreux autres modèles exactement solubles sont construits dans les années 1970 et surtout 1980. En linéarisant l'EYB, on obtient des relations de commutation faisant intervenir des crochets de Lie comme en intégrabilité classique [268, 269]. Cela permet de classer les solutions des EYB, donc les modèles exactement solubles, d'après la typologie des algèbres de Lie [270]. Ce classement a été amorcé pour les *représentations fondamentales* des algèbres de Lie affines classiques simples pour les modèles de vertex par Bazhanov [271] et Jimbo [272] et pour les modèles de faces (ou modèles « IRF », cf. ci-dessous) par Jimbo *et al.* [273]. Il est désormais considéré [274] qu'un modèle exactement soluble est spécifié par la donnée d'une représentation d'une certaine algèbre de Lie. Pour les représentations non fondamentales des algèbres de Lie, des techniques différentes existent (voir par exemple [275]).

Parallèlement, à partir du milieu des années 1980, l'étude des solutions de EYB a donné naissance à une nouvelle branche des mathématiques, l'étude des groupes et des algèbres quantiques. Cette branche est toujours très active aujourd'hui.

Enfin, depuis les années 1990, des travaux portant sur des modèles hors d'équilibre à une dimension (mais qui peuvent être vus comme des modèles à deux dimensions si l'on représente dans le plan les trajectoires dans le temps des objets du modèle unidimensionnel) ont permis d'inventer une nouvelle technique de résolution exacte, appelée « représentations en produits de matrices » ou « *Ansatz* de produits de matrices ». Elle a été introduite pour calculer le courant et les profils de densités dans le modèle dit du processus à exclusion simple asymétrique (connu sous l'acronyme ASEP en anglais) à une dimension et dans sa version totalement asymétrique (TASEP) [276] — il s'agit d'un modèle très simple de transport hors d'équilibre entre deux réservoirs (de molécules, de chaleur, *etc.*), défini sans hamiltonien, uniquement par des règles d'évolution stochastique sur un réseau : chaque site du réseau peut contenir au plus une particule, et chaque particule a, par unité de temps, une certaine probabilité de sauter vers les sites voisins du site qu'elle occupe qui ne sont pas déjà occupés [87, 88, 85]. Cette nouvelle technique de résolution s'ajoute aux techniques connues (voir [277, 278] pour des calculs exacts de propriétés du modèle ASEP avec l'*Ansatz* de Bethe, notamment sa fonction de grande déviation ; en particulier, il existe une bijection entre le modèle ASEP hors équilibre à 1+1 dimension (espace et temps) et un modèle à six vertex à l'équilibre, soluble par *Ansatz* de Bethe). Les liens de cette nouvelle technique avec la technique de l'*Ansatz* de Bethe (les modèles solubles par une technique sont-ils aussi solubles par l'autre ?) sont en cours d'investigation [279] : on connaît au moins un exemple (le modèle ASEP) où un *Ansatz* de Bethe algébrique peut être reformulé en une représentation en produits de matrices, et où, inversement, la représentation en produits de matrices permet de dériver les équations de l'*Ansatz* de Bethe.

Les modèles de croissance d'interfaces, et notamment les modèles de tas de sable très

étudiés au tournant des années 1980 et 1990 dans le cadre du phénomène de criticalité auto-organisée (SOC en anglais), forment une autre famille de modèles hors équilibre où des résultats intéressants peuvent être obtenus par des techniques d'intégrabilité (dont l'*Ansatz* de Bethe) [196, 197].

12.1.3 Quelques grands types de modèles exactement solubles sur réseaux bidimensionnels

Donnons ici une liste des grands types de modèles de mécanique statistique qui rentrent dans le cadre que nous nous sommes fixés, c'est-à-dire ceux pour lesquels on peut, *pour certains choix particuliers des poids statistiques*, ramener le calcul de la fonction de partition à la résolution d'un nombre d'équations borné par une fonction linéaire du nombre de degrés de liberté. Cette mise en situation est très importante car un modèle donné est souvent formulable de nombreuses façons différentes (par exemple le modèle ferromagnétique d'Ising peut être vu comme un modèle de vertex, un modèle IRF, un modèle de fermions libres, un modèle de dimères, *etc.*), et une reformulation appropriée est souvent un préalable nécessaire à une résolution exacte — et permet parfois de réutiliser des résultats connus.

Une convention de vocabulaire tout d'abord : pour nous, lien et arête d'un réseau ou d'un graphe sont synonymes, de même que site, nœud et vertex.

Modèles de vertex et modèles IRF. Les types les plus généraux de ces modèles sont d'une part, les modèles de vertex, et, d'autre part, les modèles appelés par R. J. Baxter [258] modèles « interactions autour d'une face » (IRF en anglais) ou encore modèles de faces par M. Jimbo *et al.* [273]. Ces deux cas sont duaux l'un de l'autre. Dans les deux cas, les degrés de liberté sont sur les arêtes du réseau (par exemple, chaque arête peut être coloriée avec une couleur d'un ensemble donné). Pour un modèle de vertex, les poids statistiques sont affectés aux nœuds : le poids d'un nœud dépend des valeurs des degrés de liberté des arêtes (de leurs couleurs) ; la donnée de ces configurations forme ce que l'on appelle un *vertex*. Le modèle est défini par la liste des vertex de poids non nuls, munis de leurs poids. Les modèles à 6 et à 8 vertex de la figure 12.1 sont les archétypes des modèles de vertex ; les arêtes peuvent ici être coloriées avec deux couleurs (ou, c'est équivalent, être munies d'une orientation). Dans le deuxième cas, le poids est affecté à une face élémentaire (ou plaquette) du réseau en fonction de la configuration des arêtes qui la délimitent. Un modèle IRF est spécifié par la liste des faces de poids non nuls, munies de leurs poids.

Dans certains cas [258], on peut facilement définir un modèle IRF à partir d'un modèle de vertex et *vice versa* par dualité du réseau : à chaque plaquette, on fait correspondre un vertex dont le centre est au centre de la face et dont les liens sont perpendiculaires aux côtés de la face, ce qui définit un réseau dit dual (cette transformation de dualité, bien définie pour les graphes planaires — ceux que l'on peut dessiner dans le plan sans croisement d'arêtes —, est une involution : le dual du dual est le réseau de départ) ; l'état de chaque lien est donné par l'état du côté qu'il traverse. Cependant, la relation entre ces deux types de modèles n'est pas toujours évidente (voir la remarque finale de [273] ou encore [280]).

Il n'est pas simple non plus de savoir à quelle(s) condition(s) sur les poids des vertex resp. des faces le modèle est exactement soluble. En général, la réponse à cette question passe par l'étude des équations de Yang-Baxter que nous verront plus loin. On peut toutefois remarquer que les cas solubles font souvent apparaître des règles de conservation (par exemple, dans les modèles à six ou à huit vertex, la règle de la glace ou tout au moins la conservation du nombre de particules si l'on retient l'interprétation des vertex en termes de lignes d'univers de particules fig. 12.1), et des symétries. Le modèle à six vertex est ainsi soluble pour des poids quelconques des six vertex, tandis que le modèle à huit vertex est soluble soit si une certaine condition, dite des fermions libres, entre les huit poids des vertex est satisfaite, soit si les poids des vertex n°1 et 2 d'une part, 3 et 4 d'autre part sont égaux (cette condition est dite *de champ nul*).

Modèles SOS et RSOS. SOS signifie « solide sur solide » (*Solid-on-Solid* en anglais) et RSOS « solide sur solide restreint » (*Restricted-Solid-on-Solid*). Il s'agit de modèles introduits pour l'interface entre deux solides cristallins, ou encore le dépôt balistique. Chaque nœud d'un réseau plan porte un degré de liberté entier appelé *hauteur*, dans \mathbb{Z} pour les modèles SOS et dans un intervalle entier $\{1, 2, \dots, q\}$ pour les modèles RSOS (un modèle RSOS est donc un modèle SOS pris *modulo* q). Dans la version originelle des modèles SOS, la hauteur représente la position de l'interface entre les solides par rapport à un plan de référence. Le réseau est carré, et deux sites voisins du réseau ont des hauteurs qui diffèrent au plus de 1 en valeur absolue. Le poids d'une configuration est défini par l'intermédiaire de l'énergie d'interaction, affectée aux faces, et celle-ci prend en compte la courbure de l'interface : si les hauteurs des sommets qui délimitent la face sont telles que la face est plane (quatre hauteurs h , ou bien deux sommets diagonalement opposés à la hauteur h et les deux autres à $h - 1$ et $h + 1$), l'énergie de cette face est nulle; sinon elle a une certaine valeur. La surface a alors un aspect plus ou moins rugueux suivant la température. On peut bien sûr prendre dans la définition précédents des hauteurs h *modulo* un certain entier non nul, ce qui définit un modèle RSOS.

Dans les généralisations des modèles RSOS [280], les hauteurs sont les numéros des sommets d'un graphe connexe \mathcal{G} qui n'a pas d'arêtes multiples. \mathcal{G} est un graphe abstrait (avec un nombre fini de sommets) qui n'a rien à voir avec le réseau (carré). On autorise des sites voisins du réseau à avoir un couple de hauteurs (h, h') uniquement si les sommets de numéros h et h' de \mathcal{G} sont reliés par une arête. En particulier, deux sites ne peuvent avoir la même hauteur que si le sommet de \mathcal{G} qui correspond à cette hauteur est relié à lui-même (\mathcal{G} n'est alors pas un graphe *simple*). Le modèle SOS correspondrait au cas où \mathcal{G} est une chaîne linéaire infinie de sommets reliés chacun à leurs deux voisins et à eux-mêmes, et, pour le modèle RSOS associé en prenant les hauteurs *modulo* q , \mathcal{G} est un polygone régulier à q sommets, chacun étant relié à ses deux voisins et à lui-même. On peut de plus prendre des hauteurs qui sont des vecteurs à plusieurs composantes, chacune obéissant à la loi précédente. Dans tous les cas, les faces carrées ont une certaine énergie qui dépend des hauteurs de leurs coins.

Précisons les relations entre modèles (R)SOS et modèles de vertex.

- SOS \subset vertex. Un modèle SOS peut être facilement reformulé comme un modèle de vertex [281]. Il suffit de fixer une convention d'orientation (uniforme) pour les arêtes du réseau carré, puis de les munir de nombres 0, 1 et -1 pour indiquer de combien la hauteur des sites varie quand on suit une arête dans le sens fixé.
- SOS \neq vertex. Réciproquement, *certain*s modèles de vertex seulement peuvent être vus comme des modèles SOS : par exemple, les modèles de vertex à deux couleurs qui respectent la règle de la glace définissent une configuration de hauteurs pour un modèle SOS dense, à une ambiguïté de « jauge » près (il faut connaître l'état des vertex *plus* la hauteur d'un site pour en déduire la hauteur de tous les sites – cf. aussi le cas de modèles de spins ci-dessous).
- RSOS \subset vertex. Des constructions similaires à celles pour les modèles SOS montrent que les modèles RSOS (même généralisés) sont aussi des cas particuliers de modèles de vertex.
- RSOS \times SOS = vertex. Inversement, les modèles de vertex exactement solubles — au moins ceux associés aux représentations fondamentales des algèbres de Lie [272, 271] — peuvent être mis sous la forme d'un modèle mixte RSOS-SOS [280]. De façon remarquable, il existe un lien entre le graphe \mathcal{G} qui définit un modèle RSOS (généralisé) *critique* et l'algèbre de Lie associée au modèle de vertex correspondant : \mathcal{G} est le *diagramme de Dynkin* [270] de l'algèbre de Lie. Les diagrammes de Dynkin des algèbres de Lie simplement lacées classiques et affines sont en fait exactement les graphes dont les matrices d'adjacence ont des valeurs propres de module au plus 2 (la matrice d'adjacence d'un graphe est la matrice dont chaque entrée en position (i, j) , qui vaut 0 ou 1, indique si l'arête $i \rightarrow j$ existe dans le graphe — la matrice d'adjacence d'un graphe non orienté

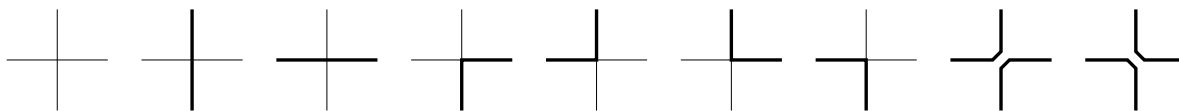


FIG. 12.2 – Les vertex possibles dans le modèle de boucles à une espèce (ou une couleur) dilué sur réseau carré, ou modèle $O(N)$. Ce sont pratiquement les mêmes vertex que dans le modèle à huit vertex, mais le vertex à quatre liens occupés du modèle à huit vertex a ici deux interprétations distinctes en termes de boucles qui ne peuvent se croiser.

est donc symétrique).

Modèles de boucles Un autre cas particulier est celui des modèles de boucles. On place des lignes fermées (des boucles) de différentes couleurs (on peut penser à des boucles élastiques en caoutchouc) sur le réseau en les accrochant aux sites de sorte que les segments de boucles empruntent toujours les liens du réseau, qu'un lien du réseau soit emprunté par au plus un segment de boucle, et que deux boucles de la même couleur ne se croisent jamais (elles peuvent en revanche être en contact lorsqu'elle atteignent un site commun). Dans le cas où tous les liens doivent porter un segment de boucle, on parle de modèle *dense* [282] (*fully packed loops* en anglais), et de modèle *dilué* dans le cas contraire (ce n'est pas vraiment la même chose qu'un « modèle dilué » au sens de la percolation de sites, où une certaine fraction des sites d'un réseau a été retirée, mais dans toute ce chapitre il ne sera pas question de tels « modèles dilués »). Suivant la définition précédente, nécessairement, à chaque vertex, il doit y avoir un nombre pair de liens portant des segments de lignes d'une couleur donnée. Si quatre liens (ou plus) d'un site sont de la même couleur, il faut distinguer entre les différentes possibilités de changement de direction des deux (ou plus) de boucles qui passent par ce site : la première boucle tourne-t-elle à droite, ou à gauche ? (Elle ne peut aller tout droit sans croiser la ou les autre(s) boucle(s).) L'état d'un site est donc la donnée non seulement de la couleur de ses liens, mais de plus de l'interprétation à retenir en termes d'évitement de boucles quand il y a une telle ambiguïté. La liste des états possibles d'un site (ou liste des vertex) pour le modèle dilué à une espèce (une couleur) de boucles sur réseau carré, bien connu sous le nom de modèle $O(N)$, est donnée figure 12.2. Les poids statistiques sont affectés, dans les modèles de boucles, à la fois aux vertex et aux boucles elles-mêmes (chaque ligne fermée d'une certaine couleur a un certain poids, indépendamment du nombre de liens qu'elle recouvre, du moment qu'il y en a au moins un).

Les modèles de boucles à plusieurs couleurs sont équivalents [280] aux modèles RSOS définis plus haut, c'est-à-dire que l'on peut les mettre en bijection, chaque modèle de boucles ayant la même fonction de partition que le modèle RSOS associé. Par conséquent, les modèles de boucles sont aussi des cas particuliers de modèles de vertex. Et, inversement, certains modèles de vertex peuvent être vus comme des modèles de boucles ; les modèles classifiés dans [272, 271] peuvent être mis sous la forme d'un modèle mixte boucles-vertex (certains de leur degrés de liberté peuvent être exprimés en termes de boucles).

Modèles de fermions libres. Il s'agit de modèles dont la fonction de partition s'écrit comme l'exponentielle d'une *action* qui s'exprime comme une somme de termes au plus quadratiques d'opérateurs de création et d'annihilation de fermions [261, 283, 284]. Ces modèles peuvent tous être résolus (*i.e.* leur fonction de partition calculée) par la technique des pfaffiens. Le nom de fermions *libres* vient de la forme gaussienne de la fonction de partition (pas de termes de degré 3, 4, *etc.*). En développant l'exponentielle, on trouve une somme d'un nombre fini de termes, car les opérateurs de création et d'annihilation de fermions sont nilpotents. À chaque terme, on peut associer un vertex dont les liens ont deux couleurs (qui correspondent à la présence ou à l'absence d'un fermion), ou encore sont vides ou pleins. Les coefficients des termes donnent les poids statistiques des vertex correspondants ; ils peuvent être négatifs. Un vertex qui correspond à un terme de degré supérieur à 2, par exemple un terme quartique, est possible,

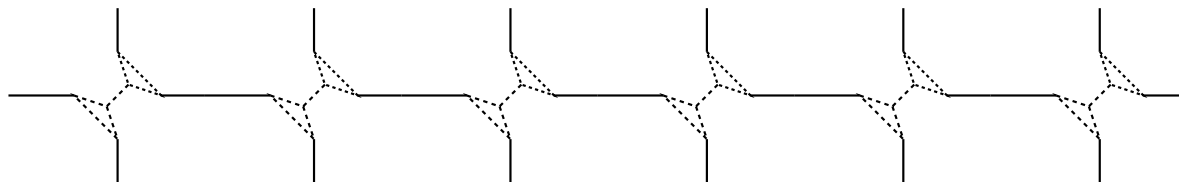


FIG. 12.3 – Six nœuds d'un réseau carré (liens en traits continus) avec leur décoration interne (liens en pointillés) telle qu'une configuration de dimères sur le réseau décoré corresponde à une configuration du modèle à huit vertex sur le réseau carré. Les poids des huit vertex s'expriment en fonction des poids des arêtes du réseau décoré, donc ne sont pas quelconques.

mais comme ce terme doit être obtenu en développant l'exponentielle de l'action, c'est-à-dire par combinaison des termes élémentaires (*i.e.* de degré inférieur ou égal à 2), son coefficient sera nécessairement fonction des coefficients des termes élémentaires. Par conséquent, le nombre de degrés de liberté dont on dispose pour former un modèle de vertex qui respecte la condition des fermions libres est égal au nombre de termes élémentaires. Et il est facile de décider si un modèle de vertex est soluble en tant que modèle de fermions libres ou non : il suffit de tester si tous ses vertex, ainsi que leurs poids, se « factorisent » en vertex élémentaires. Remarquer qu'un modèle de vertex peut n'être pas un modèle de fermions libres mais être tout de même soluble (c'est le cas du modèle à huit vertex en champ nul quand la condition des fermions libres est violée).

Graphiquement, on peut interpréter les configurations de ces modèles en termes de trajectoires ou de lignes d'univers de particules qui peuvent se croiser [285]. Un croisement de deux particules sur un vertex apporte le même poids qu'un évitement, mais avec un signe moins.

Modèles de dimères. Ils ont déjà été définis dans l'historique précédent : une configuration de ces modèles est telle que chaque dimère couvre un lien du réseau et les deux sites à leurs extrémités et que chaque site est recouvert exactement une fois (par un « demi-dimère »). Les poids sont attribués aux arêtes du réseau : suivant qu'elle est recouverte ou non, une arête peut avoir deux poids. Tout modèle de dimère sur réseau plan (c'est-à-dire sans croisement d'arêtes) est exactement soluble par la technique des pfaffiens. On peut très simplement reformuler ces modèles en termes de modèles de vertex. Réciproquement, les modèles de vertex sur réseau plan qui sont aussi des modèles de fermions libres peuvent être reformulés en termes de modèles de dimères sur le réseau *décoré* obtenu en transformant chaque nœud avec ses morceaux d'arêtes (parfois chaque couple de nœuds) en un petit sous-réseau [286, 287]. Un exemple est donné fig. 12.3. On considère chaque petit sous-réseau (arêtes en pointillé) comme un nœud, ce qui forme un réseau carré, les liens entre les nœuds du réseau carré étant en traits continus. Une configuration de dimères sur le réseau décoré correspond alors exactement à une configuration du modèle à huit vertex sur le réseau carré. Remarquer que les poids des huit vertex s'expriment alors en fonction des poids des arêtes du réseau décoré : il sont donc corrélés d'une certaine manière — ce qui rend soluble le modèle de vertex.

Modèles de spins. Il s'agit d'un cas particulier simple des catégories « vertex » et « IRF ». Les nœuds d'un réseau portent un degré de liberté souvent à valeurs dans un ensemble fini ($\{-1, 1\}$ pour des spins d'Ising ou encore $\{1, 2, \dots, q\}$ avec $q \in \mathbb{N}$ pour les modèles de Potts [12]). Les poids statistiques sont affectés aux arêtes : par exemple, pour les modèles d'Ising et Potts, le poids d'une arête prend deux valeurs, suivant que les spins aux extrémités de cette arête sont dans le même état ou non. Les spins interagissent donc deux par deux. Dans certains cas, on rencontre aussi des interactions à plus de spins (par exemple à quatre spins dans une reformulation du modèle à huit vertex en champ nul [258]). Il est facile de voir, au moins pour les interactions deux par deux, qu'un tel modèle peut être reformulé comme modèle de vertex ou modèle IRF : on commence par attribuer à chaque arête un degré de liberté qui indique l'état des spins aux extrémités de l'arête, ou tout au moins une information

sur ces deux états suffisante pour calculer le poids de l'arête et reconstituer l'état des spins de tout le réseau sans perte d'information extensive. Par exemple, pour le modèle d'Ising, il suffit d'indiquer sur chaque arête si les spins aux extrémités sont dans le même état ou non. Étant donné la valeur d'*un seul* spin du réseau et les états des arêtes, on peut reconstituer l'état de tous les spins. Si l'on ne connaît que les états des arêtes, il y a une ambiguïté entre une configuration de spins compatibles avec ces états et celle où tous les spins sont renversés, qui est également compatible. Cependant, la fonction de partition qui se fonde sur les états des arêtes a exactement 2 fois moins de termes que celle qui se fonde sur les spins, ce qui représente une contribution à l'entropie qui s'annule comme l'inverse du nombre total de spins à la limite thermodynamique. En ce sens, on peut dire que les deux fonctions de partition, et donc les deux modèles, sont équivalents. Une fois les arêtes ainsi munies d'états, on peut décider par exemple que le poids d'un vertex (resp. d'une face si l'on veut construire un modèle IRF) est égal au produit des racines carrées des poids des arêtes qui y sont rattachées (resp. qui bordent la face), et ainsi le modèle de spins est inclus dans les catégories des modèles de vertex et IRF. Cette construction se généralise à des spins à q états (modèles de Potts).

12.2 Factorisation des matrices S , *Ansatz* de Bethe et équations de Yang-Baxter

Le phénomène que nous appellerons ici *factorisation des matrices S* est la clef de l'intégrabilité de tous les modèles précédents. Nous allons essayer d'en donner une image intuitive (non rigoureuse et non formalisée) puis nous verrons comment il apparaît dans la technique de l'*Ansatz* de Bethe qui permet de diagonaliser la matrice de transfert d'un modèle exactement soluble, et sous une forme mathématisée dans les équations de Yang-Baxter.

12.2.1 La factorisation des matrices S , ou quand toute interaction se ramène à des interactions à deux corps

Très souvent, un modèle exactement soluble au sens où nous l'entendons fait intervenir des règles de conservation et/ou de symétrie telles que l'on peut interpréter les différentes configurations (de vertex, de faces, *etc.*) en termes de lignes d'univers de particules. Un cas fréquent est celui où les particules sont de deux types, L et R (initiales de *left* et *right*), ainsi appelés en fonction de la direction où elles ont naturellement tendance à aller. Les particules peuvent, d'une ligne à l'autre du réseau, se propager simplement, se croiser et former des états liés. Que les particules s'excluent mutuellement (il peut y avoir au plus une particule d'un type donné sur un site — ou un lien — du réseau) ou qu'au contraire elles puissent se superposer, dès que les croisements ou les états liés (à deux particules) sont possibles dans un modèle, il apparaît des situations où trois particules interagissent. Une condition suffisante et, semble-t-il, nécessaire pour que le modèle soit soluble est qu'une telle interaction à trois corps (ou plus) se décompose en interactions deux-à-deux successives. *Nous admettrons cette équivalence logique dans toute la suite.* Bien entendu, il y a plusieurs manières de décomposer une interaction à n corps en interactions à deux corps : la figure 12.4 montre les deux décompositions B et C d'une interaction à trois corps A. En pratique, cette multiplicité semble traitée uniquement de deux façons dans les différents cas de modèles intégrables que nous étudions ici :

- soit les décompositions B et C ont le même poids statistique (le poids d'une décomposition, B ou C, étant défini comme la somme des poids des configurations qui ont les mêmes valeurs des six liens externes de cette décomposition ; c'est-à-dire que l'on somme sur les valeurs possibles des liens internes (ceux qui forment un triangle) de la décomposition) — alors peu importe que A soit interprété comme B ou comme C, cela ne change pas la fonction de partition,
- soit le poids de A est la somme des poids de B et C.

Le premier cas sera noté dans ce paragraphe $A=B=C$ et le deuxième $A=B+C$.

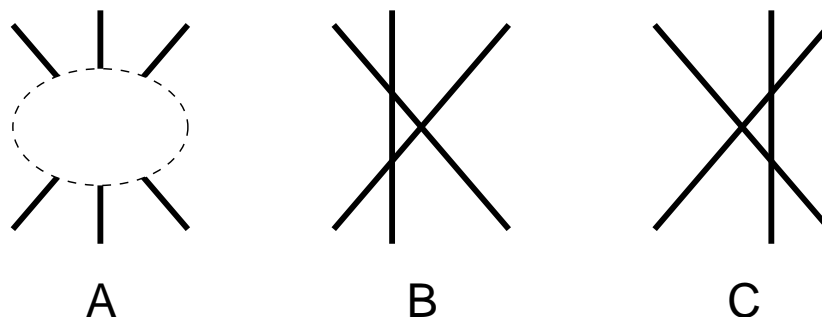


FIG. 12.4 – Représentation schématique des deux décompositions B et C d'une interaction à trois corps A en interactions deux-à-deux.

Modèles sur réseaux carrés

Donnons deux exemples de modèles exactement solubles sur réseau carré où ces phénomènes apparaissent. Le premier est celui du modèle qui a servi à M. Widom [288] puis à P. A. Kalugin (Pavel Kalouguine en transcription française) [289] à calculer l'entropie du pavage carrés-triangles, le deuxième est celui du modèle à six vertex résolu par E. Lieb [249, 250, 251].

Un bref commentaire sur l'intérêt physique du modèle résolu par M. Widom et P. A. Kalugin (le modèle à six vertex a été introduit, comme on l'a vu, pour étudier l'entropie de la glace de l'eau ; il modélise aussi des composés ferroélectriques comme le diphosphate de potassium (KDP) ou antiferroélectriques [258]). On a découvert dans la première moitié des années 1980 des composés solides, nommés quasicristaux, qui présentent des invariances par rotation qui ne sont pas prédites par la théorie cristallographique, et des quasi-invariances par translation : la transformée de Fourier de la densité d'électrons dans le matériau (que l'on peut observer par diffraction de Bragg — c'est comme cela que ces matériaux ont été découverts) n'est pas discrète comme pour un matériau parfaitement cristallin, invariant par translation, mais pas non plus continue comme pour un matériau désordonné comme les liquides : elle présente des pics principaux comme pour les cristaux entre lesquels s'intercalent des pics secondaires [290]. Pour expliquer pourquoi, à basse température, ces matériaux peuvent former une phase en équilibre thermodynamique ou tout au moins métastable qui n'est pas un vrai cristal (alors qu'une phase cristalline leur permettrait de minimiser leur énergie), il a été suggéré que l'état quasi-cristallin permettait un tel gain d'entropie (grâce au désordre) que l'énergie libre est plus basse dans cet état que dans l'état ordonné. Pour vérifier cette hypothèse, on a tracé un parallèle entre les quasicristaux et des modèles de pavages aléatoires, comme le pavage du plan par des carrés et des triangles équilatéraux. Dans un tel modèle de pavage, il n'y a pas d'énergie mais l'on s'efforce de calculer l'entropie, c'est-à-dire le nombre de configurations possibles, et celle-ci est censée donner une bonne approximation de l'entropie du quasicristal. Le cas du pavage carrés-triangles fournit ainsi une explication schématique (à deux dimensions) de la stabilité thermodynamique de l'état quasi-cristallin [288]. Une autre modélisation du mécanisme de formation des quasicristaux, confirmée par l'expérience dans un cas au moins, est donnée dans [291] : un *pavage* introduit par R. Penrose peut aussi être vu comme un modèle de *recouvrement*, où l'on place dans le plan des cellules de base qui peuvent se recouvrir partiellement suivant certaines règles (la partie en recouvrement des cellules doit correspondre à une décoration prédéfinie de ces cellules). Un quasicristal dans la nature correspond alors à un recouvrement de densité maximale (le nombre de cellules de base par unité d'aire est maximal), et l'on peut interpréter les cellules de base en termes de motifs atomiques (deux motifs peuvent partager un ou plusieurs atomes, d'où la possibilité du recouvrement). Nous ignorons s'il est possible de relier les deux approches, maximisation de l'entropie dans un cas et de la densité dans l'autre.

Le modèle de faces obtenu après reformulation du pavage carrés-triangles et résolu par M.

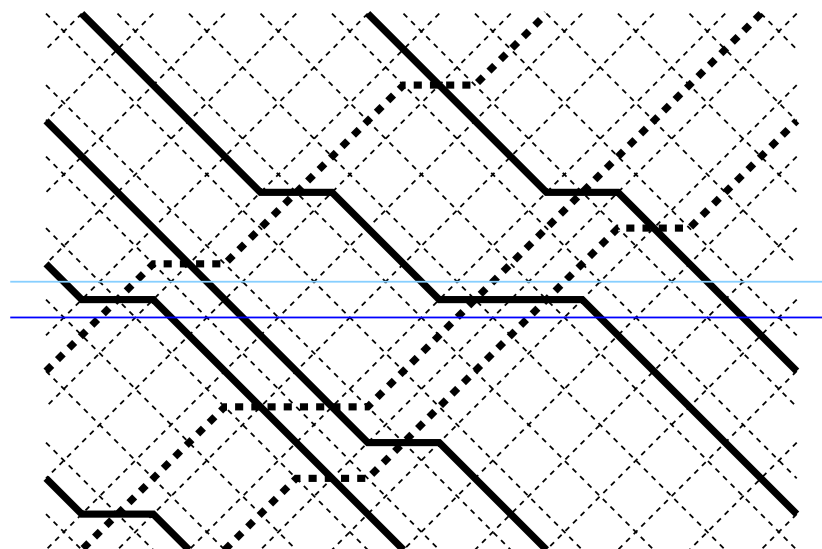


FIG. 12.5 – Une configuration typique de la reformulation en termes de particules L et R des pavages du plan à l'aide de carrés et de triangles équilatéraux. Le réseau carré est indiqué en traits fins. Les lignes d'univers des particules L et R sont en traits gras, continus et interrompus respectivement. Les lignes horizontales servent d'appui à une explication plus loin dans ce paragraphe.

Widom et P. A. Kalugin est défini sur un réseau carré où les liens sont obliques (à 45° avec l'horizontale). Une configuration typique est représentée fig. 12.5 (voir aussi la figure 13.12 p. 289). Les lignes pleines sont les lignes d'univers des particules L et les lignes pointillées (grasses) sont celles des particules R. Deux particules de types différents, une L et une R, se croisent de la manière suivante : l'une des deux poursuit sa route comme si de rien n'était, et l'autre se décale galamment d'une unité, vers la gauche ou vers la droite suivant son type, pour laisser le passage à la première. Deux particules de même type ne peuvent se croiser, et *a fortiori* leurs lignes d'univers se superposer — ou, dit autrement, le poids statistique d'une face où deux particules de même type occupent la même position est nul. Le centre d'une face est ainsi occupé par au plus une particule en tout.

Il est « fastidieux mais facile » de vérifier que les configurations de lignes d'univers de particules L et R sont exactement celles que l'on peut former à l'aide des faces indiquées fig. 12.6 ; voir la figure 13.12 p. 289) pour une configuration dessinée à l'aide de ces faces.

Essayons maintenant de voir que les configurations possibles sont exactement celles où les interactions à plusieurs corps se décomposent en interactions à deux corps. On suppose une ligne du réseau construite, par exemple la ligne la plus basse des deux lignes (horizontales) de vertex soulignées au milieu de la figure 12.5. Elle est entièrement déterminée par la donnée du contenu de tous les centres de faces carrées qu'elle contient : chaque centre est vide, contient une particule L ou contient une R. La ligne suivante (c'est-à-dire sur la figure 12.5 la ligne horizontale du haut) s'obtient par propagation et interaction des particules L et R. Les particules L qui n'ont pas de particules L ou R immédiatement à leur gauche, et les particules R qui n'ont pas de particules L ou R immédiatement à leur droite, se propagent. Les autres peuvent former toutes les combinaisons d'interactions possibles. Par exemple, quand une R jouxte une L sur sa gauche (bas de la figure 12.5), l'une des deux se décale pour laisser passer l'autre comme on l'a vu : il y a deux possibilités. La ligne soulignée du bas, parmi les deux lignes soulignées au milieu de la figure 12.5, montre deux cas où trois particules peuvent interagir. Sur la gauche de cette ligne, comme la particule L s'écarte pour laisser passer la R, il n'y a en fait qu'une interaction à deux corps, la deuxième L en partant de la gauche se propageant simplement. En revanche, sur la droite de cette ligne, la situation ne se réduit pas à une seule

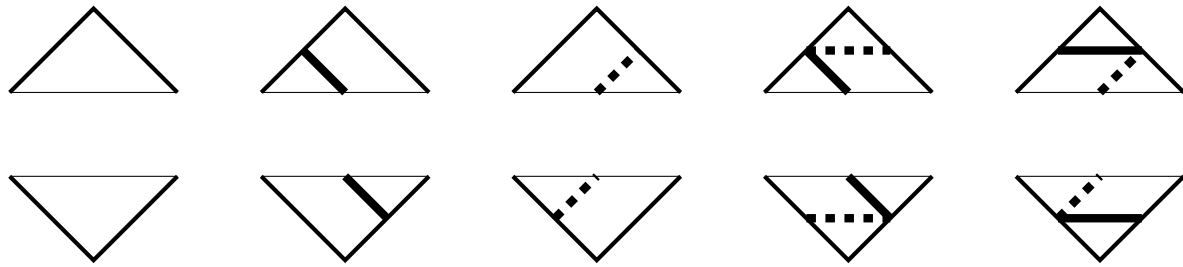


FIG. 12.6 – Les faces carrées de la reformulation en termes de particules L et R des pavages du plan à l'aide de carrés et de triangles équilatéraux sont celles que l'on peut former en associant deux par deux les faces triangulaires ci-dessus : une face pointe en haut et une face pointe en bas [267]. Les côtés épais des triangles sont ceux qui coïncident avec les liens du réseau carré fig. 12.5. Il y a trois façon d'associer les faces triangulaires : suivant les côtés horizontaux ou suivant les côtés obliques (gauches et droits). Dans tous les cas, deux faces ne peuvent être associées par un côté que si ce côté a la même décoration (vide, une particule L, une particule R, ou une L et une R). Les trois façons d'associer les faces triangulaires donnent un jeu de neuf faces carrées.

interaction à deux corps : comme la particule L la plus à droite s'écarte pour laisser passer la R la plus à droite, elle doit ensuite interagir avec la deuxième particule R la plus à droite. La première possibilité est celle qui apparaît sur la figure : c'est encore la L qui s'écarte pour laisser passer la deuxième R. La deuxième possibilité est que la L se propage après avoir croisé la première R et que ce soit la deuxième R qui s'écarte. En ce cas, la deuxième R se retrouve sur le même site que la première, et, le poids statistique de cette (troisième) interaction étant nul, la configuration résultante ne contribue pas à la fonction de partition. En résumé, et ceci se généralise à toutes les lignes du réseau, les configurations qui peuvent succéder à celle de la ligne horizontale du bas fig. 12.5 sont toutes celles que l'on peut former en appliquant autant d'interactions à deux corps que possibles (chaque interaction à deux corps multiplie par deux le nombre de possibilités pour la nouvelle configuration, sachant que certaines possibilités ont un poids statistique nul). Donc nous nous trouvons dans le cas « $A=B+C$ » de la figure 12.4 : la fonction de partition est la somme sur les combinaisons d'interactions à deux corps.

Voyons maintenant le cas du modèle à six vertex. Le bas de la figure 12.1 suggère que l'on peut interpréter [258] ces six vertex en termes de lignes d'univers de particules R qui peuvent se propager (de bas en haut) vers le haut ou vers la droite. Pour simplifier l'interprétation et la rendre plus symétrique, introduisons des « antiparticules » L qui remplissent les liens verticaux laissés vides par les particules R ; chaque lien vertical est ainsi couvert soit par une particule L, soit par une R. On peut, en un certain sens, qualifier ce modèle de particules de *dense*, alors que le modèle obtenu par reformulation des pavages carrés-triangles était dilué puisque certains sites ne portaient pas du tout de particule (mais ce n'est pas la même chose que les modèles de boucles denses où tout lien, vertical comme horizontal, est couvert par exactement un segment de trajectoire de particule). Les six vertex ont maintenant l'interprétation donnée fig. 12.7. Une particule, L ou R, se propage normalement vers le haut (vertex 1 et 3). Mais deux particules L et R sur des sites voisins, la R étant à gauche de la L, peuvent aussi se croiser (vertex 5 et 6). Remarquer qu'ici le croisement est symétrique : la L se décale d'un site vers la gauche tandis que la R se décale d'un site vers la droite, alors que pour le modèle-reformulation des pavages carrés-triangles il y avait deux chiralités de croisements (décalage de la L ou de la R). Les collisions à n corps se factorisent : si une R a croisé une L et qu'elle trouve une ou plusieurs autres L sur son chemin, elle les croise à leur tour (suite, de gauche à droite, d'un vertex 5, de plusieurs vertex 4 et d'un vertex 6). De même si une L trouve plusieurs R sur son chemin (suite d'un vertex 5, de plusieurs vertex 2 et d'un vertex 6). Si les conditions aux limites sont périodiques dans la direction horizontale (ce qui est souvent

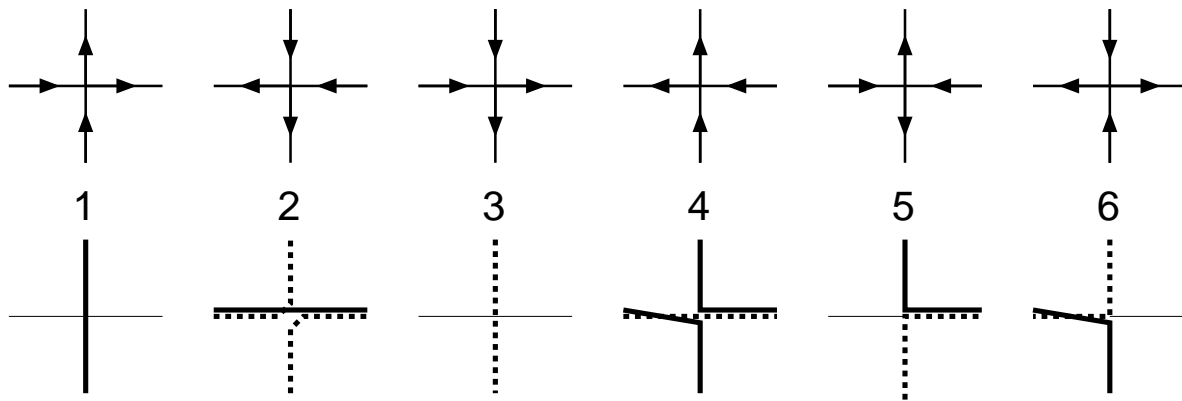


FIG. 12.7 – Réinterprétation des six vertex du modèle de même nom (en haut) en termes de particules L et R (en bas) : les flèches vers le haut, resp. vers le bas, des vertex correspondent à des particules L (lignes grasses continues) resp. R (lignes grasses interrompues).

le cas retenu), il peut y avoir plusieurs interprétations pour des configurations de particules avant et après interactions : par exemple, dans le cas où l'état de départ (indiqué par les liens verticaux inférieurs des vertex d'une ligne du réseau carré) et l'état d'arrivée (indiqué par les liens verticaux supérieurs) sont tous deux constitué d'une particule R au même endroit et de particules L partout ailleurs, il y a deux possibilités de raccordement entre départ et arrivée. Dans la première, toutes les particules se propagent verticalement. Dans la deuxième, la particule R croise successivement toutes les particules L jusqu'à être revenue à son point de départ. La particule L initialement juste à droite de la particule R croise donc cette dernière deux fois : une fois quand la particule R commence son périple, et une fois quand elle l'a presque terminé. Ici encore, la contribution d'un couple de lignes départ-arrivée à la fonction de partition est la somme des poids statistiques de toutes les interprétations de ce couple en termes d'interactions deux-à-deux (cas $A=B+C$).

Modèles de vertex et de faces sur réseaux triangulaires et hexagonaux

Les deux cas précédents concernent des réseaux carrés. Peut-on aussi observer le même phénomène de factorisation des interactions sur un réseau triangulaire, où les vertex ont non plus quatre mais six liens, et sur un réseau hexagonal, où ils ont trois liens ? Ou encore pour un modèle de faces triangulaires ou hexagonales ? La réponse est oui.

Nous noterons dans la suite *vertex- n* pour « vertex à n liens », et de même *face- n* pour « face à n côtés ».

Modèles de vertex-3 sur réseau hexagonal. On peut montrer facilement que, dans ce cas, il y a systématiquement factorisation des interactions suivant le schéma « $A=B=C$ ». Donc, dans ce cas, le modèle est soluble *pourvu qu'il y ait conservation des particules* : à partir du moment où l'on peut interpréter les vertex comme des lignes d'univers de particules, la solubilité est assurée. On suppose dans ce paragraphe que la règle de conservation est observée. Commençons par regrouper les vertex-3 six par six pour former des hexagones, de sorte que chaque vertex appartienne à un et un seul hexagone (fig. 12.8 à gauche). Un hexagone est en quelque sorte une interaction à trois corps, puisqu'on peut voir les six liens qui croisent ses côtés comme trois particules entrantes et trois particules sortantes. Au sein de chaque hexagone, on peut associer, en contractant trois liens comme indiqué sur la figure 12.8 à droite, les vertex-3 deux par deux en vertex-4, suivant deux manières possibles : chaque manière est une interprétation en termes d'interactions à deux corps de l'interaction à trois corps que représente l'hexagone. Chacune des deux manières a le même poids statistique, égal au produit des poids des six vertex-3 ; nous sommes dans le cas « $B=C$ » évoqué plus haut.

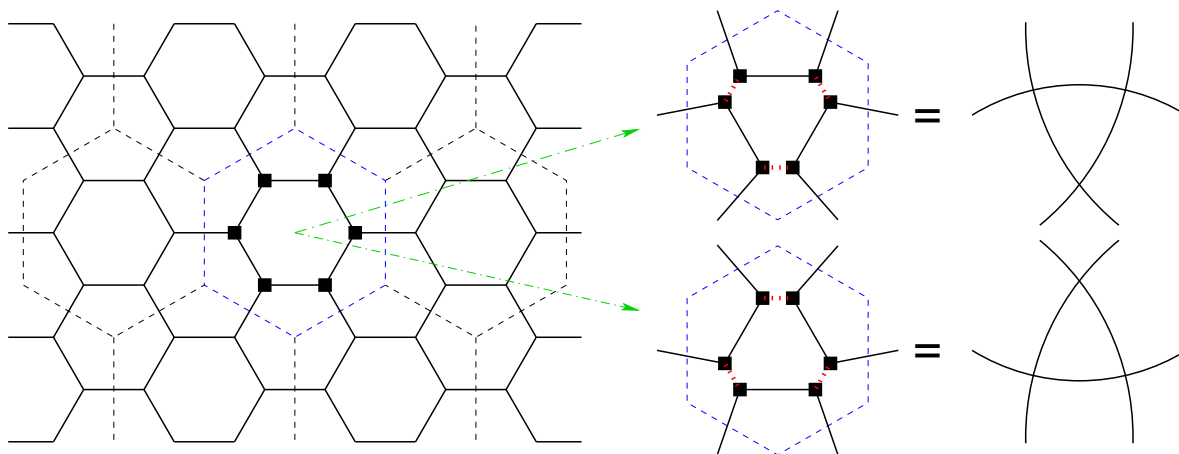


FIG. 12.8 – Après avoir regroupé les vertex-3 du réseau hexagonal (à gauche) six par six au sein d’hexagones (indiqués en pointillés), on peut formellement opérer des fusions de vertex-3 au sein de chaque hexagone de deux manières différentes (à droite, en haut et en bas). Cela montre qu’un hexagone est analogue à une collision à trois corps, et que celle-ci se factorise en trois collisions à deux corps de deux manières différentes (mais de même poids statistique, égal au produit des poids des six vertex-3 contenus dans l’hexagone).

La règle de conservation des particules (ou l’existence d’une interprétation des vertex en termes de lignes d’univers de particules) n’est pas automatique. Elle est observée par exemple dans les modèles de vertex-3 à q couleurs définis de la façon suivante : pour le besoin de la discussion on fixe une direction, par exemple la verticale. Les vertex-3 sont classés en deux types : ceux qui ont un lien vertical en bas (ils sont en forme de Y) et ceux qui ont un lien vertical en haut (en forme de λ). On choisit un ensemble E de q paires de couleurs, parmi les $q(q-1)/2$ paires possibles, et à chaque paire on associe une des q couleurs. Les $2q$ vertex de type Y et les $2q$ vertex de type λ sont ceux formés en coloriant les deux liens à l’opposé du lien vertical à l’aide d’une paire P de couleur de E et en coloriant le lien vertical à l’aide de la couleur associée à P . Le modèle ainsi défini est lié à un modèle de Perk et Schultz : si l’on associe deux par deux, par les liens verticaux, les vertex-3 (un Y et un λ à chaque fois) en vertex-4 de toutes les manières possibles, le poids d’un vertex-4 étant le produit des poids des vertex-3 qui le forment, on obtient un modèle de Perk-Schultz [292, 293, 294] à q couleurs dans une limite singulière, à savoir pour une valeur particulière du *paramètre spectral* (voir ci-dessous la définition) qui annule les poids de certains vertex [295]. Les modèles de Perk et Schultz constituent la généralisation à q couleurs du modèle à six vertex : ce sont les modèles qui respectent la règle de la glace (pour chaque vertex-4 du modèle, le nombre de liens de chaque couleur doit être pair, ce qui n’autorise que les vertex unicolores et les vertex bicolores 2-2). Par exemple, pour $q = 2$, on peut ainsi retrouver les vertex-4 du modèle à huit vertex dans le cas dit des fermions libres (voir fig. 12.9). Il serait intéressant de savoir si la construction précédente donne en fait tous les modèles de vertex-3 sur réseau triangulaire solubles ou s’il y en a d’autres.

Une autre manière de caractériser la solubilité d’un modèle de vertex-3 repose sur la construction suivante : on contracte tous les liens ayant une certaine direction, de manière à fusionner les deux vertex à leurs extrémités en un seul vertex (par exemple, sur la figure 12.8 à gauche, on peut contracter tous les liens horizontaux). On est ainsi ramené à un modèle sur réseau carré. Le modèle sur réseau triangulaire est soluble si, et seulement si, le modèle de vertex-4 sur réseau carré l’est (ce qui est le cas s’il y a loi de conservation et factorisation des interactions sur le réseau carré).

Modèles de faces triangulaires (faces-3). C’est le cas dual du précédent. On peut soit regrouper les faces-3 six par six pour former des hexagones, puis regrouper au sein des hexa-

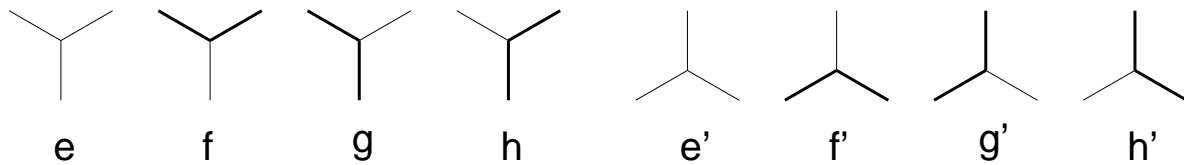


FIG. 12.9 – Le modèle de vertex-3 illustré ci-dessus, avec les poids e, f, g, h pour les vertex-3 en forme de Y et e', f', g', h' pour les vertex-3 en forme de λ , redonne par fusion le modèle à huit vertex. Si les poids des huit vertex (fig. 12.1) sont respectivement $a, a', b, b', c, c', d, d'$, l'association des vertex-3 ci-dessus deux par deux selon les liens verticaux conduit à huit vertex de poids respectifs $a = ee', a' = ff', b = gh, b' = gh', c = ef', c' = e'f, d = hh', d' = gg'$ et donc la condition dite des fermions libres $aa' + bb' = cc' + dd'$ s'écrit ici $ee'ff' + gg'hh' = ee'ff' + gg'hh'$; elle est vérifiée. Ainsi, quelles que soient les valeurs des poids des vertex-3, le modèle est soluble. Cela s'explique par le fait que les vertex choisis possèdent une loi de conservation (nous avons choisi 4 vertex-3 particuliers sur les $2^3 = 8$ possibles pour chaque type, Y et λ), et par le fait que le réseau hexagonal assure automatiquement la factorisation des interactions — voir texte.

gonés, de deux manières, les faces-3 deux par deux pour former des faces carrées : cas $A=B=C$ de la factorisation des interactions, soit regrouper les faces-3 deux par deux suivant les liens du réseau qui ont une direction donnée pour se ramener à un modèle de faces carrées. Ce cas comprend en particulier le modèle des pavages du plan à l'aide de carrés et de triangles équilatéraux : de Gier et Nienhuis ont montré [267] que le modèle de faces carrées que l'on trouve par fusion des faces triangulaires de la figure 12.6 est une limite singulière de la famille de modèles solubles sur réseau carré à 3 couleurs de Perk-Schultz.

Modèles de vertex-6 sur réseau triangulaire. Nous avons recensé deux situations où un tel modèle est soluble (la deuxième pouvant être vue comme un cas particulier de la première) :

1. Le modèle de vertex-6 est un cas limite de modèle de vertex-4 soluble sur réseau de Kagomé ([258], chap. 11). Les interactions sur les vertex à six liens se factorisent suivant le cas « $A=B=C$ ». C'est-à-dire : il existe un jeu de vertex-4 tel que les vertex-6 se décomposent en triplets de vertex-4, et les deux façons de les décomposer ont le même poids (le jeu de vertex-4 forme donc un modèle exactement soluble). Alors on peut introduire un modèle soluble sur réseau de Kagomé, tel que chaque site du réseau triangulaire soit le résultat de la contraction d'un petit triangle du réseau de Kagomé (il y a deux chiralités possibles). De là, on peut se ramener au cas de deux réseaux carrés (fig. 12.10). Autrement dit, le modèle de vertex-6 est soluble parce que le modèle de vertex-4 l'est.
2. Le modèle de vertex-6 est en fait un modèle de faces triangulaires (soluble), *i.e.* les poids statistiques des vertex à six liens sont tels que les configurations du modèle sur réseau triangulaire, avec leurs poids statistiques, sont exactement les mêmes que celles d'un modèle de faces triangulaires, ou encore, en passant au réseau dual défini plus haut, d'un modèle de vertex-3 sur réseau hexagonal. Il est facile de tester si cette équivalence existe (surtout avec un ordinateur !) : étant donné le jeu de vertex-6, on écrit la liste des faces triangulaires possibles en leur attribuant comme poids par exemple le produit des racines sixièmes des poids des trois vertex-6 qui les bordent. Les poids des faces doivent être alors définis sans ambiguïté (même si une face peut être formée par plusieurs triplets de vertex), d'une part, et d'autre part la liste des vertex-6 que l'on peut former avec ces faces doit coïncider avec celle des vertex-6 du modèle de départ. Ces conditions sont nécessaires et suffisantes pour que le modèle de vertex-6 se ramène à un modèle de faces triangulaires, donc que les interactions se factorisent (*à condition toujours qu'une loi de conservation existe*). Pour un tel modèle et à cette condition, il y a encore factorisation des interactions suivant le mode « $A=B=C$ » comme on l'a vu ci-dessus.

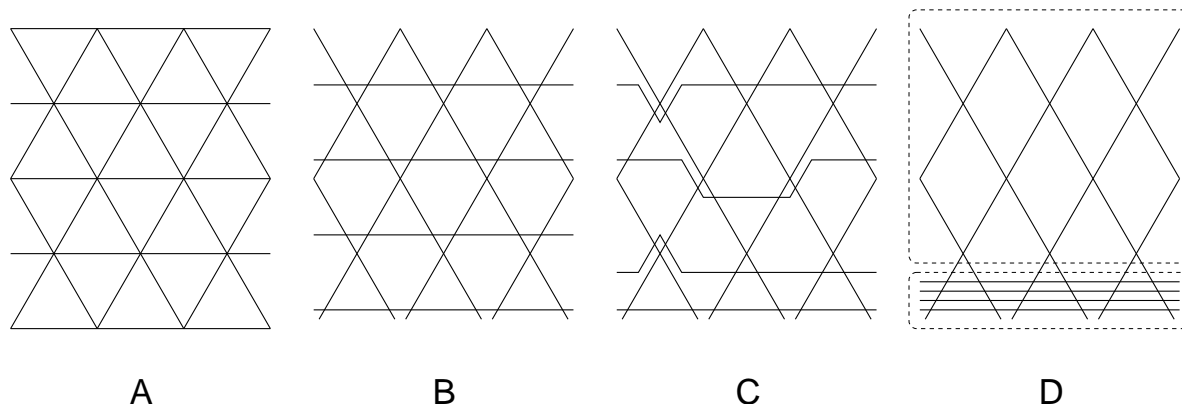


FIG. 12.10 – Un cas de solubilité d'un modèle de vertex-6 est celui où ce modèle, défini sur réseau triangulaire (A), est en fait une limite d'un modèle de vertex-4 sur réseau de Kagomé (B) qui possède la propriété de factorisation des interactions à n corps selon le mode « $A=B=C$ ». C'est-à-dire tel que l'ordre de croisement des particules n'influe pas sur le poids statistique (cf. fig. 12.4). La fonction de partition est alors inchangée même si l'on change l'ordre des interactions à deux corps en décalant certaines parties de lignes (C). On peut, grâce à cette propriété, se ramener au calcul de la fonction de partition sur deux réseaux carrés (D, chacun des réseaux carrés est indiqué par un cadre en trait interrompu).

Modèles de faces hexagonales. C'est le cas dual du précédent (vertex-6), et les deux situations ont leur équivalent :

1. Cas limite d'un modèle de faces 4 (soluble) sur le dual du réseau de Kagomé. Les interactions dans les hexagones se factorisent suivant le cas « $A=B=C$ ». Alors on peut étendre le modèle d'hexagones à un modèle sur le réseau dual du réseau de Kagomé, en remplaçant chaque hexagone par trois losanges (il y a deux chiralités possibles), puis, de là, se ramener à deux réseaux carrés (fig. 12.11).
2. Le modèle de faces-6 est en fait un modèle de vertex-3 (le poids statistique des faces-6 est tel qu'elles se décomposent en fait en associations de 6 vertex-3); on est alors ramené au cas, vu ci-dessus, d'un modèle de vertex-3, où il y a forcément factorisation des interactions dès qu'une loi de conservation existe.

Notons que, si l'on peut s'efforcer comme nous venons de le faire de donner une vision géométrique des lois de conservation et de la factorisation des interactions (de la matrice S), cette vision est parfois compliquée. Une approche plus systématique et algébrique, esquissée plus loin, est celle des équations de Yang-Baxter. Cependant, cette vision géométrique est souvent bien utile pour chercher des modèles solubles et même pour mener des calculs, notamment à l'aide de l'*Ansatz* de Bethe.

12.2.2 À propos de l'*Ansatz* de Bethe

Principe et présentation de la technique

Matrices de transfert. Rappelons brièvement le principe de la technique de la matrice de transfert. Une fois qu'on a défini un modèle (de vertex par exemple) avec ses poids statistiques, il s'agit de calculer la fonction de partition à la limite thermodynamique (c'est-à-dire quand la taille du réseau tend vers l'infini) et des quantités reliées. Voyons déjà le cas d'un modèle unidimensionnel; par exemple le modèle d'Ising sur une chaîne de N spins, où chaque site porte un spin qui vaut 1 ou -1. Soit deux vecteurs linéairement indépendants $|1\rangle$ et $|-1\rangle$ (la base canonique du \mathbb{R} -espace vectoriel \mathbb{R}^2 fait l'affaire). On peut représenter la loi de probabilité pour un spin où ce spin prend la valeur 1 avec probabilité p et la valeur -1 avec probabilité $1-p$ comme le vecteur $|P\rangle = p|1\rangle + (1-p)|-1\rangle$. Supposons que la chaîne de spins est ouverte et que

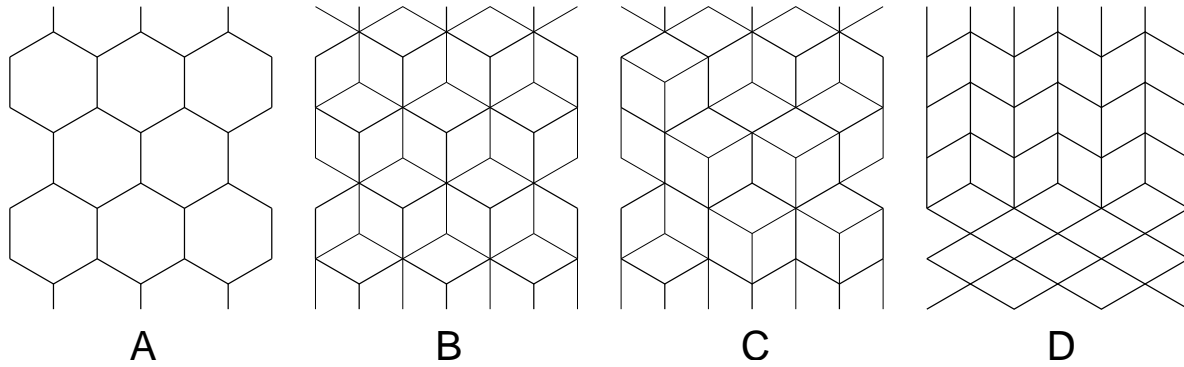


FIG. 12.11 – Un modèle de faces-6 (A) est soluble s’il s’obtient à partir d’un modèle de faces-4 sur le dual du réseau de Kagomé (B) où l’ordre des interactions à deux corps ne change pas le poids statistique (cas « $A=B=C$ »). Alors on peut procéder à des réarrangements locaux (C) et, de proche en proche, se ramener au calcul de la fonction de partition sur deux réseaux carrés (D).

cette loi de probabilité décrit les conditions à une extrémité (repérée par l’indice $i = 1$ parmi $\{1, 2, \dots, H\}$). Si la température inverse est β (en unités adimensionnées telles que l’énergie mise en jeu dans un lien entre deux spins lors du retournement d’un spin soit 2), le poids statistique d’un lien entre deux spins de même valeur est proportionnel à $\exp(-\beta)$ tandis que celui d’un lien entre deux spins opposés est $\exp(+\beta)$. Dans le cas où $H = 2$, pour savoir la loi de probabilité du spin situé en $i = 2$, il suffit alors de chercher les coefficients du vecteur $M|P\rangle$ dans la base $| - 1\rangle, |1\rangle$ et de les normaliser, où M est l’endomorphisme de \mathbb{R}^2 dont la matrice dans la base $| - 1\rangle, |1\rangle$ est

$$\begin{pmatrix} e^\beta & e^{-\beta} \\ e^{-\beta} & e^\beta \end{pmatrix}. \quad (12.1)$$

Cette matrice est appelée matrice de transfert car elle permet de relier les lois de probabilité d’un site à l’autre sur le réseau. Si l’on souhaite obtenir la fonction de partition de cette chaîne de longueur 2, il suffit de faire la somme des éléments de $M|P\rangle$, ou, dit autrement, de calculer le produit scalaire $\langle O|M|P\rangle$ de ce vecteur avec l’état de projection $\langle O| = \langle 1| + \langle -1|$ (forme linéaire duale du vecteur de coordonnées $(1, 1)$; il n’est pas nécessaire de normaliser). Si la condition à la limite $i = 1$ n’est pas fixée mais libre (contrairement à ci-dessus où $|P\rangle$ était supposé connu), on remplace $|P\rangle$ par la somme sur les états possibles du spin en $i = 1$, $|O\rangle = | - 1\rangle + |1\rangle$. En itérant simplement ce procédé, on obtient la fonction de partition pour une chaîne ouverte de H spins : $Z = \langle O|M^{H-1}|O\rangle$. Si la chaîne est fermée (conditions aux limites périodiques, qui ont l’avantage bien connu de diminuer les effets de taille finie par rapport aux autres conditions aux limites), l’état du spin en $i = 1$ apparaît deux fois et la fonction de partition est la trace de l’opérateur M^{H-1} . À la limite thermodynamique où $H \rightarrow +\infty$, Z est alors donnée, à des corrections exponentiellement petites en H près et sauf cas particulier, par la somme des puissances $H - 1^{\text{es}}$ des valeurs propres de M de plus grand module (qui peuvent être complexes). Si les poids statistiques (*i.e.* les coefficients de la matrice de transfert) sont tous positifs ou nuls, ce qui est souvent le cas pour les modèles qui ont physiquement un sens, le théorème de Perron-Frobenius nous assure qu’il y a au moins une valeur propre réelle positive, et qu’un vecteur propre associé a des coefficients tous positifs ou nuls. Cette technique se généralise très simplement aux modèles de vertex et de faces.

Elle se généralise aussi à un réseau en forme d’échelle et non plus de corde à nœuds, ou à n’importe quel réseau carré de largeur L finie. Le nombre d’états possibles sur une ligne contenant L spins d’Ising est 2^L , donc la matrice de transfert est de cette taille (et carrée). Le nombre de valeurs propres croît exponentiellement avec L (et ceci est observé aussi sur des réseaux non carrés ou des modèles autres que ceux de spins d’Ising). Cependant, en général le nombre de valeurs propres de plus grand module croît seulement algébriquement avec L ,

si bien que ce nombre ne contribue pas extensivement à l'énergie libre du modèle à la limite $H \rightarrow +\infty$ puis $L \rightarrow +\infty$.

La technique précédente seule ne permet pas d'accéder facilement à cette limite : il est facile de faire tendre H vers l'infini, mais en pratique la valeur de L est limitée par la taille des matrices de transfert que l'on peut diagonaliser (pour $L = 16$, la matrice du modèle d'Ising est déjà de taille 65536 et peu d'ordinateurs de bureau sont capables aujourd'hui de la diagonaliser en une durée utile!). C'est là qu'intervient la particularité des modèles intégrables.

Équations de l'Ansatz de Bethe (EAB). On observe que, quand les conditions d'intégrabilité discutées précédemment sont réunies, à savoir lois de conservation et factorisation des interactions, les vecteurs propres de la matrice de transfert du modèle ont une forme bien particulière, donnée par l'Ansatz de Bethe (à une normalisation près bien entendu). La forme est la même pour tous les vecteurs propres : il s'agit d'une somme d'ondes planes par morceaux, paramétrées par un ensemble de nombres complexes (notons-les u_i ; ils représentent moralement les vitesses de phases et taux d'atténuation des ondes). Les valeurs de ces paramètres u_i diffèrent d'un vecteur propre à l'autre et permettent de caractériser un vecteur. Elles sont, si le réseau a des conditions aux limites périodiques pour les lignes de largeur L , solutions d'équations algébriques, appelées *équations de l'Ansatz de Bethe* (EAB), dont le degré est de l'ordre de L , et il y a de l'ordre de L équations (une par nombre complexe u_i). Chaque équation exprime une condition de cohérence qui peut s'énoncer ainsi : « quand une particule se déplace d'une largeur de réseau exactement, l'onde plane associée acquiert un déphasage et une atténuation égaux au déphasage et à l'atténuation résultant des croisements successifs de toutes les autres particules ». La technique n'est cependant pas limitée aux conditions aux limites périodiques (cylindriques), voir [296] pour le cas de parois réfléchissantes. On peut assez facilement reformuler ces équations de manière à y faire apparaître des constantes entières telles qu'il existe une bijection entre les constantes et les nombres u_i . De plus, on peut très souvent prédire quels choix de valeurs pour ces constantes mènent à des vecteurs propres dont la valeur propre associée est de plus grand module (même si cette prédiction est rarement prouvée). La valeur de la fonction de partition pour L et H grands est donc accessible au seul prix de la recherche d'une ou de quelques solutions des $\approx L$ équations algébriques. Même si l'on ne sait pas résoudre exactement ces équations, leur résolution numérique (pour un choix des constantes) est beaucoup plus rapide que la diagonalisation de la matrice de transfert. Bien sûr, la recherche de toutes leurs solutions, qui serait nécessaire pour le calcul de toutes les valeurs propres de la matrice, demande un temps qui croît exponentiellement en L ou en une puissance de L , comme la diagonalisation directe : il n'y a pas ici de miracle. La technique de l'Ansatz de Bethe fonctionne donc parce que l'on arrive à éliminer *a priori* du calcul toutes les valeurs propres sous-dominantes.

Précisons que, dans certains cas, et notamment celui du modèle que nous avons étudié, les vecteurs propres donnés par l'Ansatz de Bethe sont uniquement ceux dont la valeur propre associée est non nulle. Leur nombre est donc strictement inférieur à la taille de la matrice de transfert, mais cela n'est pas gênant pour le calcul de la fonction de partition puisque les valeurs propres nulles n'y contribuent pas pour H grand. Une difficulté pourrait survenir si les conditions au bord du réseau sont telles que la loi de probabilité de ce bord est représentée exactement par un vecteur propre de valeur propre nulle. Dans notre cas, le danger est écarté car, comme tous les coefficients de la matrice de transfert (c'est-à-dire les poids statistiques des passages d'une ligne du réseau à la suivante) sont positifs, les vecteurs propres de valeurs propres nulles ont des coefficients négatifs ou complexes, et ne peuvent donc pas représenter une loi de probabilité.

Un autre point important est que, du fait des lois de conservation et notamment de celle du nombre de particules d'une ligne à l'autre du réseau, la matrice de transfert est diagonale par blocs : chaque bloc correspond à un jeu de valeurs pour les paramètres conservés. On peut donc souvent étudier l'Ansatz de Bethe à nombre(s) n de particules (L , ou R , ou L et R ...) fixé. La densité de particule n/L est alors un paramètre intensif qui s'ajoute aux autres (les

poids des vertex ou des faces ou...).

Limite continue des EAB. En général, les nombres u_i qui correspondent à une valeur propre de plus grand module se disposent de manière bien particulière dans le plan complexe : ils sont régulièrement répartis le long d'une (ou plusieurs) courbes. Plus L et les nombres de particules sont grands, plus les u_i sont tassés, mais toujours sur la courbe. La forme de cette courbe dépend uniquement des paramètres intensifs du modèle (en particulier n/L). On peut alors postuler (et c'est bien vérifié numériquement) une forme continue des EAB valable pour la limite thermodynamique $L, n \rightarrow +\infty$ (à paramètres intensifs fixés), et qui fait intervenir des intégrales à noyaux d'une ou plusieurs fonctions inconnues dont les valeurs sont liées à la densité des u_i dans le plan complexe. Pour cette raison, nous parlerons indifféremment dans la suite de limite continue ou de limite thermodynamique des EAB. Dans des cas très particuliers où la topologie des courbes limites est remarquable (par exemple, le contact de deux courbes en forme de parenthèses, qui en général soit ne se touchent pas, soit se croisent : voir fig. 12.12), on peut arriver à résoudre les EAB continues. Ces cas particuliers semblent correspondre à une symétrie plus grande du modèle pour la valeur correspondante des paramètres intensifs, mais cette symétrie nous a semblé rarement explicitée et comprise dans la littérature [297].

Dans les modèles où les degrés de liberté (discrets comme toujours dans notre étude) ne peuvent prendre qu'un nombre fini de valeurs, on observe le phénomène suivant. Fixons tous les paramètres intensifs sauf la densité de particules n/L . Chaque valeur de n correspond à un bloc de la matrice de transfert, donc à un module de valeur propre maximal. Si n est libre, c'est-à-dire s'il n'est pas fixé par les conditions aux limites et haut et/ou en bas du réseau de hauteur H (ce qui est vrai par exemple dans le cas de conditions aux limites périodiques dans la direction verticale), la fonction de partition s'exprime comme la somme des contributions des différents blocs (ou secteurs) indicés par n : chaque bloc a un module de valeurs propres maximal. Une (ou rarement quelques) valeurs de n maximisent ce module. Remarquablement, la valeur de n qui donne cette contribution prépondérante est exactement celle pour laquelle on observe la topologie particulière des courbes limites des u_i (à la limite $L \rightarrow +\infty$). C'est le cas en particulier pour les modèles à six ou à huit vertex [258] ou pour celui des pavages aléatoires carrés-triangles [290]. Cette coïncidence permet alors d'aboutir à une formule close (algébrique) pour la fonction de partition, l'énergie libre, l'entropie, *etc.*

Il y a au moins trois techniques pour la résolution des EAB à la limite continue ; la troisième sera illustrée un peu plus loin sur l'exemple d'un modèle de pavages aléatoires de carrés et de triangles, puis utilisée au chapitre 13. La première [298, 299] s'applique dans certains cas où il n'y a qu'une famille de solutions des EAB (que les u_i ou que les v_i par exemple) ; elle consiste à transformer les EAB en une équation intégrale faisant intervenir la fonction densité des solutions le long de leur courbe (comme dans la troisième technique ci-dessous), à résoudre l'équation intégrale dans le cas non physique où la densité de particules (nombre de particules divisé par la largeur du système) est négative puis à en déduire la solution dans le cas physique par prolongement analytique. Le ressort de cette technique est que, quand la densité de particules est négative, les solutions des EAB se placent en un ou plusieurs segments *le long de l'axe réel*, donc décrire leur courbe limite est très facile : il suffit de donner les extrémités du ou des segments. La fonction densité de racines, qui a une coupure le long de la courbe des racines, est facile à trouver : une fonction avec une coupure le long d'un segment fini de l'axe réel est, moralement, une fonction racine carrée. La deuxième technique, que nous citons pour mémoire, vaut pour les modèles denses comme le modèle à six vertex et les modèles de Perk et Schultz (la figure 12.7 montre comment le modèle à six vertex peut être réinterprété comme un modèle dense de particules ; pour les modèles de Perk et Schultz nous ne donnons pas la construction similaire mais c'est une conséquence de la règle de la glace que vérifient ces modèles). Cette technique semble valable pour un nombre quelconque de familles de solutions des EAB, u_i, v_i , *etc.* mais nous la discutons par simplicité dans le cas où il n'y en a qu'une, disons les u_i . Pour un modèle dense, on constate que les nombres complexes u_i se répartissent sur un cercle (ou bien sur un segment de droite) dans le plan complexe

(voir [258] chap. 8 pour le modèle à six vertex ou encore [300, 274] pour les modèles de Perk et Schultz à n familles de solutions des EAB avec *Ansatz* de Bethe emboîté). De plus, les noyaux des intégrales qui apparaissent dans les EAB à la limite continue peuvent être mis sous une forme telle que les intégrales sont en fait des produits de convolution. Dans le cas (le plus intéressant) où les u_i se répartissent sur un cercle, cette transformation utilise une bijection entre un certain paramètre réel et l'argument des u_i , le paramètre réel devenant la variable d'intégration. À la densité de particules telle que se produit le phénomène topologique de contact mentionné ci-dessus (pour le modèle à six vertex, c'est pour une densité de particules L égale à celle des particules R , donc à $L/2$ sur un réseau de largeur L , que se produit le phénomène remarquable), l'intervalle que parcourt le paramètre réel quand on énumère les u_i est exactement la droite réelle tout entière, si bien que les intégrales qui apparaissent dans les EAB à la limite continue sont des intégrales sur \mathbb{R} (et non plus sur un intervalle fini) et sont invariantes par translation. La symétrie supplémentaire mentionnée précédemment prend ici la forme d'une invariance par translation dans l'espace du paramètre réel (et elle correspond pour le réseau à la situation où le nombre de flèches de chaque sens sur les vertex fig. 12.1 est le même). On peut alors utiliser la transformée de Fourier pour inverser les équations intégrales, ce qui permet d'exprimer explicitement la densité des u_i puis toutes les quantités intéressantes à la limite thermodynamique.

La troisième technique, due à P. A. Kalugin [289], s'applique même pour des modèles dilués, où les u_i se répartissent sur des courbes \mathcal{C} qui ne sont en général pas des cercles. Les fonctions inconnues qui interviennent dans les EAB à la limite continue sont, postule-t-on, des fonctions qui seraient méromorphes (*i.e.* régulières en dehors de quelques singularités isolées) si elles n'avaient pas chacune une coupure. Cette coupure est située sur une courbe limite des u_i resp. des v_i (ou d'une quantité reliée, par exemple la courbe limite des nombres $-1/u_i$ resp. $-1/v_i$), et la fonction en question y a un saut fini. L'amplitude du saut s'exprime (à une constante multiplicative près) comme la valeur en ce point d'une autre des fonctions qui apparaissent dans les EAB. Étant donné une combinaison linéaire (notons-la f) de ces fonctions, du fait des coupures, on est naturellement conduit à considérer le prolongement analytique (méromorphe) de f sur une surface plus grande que le plan complexe, obtenue en raccordant des copies du plan complexe, privé des coupures, le long de ces coupures. Cette surface plus grande est appelée surface de Riemann de f et les différentes copies du plan complexe constituent ses *feuilletts*. Si f était la fonction logarithme complexe, la coupure serait située sur l'axe des nombres réels négatifs ou nuls, où f ferait un saut d'amplitude $2i\pi$, et la surface de Riemann serait une hélice infinie, chaque feuillet faisant un tour de l'hélice. Les feuilletts seraient en bijection avec les nombres entiers relatifs. Dans notre cas, sur tous les feuilletts, f s'exprime explicitement comme combinaison linéaire des fonctions qui apparaissent dans les EAB, mais, pour assurer la continuité de f , les coefficients de ces combinaisons linéaires changent quand on passe d'un feuillet à l'autre en franchissant ce qui était une coupure. Les nouveaux coefficients sont en pratique l'image des anciens par des opérateurs linéaires, dits de *monodromie* (il y a un opérateur par coupure; ces opérateurs sont des endomorphismes de l'espace vectoriel des combinaisons linéaires des fonctions de départ, à savoir celles qui interviennent directement dans les EAB et sont proportionnelles aux densités de nombres u_i pour chaque type de particules). Le prolongement analytique obtenu, c'est-à-dire en pratique la liste des coefficients des combinaisons linéaires sur les différents feuilletts, dépend de la combinaison linéaire de départ (celle qui définit f sur un feuillet de départ).

Des courbes limites \mathcal{C} des solutions des EAB à deux familles de particules (donc deux familles de solutions u_i et v_i) sont schématisées fig. 12.12. En général, si l'on part de l'origine et que l'on décrit une courbe fermée, on peut couper un nombre (entier) arbitraire de fois les courbes \mathcal{C} , donc le prolongement analytique f fait intervenir une infinité de combinaisons linéaires sur les différents feuilletts (cas A et B sur la figure). Mais, dans les cas topologiquement remarquables évoqués plus haut, on croise toutes les courbes le même nombre de fois sur un tel chemin, car ces courbes sont exactement jointives et forment un ou plusieurs chemins fermés (cas C et F). Les combinaisons linéaires sont donc décrites par un seul paramètre entier. Mieux,

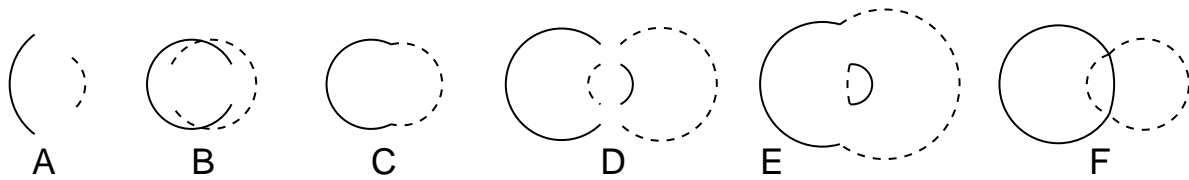


FIG. 12.12 – Dans les cas les plus simples, les modèles dilués à deux familles de particules font intervenir deux courbes limites pour les solutions u_i et v_i des EAB à la limite $L \rightarrow +\infty$. En général ces courbes ne se touchent pas (A) ou se coupent (B). La situation où l'on peut faire le calcul analytique à la limite $L \rightarrow +\infty$ de la fonction de partition, en utilisant des fonctions algébriques, est celle où les courbes se touchent tout juste (C). Dans des cas plus complexes, il y a quatre courbes limites ou plus qui viennent en familles. D montre un cas où il y a deux familles de deux courbes (une famille en traits pleins et l'autre en traits interrompus). En général ces courbes ne se touchent pas ou se coupent. Une première situation particulière est celle où les familles se touchent sans que les membres d'une même famille soient eux-mêmes en contact (E); en fait, nous conjecturons que, dans un tel cas, il est toujours possible de se ramener au cas F où toutes les courbes sont en contact (voir le texte). Dans le cas encore plus remarquable où toutes les courbes sont en contact (F), on peut faire le calcul de la fonction de partition à l'aide de fonctions algébriques.

il se trouve en pratique, pour certains modèles où les degrés de liberté prennent un nombre fini de valeurs, que l'opérateur qui fait passer d'une combinaison linéaire à la suivante après parcours du chemin fermé qui coupe les courbes jointives (c'est-à-dire le produit des opérateurs de monodromie de chacune des courbes) est idempotent — notons l'indice d'idempotence i . Donc le nombre de combinaisons linéaires dans la ou plutôt les expressions de f sur les différents feuillettes de sa surface de Riemann est fini, et, en faisant un changement de variable algébrique qui permet de mettre en correspondance le plan complexe, découpé en i régions, avec les i feuillettes, on peut se ramener à un problème qui fait intervenir une unique fonction méromorphe inconnue g . Il n'est alors pas très difficile de déterminer g d'après ses résidus, puis de remonter aux fonctions f , puis aux quantités thermodynamiques du modèle. Nous verrons tout ceci sur l'exemple tiré de la revue [290], qui correspond aux cas A, B et C de la figure 12.12. La référence [297] présente une situation où il y a six courbes limites (correspondant à trois types de particules, deux types L et un type R), tandis que la revue [290] étudie un cas plus simple où il n'y en a que deux (un type L et un type R), et nos modèles auront deux types de particules et quatre courbes limites (courbes D, E, F sur la figure). Remarquons que l'indice d'idempotence (6 dans le modèle tiré de [290]) de l'opérateur correspondant au franchissement des deux courbes jointives a apparemment un lien avec la géométrie du modèle statistique sous-jacent, et peut-être avec la symétrie de la phase où l'entropie est maximale, puisque l'on trouve respectivement les indices 4, 5 et 6 pour les pavages rectangles-triangles octogonal [301, 302], décagonal (5 orientations pour les rectangles du pavage) [297] et celui de notre exemple (3 orientations). De même, le modèle des trimères triangulaire [303, 304] défini sur réseau triangulaire, avec une symétrie entre six phases (correspondant aux six sous-réseaux du réseau triangulaire) dans l'état d'entropie maximale, fait intervenir un indice d'idempotence 6, et nous avons trouvé le même indice dans les modèles que nous avons étudié (chapitre 13). Mais cette relation n'est pour l'instant pas pleinement expliquée.

Il reste des situations intermédiaires entre courbes \mathcal{C} jointives et courbes \mathcal{C} qui se coupent ou ne se touchent pas, à savoir le cas E sur la figure 12.12. Nous conjecturons, en généralisant ce que nous avons constaté au chapitre 13 sur les modèles que nous avons introduits, que ce cas peut être ramené au cas F si l'on introduit un poids statistique supplémentaire sur les vertex qui a pour effet de multiplier toutes les racines des EAB par une constante et de faire subir des homothéties de rapports *différents* aux courbes limites des EAB. En choisissant bien la valeur de ce poids statistique, les rapports des homothéties sont tels que les courbes se

touchent. Ajouter ce poids statistique n'entraîne pas de perte de généralité car il peut aussi être mis en facteur dans la fonction de partition, donc il est facile de calculer la fonction de partition quand ce poids vaut un (ce qui nous intéressait au départ) à partir de la fonction de partition quand il prend sa valeur particulière — cette valeur particulière peut être calculée.

Un exemple : le modèle de pavages aléatoires carrés-triangles

L'exposé précédent est volontairement dépourvu d'équations, mais en contrepartie il a le défaut d'une trop grande abstraction. Illustrons maintenant les différents concepts qu'il introduit dans le cas, simple mais très riche, du modèle résolu par M. Widom et P. A. Kalugin dont nous avons déjà parlé [290]. Ce modèle peut être vu comme un modèle de faces triangulaires, énumérées fig. 12.6 ; une configuration typique est montrée fig. 12.5. Le poids des faces est \sqrt{t} pour toutes sauf pour celles qui sont vides de particules. Nous prendrons comme *lignes* du réseau les lignes qui joignent les centres de faces carrées du réseau, ou encore celles formées par les bases des triangles (voir fig. 12.5). Chaque ligne contient L bases de triangles. Nous admettrons comme précédemment que les configurations formées à partir des faces triangulaires sont exactement les mêmes que celles formées à partir de particules L et R qui se propagent respectivement vers la gauche et vers la droite d'une ligne à l'autre, et qui peuvent interagir (uniquement) quand leurs trajectoires sont sur le point de se croiser, selon les modalités précisées au paragraphe 12.2.1, et nous traiterons donc le modèle de particules. Sur les lignes du réseau, les particules L et R occupent forcément les centres des carrés ou les milieux des bases des triangles. Il y a deux types de lignes, les lignes paires et les impaires. Nous repérerons les positions des particules par des entiers (ou plus précisément par les éléments de $\mathbb{Z}/L\mathbb{Z}$) sur les lignes paires, et par des demi-entiers (les éléments de $\mathbb{Z}/L\mathbb{Z} + 1/2$) sur les lignes impaires.

Ansatz de Bethe. Le point de départ du calcul est de trouver la forme des vecteurs propres de la matrice de transfert M , ou en fait de ses différents blocs, indexés par les nombres n_L et n_R de particules de types respectifs L et R. Nous prenons la convention où l'image par M d'un vecteur qui représente l'état d'une ligne est la somme des vecteurs qui représentent les états possibles de la ligne immédiatement au-dessus (la parité change donc), chacun affecté de son poids statistique. D'autres conventions sont possibles ; par exemple M peut donner les configurations des lignes précédentes au lieu de donner celles des lignes suivantes.

Nous noterons $|x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}\rangle$ le vecteur qui représente la configuration où des particules L occupent les positions $x_1, x_2, \text{etc.}$ et où des particules R occupent les positions $y_1, y_2, \text{etc.}$ (les abscisses des particules sont toutes entières ou toutes demi-entières sur une même ligne). La forme linéaire associée à ce vecteur est notée comme d'habitude $\langle x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R} | \Psi \rangle$ désignera le vecteur propre générique que nous nous efforçons de construire en donnant explicitement ses coefficients dans la base précédente, notés

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_R}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}) := \langle x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R} | \Psi \rangle.$$

Dans toute cette discussion, le lecteur est invité à se reporter à la figure 12.5 pour mieux suivre les calculs.

Le premier bloc est celui des lignes vides, $n_L = n_R = 0$, il est de taille 1×1 , et son coefficient, donc sa valeur propre, est 1.

Vient ensuite le bloc $n_L = 1, n_R = 0$. Il est de dimension $2L \times 2L$. M envoie le vecteur $|x;\rangle$ de ce bloc sur $t|x - 1/2;\rangle$: la particule L, toute seule, n'a pas d'autre choix que de se propager (vers la gauche), et sa trajectoire correspond fig. 12.6 à deux triangles de poids \sqrt{t} . L'Ansatz de Bethe propose dans un tel cas d'utiliser une structure d'onde plane, à savoir $\Psi(x;) = u^x$, avec la condition au bord $u^L = 1$, ce qui lève l'ambiguïté sur la valeur de x qu'il faut prendre parmi toutes celles qui sont congrues modulo L , et où les puissances demi-entières doivent être comprises comme $\epsilon\sqrt{t}$ avec $\epsilon = \pm 1$ (mais ϵ est le même pour tous les éléments du vecteur propre). $|\Psi\rangle$ et la valeur propre correspondante λ satisfont par hypothèse à la relation $M|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ qui, après multiplication à gauche par la forme linéaire $\langle x|$, conduit

à $\lambda = \epsilon\sqrt{u}t$ indépendamment de x . La forme d'onde plane postulée donne donc bien un vecteur propre de M . Mieux, l'équation $u^L = 1$, seule contrainte sur l'unique paramètre u des vecteurs propres, a exactement L solutions, et chacune correspond à deux vecteurs propres distincts (pour $\epsilon = \pm 1$), donc la famille des $2L$ « vecteurs propres-ondes planes », linéairement indépendants, forme une base qui diagonalise le bloc de M que nous étudions.

Le bloc $n_L = 0, n_R = 1$ est très similaire : il suffit de remplacer u par $1/v$ (les particules R se propageant en sens opposé aux L).

Les blocs $n_L \geq 2, n_R = 0$ ou bien $n_L = 0, n_R \geq 2$, de tailles respectives $2\binom{L}{n_L}$ et $2\binom{L}{n_R}$, ne sont guère différents : les particules L (ou bien R) se propagent toutes de concert. Les valeurs propres sont les nombres $\epsilon t^{n_L} \sqrt{u_1 u_2 \dots u_{n_L}}$ (resp. $\epsilon t^{n_R} / \sqrt{v_1 v_2 \dots v_{n_R}}$) qui correspondent à certaines solutions des EAB $u_i^L = 1$ pour $1 \leq i \leq n_L$ (resp. $v_i^L = 1$ pour $1 \leq i \leq n_R$). Nous allons préciser plus loin lesquelles, mais remarquons que si on choisit des u_i (resp. v_i) distincts, on obtient le bon compte de valeurs propres.

Le bloc $n_L = 1, n_R = 1$ est intéressant car il met en jeu une interaction entre la particule L et la particule R : quand leurs trajectoires les mèneraient sur le même site si elles se propageaient simplement, c'est-à-dire encore quand elles sont situées, dans l'ordre R, L, sur des sites immédiatement voisins, elles peuvent (ou plutôt doivent) se croiser de deux manières différentes comme nous l'avons expliqué à la section 12.2.1. Ce bloc est de taille $2\binom{L}{2}$ (les deux particules occupent deux positions x et y distinctes sur les L positions possibles, et il y a deux parités de lignes). Dans les situations où les particules sont assez loin l'une de l'autre, elles n'interagissent pas et l'*Ansatz* de Bethe propose d'utiliser des ondes « planes par morceaux », à savoir

$$\Psi(x; y) = \begin{cases} A_{uv} u^x v^y & \text{si } x < y \\ A_{vu} u^x v^y & \text{si } y < x \end{cases} \quad (12.2)$$

L'expression précédente n'a de sens que si x et y sont des entiers entre 0 et $L - 1/2$, mais on impose aussi, pour tenir compte de la condition au bord périodique, $\Psi(L; y) = \Psi(0; y)$ et $\Psi(x; L) = \Psi(x; 0)$, c'est-à-dire $u^L = A_{uv}/A_{vu}$ et $v^L = A_{vu}/A_{uv}$, et cela lève toute ambiguïté. L'action de la matrice sur un vecteur-configuration mène en général, c'est-à-dire pour $y \neq x + 1$, à $\lambda\Psi(x; y) = t^2\Psi(x + 1/2; y - 1/2)$, et l'*Ansatz* précédent vérifie presque toutes les conditions pour être un vecteur propre, de valeur propre $t^2\sqrt{u/v}$. Voyons si l'on peut traiter le cas particulier des interactions, c'est-à-dire la situation où $y = x + 1$, sachant que l'on dispose encore du rapport de A_{uv} à A_{vu} comme degré de liberté. Cherchons le coefficient $\Psi(x - 1/2; x + 1/2)$. Si l'on multiplie à gauche par $\langle x - 1/2; x + 1/2 |$ la relation $\lambda|\Psi\rangle = M|\Psi\rangle$, il vient cette fois *deux* termes dans le membre de droite, car la configuration $|x - 1/2; x + 1/2\rangle$ a deux prédécesseurs possibles (de même poids t) d'après de que l'on a vu : $\Psi(x + 1; x)$ si c'est la particule L qui s'est écartée pour laisser passer la R, et $\Psi(x; x - 1)$ si c'est la R qui s'est écartée pour laisser passer la L. Alors il faut, et il suffit de, fixer $\lambda A_{uv} = t A_{vu} (u^{3/2} v^{-1/2} + u^{1/2} v^{-3/2})$, soit encore $A_{uv} = A_{vu} (u + v^{-1}) t^{-1}$, pour que $|\Psi\rangle$ soit un vecteur propre de M . Les EAB, c'est-à-dire les (deux) conditions de cohérence au bord ci-dessus, prennent donc la forme

$$\begin{aligned} u^L &= (u + v^{-1}) t^{-1} \\ v^{-L} &= (u + v^{-1}) t^{-1}. \end{aligned} \quad (12.3)$$

Une interprétation de ces équations est la suivante : [membre de gauche des EAB] un déplacement d'une largeur de réseau, c'est-à-dire de L sites, vers la droite (resp. vers la gauche) d'une particule L (resp. R) équivaut à [membre de droite] un croisement (une interaction) avec une particule R (resp. L) [membre de droite des EAB].

Reste à compter les vecteurs propres fournis par l'*Ansatz* (12.2) pour voir s'ils suffisent à diagonaliser le bloc $n_L = 1, n_R = 1$ de la matrice de transfert. Il y a $L(L - 1)$ configurations sur une ligne de parité donnée, donc ce bloc est (carré) de taille $2L(L - 1)$ en comptant les deux parités. Notons $z = v^{-1}$. Les EAB, algébriques en u et w , mènent à $u^L = z^L$ donc $z = \omega u$ pour une certaine racine L^e de l'unité ω . Ensuite, $u^L = t^{-1}(1 + \omega)u$ se simplifie en $u^{L-1} = t^{-1}(1 + \omega)$ car $u = 0$ conduit à un vecteur propre nul. Pour chacune des L valeurs de ω possibles, il y

a donc $L - 1$ valeurs de u possibles, donc les couples (u, v) solutions des EAB (12.3) sont au nombre de $L(L - 1)$ si l'on ne tient pas compte des choix de signes possibles pour les exposants demi-entiers de u et v , et de $4L(L - 1)$ au total (deux choix de signes chacun pour u et pour v). Il semble donc à première vue que l'on trouve *trop* de vecteurs propres ! C'est qu'en fait un certain nombre de prétendus vecteurs propres sont nuls, et que d'autre part tous les vecteurs propres trouvés ne sont pas linéairement indépendants. En particulier, à partir de chaque vecteur propre donné par l'*Ansatz* de Bethe on peut en trouver trois autres en changeant les signes des exposants demi-entiers de u et v , mais la dimensions du sous-espace engendré par ces quatre vecteurs n'est que de trois. Voyons en détail ce qui se passe pour les petites tailles $L = 2, 3, 4$; on admettra que le phénomène se généralise à L plus grand et que le nombre de vecteurs propres (non nuls) linéairement indépendants est toujours $2L(L - 1)$. Pour $L = 2$, $\omega \in \{-1, 1\}$, mais si l'on choisit $\omega = -1$ les EAB se réduisent à $u^2 = 0$ donc ce cas est à exclure (vecteur propre nul) : restent bien $2L(L - 1)$ vecteurs propres, et ils sont linéairement indépendants. Pour $L = 3$ et $z = u$ ($\omega = 1$), $u^2 = 2t^{-1}$ donc u peut prendre deux valeurs, d'où $2 \times 4 = 8$ vecteurs propres en tenant compte des signes des puissances demi-entières de u et v . Mais ces huit vecteurs forment un sous-espace vectoriel de dimension quatre seulement. De même pour les deux autres valeurs de ω , soit au total $12 = 2L(L - 1)$ vecteurs propres. Pour $L = 4$, $\omega \in \{1, \hat{i}, -1, -\hat{i}\}$, mais, si $\omega = -1$, $u = 0$, ce qui est exclu. Restent trois blocs de trois valeurs de u , où les signes des puissances impaires forment quatre combinaisons. Mais ces 36 vecteurs se répartissent en trois blocs de 12 où seuls 8 sont linéairement indépendants, donc au total l'*Ansatz* de Bethe donne $24 = 2L(L - 1)$ vecteurs propres.

Le facteur d'échange de deux particules de types différents, L et R, c'est-à-dire la modalité de leur interaction, est maintenant précisé. Reste à voir celui de deux particules de même type. S'il y a factorisation des interactions dans ce modèle, tous les blocs de la matrice de transfert devront alors être des généralisations simples de ces deux situations. Les secteurs $n_L = 0$ ou $n_R = 0$ n'avaient pas permis de préciser les interactions L-L ou R-R, mais le secteur $n_L = 2, n_R = 1$ (puis symétriquement $n_L = 1, n_R = 2$) va permettre de le faire. Dans ce secteur, la plupart des configurations se traitent de la même façon que précédemment. C'est seulement quand les trois particules sont sur des sites contigus (et dans l'ordre R, L, L) qu'une spécificité apparaît. La première possibilité d'interaction est visible à gauche de la figure 12.5, entre les deux lignes horizontales : la particule L la plus à gauche s'écarte pour laisser passer la R. Alors la R n'est pas immédiatement sur le chemin de l'autre L ; à la ligne suivante cependant elles interagissent à leur tour mais l'on est ramené à l'interaction à deux corps : l'une ou l'autre peut s'écarter pour laisser passer l'autre et il ne se passe rien de nouveau. La deuxième possibilité est visible un peu plus bas, le long de la trajectoires des deux particules L : c'est la R qui s'écarte pour laisser passer la L la plus à gauche. Mais alors la propagation simple mènerait la R sur la route de la deuxième L, donc la R doit interagir tout de suite, sur la même ligne du réseau, avec la deuxième L. Cependant l'interaction n'est pas libre : ce doit être encore la R qui s'écarte pour laisse passer la (deuxième) L. Dans le cas contraire, si la R continuait tout droit tandis que la deuxième L s'écarterait, la deuxième L se retrouverait sur le même site que la première, ce qui est exclu dans ce modèle. On pourrait donc penser que l'interaction à deux corps entre la R et la deuxième L est influencée par la présence de la première L, et qu'il n'y a pas factorisation des interactions. Mais une autre interprétation de la même situation permet de sauvegarder cette factorisation. Il suffit de considérer que deux particules L sur le même site interagissent et ont deux façons de se croiser : soit elles conservent leur ordre, soit elles échangent leur ordre sur la ligne (mais sont toujours situées sur le même site), et le poids statistique de cet échange est l'opposé de celui de la conservation de l'ordre. Avec cette nouvelle règle, l'interaction, factorisée, des trois particules devient la suivante quand la R s'écarte pour laisser passer la L la plus à gauche :

- Premier cas : la R s'écarte encore une fois pour laisser passer la deuxième L, et alors les deux L ne peuvent interagir car elles sont sur des sites différents.
- Deuxième cas : la R continue tout droit et la deuxième L s'écarte. Celle-ci se retrouve

alors sur le même site que la première L et les deux L interagissent (interaction à deux corps). Première possibilité, de poids statistique p , disons : elles gardent leur ordre. Deuxième possibilité, de poids statistique $-p$: elles échangent leur ordre. Poids total de ce deuxième cas : $p - p = 0$, donc c'est comme s'il était impossible.

L'*Ansatz* de Bethe qui permet de diagonaliser le bloc $n_L = 2, n_R = 1$ de la matrice de transfert est une généralisation des précédents, avec de surcroît une sommation sur les permutations des particules de même type pour symétriser le tout :

$$\Psi(x_1, x_2; y) = \begin{cases} A_{u_1 u_2 v} u_1^{x_1} u_2^{x_2} v^y + A_{u_2 u_1 v} u_2^{x_1} u_1^{x_2} v^y & \text{si } x_1, x_2 < y \\ A_{u_1 v u_2} u_1^{x_1} v^y u_2^{x_2} + A_{u_2 v u_1} u_2^{x_1} v^y u_1^{x_2} & \text{si } x_{1/2} < y < x_{2/1} \\ A_{v u_1 u_2} v^y u_1^{x_1} u_2^{x_2} + A_{v u_2 u_1} v^y u_2^{x_1} u_1^{x_2} & \text{si } y < x_1, x_2 \end{cases} \quad (12.4)$$

Ici encore, les conditions au bord viennent lever les ambiguïtés sur les relations d'ordre : $\Psi(x, L; y) = \Psi(0, x; y)$ et $\Psi(x_1, x_2; L) = \Psi(x_1, x_2; 0)$. Les valeurs propres sont les nombres $\epsilon t^3 \sqrt{u_1 u_2 / v}$, et l'on vérifie que la forme (12.4) donne bien un vecteur propre même dans les situations qui mettent en jeu plusieurs interactions. Les nombres u_1, u_2 et v sont les solutions des EAB (*i.e.* des conditions au bord) :

$$\begin{aligned} u_1^L &= -1 \times (u_1 + v^{-1}) t^{-1} \\ u_2^L &= -1 \times (u_2 + v^{-1}) t^{-1} \\ v^{-L} &= (u_1 + v^{-1})(u_2 + v^{-1}) t^{-2}, \end{aligned} \quad (12.5)$$

ces équations indiquant que le décalage vers la gauche d'une ligne entière (L sites) d'une particule R équivaut au croisement des deux L, tandis que le décalage de L sites vers la droite d'une particule L équivaut au croisement de l'autre L (facteur -1) et de la R. La forme de l'*Ansatz* de Bethe (12.4) avec le facteur de croisement -1 pour deux L évoque clairement les fonctions d'onde antisymétriques des fermions en mécanique quantique et indique que les particules L sont en fait des fermions. Le secteur $n_L = 1, n_R = 2$ se traite symétriquement et conduit à choisir -1 aussi comme facteur d'échange de deux particules R. L'*Ansatz* de Bethe dans ce cas fait intervenir une somme sur les permutations des particules R, qui sont aussi des fermions.

Maintenant que les modalités d'interaction à deux corps L-R, L-L et R-R ont été fixées, il ne nous reste plus de degrés de liberté et il faut espérer que la généralisation de l'*Ansatz* de Bethe aux secteurs comptant plus de particules suffira à diagonaliser la matrice de transfert. Cette généralisation s'écrit :

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}) = \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_{n_L}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{n_R}} A_{\dots} \prod_{i=1}^{n_L} u_{\pi(i)}^{x_i} \prod_{j=1}^{n_R} v_{\sigma(j)}^{y_j} \quad (12.6)$$

où π et σ sont des permutations des particules L et R respectivement, et où les indices des facteurs A sont les séquences du type $u_3 u_6 v_4 u_1 v_2 \dots$ telles que l'ordre des particules L (représentées par les nombres u) dans leur ensemble d'une part, R (représentées par les v) dans leur ensemble d'autre part, corresponde à celui donné par π et σ , et que la façon dont les particules L et R sont intercalées reflète la façon dont les positions x_1, x_2, \dots, x_{n_L} et y_1, y_2, \dots, y_{n_R} sont intercalées. Comme toujours, pour les puissances demi-entières des u_i et v_j , il y a deux choix possibles ; toutes les combinaisons peuvent être retenues du moment que l'on prend le même signe pour toutes les puissances d'un u_i ou v_j donné dans les différents coefficients du vecteur propre. La valeur propre correspondante s'écrit

$$\lambda = \epsilon \left(\prod_{i=1}^{n_L} t u_i \right) \left(\prod_{j=1}^{n_R} t v_j^{-1} \right) \quad (12.7)$$

où $\epsilon = \pm 1$ et les nombres u_i, v_j sont les solutions des EAB

$$\begin{aligned} u_i^L &= (-1)^{n_L-1} \prod_{j=1}^{n_R} t^{-1}(u_i + v_j^{-1}) \quad \text{pour } 1 \leq i \leq n_L \\ v_i^{-L} &= (-1)^{n_R-1} \prod_{i=1}^{n_L} t^{-1}(u_i + v_j^{-1}) \quad \text{pour } 1 \leq j \leq n_R. \end{aligned} \quad (12.8)$$

Parmi toutes les solutions, certaines mènent à des vecteurs propres nuls à rejeter, en particulier toutes les solutions où deux u_i ou deux v_j au moins sont égaux (à cause de la somme sur les permutations et des facteurs d'échange -1), et les vecteurs propres restants ne sont pas linéairement indépendants mais engendrent en tout cas le sous-espace vectoriel qui correspond au bloc n_L, n_R de la matrice de transfert. Il est techniquement difficile, mais pas impossible, de démontrer que l'*Ansatz* de Bethe donné ci-dessus diagonalise bien tous les blocs de la matrice de transfert. À notre connaissance cela n'a pas été fait en toute généralité [290]. On sait aussi par d'autres arguments, plus algébriques [267], que le modèle étudié ici est intégrable, ce qui conforte l'idée que l'*Ansatz* de Bethe est la solution exacte. Autrement dit, tous les cas, à nombres quelconques de particules, se ramènent bien par factorisation des interactions au cas d'interactions entre deux particules seulement. Nous pouvons maintenant revenir brièvement sur le cas des secteurs $n_L = 0$ ou $n_R = 0$: dans ces secteurs, bien que les interactions L-L ou R-R ne soit pas explicitement utilisée, la forme symétrisée de l'*Ansatz* de Bethe avec le facteur d'échange -1 qui vient de ces interactions interdit de prendre les solutions des EAB où deux u_i ou bien deux v_j sont égaux, ce qui rend égaux le nombre de solutions des EAB qui vérifient cette contrainte et la taille des blocs, comme nous l'avions remarqué sans comprendre pourquoi il fallait choisir un sous-ensemble strict des solutions des EAB.

Une autre remarque avant de voir comment l'on peut traiter la limite thermodynamique : l'on pourrait aussi bien prendre le facteur de croisement 1 entre deux particules L et R et autoriser les configurations où plusieurs L (et par ailleurs plusieurs R) partagent le même site. Cela définirait un autre modèle intégrable, où les particules L d'une part, R d'autre part, seraient des *bosons* et non plus des fermions. Ce modèle ne semble pas avoir été étudié.

Limite thermodynamique. Prenons maintenant les logarithmes complexes des EAB (12.8). Si l'on note $\tilde{u}_i := u_i$ et $\tilde{v}_j := -1/v_j$ (pour tout i) et que l'on définit

$$\begin{aligned} F_L(z) &:= \ln(z) - \frac{1}{L} \sum_{j=1}^{n_R} \ln(z - \tilde{v}_j) + \frac{n_R}{L} \ln(t) \\ F_R(z) &:= \ln(z) - \frac{1}{L} \sum_{i=1}^{n_L} \ln(\tilde{u}_i - z) + \frac{n_L}{L} \ln(t), \end{aligned} \quad (12.9)$$

les EAB (12.8) s'écrivent : « il existe des nombres entiers C_i et D_j tels que

$$\begin{aligned} LF_L(\tilde{u}_i) - (n_L - 1)\pi\hat{i} &= 2C_i\pi\hat{i} \quad \text{pour } 1 \leq i \leq n_L \\ LF_R(\tilde{v}_j) - (L + n_R - 1)\pi\hat{i} &= 2D_j\pi\hat{i} \quad \text{pour } 1 \leq j \leq n_R \gg. \end{aligned} \quad (12.10)$$

On peut se servir de cette reformulation pour écrire des équations d'itération telles que les \tilde{u}_i et \tilde{v}_j soient les points fixes, ce qui permet de trouver numériquement les solutions des EAB quand ce schéma itératif converge (et pour une valeur donnée des paramètres intensifs $n_L/L, n_R/L$ et t). Par ailleurs il est clair que si deux C_i ou deux D_j sont égaux, les u_i ou v_j correspondants le seront aussi donc le prétendu vecteur propre correspondant sera nul. De même on peut se ramener à des intervalles finis pour les C_i et les D_j si l'on choisit la convention que tous les logarithmes complexes ont des parties imaginaires dans $]-\pi; \pi]$ par exemple. En se servant de la résolution numérique, on arrive ainsi à la conclusion que les solutions des EAB qui correspondent aux valeurs propres de plus grand module sont celles où les C_i et D_j forment chacun une chaîne contiguë (par exemple, 3, 4, 5, ..., 3 + $n_L - 1$), avec une certaine valeur pour

le décalage entre les deux chaînes des C_i et des D_j . Or, assez logiquement, une petite variation de C ou D (c'est-à-dire une variation d'une unité) entraîne une petite variation du u_i ou du v_j correspondant, si bien que les u_i et v_j sont dans ce cas eux aussi tassés et forment une chaîne. On trouve que les \tilde{u}_i et \tilde{v}_j se placent comme dans les cas A, B, C de la figure 12.12. Il est alors possible de passer de la formulation (12.10) des EAB à une limite continue où n_L et n_R tendent vers $+\infty$ proportionnellement à L . Si $C_{i+1} - C_i = 1$ et $D_{j+1} - D_j = 1$, $F_L(\tilde{u}_{i+1}) - F_L(\tilde{u}_i) = 2\pi i/L$ et $F_R(\tilde{v}_{j+1}) - F_R(\tilde{v}_j) = 2\pi i/L$ si bien que les dérivées f_L et f_R de F_L et F_R sont égales, le long des courbes où se placent les solutions \tilde{u}_i et \tilde{v}_j , à la densité de ces solutions multipliée par $L/(2\pi i)$. En dérivant la formulation logarithmique (12.10) des EAB par rapport à \tilde{u}_i et \tilde{v}_j respectivement et en introduisant cette expression pour les densités des solutions, on est ramené à deux équations intégrales, valables à la limite thermodynamique :

$$\begin{aligned} f_L(z) &= \frac{1}{z} + \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{v}_{n_R}}^{\tilde{v}_1} \frac{f_R(\tilde{v})}{z - \tilde{v}} d\tilde{v} \\ f_R(z) &= \frac{1}{z} - \frac{1}{2\pi i} \int_{\tilde{u}_1}^{\tilde{u}_{n_L}} \frac{f_L(\tilde{u})}{z - \tilde{u}} d\tilde{u}. \end{aligned} \quad (12.11)$$

Les orientations des intégrales le long des courbes sont données par les bornes, sachant que la courbe de gauche sur la figure 12.12 A, B, C est celle des \tilde{v} , \tilde{v}_1 étant en haut et \tilde{v}_{n_R} en bas, tandis que la courbe de droite est celle des \tilde{u} , \tilde{u}_1 étant en bas et \tilde{u}_{n_L} en haut. Remarquer que les paramètres intensifs ont disparu des équations, notamment t . C'est qu'en fait toute l'information est encodée dans la position des courbes limites des racines de EAB : si l'on connaît cette position, on peut en déduire la valeur de f_L et f_R , donc la densité des racines et n_L/L et n_R/L d'une part. D'autre part, F_L et F_R sont *des* primitives de f_L et f_R (il y en a plusieurs), mais l'on peut trouver lesquelles en exploitant le fait qu'elles prennent des valeurs imaginaires pures le long des courbes limites, qu'elles sont (on le postule) méromorphes avec chacune une coupure, et qu'on connaît leurs singularités en passant à la limite thermodynamique dans les équations (12.10). La valeur du paramètre t peut alors être déduite de la connaissance de ces primitives. La difficulté est en fait le calcul de f_L et f_R proprement dit, et, comme nous l'avons expliqué dans le paragraphe précédent, la technique employée ici ne fonctionne que pour des configurations particulières des courbes limites. On déduit facilement des équations (12.11) le comportement de f_L à la coupure le long des \tilde{v} et de f_R à la coupure le long des \tilde{u} : pour $\epsilon > 0$,

$$\begin{aligned} f_L(\tilde{v} + \epsilon) - f_L(\tilde{v} - \epsilon) &= f_R(\tilde{v}) \\ f_R(\tilde{u} + \epsilon) - f_R(\tilde{u} - \epsilon) &= -f_L(\tilde{u}) \end{aligned} \quad (12.12)$$

indique l'ampleur des sauts de f_L et f_R quand on traverse les coupures de gauche à droite. Le prolongement analytique (méromorphe) sur la surface de Riemann évoqué p. 234 dans le cas général est ici constitué de combinaisons linéaires de la forme $f(z) = a_L f_L(z) + a_R f_R(z)$, où a_L et a_R sont spécifiés dans chaque feuillet de la surface de Riemann de f . Si ces coefficients sont connus dans un feuillet, on trouve leur valeur dans les autres feuillets en faisant le raisonnement suivant. Lorsque l'on franchit une coupure, il faut changer la valeur des coefficients a_L et/ou a_R pour compenser l'éventuel saut de f_R et/ou f_L afin que f reste méromorphe : par exemple, si $f(z) = f_R(z)$ immédiatement à gauche de la ligne des \tilde{u} , il faut prendre l'expression $f(z) = f_R(z) + f_L(z)$ immédiatement à droite de cette ligne, car f_R a un saut d'amplitude $-f_L$. Le vecteur (a_L, a_R) dans un feuillet est remplacé par son image par l'opérateur linéaire $\Gamma_{\tilde{u}}$ (resp. $\Gamma_{\tilde{v}}$) quand on franchit (de gauche à droite) la ligne des \tilde{u} (resp. \tilde{v}) qui borde ce feuillet. Les matrices de ces opérateurs de monodromie sont :

$$\Gamma_{\tilde{u}} : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \Gamma_{\tilde{v}} : \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (12.13)$$

Ces deux matrices engendrent (par multiplication) tout le groupe $SL_2(\mathbb{Z})$, et nous ne savons pas comment trouver l'expression de f_L et f_R dans ce cas. En revanche, si les extrémités des

courbes des \tilde{u} et \tilde{v} se touchent, on ne peut franchir une même coupure deux fois de suite, et le vecteur (a_L, a_R) est obtenu par itération du produit des deux matrices ci-dessus (par exemple $\Gamma_{\tilde{u}}\Gamma_{\tilde{v}}$) avec éventuellement une multiplication supplémentaire par l'une des deux matrices. Or ce produit ($\Gamma_{\tilde{u}}$ ou $\Gamma_{\tilde{v}}$) est idempotent (d'indice 6) donc, à coefficients initiaux a_L et a_R fixés, le nombre de possibilités de changement aux coupures est fini. Le prolongement analytique f est entièrement décrit par 12 couples de coefficients (a_L, a_R) . On peut identifier les feuillets où les coefficients prennent la même valeur pour se ramener à un espace de Riemann à un nombre fini (12) de feuillets, avec une sorte de condition au bord périodique. Il est alors commode de se ramener à une seule copie du plan complexe (ou plutôt une seule sphère de Riemann) à l'aide d'une bijection méromorphe : si $b = \tilde{v}_1 = \tilde{u}_{n_L}$ désigne l'extrémité commune en haut des courbes limites (l'autre extrémité étant le complexe conjugué b^*), on fait le changement de variable et de fonction inconnue

$$z = \frac{w^6 + 1}{\frac{w^6}{b^*} + \frac{1}{b}} \quad \text{ou} \quad w^6 = \frac{z - b}{z - b^*}, \quad \text{et} \quad g(w)dw := f(z)dz,$$

$f(z)$ étant un prolongement analytique sur la surface de Riemann spécifié par les valeurs de a_L et a_R dans un feuillet arbitraire (on peut prendre n'importe lesquelles sauf $(0, 0)$, cela n'a pas d'importance en principe, et en pratique il est plus simple de prendre des coefficients réels). Quand z décrit la surface de Riemann avec la condition au bord périodique, w décrit la sphère de Riemann. Les douze coupures sont transformées dans l'espace de w en douze lignes qui relient zéro (l'image de $z = b$) et l'infini (l'image de $z = b^*$). La forme différentielle $g(w)dw$ est régulière par construction le long de ces douze lignes. En leurs extrémités 0 et ∞ , elle est régulière aussi. En effet, $f_L(z)dz$ et $f_R(z)dz$ sont finies le long des coupures (elles sont proportionnelles aux densités des \tilde{u}_i et \tilde{v}_i sur les coupures, et l'on observe numériquement que ces densités sont finies), donc aussi en b et b^* par passage à la limite – de même pour $g(w)dw$. Ailleurs, $g(w)dw$ a uniquement des singularités isolées, qui correspondent à celles de $f(z)dz$. Notons w_k , $1 \leq k \leq 12$, les douze images par $z \mapsto w$ des points 0 et ∞ où f_L et f_R ont des singularités, et R_k les résidus correspondants (« $f(z)$ a un pôle en ∞ de résidu R » signifie que $f(z) \sim -R/z$ pour grand z , comme on le voit en intégrant sur un contour qui entoure ∞ et en faisant le changement de variable $y := 1/z$). $g(w)dw$ s'exprime comme :

$$g(w)dw = \sum_{k=1}^{12} \frac{R_k}{w - w_k} dw. \quad (12.14)$$

Ensuite, comme conséquence de (12.10), $f_L(z)dz$ et $f_R(z)dz$ sont imaginaires pures en $z = b$ et en $z = b^*$ le long de chacune des courbes limites (celle des \tilde{u} et celle des \tilde{v}), donc $g(w)dw$ est imaginaire pure en $w = 0$ le long des douze images de ces courbes (puisque les coefficients a_L et a_R sont réels dans tous les feuillets). Notons $dw_{\tilde{u},1}$ et $dw_{\tilde{u},2}$ les affixes de vecteurs tangents en $w = 0$ à deux images différentes de la courbe des \tilde{u} dans la sphère de Riemann des w . $g(0)dw_{\tilde{u},1}$ et $g(0)dw_{\tilde{u},2}$ sont tous deux imaginaires purs, donc ce sont les affixes de deux vecteurs colinéaires. Cependant, les deux images de la courbe des \tilde{u} ne sont pas tangentes en $w = 0$ (l'une est l'image de l'autre par la rotation de centre 0 et d'angle $\pi/3$), donc $dw_{\tilde{u},1}$ et $dw_{\tilde{u},2}$ ne sont pas colinéaires. La seule possibilité pour résoudre ce paradoxe est que $g(0)$ soit nul. Reporter cela dans l'expression de g livre des relations entre n_L/L et n_R/L et la position de b (repérée par $b =: i|b| \exp(-i\gamma)$) :

$$\frac{n_L}{L} = 1 - \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \frac{\pi - \gamma}{3}, \quad \frac{n_R}{L} = 1 - \frac{2}{\sqrt{3}} \cos \frac{\pi + \gamma}{3}. \quad (12.15)$$

Ceci n'est vrai que sous l'hypothèse du contact des courbes des \tilde{u}_i et \tilde{v}_i , et indique donc pour quelles valeurs des paramètres intensifs du modèle cette hypothèse peut être vraie (γ peut être relié à t). On peut enfin calculer F_L et F_R (par intégration, en levant l'ambiguïté sur le choix de la primitive grâce au fait que F_L et F_R sont imaginaires pures le long des coupures, avec

passage à la limite en b)², puis une valeur propre de plus grand module, ce qui donne accès (à des corrections non extensives près comme on l'a vu p. 231) à la fonction de partition, donc en particulier à l'entropie. En effet, on observe (numériquement et sans vraiment l'expliquer) que les valeurs de n_L/L et n_R/L qui correspondent au contact des courbes limites des solutions des EAB sont celles qui maximisent, les autres paramètres étant fixés, la valeur propre donnée par l'*Ansatz* de Bethe. Donc les contributions à la fonction de partition des blocs de la matrice de transfert qui ont des densités de particules n_L/L et n_R/L différentes sont exponentiellement plus petites (comme toujours, dans la limite où la hauteur H du réseau tend vers $+\infty$ d'abord, et ensuite n_L , n_R et L tendent vers $+\infty$). L'entropie ainsi calculée dépend encore de t (à travers l'argument de b)³. Elle a une dépendance non singulière en t , avec un maximum pour la valeur telle que les triangles occupent 50% de l'aire du pavage. Cependant, si l'on calcule l'entropie en fonction non de t , mais de la fraction τ de l'aire occupée par les triangles, on trouve qu'elle présente un « cusp » en $\tau = 1/2$, et cela permet de comprendre pourquoi l'état quasi-cristallin est thermodynamiquement stabilisé (c'est un état métastable) [288].

Le calcul des valeurs propres des autres secteurs que celui où les courbes des \tilde{u}_i et \tilde{v}_i se touchent est en l'état actuel de nos connaissances inaccessible, car c'est la topologie particulière de la surface de Riemann en cas de contact de ces courbes qui permet de se ramener à une fonction méromorphe $g(w)$ définie sur la sphère de Riemann.

Deuxième exemple : le modèle à six vertex

Dans le cas du modèle à six vertex (voir une réinterprétation des six vertex en termes de trajectoires de particules « denses », c'est-à-dire occupant tous les liens verticaux, fig. 12.7), il est commode d'utiliser une forme différente de l'*Ansatz* de Bethe. Ici encore, la matrice de transfert est diagonale par blocs : sur un réseau de largeur L , le nombre de particules R n_R est conservé d'une ligne à l'autre, ainsi que le nombre n_L de particules L qui est forcément $L - n_R$. Mais comme le modèle est dense (au sens où tout lien vertical est couvert par une particule exactement), il suffit de suivre l'évolution des particules d'un seul type (disons les R), et, si nous effaçons les trajectoires des autres particules (les L), nous sommes ramenés à des particules qui peuvent, sur une ligne de liens horizontaux, avancer d'un nombre quelconque de pas vers la droite (entre zéro et ce qui est permis par la largeur du réseau et ce que font les autres particules du même type, qui ne peuvent être croisées), comme dans l'interprétation des six vertex donnée par la figure 12.1. La différence avec l'*Ansatz* de Bethe précédent vient de ce nombre non borné (à la limite thermodynamique) de possibilités. Même si $n_R = 1$ (une seule particule R), il y a déjà un grand nombre de possibilités de croisements, car $n_L = L - 1$: la particule R peut croiser entre 0 et $L-1$ particules L. Le passage d'une ligne du réseau à l'autre ne fait donc pas intervenir un ou quelques termes, mais L termes. Dit autrement : dans une colonne ou une ligne donnée du bloc $n_R = 1$ de la matrice de transfert, il n'y a pas un nombre fini de taux de transition non nuls comme dans le modèle de pavages, mais L . Cependant, cette multiplicité est prise assez facilement en compte car les termes peuvent être traités globalement comme une somme partielle de série géométrique. Un autre exemple (plus compliqué mais plus riche, avec des états liés) d'*Ansatz* de Bethe similaire, pour le modèle de boucles à deux couleurs denses (FPL²), est donné dans [305] (voir [306] pour une redérivation que les auteurs jugent plus simple par un *Ansatz* de Bethe algébrique emboîté au lieu de l'*Ansatz* de Bethe à coordonnées de [305]).

Une configuration d'une ligne est entièrement déterminée par la donnée des positions des particules R, $1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_{n_R} \leq L$, et nous allons construire un *Ansatz* de Bethe en faisant comme si les particules L n'existaient pas. On note \vec{X} cet ensemble d'abscisses ; le problème est de chercher un vecteur propre $\Psi(\vec{X})$ d'un bloc de la matrice de transfert, spécifié par ses composantes : il doit satisfaire à l'équation $\lambda \Psi(\vec{X}) = \sum_{\vec{Y}} M(\vec{X} \leftarrow \vec{Y}) \Psi(\vec{Y})$ où les

²Il nous semble qu'il manque, dans les deuxième et quatrième équations (43) de la revue [290] des facteurs devant $dz/(z dw)$, respectivement $1 - n_-/L$ et $1 - n_+/L$.

³Dans l'équation (46) de la revue [290], il faut remplacer 3 par $\sqrt{3}$.

\vec{Y} sont les états de la ligne inférieure qui peuvent engendrer l'état \vec{X} sur la ligne supérieure. Notons a, a', b, b', c, c' les poids respectifs des vertex fig. 12.7. Dans le secteur $n_R = 0$, on trouve simplement $\lambda = a^L b'^L$ (soit toutes les particules L se propagent tout droit — vertex a —, soit toutes se décalent d'un cran vers la gauche, et une particule R décrit une trajectoire horizontale fermée sur toute la ligne — vertex b'). Dans le secteur $n_R = 1$, on trouve, $\vec{X} = x$ étant l'abscisse de l'unique particule R,

$$\begin{aligned} \lambda \Psi(x) = & a^{L-1} b \Psi(x) + \sum_{y=x+1}^{L-1} a^{L+x-y-1} b'^{y-x-1} c c' \Psi(y) + \\ & a' b'^{L-1} \Psi(x) + \sum_{y=1}^{x-1} a^{x-y-1} b'^{N+y-x-1} c c' \Psi(y) \end{aligned} \quad (12.16)$$

si l'on énumère toutes les possibilités de croisements de la particule R. L'*Ansatz* de Bethe propose de chercher des solutions sous la forme d'ondes planes : $\Psi(x) = z^x$, où x est la position de la particule R. Alors, en reprenant les notations de R. J. Baxter ([258], section 8.3),

$$\lambda z^x = a^L z^x L(z) - \frac{a^{x-1} b'^{L-x} c c' z^{L+1}}{a - b'z} + b'^L z^x M(z) + \frac{a^{x-1} b'^{L-x} c^2 z}{a - b'z}$$

où $L(z) := [ab + z(cc' - bb')]/(a^2 - ab'z)$ et $M(z) := [aa' - c^2 - a'b'z]/(ab' - b'^2z)$. Les premier et troisième termes ci-dessus ont la même forme que le membre de gauche (z^x), mais pas les deux autres. Cependant, la condition au bord $\Psi(L) = \Psi(0)$ ou encore $z^L = 1$, qui permet de prendre des abscisses de la particule R dans \mathbb{Z} sans se préoccuper des bords en $x = 1$ et $x = L$ et restaure donc dans l'écriture mathématique l'invariance par translation, suffit précisément à éliminer ces deux termes, dit « termes indésirables » (*unwanted terms* en anglais). L'EAB s'écrit donc ici simplement $z^L = 1$, et à ce stade le facteur d'échange des particules (R) n'est pas encore précisé. La valeur propre est alors $\lambda = a^L L(z) + b'^L M(z)$.

Le bloc $n_R = 2$ de la matrice de transfert est ensuite diagonalisé par un *Ansatz* de la forme : $\Psi(x_1, x_2) = A_{12} z_1^{x_1} z_2^{x_2} + A_{21} z_2^{x_1} z_1^{x_2}$, où x_1 et x_2 sont les abscisses des deux particules R. Comme pour le modèle de pavages aléatoires, on somme sur toutes les permutations des particules de même type (ici les R). Le calcul détaillé de l'action de la matrice montre qu'il y a ici deux types de termes indésirables, des termes internes et des termes de bord. Les termes de bord sont éliminés si l'on tient compte des conditions de cohérence au bord. Elles s'écrivent $\Psi(x_1, L) = \Psi(0, x_1)$, soit encore $A_{12} z_1^{x_1} z_2^L + A_{21} z_2^{x_1} z_1^L = A_{12} z_1^{x_1} + A_{21} z_2^{x_1}$, et, comme ceci doit être vrai pour tout x_1 , il est très vraisemblable que les coefficients de $z_1^{x_1}$ et de $z_2^{x_1}$ soient nuls : $z_1^L = z_2^{-L} = A_{12}/A_{21}$. Ces conditions ont la même interprétation que dans le modèle des pavages : décaler une des deux particules R d'une ligne entière (L sites) équivaut à lui faire croiser sa camarade. Les termes indésirables internes ne sont pas éliminés par ces conditions au bord. En revanche, un choix judicieux du facteur d'échange A_{12}/A_{21} permet de les éliminer ; il faut prendre $A_{12}/A_{21} = -s_{21}/s_{12}$ avec

$$s_{12} := (a'b - ab')(b'z_1 - a)(b'z_2 - a) - c^2[ab - z_2(aa' + bb' - cc') + \frac{a^2}{a'^2} b'z_1 z_2].$$

On constate que, quand $aa' + bb' - cc' = 0$, le facteur d'échange se réduit à -1 et donc les particules R se comportent comme des fermions libres (et donc, par symétrie, les L en font de même). On retrouve la condition dite des fermions libres évoquée plus haut.

Les blocs ultérieurs sont ensuite diagonalisés par une généralisation simple de l'*Ansatz* :

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_R}) = \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_{n_R}} A_{\pi(1)\pi(2)\dots\pi(n_R)} z_{\pi(1)}^{x_1} z_{\pi(2)}^{x_2} \cdots z_{\pi(n_R)}^{x_{n_R}} \quad (12.17)$$

avec les relations de permutation des particules

$$s_{i,i+1} A_{1,2,\dots,i,i+1,\dots,n_R} + s_{i+1,i} A_{1,2,\dots,i+1,i,\dots,n_R} = 0$$

pour $1 \leq i \leq n_R - 1$, et les conditions au bord

$$z_{\pi(1)}^L = A_{\pi(1), \pi(2), \dots, \pi(n_R)} / A_{\pi(2), \pi(3), \dots, \pi(n_R), \pi(1)}$$

pour toutes les permutations $\pi \in \mathfrak{S}_{n_R}$, d'où l'on tire les EAB

$$z_i^L = (-1)^{n_L - 1} \prod_{j \in \llbracket 1, n_R \rrbracket \setminus \{i\}} \frac{s_{ji}}{s_{ij}} \text{ pour } 1 \leq i \leq n_R. \quad (12.18)$$

Les valeurs propres sont les nombres

$$\lambda = a^L L_1 L_2 \dots L_{n_R} + b^L M_1 M_2 \dots M_{n_R}$$

où L_i resp. M_i est une abréviation pour $L(z_i)$ resp. $M(z_i)$.

Ici encore, on peut résoudre numériquement les EAB pour trouver le spectre de la matrice de transfert (nous n'avons pas cherché à le faire), et l'on peut aussi faire un calcul analytique à la limite thermodynamique comme l'explique R. J. Baxter ([258], section 8.7). Il se trouve que les z_i sont, dans le cas intéressant du modèle (dans l'autre cas, la valeur propre dominante est celle du bloc $n_R = 0$ de la matrice), répartis sur le cercle unité. Il est alors judicieux de poser $z_i =: \exp(\hat{i}k_i)$ et de se ramener à une forme logarithmique des EAB qui fait intervenir les k_i et des constantes I_i entières ou demi-entières, analogues aux C_i du modèle des pavages aléatoires carrés-triangles. À la limite thermodynamique, les k_i sont répartis dans un intervalle $[-Q, Q]$, et un autre changement de variables permet de se ramener à des nombres α_i répartis dans un intervalle $[-Q_1, Q_1]$ qui, lorsque $n_R = L/2$ exactement, est la droite réelle ($Q_1 = +\infty$). La limite continue des EAB du modèle à six vertex ressemble à celle du modèle de pavages aléatoires, sauf qu'ici il y a une seule fonction analytique inconnue, celle qui donne accès à la densité des k_i (ou des α_i) sur leur intervalle, car, encore une fois, les particules L sont simplement les « antiparticules », les « trous » laissés par les particules R. Quand $Q_1 = +\infty$, l'intégrale à noyau qui apparaît dans l'équation intégrale pour la fonction densité est un produit de convolution qui peut être transformé en un simple produit par transformée de Fourier, et la fonction densité peut être explicitée. Pour être précis, ceci ne concerne qu'une certaine plage de valeurs des poids des vertex ; dans l'autre plage, les α_i sont imaginaires purs et il faut avoir recours non à une transformée de Fourier, mais à des séries de Fourier pour calculer la fonction densité.

Ces remarques terminent la discussion de nos deux exemples, et nous renvoyons le lecteur intéressé par le détail des calculs et les éléments de justification rigoureuse aux références citées ci-dessus. Donnons encore quelques propriétés de l'*Ansatz* de Bethe utiles en pratique avant de clore ce paragraphe.

États excités et longueur de corrélation

Il est généralement possible d'avoir accès aussi aux valeurs propres sous dominantes de la matrice de transfert grâce à l'*Ansatz* de Bethe. Dans l'exemple des pavages aléatoires carrés-triangles, il est manifeste que l'*Ansatz* donne toutes les valeurs propres. La difficulté est donc d'identifier, parmi toutes les solutions des EAB, lesquelles sont pertinentes. La formulation (12.10) est la plus utile pour cela. Nous savons déjà (sur la foi de résolutions numériques le plus souvent, même si le travail de Yang et Yang [246, 247, 248] indique une façon de traiter la difficulté rigoureusement) comment choisir les constantes C_i et D_j pour obtenir une valeur propre de plus grand module : elles doivent former des intervalles sans trous, avec un certain décalage entre le début de l'intervalle des C_i et celui des D_j . En décalant de la même quantité (mais dans les directions opposées) les C_i et les D_j , c'est-à-dire en faisant le changement $C_i \rightarrow C_i + \Delta$, $D_j \rightarrow D_j - \Delta$, on peut obtenir les valeurs propres de plus grand module mais d'arguments éventuellement différents (la « dégénérescence » éventuelle vient de l'invariance par translation horizontale du réseau). Comme on l'a déjà dit, si les poids statistiques, donc

les coefficients de la matrice de transfert, sont tous positifs ou nuls, le théorème de Perron-Frobenius assure qu'une valeur propre de plus grand module est positive et que le vecteur propre associé, unique à un coefficient multiplicatif scalaire près, a toutes ses composantes positives ou nulles (en appliquant ce théorème, il faut prendre garde au fait que la matrice de transfert peut être diagonale par blocs, non seulement à cause de la conservation des nombres de particules L et R, mais aussi à cause de la conservation d'autres quantités — le théorème ne s'applique qu'au sein d'un bloc, et donc il peut y avoir plusieurs valeurs propres maximales réelles positives, et plusieurs vecteurs propres associés, s'il y a plusieurs blocs). Les valeurs propres de module immédiatement inférieur s'obtiennent souvent en modifiant très légèrement les configurations des C_i et D_j , par exemple en écartant d'un degré le premier (ou le dernier) des C_i (ou des D_j). Il est cependant impossible de donner une règle générale en ce domaine, car, premièrement, le « bon » choix dépend du modèle, et, deuxièmement, pour un même modèle, il peut dépendre des valeurs des paramètres intensifs! En outre la règle, pour un modèle et un choix des paramètres intensifs donnés, peut être violée pour les tailles L les plus petites. Même si le « bon » choix pour obtenir les valeurs propres dominantes est manifestement robuste (d'un modèle à l'autre), nous ne pouvons que recommander l'expérimentation numérique pour obtenir les valeurs propres sous-dominantes. Elles apportent en tout cas de renseignements physiques précieux comme nous allons le voir, donc valent la peine d'être étudiées.

Signalons aussi l'existence d'un « *Ansatz* de Bethe thermodynamique » [307], dont le but est d'atteindre non les premières excitations (c'est-à-dire les premières valeurs propres sous-dominantes), mais des excitations dans la « masse » du spectre, et dont l'emplacement est déterminé par une certaine *température*. Ces termes d'excitations et de température viennent de contextes où la matrice de transfert est un hamiltonien, et où chercher la plus grande valeur propre revient à chercher l'état fondamental (l'état de plus basse énergie).

Dans le langage de la matrice de transfert, une interprétation physique des valeurs propres sous-dominantes fait intervenir les longueurs de corrélation et les tensions interfaciales. Soit en effet une observable A . La fonction de corrélation de cette observable entre des lignes situées à la distance (verticale) h l'une de l'autre dans le réseau, et situées respectivement aux distances H_1 et H_2 des bords qui ont pour états $|v\rangle$ et $|v'\rangle$, peut être définie par :

$$\frac{1}{Z} \langle v' | M^{H_1} A M^h A M^{H_2} | v \rangle - \frac{1}{Z^2} \langle v' | M^{H_1} A M^{H_2+h} | v \rangle \langle v' | M^{H_1+h} A M^{H_2} | v \rangle$$

où $Z := \langle v' | M^{H_1+h+H_2} | v \rangle$. En négligeant les dégénérescences des valeurs propres et en notant λ_0 « la » valeur propre de plus grand module, λ_1 « la » suivante et λ_2 celle d'après (de vecteurs propres $|v_0\rangle$, $|v_1\rangle$ et $|v_2\rangle$), la quantité ci-dessus vaut, à la limite $H_1, H_2 \rightarrow +\infty$ et pour h grand,

$$\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)^h \langle v_0 | A | v_1 \rangle \langle v_1 | A | v_0 \rangle + \mathcal{O} \left[\left(\frac{\lambda_2}{\lambda_0}\right)^h \langle v_0 | A | v_2 \rangle \langle v_2 | A | v_0 \rangle \right].$$

En général, c'est-à-dire pour toutes les observables A sauf quelques unes qui forment un ensemble de mesure de probabilité nulle (pour la mesure « plate » sur les observables, mais pas forcément pour une mesure qui tient compte de l'intérêt du physicien!), les éléments de matrice $\langle v_0 | A | v_1 \rangle$ et $\langle v_1 | A | v_0 \rangle$ sont non nuls. Ainsi, la corrélation entre lignes décroît, dans le réseau de largeur L finie et suivant la direction verticale, en $\exp(-h/\xi)$, où la longueur de corrélation ξ est

$$\xi := -1/(\ln |\lambda_0| - \ln |\lambda_1|). \quad (12.19)$$

Cette définition n'est pas modifiée si les valeurs propres dominantes ou sous-dominantes sont en fait plusieurs à avoir le même module. Dans les cas particuliers où $\langle v_0 | A | v_1 \rangle$ ou l'élément symétrique $\langle v_1 | A | v_0 \rangle$ est nul, les corrélations associées à l'observable A sont de plus courte portée : la définition de ξ est la même à condition de remplacer λ_1 par la première valeur propre sous-dominante d'éléments de matrice correspondants non nuls.

Le comportement ci-dessus est valable pour L fini. Il reste à voir, pour chaque modèle, ce qu'il en advient à la limite $L \rightarrow +\infty$. On peut imaginer au moins trois scénarios :

- ξ reste fini à la limite $L \rightarrow +\infty$. Alors les corrélations (verticales) décroissent exponentiellement, et, en général, la longueur de corrélation ξ dépend des paramètres intensifs. Si une transition de phase du second ordre se produit pour une certaine valeur de ces paramètres, on observe une divergence, en cette valeur, de la longueur de corrélation ξ . Cette situation se rencontre par exemple dans l'étude du modèle d'Ising à deux dimensions au-dessus de la température critique (voir [258], paragraphe 7.11).
- λ_0 et λ_1 ne sont certes pas égales, mais la distance entre elles décroît exponentiellement avec L : $\lambda_1/\lambda_0 = 1 - \mathcal{O}(x^L)$ avec $|x| < 1$. Elles sont alors dites *asymptotiquement dégénérées*. La définition de ξ ci-dessus n'est alors pas pertinente ($\xi \rightarrow +\infty$ comme x^{-L}), et il faut y remplacer λ_1 par la première valeur propre sous-dominante qui n'est pas asymptotiquement dégénérée avec λ_0 . En revanche λ_1 donne un autre renseignement : la quantité x ci-dessus peut s'interpréter comme $\exp(-\beta s)$, où s est une *tension interfaciale* (éventuellement accompagnée par la température inverse β si les poids du modèle s'y prêtent). Le modèle d'Ising en dessous de la température critique connaît cette situation (voir [258], paragraphe 7.10).
- ξ est proportionnel à L . Cette situation se rencontre quand les perturbations locales faites sur une certaine ligne du réseau ne s'atténuent pas, mais au contraire se propagent dans un « cône de lumière ». Le modèle a des corrélations intrinsèquement à longue portée. Ce cas concerne le modèle que nous avons étudié.

Voyons maintenant comment la notion de factorisation des interactions, que nous avons largement mise en évidence dans les cas où l'*Ansatz* de Bethe diagonalise la matrice de transfert, a pu être mise sous une forme plus abstraite et comment cette approche algébrique a permis d'éclairer le phénomène de l'intégrabilité.

12.3 Équations de Yang-Baxter

Les équations de Yang-Baxter (EYB) sont appelées aussi équations étoile-triangle car elles ont été inspirées par les relations triangle-étoile qui permettent de simplifier les réseaux (réseaux de conducteurs ohmiques, modèles d'Ising, *etc.*), ou encore *triangle equations* dans les traductions en anglais de la littérature russe [308, 269]. Elles devraient, comme le note R. J. Baxter [258], être appelées « équations triangle-triangle ». Elles donnent une condition algébrique sur des matrices ou des tenseurs dont les coefficients sont les poids des vertex ou des faces d'un modèle pour que ce modèle soit intégrable.

Le point de départ de cette approche est la remarque que les vecteurs propres donnés par l'*Ansatz* de Bethe pour le modèle à six vertex sont communs à toute une classe de matrices de transfert. Si l'on reparamètre les poids a, a', b, b', c, c' des six vertex fig. 12.1, dans un cas symétrique, par :

$$a = a' = \rho \sinh \frac{\lambda - v}{2}, \quad b = b' = \rho \sinh \frac{\lambda + v}{2}, \quad c = c' = \rho \sinh \lambda, \quad (12.20)$$

il se trouve que les vecteurs propres donnés par l'*Ansatz* de Bethe sont indépendants de λ et ρ . Donc, en particulier, les matrices de transfert pour des valeurs distinctes de v commutent. Plus généralement, une condition suffisante et, semble-t-il, nécessaire (voir exception ci-dessous) pour qu'un modèle discret (modèle de vertex, de faces, *etc.*) soit exactement soluble est qu'il existe une famille infinie, paramétrée par un certain nombre v , de matrices de transfert pour ce modèle, qui commutent entre elles. C'est-à-dire : on doit pouvoir mettre les poids des vertex ou des faces sous une forme qui fait apparaître ce paramètre v , dit paramètre spectral (car il change le spectre mais pas les vecteurs propres des matrices de transfert), et telle que les matrices de transfert ayant des poids statistiques qui correspondent à deux valeurs

de v quelconques au sein d'une famille infinie (mais les autres paramètres restant inchangés) commutent. On requiert de plus que les poids statistiques s'expriment comme des fonctions entières de v . Que cette condition soit suffisante peut paraître assez logique, dans la mesure où la commutation des matrices de transfert correspond à l'existence de quantités conservées, comme en intégrabilité classique (voir le paragraphe 12.1.1). Qu'elle soit nécessaire est moins facile à comprendre ; cela signifie, en gros, que la factorisation des interactions est indispensable pour qu'un modèle soit soluble. Il est par ailleurs important de noter que la condition ci-dessus, prise au pied de la lettre, n'est *pas* nécessaire : on sait [267] que, pour le modèle des pavages du plan à l'aide de carrés et de triangles équilatéraux, la matrice de transfert (dont les coefficients sont les poids des vertex) est un cas limite singulier d'une famille infinie de matrices de transfert qui commutent, mais elle ne fait *pas* elle-même partie de cette famille (de même que le modèle de la percolation, dont l'énergie libre est identiquement nulle donc non singulière, est la limite $q \rightarrow 1$ des modèles de Potts dont l'énergie libre est non analytique au point critique pour tout $q > 1$).

Pour exprimer la propriété de commutation plus aisément, on introduit communément les notations suivantes (pour le cas d'un modèle de vertex — les modèles de faces se traitent de façon analogue). Le poids d'un vertex dont les degrés de liberté des liens sont μ, α, β, ν , suivant la convention :

$$\begin{array}{c} \beta \\ | \\ \mu \text{---} \text{---} \nu \\ | \\ \alpha \end{array}$$

est noté $w(\mu, \alpha, \beta, \nu)$ (attention, l'ordre des indices de cette convention, employée et probablement introduite par R. J. Baxter [258], n'est pas le même que dans la notation des auteurs [269, 272, 271, 273] qui utilisent des représentations des algèbres de Lie pour étudier les modèles intégrables comme nous le verrons plus loin : pour eux, le vertex ci-dessus est noté $E_{\mu\nu} \otimes E_{\alpha\beta}$). L'élément de la matrice de transfert M qui fait passer de la configuration (déterminée par l'ensemble des valeurs des liens verticaux sur une ligne horizontale de largeur L) $\vec{\alpha} = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_L$ à la configuration sur la ligne immédiatement au-dessus $\vec{\beta} = \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_L$, noté $M_{\vec{\alpha}\vec{\beta}}$:

$$\begin{array}{ccccccc} & \beta_1 & \beta_2 & & & \beta_L & \\ & | & | & & & | & \\ \text{---} & \mu_1 & \mu_2 & \text{---} & \dots & \text{---} & \mu_{L+1} = \mu_1 \\ & | & | & & & | & \\ & \alpha_1 & \alpha_2 & & & \alpha_L & \end{array}$$

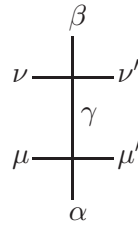
a pour expression

$$M_{\vec{\alpha}\vec{\beta}} = \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \cdots \sum_{\mu_L} w(\mu_1, \alpha_1, \beta_1, \mu_2) w(\mu_2, \alpha_2, \beta_2, \mu_3) \cdots w(\mu_L, \alpha_L, \beta_L, \mu_1) \quad (12.21)$$

du fait de la condition à la limite périodique. On somme sur tous les degrés de libertés des liens horizontaux. Si l'on calcule les éléments de matrice des produits MM' et $M'M$ de deux matrices de transfert M et M' , on voit qu'ils s'expriment comme

$$\begin{aligned} (MM')_{\vec{\alpha}\vec{\beta}} &= \text{Tr} [S(\alpha_1, \beta_1) S(\alpha_2, \beta_2) \cdots S(\alpha_L, \beta_L)] \\ (M'M)_{\vec{\alpha}\vec{\beta}} &= \text{Tr} [S'(\alpha_1, \beta_1) S'(\alpha_2, \beta_2) \cdots S'(\alpha_L, \beta_L)] \end{aligned} \quad (12.22)$$

où $S(\alpha, \beta)$ et $S'(\alpha, \beta)$ sont les matrices de transfert (dans la direction horizontale), paramétrées par les valeurs des liens verticaux α et β , qui permettent de passer d'une configuration des liens horizontaux μ, ν à gauche de deux vertex situés l'un au-dessus de l'autre à une configuration μ', ν' à droite :

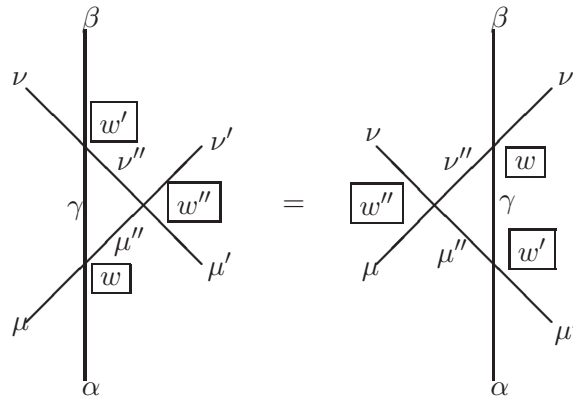


S correspond au cas où le poids du vertex inférieur est donné par M et celui du vertex supérieur par M' , tandis que pour S' c'est l'inverse. Autrement dit, S et S' représentent les poids de ce « biverter », le lien vertical central étant éliminé par sommation sur les valeurs qu'il peut prendre. Alors, par cyclicité de la trace des matrices qui apparaît ci-dessus, M et M' commutent s'il existe une matrice P inversible telle que, pour tous α et β , $S(\alpha, \beta) = PS'(\alpha, \beta)P^{-1}$. Ceci n'est qu'une condition suffisante, mais on comprend bien que trouver un cas où M et M' commutent sans que cette condition soit remplie est extrêmement peu probable : il faut que les éléments de matrice de MM' et $M'M$ soient égaux pour toutes les valeurs de α et β . Physiquement, cela revient à demander que les interactions à L corps se factorisent collectivement sans que les interactions à trois corps se factorisent, comme on va le voir.

Notons $w''(\nu, \mu, \nu', \mu')$ les éléments d'une telle matrice P (les lignes représentent les configurations μ, ν et les colonnes les configurations μ', ν'). La relation de similitude entre S et S' ci-dessus s'écrit alors

$$\sum_{\gamma, \mu'', \nu''} w(\mu, \alpha, \gamma, \mu'') w'(\nu, \gamma, \beta, \nu'') w''(\nu'', \mu'', \nu', \mu') = \sum_{\gamma, \mu'', \nu''} w''(\nu, \mu, \nu'', \mu'') w'(\mu'', \alpha, \gamma, \mu') w(\nu'', \gamma, \beta, \nu') \quad (12.23)$$

Son interprétation graphique est que les poids des deux « trivertex » que l'on peut former en prenant trois par trois un vertex du modèle et de poids w , un vertex du modèle et de poids w' et un vertex qui correspond à un coefficient w'' de P sont égaux :



Plus précisément, le poids du trivertex de gauche, paramétré par les valeurs $\alpha, \beta, \mu, \nu, \mu', \nu'$ des liens extérieurs, est égal à la somme des poids des triplets de vertex w, w', w'' qui ont ces valeurs des liens extérieurs et qui sont compatibles à l'intérieur (par γ, μ'', ν''). De même pour le poids du trivertex de droite.

On reconnaît bien sûr la situation de la figure 12.4, qui représentait la factorisation des interactions à trois corps, ou encore montrait comment décimer des triangles sur un réseau de Kagomé (en sommant sur les degrés de liberté γ, μ'', ν'' des côtés de ces triangles) pour se ramener à un réseau triangulaire de vertex-6. Une construction analogue peut être faite pour des matrices de transfert de faces et non de vertex. Remarquer que la matrice P peut contenir des poids de vertex qui sont dans le modèle : M, M' et P sont alors interchangeables, comme aux chapitres 9 et 10 de [258] pour les modèles à six et à huit vertex. Mais ce n'est pas toujours le cas ; un contre-exemple peut être trouvé dans [294, 267] pour le modèle de Perk et Schultz à

trois couleurs par exemple, où les poids des vertex dans M et M' contiennent des coefficients sur les liens verticaux (x_ρ et x_σ avec les notations de [294], matrice O dans [267]) qui doivent être pris égaux à 1 dans la matrice P .

Recherche de solutions de l'équation de Yang-Baxter. L'équation de Yang-Baxter (12.23) est un point de départ pour chercher, voire recenser, les modèles discrets exactement solubles. Plusieurs techniques sont disponibles. On peut essayer de chercher directement des solutions de cette équation, les inconnues étant les poids d'un certain jeu de vertex que l'on souhaite étudier. Dans le cas d'un modèle de vertex-4 (sur réseau carré) homogène (les poids des vertex sont les mêmes sur tous les sites) et où les degrés de liberté sur les liens sont des spins d'Ising (ils peuvent prendre seulement deux valeurs), c'est-à-dire en fait pour le modèle à huit vertex avec des poids quelconques (les poids des vertex 5 et 6 d'une part, 7 et 8 d'autre part sont pris égaux mais ce n'est pas une restriction car ils apparaissent toujours ensemble), une recherche exhaustive des familles de poids qui sont solutions des EYB a été menée sur ce principe [309]. On trouve que les familles solubles (c'est-à-dire les familles infinies de matrices de transfert qui commutent) sont le modèle à huit vertex symétrique résolu par Baxter [258] (où les poids des vertex 1 et 2, $a = a'$, sont égaux, ainsi que ceux des vertex 3 et 4, $b = b'$), et trois familles distinctes de modèles qui vérifient la condition des fermions libres définie plus haut. Ce genre de traitement des EYB est toutefois assez difficile (les auteurs de [309] manipulent douze équations et six inconnues) et se généralise mal à des situations où les degrés de liberté sont plus complexes que des spins d'Ising. Les travaux déjà cités [292, 293, 294] font une étude du même genre pour des degrés de liberté discrets pouvant prendre q valeurs, mais dans le cas restreint où la règle de la glace est respectée.

Une autre possibilité, plus puissante, est de placer l'équation dans un cadre plus abstrait. Si les degrés de liberté sur les liens (on traite ici le cas des modèles de vertex) peuvent prendre q valeurs, on représente leur état par une base \mathcal{B} d'un espace vectoriel de dimension q (typiquement \mathbb{C}^q). Soit V_{h_1} et V_{h_2} les espaces des vecteurs qui représentent les états des liens « horizontaux » sur l'illustration précédente, c'est-à-dire ceux de degrés de liberté μ, μ'', ν' (à gauche de la figure) et μ, ν'', ν' (à droite) pour V_{h_1} , et ν, ν'', μ' (à gauche) et ν, μ'', μ' (à droite) pour V_{h_2} . L'espace V_v correspond quand à lui aux liens verticaux α, γ, β . On introduit un endomorphisme $R_{h_1, v}$ du produit tensoriel $V_{h_1} \otimes V_v$ et donc les coefficients de la matrice dans la base construite à partir de \mathcal{B} sont les poids des vertex $w(\mu, \alpha, \beta, \nu)$. C'est-à-dire : R est en quelque sorte la matrice de transfert qui fait passer de l'état initial μ, α en bas à gauche d'un vertex (encodé comme un vecteur de $V_{h_1} \otimes V_v$) à l'état final ν, β en haut à droite du vertex. Si u est le paramètre spectral du jeu de vertex, on explicite la dépendance de $R_{h_1, v}$ en notant $R_{h_1, v}(u)$. Et on étend trivialement $R_{h_1, v}(u)$ en un opérateur qui agit sur $V_{h_1} \otimes V_{h_2} \otimes V_v$ en disant qu'il laisse la base de V_{h_2} inchangée. De même, on définit un opérateur $R_{h_2, v}$ avec les poids w' et un opérateur R_{h_1, h_2} avec les poids w'' . Alors l'EYB (12.23) prend la forme :

$$R_{h_1, v}(u)R_{h_2, v}(v)R_{h_1, h_2}(u - v) = R_{h_1, h_2}(u - v)R_{h_2, v}(v)R_{h_1, v}(u), \quad (12.24)$$

ce qui doit être compris comme « les opérateurs sur $V_{h_1} \otimes V_{h_2} \otimes V_v$ définis par le membre de gauche et le membre de droite respectivement sont égaux ». Que le paramètre spectral de R_{h_1, h_2} soit $u - v$ ne découle pas directement de la formulation (12.23). C'est qu'on constate à partir de cas particulier que cette dépendance particulière est toujours présente. D'autres contraintes sont aussi toujours présentes en pratique [269], notamment le fait que R soit une fonction méromorphe de u exprimée uniquement à l'aide de fonctions trigonométriques ou elliptiques ou de fractions rationnelles, et la condition dite d'unitarité.

Comme on l'a évoqué plus haut, un point de départ intéressant pour étudier cette équation est de la linéariser. La matrice R est dite quantique, et l'on peut chercher des solutions dans le cas où la matrice R est *quasi-classique* : on suppose qu'il existe un paramètre \hbar , un scalaire $\kappa(u, \hbar)$ et un opérateur r tels que [272]

$$R(u, h) = \kappa(u, \hbar) [\mathbb{I} + \hbar r(u) + \mathcal{O}(h^2)]. \quad (12.25)$$

Alors l'EYB prend la forme dite classique

$$[r_{h_1,v}(u), r_{h_2,v}(v)] + [r_{h_1,v}(u), r_{h_1,h_2}(u-v)] + [r_{h_2,v}(v), r_{h_1,h_2}(u-v)] = 0 \quad (12.26)$$

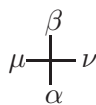
où $[\cdot, \cdot]$ désigne le commutateur. Comme cette équation ne fait intervenir que des commutateurs, on peut voir r comme un élément de $\mathcal{G} \otimes \mathcal{G}$ où \mathcal{G} est une certaine algèbre de Lie. Les solutions de (12.26) peuvent être écrites sous une forme indépendante de la représentation de \mathcal{G} , mais en revanche R dépend du choix de la représentation. Comme nous l'avons mentionné dans l'historique 12.1.2, ces remarques ont permis de faire une classification et une énumération partielles des solutions des EYB, c'est-à-dire, pense-t-on, des modèles exactement solubles. Les cas traités concernent surtout les représentations fondamentales des algèbres de Lie [272, 271, 273], quoique des techniques existent pour les autres représentations [275].

Utilisation de l'EYB pour résoudre des modèles. Une fois qu'un modèle intégrable a été identifié, on peut aussi se servir de l'EYB pour « le résoudre », c'est-à-dire pour calculer sa fonction de partition à la limite thermodynamique. La technique est similaire à celle de l'*Ansatz* de Bethe que nous avons vue, mais en plus abstraite — on parle d'« *Ansatz* de Bethe algébrique », alors que la technique précédente est qualifiée d'« *Ansatz* de Bethe à coordonnées » ou « à positions » (en anglais, *coordinate Bethe Ansatz* ou *position Bethe Ansatz*). Notons que le modèle à huit vertex, pour lequel cette technique a été initialement développée, peut aussi être étudié par *Ansatz* de Bethe à coordonnées, mais cela se révèle plus compliqué [258]. Nous ne présentons pas la technique de l'*Ansatz* de Bethe algébrique dans ce mémoire (même sur un exemple simple !) car cela nécessiterait un développement long et technique, alors que nous n'avons pas eu l'occasion de nous en servir. Le lecteur intéressé est renvoyé notamment au livre de R. J. Baxter [258], chapitres 9 et 10.

Nous n'allons pas discuter plus longtemps les EYB qui font l'objet, comme on s'en doute, d'une vaste littérature et même de la branche des mathématiques dévolue à l'étude des groupes et des algèbres quantiques, mais nous espérons avoir donné un aperçu, voire une intuition, du phénomène de l'intégrabilité et de certains outils qui existent à ce jour pour le traiter.

12.3.1 Annexe : les poids des vertex du modèle intégrable $A_2^{(1)}$

Pour montrer que les modèles intégrables couvrent un nombre de cas qui n'est pas si restreint que l'on pourrait le penser, donnons les poids des quinze vertex du modèle $A_2^{(1)}$, c'est-à-dire du modèle de Perk et Schultz à trois couleurs, qui sont compatibles avec l'intégrabilité de ce modèle [294, 292, 272, 274, 267]. Même si ces poids ne sont pas quelconques (ils forment une réunion de variétés d'intérieur nul dans l'espace \mathbb{R}^{15} de tous les poids possibles), ils laissent tout de même une grande liberté. Chaque vertex-4 est spécifié par les couleurs μ, α, β, ν (parmi $\{1, 2, 3\}$) de ses quatre branches suivant la convention donnée plus haut :



Les poids statistiques sont donnés dans le tableau ci-dessous à un facteur multiplicatif commun près :

| Vertex | Poids | Vertex | Poids |
|---------|---|---------|---------------------------|
| 1,2,1,2 | $x_1 x_2 e^{+u(1+w_1-w_2)} \sinh \lambda$ | 1,2,2,1 | $x_1^2 y_3^{-2} \sinh(u)$ |
| 2,1,2,1 | $x_1 x_2 e^{-u(1+w_1-w_2)} \sinh \lambda$ | 1,3,3,1 | $x_1^2 y_2^{-2} \sinh(u)$ |
| 1,3,1,3 | $x_1 x_3 e^{+u(1+w_1-w_3)} \sinh \lambda$ | 2,3,3,2 | $x_2^2 y_1^{-2} \sinh(u)$ |
| 3,1,3,1 | $x_1 x_3 e^{-u(1+w_1-w_3)} \sinh \lambda$ | 2,1,1,2 | $x_2^2 y_3^{+2} \sinh(u)$ |
| 2,3,2,3 | $x_2 x_3 e^{+u(1+w_2-w_3)} \sinh \lambda$ | 3,1,1,3 | $x_1^2 y_2^{+2} \sinh(u)$ |
| 3,2,3,2 | $x_2 x_3 e^{-u(1+w_2-w_3)} \sinh \lambda$ | 3,2,2,3 | $x_1^2 y_1^{+2} \sinh(u)$ |
| 1,1,1,1 | $x_1^2 \sinh(\epsilon_1 u + \lambda)$ | | |
| 2,2,2,2 | $x_2^2 \sinh(\epsilon_2 u + \lambda)$ | | |
| 3,3,3,3 | $x_3^2 \sinh(\epsilon_3 u + \lambda)$ | | |

ϵ_1, ϵ_2 et ϵ_3 désignent des éléments de $\{+1, -1\}$. Les autres paramètres sont des nombres réels.

Le modèle des pavages carrés-triangles correspond au cas limite où l'on choisit les w_i nuls, les ϵ_i égaux à $+1$, $u = -\lambda$, $1/x_1 = x_2 = x_3 = \sqrt{x}$ et $y_1 = y_2 = y_3 = 1/\sqrt{x}$ et où l'on fait tendre x vers zéro [267].

Chapitre 13

Les modèles étudiés : construction et *Ansatz* de Bethe

VOYONS maintenant comment, inspirés par les techniques précédentes, nous avons construit deux modèles intégrables qui devraient reproduire des éléments de la statique des milieux granulaires. Nous donnons en particulier les *Ansätze* de Bethe qui servent à diagonaliser les matrices de transfert de ces modèles et nous discutons les probables familles de solutions des EYB dont ils sont membres. Nous présentons aussi dans ce paragraphe les résultats directement obtenus grâce à la propriété d'intégrabilité. Le paragraphe suivant sera consacré à la technique de simulation Monte Carlo utilisée pour étudier les propriétés du modèle auxquelles nous n'avons pas eu accès autrement, puis nous discuterons de l'intérêt physique des modèles, de leur interprétation, de leur apport pour la compréhension des milieux granulaires.

13.1 Construction du modèle de chaînes de forces

13.1.1 Ingrédients

Notre première exigence était d'étudier des modèles exactement solubles. D'un côté, cela restreint le nombre de modèles accessibles (tout en fournissant un guide pour la construction), mais de l'autre cela permet d'obtenir des prédictions quantitatives où les corrections de taille finie sont bien maîtrisées, négligeables ou nulles, alors que celles des techniques standard d'étude des modèles statistiques (simulations Monte Carlo et matrice de transfert notamment) sont souvent difficiles à interpréter car les tailles accessibles sont trop petites. De plus, même dans le cas où les calculs ne peuvent être menés jusqu'au bout analytiquement, il est beaucoup plus rapide d'obtenir des résultats quantitatifs pour une large gamme de valeurs des paramètres de contrôle avec un modèle intégrable que par des approches perturbatives ou Monte Carlo.

Géométrie. Nous avons choisi une géométrie à deux dimensions discrète, de réseau régulier, et sans désordre — c'est dans cette géométrie que l'on rencontre le plus de modèles intégrables. Ce choix n'est évidemment pas sans conséquences sur la physique du modèle de milieux granulaires.

Il nous restreint tout d'abord aux empilements *bidimensionnels*. Certains phénomènes sont fort sensibles à la dimension de l'empilement : par exemple, si l'on jette en désordre des billes solides d'un centimètre de diamètre dans un seau, l'empilement formé est presque toujours irrégulier, alors que si on les fait tomber entre deux planches (pour forcer l'empilement à être bidimensionnel), l'empilement formé est presque toujours un réseau hexagonal régulier [166]. Néanmoins, bon nombre de phénomènes caractéristiques des milieux granulaires statiques se rencontrent déjà à deux dimensions : distribution particulière des forces inter-particules, formation de « chaînes de forces », création d'arches, *etc.*, et l'on espère les retrouver dans les prédictions du modèle.

Ensuite, le choix d'un réseau *régulier* est aussi une restriction. En principe, il permet au moins l'accès aux situations où l'empilement est régulier (cas des billes citées ci-dessus). Or cette situation est déjà très intéressante, car les forces de contact entre particules ont

un désordre intrinsèque même si les particules semblent bien rangées. Les mécanismes qui expliquent cela sont doubles : d'une part, un déplacement minime d'une particule autour de sa position « idéale » suffit à engendrer une force importante. Dans le cas où les particules sont des solides régis par la loi de Hertz, la force (de répulsion) entre deux particules est proportionnelle à $\delta^{3/2}$, où δ est l'amplitude de la déformation. D'autre part, un changement minime dans l'équilibre des forces n'est pas facilement absorbé par des réarrangements locaux, mais a tendance au contraire à se propager assez loin dans l'échantillon [204, 205]. On observe d'ailleurs *grosso modo* deux comportements pour la réponse d'un milieu granulaire statique à une force localisée (et suffisamment petite pour qu'il n'y ait pas de déplacement de grains, de réarrangement des contacts) : selon l'introduction de [221], pour les empilements réguliers (à deux ou trois dimensions d'espace) ou les empilements désordonnés mais compacts, l'excitation induit des augmentations des forces de contact suivant un cône (dont l'angle peut dépendre de l'importance de la friction entre les grains), tandis que pour un empilement désordonné et peu compact le « surplus de compression » se propage essentiellement à l'aplomb du point d'excitation. Un modèle sur réseau régulier s'inscrit bien sûr dans le premier cas. Des travaux expérimentaux ont été menés aussi sur des empilements réguliers [168].

En outre, si l'on ne cherche pas à interpréter les nœuds du réseau comme des grains, on peut aussi espérer traiter le cas d'un empilement désordonné. Soit que l'on ait une approche mésoscopique qui prend les chaînes de forces comme objets fondamentaux et « oublie » les grains sous-jacents, soit que les grains soient représentés par la décoration du réseau et pas simplement par les nœuds, ou bien que seuls certains nœuds soient occupés par un grain (désordre de sites). Une approche mésoscopique ou un désordre de sites peuvent avoir un sens si l'on pense notamment aux enseignements de la technique dite du groupe de renormalisation : certains détails microscopiques étant gommés lorsque l'on calcule des quantités macroscopiques, communes à une classe d'universalité, peu importe le modèle que l'on choisit, du moment que les grandes caractéristiques (symétries, lois de conservation, caractère scalaire ou vectoriel, ordonné ou désordonné...) soient les bonnes. C'est ainsi que le modèle, somme toute simpliste, d'Ising, suffit à prédire un certain nombre de quantités pour la transition de phase du ferromagnétisme des matériaux à spin anisotrope.

Symétries et règles de conservation. Pour commencer nous avons cherché à construire un modèle sur réseau triangulaire (un modèle de vertex-6) où les liens représentent les éléments des chaînes de forces. Le réseau triangulaire, contrairement aux réseaux carré et hexagonal, permet aux chaînes de forces non seulement de se propager tout droit (sur réseau hexagonal c'est impossible), mais aussi de fusionner ou de se scinder en deux (sur réseau carré c'est impossible). Les liens du réseau portent des degrés de liberté (discrets pour rendre le modèle soluble par les techniques évoquées au chapitre 12) qui indiquent, grossièrement, l'intensité de la chaîne de forces. Les vertex-6 autorisés dans le modèle (c'est-à-dire ceux de poids non nul) doivent autant que possible respecter des symétries de bon sens : par exemple, si un vertex est autorisé, ses images par les réflexions haut-bas et gauche-droite devraient l'être aussi.

Le chapitre 12 nous enseigne que les vertex autorisés des modèles exactement solubles obéissent souvent à des règles de conservation (par exemple la règle de la glace — remarquer que cette règle n'est pas respectée par tous les modèles répertoriés dans [272, 271, 273], loin de là). Peut-on voir la règle de l'équilibre (statique) des forces, qui est probablement une contrainte fondamentale des réseaux de forces dans les milieux granulaires statiques, comme une loi de conservation ? C'est possible au moins dans certains cas : prenons comme degrés de liberté, sur les liens, des entiers positifs ou nuls, qui représentent les intensités (quantifiées) des forces exercées sur les points matériels situés aux vertex. On suppose que toutes les forces que subit un point matériel sont dirigées vers lui, comme si les liens étaient occupés par des ressorts comprimés, et conformément à ce qui se passe dans les milieux granulaires secs définis au paragraphe 11.1 (les forces entre grains sont toujours des forces de contact répulsives). On pourrait imaginer une situation physique, également modélisée par le modèle que nous sommes en train de construire, où les liens sont occupés par des ressorts *tendus* (forces attractives),

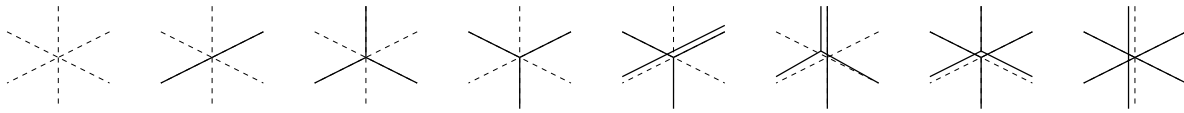


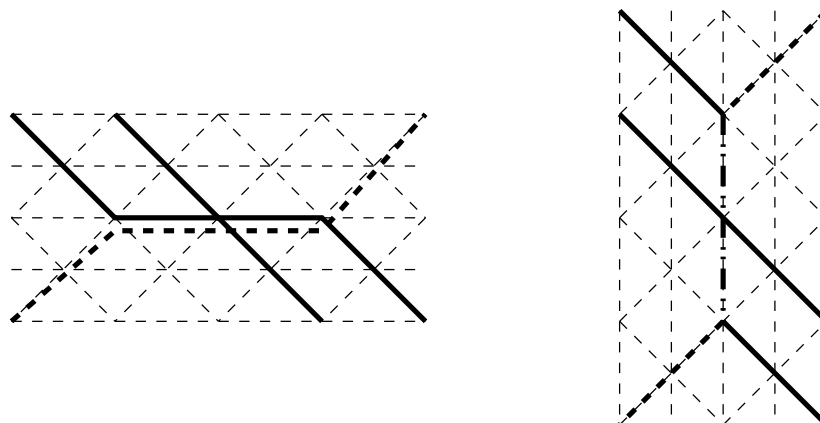
FIG. 13.1 – Quelques vertex autorisés par la règle d'équilibre vectoriel des forces. Les forces autour du centre d'un vertex s'exercent sur lui, toutes le même sens, avec une intensité indiquée par les nombres de particules sur les liens. La somme vectorielle des forces sur un vertex doit être nulle (condition d'équilibre statique), et cela s'interprète en termes de conservation de nombres de particules L et R (les segments de forces verticaux étant représentés par des paires liées \overline{LR}). Remarquer que les deux dessins de droite représentent en fait le même vertex (celui où les six forces ont une intensité égale à un), mais en constituent deux interprétations différentes : une chaîne de forces verticale se scinde juste à l'endroit où une autre se forme, ou bien trois chaînes se croisent. La factorisation des interactions (condition pour que le modèle soit soluble) fixera le poids statistique de ce vertex en fonction des poids des vertex plus simples, et nous saurons alors que penser des différentes interprétations possibles.

mais nous allons nous restreindre dans toute la suite aux forces répulsives. Orientons le réseau triangulaire, pour fixer les idées, de sorte que certains liens soient verticaux (les autres forment alors des angles de $\pm\pi/3$ avec la verticale). La « verticale » désigne pour nous une direction privilégiée (un bord de la feuille de papier par exemple) sans propriété physique particulière car, dans toute la suite, nous ne prendrons pas (directement) en compte le poids des grains. Interprétons les entiers sur les liens obliques comme des nombres de particules L et R respectivement (les particules L se propagent vers le haut et vers la gauche, tandis que les R se propagent vers le haut et vers la droite). La condition vectorielle de l'équilibre des six forces qui s'exercent sur le point matériel au centre d'un vertex impose la règle suivante : une particule L qui arrive en bas à gauche d'un vertex doit en repartir en haut à droite, ou bien s'apparier à une particule R et repartir avec elle par le lien vertical en haut (la L et la R forment alors une paire liée \overline{LR}). Il y a une règle similaire pour les particules R. Enfin, une paire liée \overline{LR} qui arrive par le lien vertical en bas du vertex peut repartir par le lien vertical en haut, ou bien se scinder, chaque membre (L et R) repartant par un lien oblique en haut. Réciproquement, on peut voir que, pour toute configuration des particules L et R autour d'un vertex qui obéit à ces règles, la condition d'équilibre vectoriel des forces est respectée. La figure 13.1 montre quelques vertex qui respectent les règles ci-dessus.

13.1.2 *Ansatz* de Bethe pour le modèle de chaînes de forces

La règle de conservation définie ci-dessus, et qui traduit l'équilibre des forces autour de chaque vertex, permet de rendre le modèle exactement soluble, au moins pour des choix judicieux de poids des vertex autorisés. En effet, sa matrice de transfert est diagonalisée par un *Ansatz* de Bethe, similaire à celui du modèle des pavages aléatoires carrés-triangles vu au chapitre 12, p. 236. Nous faisons le calcul de la fonction de partition par matrice de transfert de ligne horizontale (de liens verticaux et obliques) à ligne horizontale. Une différence entre notre *Ansatz* de Bethe et celui des pavages aléatoires carrés-triangles ou celui du modèle à six vertex (p. 243) tient au changement d'orientation du réseau triangulaire : pour le modèle des pavages, une des trois directions de liens était prise *horizontale*. Techniquement, une conséquence est que les liens où voyagent deux particules de types différents ne se traitent et ne s'interprètent pas de la même manière : pour notre modèle, nous dirons qu'une particule L et une R, qui voyagent d'ordinaire chacune sur les liens obliques de l'une des deux directions données, s'associent parfois pour former une paire liée \overline{LR} qui, elle, voyage sur un certain nombre de liens verticaux avant de se dissocier. Dans le modèle des pavages et le modèle à six vertex, il était considéré qu'une particule L et une R se décalaient horizontalement, sur le même lien, d'une même distance, mais en sens contraires. Une particule L (ou une R) pouvait

se décaler d'un nombre arbitraire de liens, tant qu'elle pouvait échanger sa position avec une particule de l'autre type. Ici, c'est impossible. Ces deux comportements sont résumés sur le schéma ci-dessous :

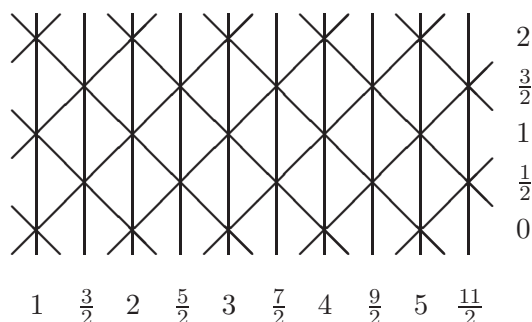


(à gauche, les particules L et R échangent leurs positions sur les lignes de liens horizontales, tandis qu'à droite elles forment des paires liées \overline{LR} sur les liens verticaux). Nous pensons que cette différence est purement technique et que nous ne sommes pas limités dans notre calcul (le choix est arbitraire) : si nous avons orienté le réseau dans l'autre direction, nous aurions probablement pu calculer la fonction de partition tout aussi bien, à l'aide d'un autre *Ansatz* de Bethe (qui reste à écrire et qui est peut-être très compliqué), où une particule L et une R situées sur deux nœuds d'une ligne séparés par un nombre quelconque de liens horizontaux peuvent continuer leur chemin ou échanger leur position (chacune parcourant tous les liens horizontaux qui les séparent), comme sur la figure ci-dessus à gauche. Le choix de la direction et de l'*Ansatz* de Bethe n'influe pas sur la plus grande valeur propre de la matrice de transfert ; il change peut-être, en revanche, les vecteurs propres associés aux valeurs propres sous-dominantes auxquels on a accès directement avec l'*Ansatz* de Bethe.

Pour décrire cet *Ansatz*, nous allons reprendre les mêmes notations : le vecteur

$$|x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}; p\rangle$$

représente l'état d'une ligne où les particules L occupent les positions d'abscisses x_i et les particules R celles d'abscisses y_j . Il y a deux types de lignes sur le réseau triangulaire avec l'orientation que nous avons choisie : sur les lignes paires, les abscisses qui désignent les centres de vertex-6 sont entières (ou, plus précisément, dans $\mathbb{Z}/L\mathbb{Z}$ où L est la largeur du réseau, c'est-à-dire le nombre de vertex-6 par ligne) et celles qui désignent les liens verticaux sont demi-entières, tandis que sur les lignes impaires c'est l'inverse. Dans le vecteur ci-dessus, la parité de la ligne est indiquée par $p \in \{0, 1/2\}$ (il est ici nécessaire de l'indiquer explicitement, alors que dans le modèle des pavages aléatoires on pouvait la déduire de la parité des positions x_i et y_j — une autre façon de faire serait de donner les positions des particules *relativement* à la position du vertex-6 le plus à gauche sur la ligne, p serait alors superflu). Cette convention est illustrée ci-dessous pour le cas $L = 5$ (les abscisses 0 et 5 désignent le même site en vertu des conditions aux limites périodiques) :



Les abscisses x_i et y_j doivent satisfaire une contrainte : sur un lien vertical donné, c'est-à-dire sur une position d'abscisse demi-entière sur une ligne paire, entière sur une ligne impaire, le nombre de particules de chaque type doit être le même (il n'y a aucune particule, ou bien une L et une R, ou bien deux L et deux R, *etc.*), puisque seules les paires liées \overline{LR} se propagent sur ces liens. Pour le reste, elles peuvent être choisies librement (sur une ligne donnée). Les nombres n_L et n_R sont bien entendu conservés d'une ligne à l'autre. De plus, la somme $S(z)$ des abscisses de toutes les particules sur la ligne d'ordonnée z obéit à la relation :

$$S(z + \frac{1}{2}) = S(z) + \frac{n_L - n_R}{2} \quad (13.1)$$

donc, quand $n_L = n_R$ **modulo** $2L$, $S(z)$ est un nombre conservé supplémentaire. Nous n'avons pas trouvé d'autre quantité conservée. On cherche un vecteur propre générique en calculant explicitement ses coefficients

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}; p)$$

où p est la parité de la ligne (0 ou $1/2$). Du fait de l'existence de lignes paires et impaires, la matrice de transfert la plus commode à écrire et que nous allons diagonaliser est en fait la matrice de transfert de deux réseaux « intriqués » et indépendants (la matrice de transfert possède deux blocs qui agissent l'un sur l'espace des configurations paires (à valeurs dans celui des configurations impaires) et l'autre sur l'espace des configurations impaires (à valeurs dans celui des configurations paires) et elle fait évoluer simultanément et indépendamment les particules de deux copies du réseau de parités différentes). Ainsi, la fonction de partition n'est pas un élément de matrice de la puissance H^e de la matrice de transfert, où H est la hauteur du réseau, mais la *moitié* de cet élément de matrice. Une autre façon de faire le calcul serait d'introduire deux matrices de transfert (qui sont en fait les deux blocs non nuls de la matrice précédente) et de calculer la puissance H^e du produit de ces deux matrices, qui agissent dans un espace de moitié moins grande dimension (donc inutile de diviser par deux l'élément de matrice calculé).

Le bloc vide $n_L = n_R = 0$ est trivial ; on fixe sa valeur propre à 1. Les blocs $n_L = 1$ et $n_R = 1$ aussi sont simples : avec les mêmes notations que pour le modèle des pavages aléatoires carrés-triangles, les vecteurs propres respectifs ont les éléments u^x et $1/v^y$, où u et v sont des nombres complexes qui doivent satisfaire aux équations de cohérence exprimant les conditions aux limites périodiques : $u^L = v^L = 1$, et les valeurs propres respectives sont alors $\epsilon\sqrt{u}$ et ϵ/\sqrt{v} , avec $\epsilon = \pm 1$. Ici on fait le choix de prendre un poids statistique 1 pour la simple propagation des particules ; ce choix sera discuté plus loin. Les blocs $n_L \geq 2, n_R = 0$ et $n_L = 0, n_R \geq 2$ sont également identiques à ceux du modèle des pavages aléatoires (à ceci près que le poids t est pris égal à 1).

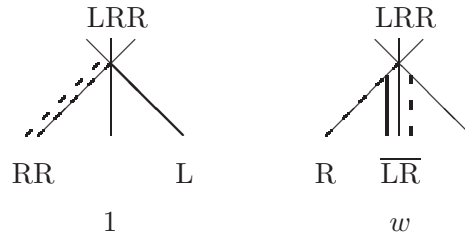
Le bloc $n_L = n_R = 1$ nous permet de fixer le facteur d'échange entre une particule L et une R. On prend une forme pour l'*Ansatz* de Bethe un peu plus générale que celle de l'équation (12.2) :

$$\Psi(x; y; p) = \begin{cases} A_{uv} u^x v^y & \text{si } x \leq y \text{ désignent des vertex-6} \\ A_{uv} B_u^L B_v^R u^x v^y & \text{si } x = y \text{ désigne un lien vertical} \\ A_{vu} u^x v^y & \text{si } y < x \text{ désignent des vertex-6} \end{cases} \quad (13.2)$$

compte-tenu du fait que les deux particules peuvent occuper le même site et, surtout, qu'elles peuvent emprunter un lien vertical. La valeur propre est, sans surprise, $\epsilon\sqrt{u/v}$, l'*Ansatz* ci-dessus étant valable pour toutes les configurations où L et R ne se rencontrent pas. On trouve la valeur du coefficient $B_u^L B_v^R$ (écrit sous forme de produit pour convenance ultérieure) en cherchant la composante $\Psi(x; x; p)$ pour $x + p$ demi-entier : si l'on multiplie à gauche par $\langle x; x; p |$ la relation $\lambda|\Psi\rangle = \epsilon\sqrt{u/v}|\Psi\rangle = M|\Psi\rangle$, il vient $\epsilon\sqrt{u/v} B_u^L B_v^R = 1$ d'où la valeur du produit $B_u^L B_v^R$. Puis vient la situation où les particules se croisent : en multipliant à gauche par $\langle x; x; p |$ avec $x + p$ entier la relation $\epsilon\sqrt{u/v}|\Psi\rangle = M|\Psi\rangle$, on trouve dans le membre de droite

deux termes, l'un en $\Psi(x; x; 1/2 - p)$ (cas où une paire liée \overline{LR} s'est propagée verticalement) et l'autre en $\Psi(x + 1/2; x - 1/2; 1/2 - p)$ (cas où la L et la R atteignent en même temps le vertex-6 en position x). La structure algébrique ci-dessus n'est pas perturbée si l'on rajoute un poids statistique, disons w , sur les (demi-)liens verticaux qui portent une paire liée \overline{LR} (w permet de contrôler l'anisotropie dans la direction verticale du réseau de forces). Plus précisément : w est le poids d'une \overline{LR} qui voyage d'une ligne à l'autre, sur une moitié de lien vertical du réseau triangulaire (le numéro de ligne change de parité, donc). Comme une \overline{LR} ne peut se dissocier sur un site qui n'est pas un vertex-6, toute \overline{LR} qui s'engage (à partir d'un vertex-6) sur un lien vertical doit parcourir ce lien jusqu'au bout et prend le poids w^2 , donc à la limite thermodynamique (où la hauteur H du réseau tend vers l'infini d'abord, la largeur L ensuite) le poids statistique d'anisotropie peut être assimilé à w^2 . Cependant, les effets de bord peuvent amener la puissance de w dans le poids d'une configuration sur réseau fini à être impaire. Dans toute la suite, nous allons enrichir le modèle avec ce poids w . On a alors $B_u^L B_v^R = \epsilon w \sqrt{v/u}$ et $A_{uv}(1 - w^2 v/u) = A_{vu}$. Ceci suffit à diagonaliser le bloc $n_L = n_R = 1$ de la matrice de transfert. D'autres choix sont possibles pour l'*Ansatz* : par exemple, on peut décider que, dans une paire liée, les particules sont dans l'ordre R,L et non L,R (la condition $x \leq y$ dans l'équation (13.2) devient alors $x < y$, tandis que $y < x$ devient $y \leq x$). Mais, *in fine*, cela revient au même au prix d'une complication plus grande. L'*Ansatz* ci-dessus est le plus simple que nous ayons trouvé.

Enfin, les blocs $n_L = 2, n_R = 1$ et $n_L = 1, n_R = 2$ permettent de fixer les facteurs d'échange des particules L et R. Comme le modèle est invariant sous la transformation qui échange simultanément gauche et droite d'une part et L et R d'autre part, il suffit de traiter le cas $n_L = 1, n_R = 2$ (l'autre s'en déduira facilement). Ici, la valeur propre est $\lambda = \epsilon \sqrt{u/v} 1/v^2$ et le seul cas nouveau est celui où les trois particules arrivent sur le même site :



Essayons un *Ansatz* avec des coefficients $A_{uv_1 v_2}$ pour l'ordre L,R,R (situation en haut des vertex ci-dessus, quand les trois particules sont sur le même site), $A_{v_1 v_2 u}$ (à gauche, en bas) et $A_{v_1 u v_2}$ (à droite, en bas), des coefficients $B_u^L B_v^R$ lorsque deux particules forment une paire liée \overline{LR} sur un lien vertical, et d'abord sans sommer sur les permutations des particules R (rappelons que la notation factorisée $B_u^L B_v^R$ n'est là que pour convenance ultérieure; nous pourrions écrire aussi bien C_{uv}). Les cas où les « collisions » font arriver au plus deux particules sur le même site, contrairement à ce qui se passe dans le dessin ci-dessus, imposent les valeurs de λ , de $B_u^L B_v^R$ et les relations du type $A_{v_1 u v_2} / A_{uv_1 v_2} = 1 - w^2 v_1 / u$ pour les échanges d'une particule L (« u ») et une R (un des « v_i »). Reste le cas du dessin ci-dessus. En multipliant à gauche par $\langle x; x, x; p |$ (avec $x + p$ entier) la relation $\lambda | \Psi \rangle = M | \Psi \rangle$, on trouve, après simplification et en tenant compte des valeurs de λ et $B_u^L B_v^R$,

$$A_{uv_1 v_2} = A_{v_1 v_2 u} + w^2 \frac{v_2}{u} A_{v_1 u v_2} = A_{v_1 u v_2} \tag{13.3}$$

lorsqu'on identifie v_1 avec la particule R la plus à gauche et v_2 avec l'autre, ou bien, si l'on choisit l'autre possibilité d'identification entre v_i et particules R, ce qui change le membre de gauche,

$$A_{uv_2 v_1} = A_{v_1 v_2 u} + w^2 \frac{v_2}{u} A_{v_1 u v_2} = A_{v_1 u v_2}, \tag{13.4}$$

la deuxième égalité (deuxième signe =) étant dans les deux cas une conséquence de la règle d'échange $A_{uv}(1 - w^2 v/u) = A_{vu}$. Le poids du vertex où une paire liée \overline{LR} se propage est w tandis que l'autre poids est 1. Si le membre de gauche est interprété avec l'ordre v_1, v_2 —

équ. (13.3), on aboutit tout de suite à une contradiction : $A_{uv_1v_2}$ ne peut pas être égal en général à $A_{v_1uv_2}$. S'il est interprété avec l'ordre v_2, v_1 — équ. (13.4), on trouve que le facteur d'échange $A_{v_2v_1}/A_{v_1v_2}$ vaut $1 - w^2v_1/u$ donc dépend de u : il n'y a pas factorisation des interactions. Nous sommes alors obligés de symétriser l'Ansatz en sommant sur les permutations des particules R (comme dans le modèle des pavages aléatoires), et les équations ci-dessus deviennent, après simplification par la règle d'échange L-R et mise en facteur de w^2/u ,

$$\sum_{\pi \in \mathfrak{S}_2} v_{\pi_1} A_{uv_{\pi_1}v_{\pi_2}} = 0 \tag{13.5}$$

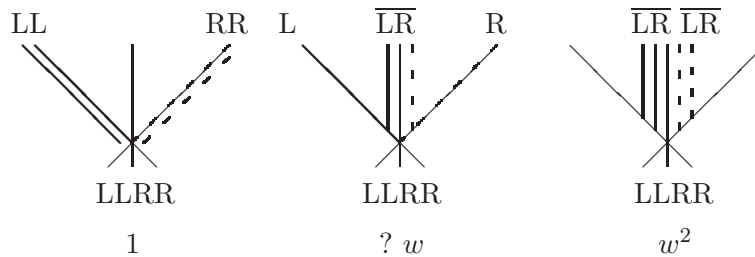
d'où la seule possibilité pour le facteur d'échange R-R s'il y a factorisation des interactions :

$$\frac{A_{v_1v_2}}{A_{v_2v_1}} = -\frac{v_2}{v_1}. \tag{13.6}$$

Réciproquement, il est facile de vérifier que cette expression suffit à faire en sorte que $|\Psi\rangle$ soit un vecteur propre du bloc de la matrice de transfert. On constate que les particules R ne se comportent pas comme des fermions libres (le facteur d'échange vaudrait alors -1), mais « presque » : si les nombres v_1 et v_2 associés aux particules sont proches (les « ondes » associées aux particules ont alors des vitesses de phase proches), le facteur d'échange vaut presque -1 . Elles ne se comportent pas non plus comme des bosons libres — on aurait pu s'y attendre dans la mesure où un nombre quelconque de particules R peuvent s'entasser sur un même site. Le facteur d'échange L-L, trouvé dans l'étude du bloc $n_L = 2, n_R = 1$ est similaire comme nous l'avons annoncé :

$$\frac{A_{u_1u_2}}{A_{u_2u_1}} = -\frac{u_2}{u_1}. \tag{13.7}$$

À ce stade tous les facteurs d'échange sont connus donc nous avons toute l'information nécessaire pour construire un Ansatz de Bethe; attardons-nous tout de même un peu et examinons le bloc $n_L = n_R = 2$ afin de mieux comprendre les propriétés de notre modèle. Quand quatre particules sont sur le même site (deux L et deux R), il y a trois possibilités pour leur mouvement, indiquées ci-dessous :



Le poids statistique du cas où deux \overline{LR} se propagent (à droite) est clairement w^2 puisqu'il y a ici deux \overline{LR} qui se propagent sur un demi-lien vertical et que l'on ne peut former cette configuration que d'une seule manière, et celui du cas où les L et R se propagent séparément (à gauche) est clairement 1 (cette configuration est obtenue une fois seulement aussi). Mais le poids de la configuration intermédiaire (au milieu), naturellement proportionnel à w , peut être aussi bien w si l'on considère les particules L et R comme indiscernables que $2w$ ou même $4w$ si l'on considère au contraire que chaque particule L ou R est indépendante et a deux choix devant elle. Nous allons voir que la condition de factorisation lève cette ambiguïté et nous force à considérer les particules comme indiscernables (donc, en particulier, quand $w = 1$ les trois vertex ci-dessus ont la même probabilité).

En écrivant la relation $\lambda|\Psi\rangle = M|\Psi\rangle$ dans le cas où les particules L et R sont loin les unes des autres, nous arrivons à l'expression (attendue) $\lambda = \epsilon\sqrt{u_1u_2/v_1/v_2}$. De même, en considérant les cas des collisions à deux ou trois particules, les particules ne participant pas au choc étant loin des autres, nous trouvons l'expression $B_u^L B_v^R = \epsilon w\sqrt{v/u}$ ainsi que les expressions des A_{\dots} (indiqués par une permutation de $\{u_1, u_2, v_1, v_2\}$) qui généralisent les expressions

précédentes et satisfont aux relations de permutation : quand deux indices u (resp. v) sont permutés, A est multiplié par $-u_2/u_1$ resp. $-v_2/v_1$, et, pour une permutation d'un u et d'un v ,

$$A_{\dots v \dots u \dots} / A_{\dots u \dots v \dots} = 1 - w^2 \frac{v}{u}. \quad (13.8)$$

Voyons maintenant le cas de la collision à quatre corps. Soit a le coefficient de w dans le poids statistique que nous cherchons. Multiplions à gauche par $\langle x - 1/2, x; x, x + 1/2; p |$ (avec $x + p$ entier) la relation $\lambda |\Psi\rangle = M |\Psi\rangle$. Le membre de gauche s'écrit, en généralisant les cas précédents à une, deux et trois particules,

$$\lambda \langle x - 1/2, x; x, x + 1/2; p | \Psi \rangle = \sum_{\sigma, \pi} B_{u_{\sigma_2}}^L B_{v_{\pi_1}}^R \lambda A_{u_{\sigma_1} u_{\sigma_2} v_{\pi_1} v_{\pi_2}} u_{\sigma_1}^{x-1/2} u_{\sigma_2}^x v_{\pi_1}^x v_{\pi_2}^{x+1/2} \quad (13.9)$$

soit, en tenant compte des expressions de λ et $B_u^L B_v^R$,

$$\lambda \langle x - 1/2, x; x, x + 1/2; p | \Psi \rangle = w \sum_{\sigma, \pi} A_{u_{\sigma_1} u_{\sigma_2} v_{\pi_1} v_{\pi_2}} u_{\sigma_1}^x u_{\sigma_2}^x v_{\pi_1}^x v_{\pi_2}^x. \quad (13.10)$$

(Comme d'habitude, la somme porte sur les permutations σ et π des ensembles d'indices respectifs des particules L et R, ici $\{1, 2\}$ et $\{1, 2\}$). Seule une composante de $|\Psi\rangle$ contribue au produit scalaire qui constitue le membre de droite $\langle x - 1/2, x; x, x + 1/2; p | M |\Psi\rangle$, à savoir la composante selon $|x, x; x, x; 1/2 - p\rangle$, car la seule manière de faire en sorte que les particules L, L, R et R soient disposés en $L\overline{LR}$ -R sur des sites contigus comme sur la figure ci-dessus au centre est que ces particules soient toutes sur le même vertex-6 sur la ligne immédiatement inférieure (la particule L à gauche ne peut venir que du vertex-6 situé en dessous d'elle à droite car une particule L seule ne se propage jamais que dans la direction oblique gauche sud-est-nord-ouest, de même la particule R à droite ne peut venir que du même vertex-6, etc.). Donc le membre de droite s'écrit

$$\langle x - 1/2, x; x, x + 1/2; p | M |\Psi\rangle = a w \sum_{\sigma, \pi} A_{u_{\sigma_1} u_{\sigma_2} v_{\pi_1} v_{\pi_2}} u_{\sigma_1}^x u_{\sigma_2}^x v_{\pi_1}^x v_{\pi_2}^x. \quad (13.11)$$

Clairement, les expressions du membre de gauche (13.10) et du membre de droite (13.11) ne peuvent être égales que si $a = 1$, donc si le poids du vertex au centre de la figure ci-dessus est w et non $2w$. Plus généralement, il nous faut considérer les particules L d'une part et R d'autre part comme indiscernables.

13.1.3 Équations de l'*Ansatz* de Bethe (EAB)

Nous conjecturons alors que, dans un bloc n_L, n_R quelconque, l'*Ansatz* de Bethe se généralise en

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}; p) = \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_{n_L}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{n_R}} A_{\dots} [B_{u_{\dots}}^L B_{v_{\dots}}^R \dots] \prod_{i=1}^{n_L} u_{\pi(i)}^{x_i} \prod_{j=1}^{n_R} v_{\sigma(j)}^{y_j} \quad (13.12)$$

comme à l'éq. (12.6) ($p \in \{0, 1/2\}$ désigne la parité de la ligne du réseau), avec de surcroît des facteurs $B_u^L = \epsilon/\sqrt{u}$ (resp. $B_v^R = \epsilon/\sqrt{v}$) pour chaque particule L (resp. R) membre d'une paire liée \overline{LR} sur un lien vertical. Les indices des A sont ici aussi des suites du type $u_3 u_6 v_4 u_1 v_2 \dots$ telles que l'ordre des particules L (identifiées aux nombres u_i) dans leur ensemble, d'une part et que celui des particules R (identifiées aux nombres v_j) dans leur ensemble, d'autre part, corresponde à celui défini par les abscisses x_i et y_j des particules L et R. C'est-à-dire : u_{i_0} apparaît comme indice de A à gauche de v_{j_0} si, et seulement si, $x_{i_0} < y_{j_0}$ — et de même pour les comparaisons $u_{i_1} - u_{i_2}$ et $v_{j_1} - v_{j_2}$. De même, les indices u_i resp. v_j d'une paire de facteurs

B^L et B^R doivent correspondre à des abscisses x_i et y_j égales et de parité opposée à celle de p . Nous conjecturons aussi que les valeurs propres sont les nombres

$$\lambda = \epsilon \left(\prod_{i=1}^{n_L} u_i \right)^{\frac{1}{2}} \left(\prod_{j=1}^{n_R} v_j^{-1} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (13.13)$$

où $\epsilon = \pm 1$ et les nombres u_i, v_j sont les solutions des EAB

$$\begin{aligned} u_{i_0}^L &= (-1)^{n_L-1} \left(\prod_{i \in [1, n_L] \setminus \{i_0\}} \frac{u_i}{u_{i_0}} \right) \prod_{j=1}^{n_R} \left(1 - w^2 \frac{v_j}{u_{i_0}} \right)^{-1} \text{ pour } 1 \leq i_0 \leq n_L \\ v_{j_0}^L &= (-1)^{n_R-1} \left(\prod_{j \in [1, n_R] \setminus \{j_0\}} \frac{v_j}{v_{j_0}} \right) \prod_{i=1}^{n_L} \left(1 - w^2 \frac{v_j}{u_{i_0}} \right) \text{ pour } 1 \leq j_0 \leq n_R. \end{aligned} \quad (13.14)$$

On peut mettre ces équations sous une forme plus symétrique en posant $\tilde{u} := \frac{w}{u}$ et $\tilde{v} := wv$:

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i_0 \leq n_L \quad \frac{\tilde{u}_{i_0}^L}{w^L} &= (-1)^{n_L-1} \left(\prod_{i \in [1, n_L] \setminus \{i_0\}} \frac{\tilde{u}_i}{\tilde{u}_{i_0}} \right) \prod_{i=1}^{n_R} (1 - \tilde{u}_{i_0} \tilde{v}_i) \\ \forall 1 \leq i_0 \leq n_R \quad \frac{\tilde{v}_{i_0}^L}{w^L} &= (-1)^{n_R-1} \left(\prod_{i \in [1, n_R] \setminus \{i_0\}} \frac{\tilde{v}_i}{\tilde{v}_{i_0}} \right) \prod_{i=1}^{n_L} (1 - \tilde{u}_i \tilde{v}_{i_0}). \end{aligned} \quad (13.15)$$

Et l'on peut en donner une formulation logarithmique : pour chaque solution $\tilde{u}_1, \tilde{u}_2, \dots, \tilde{u}_{n_L}, \tilde{v}_1, \tilde{v}_2, \dots, \tilde{v}_{n_R}$ des équations précédentes, il existe des constantes entières C_1, C_2, \dots, C_{n_L} et D_1, D_2, \dots, D_{n_R} telles que, s_1, s_2, \dots, s_{n_L} d'une part et t_1, t_2, \dots, t_{n_R} d'autre part désignant des logarithmes complexes des \tilde{u}_i et \tilde{v}_j ,

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i_0 \leq n_L \quad (L + n_L - 1)s_{i_0} - \sum_{i \in [1, n_L] \setminus \{i_0\}} s_i \\ - \sum_{i=1}^{n_R} \ln [1 - e^{s_{i_0}} e^{t_i}] - L \ln(w) - (n_L - 1)\pi i = 2C_{i_0} \pi \hat{\imath} \\ \forall 1 \leq i_0 \leq n_R \quad (L + n_R - 1)t_{i_0} - \sum_{i \in [1, n_R] \setminus \{i_0\}} t_i \\ - \sum_{i=1}^{n_L} \ln [1 - e^{s_i} e^{t_{i_0}}] - L \ln(w) - (n_R - 1)\pi i = 2D_{i_0} \pi \hat{\imath}. \end{aligned} \quad (13.16)$$

Cette dernière formulation peut être convertie aisément en un schéma de résolution itératif, que nous expliquons au paragraphe suivant. On peut aussi écrire une énergie libre pour les nombres u_i et v_j dont les EAB sont les équations de point-col [246].

Montrer rigoureusement que l'*Ansatz* de Bethe ci-dessus diagonalise bien la matrice de transfert de notre modèle serait assez compliqué, encore davantage que dans le cas des pavages aléatoires carrés-triangles, où cela n'a été fait que partiellement [290], ou que pour le modèle à six vertex que nous avons déjà discuté — voir les citations au chapitre 12. Nous n'avons pas tenté de le faire. Cependant, il n'est pas du tout évident que l'*Ansatz* valable pour les blocs $n_L + n_R \leq 3$ de la matrice de transfert se généralise, et nous pourrions être face à une coïncidence (voir [258], fin de la section 8.3 pour la mention d'une coïncidence similaire sans que l'*Ansatz* de Bethe se généralise). Pour justifier malgré tout une certaine confiance dans l'*Ansatz* ci-dessus, nous avons comparé les valeurs propres obtenues avec lui (et le schéma de résolution numérique itératif exposé ci-dessus) et les valeurs propres obtenues directement en diagonalisant la matrice de transfert.

Écrire un bloc de la matrice de transfert sur ordinateur, en énumérant les configurations de ce bloc, n'est pas très difficile. En revanche, la diagonalisation peut poser problème en

raison de la grande taille des blocs de la matrice. Nous avons diagonalisé analytiquement (à l'aide d'un logiciel de calcul formel) le bloc $n_L = n_R = 2$ pour une largeur de réseau $L = 4$ de la matrice de transfert, et numériquement (à l'aide du logiciel libre Scilab développé par l'INRIA) les blocs jusqu'à $n_L = n_R = 4$ et des tailles de réseau jusqu'à $L = 5$ — par exemple, le bloc $n_L = n_R = 3$, $L = 4$ de la matrice de transfert est de taille 1960. (Nous fermons ici les yeux sur la distinction entre blocs où S est conservée : ils sont amalgamés dans un grand bloc correspondant uniquement à la conservation de n_L et n_R). Nous trouvons que les valeurs propres non nulles de la matrice de transfert coïncident exactement (aux erreurs numériques, c'est-à-dire moins de 10^{-6} , près) avec celles données par l'*Ansatz* de Bethe pour ces tailles de blocs ; nous avons également vérifié pour quelques solutions des EAB que la forme postulée du vecteur propre générique est bien un vecteur propre de la matrice de transfert. Certes, ces tailles de blocs peuvent paraître modestes, mais il est très peu probable que l'*Ansatz* de Bethe soit correct pour six ou huit particules simplement par coïncidence. Nous sommes donc convaincus que les interactions à n corps entre particules dans ce modèle se factorisent et que le modèle est exactement soluble.

13.1.4 Un schéma de résolution numérique itératif des EAB

Dans cette petite digression, voyons comment les équations de l'*Ansatz* de Bethe sous la forme (13.16) peuvent être converties en un schéma de résolution itératif. C'est cet algorithme qui nous a permis de trouver toutes les données numériques relatives au spectre de la matrice de transfert et qui sont présentées et discutées dans la suite de ce chapitre. La résolution des EAB par une méthode semblable à celle-ci semble assez répandue dans la littérature [310], mais nous n'en avons pas trouvé de discussion explicite (chaque auteur, supposons-nous, devant penser qu'il s'agit soit d'une trivialité, soit d'un secret industriel). Néanmoins la programmer de façon efficace prend un certain temps, et elle mériterait qu'on s'y arrête davantage, ne serait-ce que pour améliorer son domaine de convergence (*cf.* ci-dessous).

Si l'on suppose s_1, s_2, \dots, s_{n_L} , et t_1, t_2, \dots, t_{n_R} calculés jusqu'au rang n , les nouvelles valeurs s'_i et t'_j au rang $n + 1$ sont données, dans cette procédure, par

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i_0 \leq n_L \quad s'_{i_0} &\leftarrow \frac{1}{L + n_L - 1} \left(\sum_{i \in [1, n_L] \setminus \{i_0\}} s_i + \sum_{i=1}^{n_R} \ln(1 - \exp s_{i_0} \exp t_i) \right. \\ &\quad \left. + L \ln(w) + (n_L - 1)\pi i + 2C_{i_0} \pi i \right) \\ \forall 1 \leq i_0 \leq n_R \quad t'_{i_0} &\leftarrow \frac{1}{L + n_R - 1} \left(\sum_{i \in [1, n_R] \setminus \{i_0\}} t_i + \sum_{i=1}^{n_L} \ln(1 - \exp s_i \exp t_{i_0}) \right. \\ &\quad \left. + L \ln(w) + (n_R - 1)\pi i + 2D_{i_0} \pi i \right) \end{aligned} \quad (13.17)$$

pour des constantes C_i et D_j fixées au départ. On constate empiriquement que, pour des C_i et D_j proches de ceux qui donnent les valeurs propres de plus grand module (répartis de façon similaire à la situation du modèle des pavages aléatoires), et pour des valeurs initiales des \tilde{u}_i et \tilde{v}_j réparties sur des courbes en arcs de cercle et de rayon approximatif w , ce schéma (avec des conditions initiales raisonnables pour les \tilde{u}_i et \tilde{v}_j , mais qui ne nécessitent pas de choix minutieux) converge vers des solutions de EAB tant que les courbes où se concentrent les \tilde{u}_i et \tilde{v}_j sont séparées par une distance finie (c'est toujours le cas en particulier pour $w < 1$ comme nous le verrons plus loin). Quand w devient tel que les courbes limites des \tilde{u}_i et \tilde{v}_j se touchent presque ou carrément se croisent (on observe en effet un tel phénomène, comme pour le modèle des pavages aléatoires), le schéma itératif atteint, pour des conditions initiales génériques, non un point fixe, mais un cycle limite, ou bien diverge carrément. A. Verberkmoes et B. Nienhuis mentionnent un problème similaire pour le modèle des trimères triangulaires [304], mais ils

peuvent s'appuyer sur des relations de dualité pour extrapoler les données obtenues dans la région où le schéma converge.

On peut s'affranchir de la divergence en « ralentissant » simplement la dynamique : formellement, si $\vec{x}(n)$ désigne le vecteur des s_i et t_j à l'étape n et si \vec{f} est la fonction telle que $\vec{x}(n+1) = \vec{f}[\vec{x}(n)]$ (éq. 13.17), il suffit de changer \vec{f} en $\vec{g} := \mu\vec{f} + (1-\mu)\mathbb{I}$, où \mathbb{I} désigne la fonction identité et $\mu \in [0, 1]$ est un scalaire. Pour μ assez petit, les valeurs propres de la différentielle de \vec{g} au voisinage du point fixe solution de (13.17) finissent par être toutes de module strictement inférieur à 1 (transformation localement contractante) et le point fixe devient stable (ou, s'il l'était déjà, son bassin d'attraction s'élargit). Cependant, nous ne savons pas si les valeurs de μ nécessaires ne divergent pas violemment quand les courbes limites de \tilde{u}_i et \tilde{v}_j se croisent (la méthode est en tout cas efficace pour des valeurs de μ finies, typiquement de 0,1 à 0,9, au voisinage du *contact* des courbes limites). Pire, ceci ne garantit pas que la dynamique ne reste pas « coincée » dans un cycle limite : même si μ est petit et donc si le point fixe solution de (13.17) est stable, on observe la présence d'un cycle limite quand les courbes limites ont leurs extrémités proches, et la dynamique converge vers ce cycle à moins que la condition initiale $\vec{x}(0)$ soit choisie avec précision (ce qui, bien sûr, est impossible sauf si l'on connaît à l'avance le point fixe que l'on voulait chercher!). Une façon de contourner ce problème est de résoudre le système (par itérations) pour une valeur de w où la convergence est peu sensible à la condition initiale ($\vec{x}(t)$ est donc très proche du point fixe pour cette valeur de w), puis de poursuivre les itérations en changeant w suffisamment lentement (« adiabatiquement » en jargon emprunté à la théorie des perturbations d'un système quantique à température finie) pour que $\vec{x}(t)$ suive le déplacement du point fixe (qui est une fonction continue de w) sans être attiré par un cycle limite. Cette méthode fonctionne, là encore, au voisinage du contact des courbes limites des \tilde{u}_i et \tilde{v}_j , mais nous ne savons pas si elle peut se généraliser à des valeurs de w arbitrairement grandes.

Mentionnons enfin que la technique utilisée par T. Aspelmeier *et al.* [311] pour la résolution des équations TAP (qui interviennent dans les modèles de verres de spin comme le modèle SK) et qui consiste à choisir une valeur de μ hors de l'intervalle $[0, 1]$ semble ne pas fonctionner ici.

13.1.5 Comptage des solutions et valeurs propres nulles

Les équations (13.15) sont algébriques, de degrés $L + n_L - 1$ en les \tilde{u}_i et $L + n_R - 1$ en les \tilde{v}_j . Cela signifie que les solutions (comptées avec leur multiplicité éventuelle) sont au nombre de $(L + n_L - 1)^{n_L} \times (L + n_R - 1)^{n_R}$ (on peut faire ce comptage en imaginant que l'on résout le système des $n_L + n_R$ équations par substitution, même si ce n'est possible que formellement quand les degrés des équations dépassent strictement quatre). Comme chaque choix des constantes C_i et D_j donne une solution des EAB, on peut se restreindre à des ensembles d'entiers de cardinaux respectifs $L + n_L - 1$ et $L + n_R - 1$ pour ces constantes.

Si deux constantes C_i ou deux constantes D_j au moins sont égales, les \tilde{u}_i et/ou \tilde{v}_j correspondants sont égaux et le prétendu vecteur propre construit par l'*Ansatz* de Bethe est nul. En effet, le facteur d'échange entre les deux particules (L-L ou R-R) correspondantes vaut alors -1 , et la somme sur les permutations des particules de même type dans l'*Ansatz* s'annule. Le nombre de vecteur propres non nuls produits par l'*Ansatz* est donc

$$\binom{L + n_L - 1}{n_L} \times \binom{L + n_R - 1}{n_R}$$

sans compter les signes $\epsilon = \pm 1$. On constate que, pour ce modèle, les degrés de liberté supplémentaires offerts par les signes ne donnent pas lieu à la complication du modèle des pavages aléatoires (où les vecteurs propres donnés par l'*Ansatz* étaient nombreux mais linéairement dépendants). L'explication est simple : soit une ligne paire (pour fixer les idées ; une ligne impaire se traite *mutatis mutandi*). Les facteurs dans l'*Ansatz* qui peuvent donner lieu à des signes ϵ sont ceux relatifs à une particule sur une position d'abscisse demi-entière, c'est-à-dire un lien vertical. Or une telle particule fait forcément partie d'une paire liée, et entraîne la

présence d'un facteur C en $\sqrt{v/u}$ dans l'*Ansatz*. Les facteurs ϵ des deux membres, L et R, de la paire liée apparaissant deux fois (une fois dans le facteur u^x, v^x et une fois dans le facteur C), ils se simplifient. Le seul degré de liberté supplémentaire en fin de compte est un facteur $\epsilon = \pm 1$ global, qui apparaît aussi dans l'expression des valeurs propres, et qui double le nombre de vecteurs propres annoncé ci-dessus. On peut aussi dire que c'est une simple conséquence de l'existence de deux sortes de lignes dans le réseau, les lignes paires et les lignes impaires. Bref, le nombre de vecteurs propres de valeurs propres non nulles donnés par l'*Ansatz* pour le bloc n_L, n_R (et S quelconque) est

$$2 \times \binom{L + n_L - 1}{n_L} \times \binom{L + n_R - 1}{n_R},$$

et l'on peut vérifier que c'est exactement le nombre de valeurs propre non nulles des petits blocs de la matrice de transfert (882 pour $n_L = n_R = 2$ et $L = 6$, 1050 pour $n_L = 3, n_R = 2$ et $L = 5$, 450 pour $n_L = n_R = 4$ et $L = 3$ par exemple).

La transformation suivante laisse stable l'ensemble des solutions des EAB : $\forall i \quad \tilde{u}_i \mapsto \omega \tilde{u}_i, \forall j \quad \tilde{v}_j \mapsto \omega^{-1} \tilde{v}_j$ où $\omega := \exp \frac{2\pi i k}{L}$ avec $k \in \llbracket 0, L \llbracket$. Le changement correspondant sur les constantes C_i et D_j en bijection avec les \tilde{u}_i et \tilde{v}_j est $C_i \mapsto C_i + k, D_j \mapsto D_j - k$, et la valeur propre λ est transformée en $\lambda \exp \left[\frac{\pi i k}{L} (n_R - n_L) \right]$. En particulier, si $n_L = n_R$, chaque valeur propre est de multiplicité au moins L (et, quand $n_L \neq n_R$, chaque valeur propre est accompagnée d'au moins $L - 1$ valeurs propres de même module).

Nous avons constaté que les valeurs propres de plus grand module sont obtenues pour les choix suivants des C_i et D_j :

$$\begin{aligned} \{C_1, C_2, \dots, C_{n_L}\} &= \llbracket x_C, x_C + n_L - 1 \rrbracket \\ \{D_1, D_2, \dots, D_{n_R}\} &= \llbracket x_D, x_D + n_L - 1 \rrbracket \end{aligned} \quad (13.18)$$

avec

$$x_C := \left\lfloor \frac{L - n_L - n_R}{2} \right\rfloor + d + 1, x_D := \left\lceil \frac{L - n_L - n_R}{2} \right\rceil - d + 1 \quad (13.19)$$

et $d := \left\lfloor \frac{n_R - n_L + L + 1}{2} \right\rfloor + \delta$ avec $0 \leq \delta \leq L - 1$. Quand $\delta = 0$, la valeur propre est réelle. Les valeurs propres de plus grand module après les premières (nous dirons familièrement « 2^{es} plus grandes valeurs propres ») s'obtiennent dans certains cas en changeant $x_D + n_L - 1$ en $x_D + n_L$ ci-dessus (le dernier D_j est séparé des autres d'une unité), et si l'on change de plus x_C en $x_C - 1$ (le premier C_i est séparé des autres d'une unité) on obtient les « troisièmes plus grandes valeurs propres ». Dans d'autres cas, c'est une « excitation de type *Umklapp* », selon l'appellation de P. A. Kalugin [312] par analogie avec les systèmes d'électrons fortement corrélés dans les solides : il faut remplacer $x_D + n_L - 1$ par $x_D - 1$. Nous mettons en garde le lecteur comme plus haut contre des exceptions à cette règle qui peuvent survenir pour de petites tailles de réseau : par exemple, pour $n_L = 1, n_R = 3, L = 6$, la formule ci-dessus pour la « troisième » valeur propre donne en fait la cinquième.

Une différence notable entre ce modèle et celui des pavages aléatoires est la présence de nombreux vecteurs propres de valeurs propres nulles. On remarque facilement que la taille de la matrice de transfert (le nombre de configurations par ligne) est strictement supérieure au nombre de valeurs propres non nulles. Il y aurait égalité entre ces deux nombres si l'on « gommait » les liens verticaux : les configurations seraient alors formées simplement en choisissant les positions des n_L particules L d'une part ($\binom{L+n_L-1}{n_L}$ choix), des n_R particules R d'autre part ($\binom{L+n_R-1}{n_R}$ choix) parmi les L vertex-6, les particules L et R étant indiscernables dans leur ensemble, et les recouvrements de particules étant autorisés. Il y a donc autant de valeurs propres nulles que de configurations avec des paires liées. Si l'on laisse de côté le facteur deux de la parité (chaque configuration se décline en une variante paire et une variante impaire), ce nombre est donc, dans le bloc n_L, n_R ,

$$\sum_{b=1}^{\min(n_L, n_R)} \binom{L+b-1}{b} \binom{L+n_L-b-1}{n_L-b} \binom{L+n_R-b-1}{n_R-b}.$$

13.1.6 Modèles « bosoniques » et modèles « fermioniques »

Dans la littérature (ne serait-ce que dans le livre de R. J. Baxter [258]), la plupart des modèles statistiques intégrables ont des degrés de liberté bornés. Par exemple, les modèles à six et à huit vertex que nous avons vus pourraient être qualifiés de « fermioniques » dans la mesure où chaque lien porte au plus une particule (on peut aussi dire qu'il porte une variable booléenne) — cette appellation est d'autant plus justifiée qu'il existe pour certaines valeurs des poids statistiques de ces modèles une correspondance avec un modèle défini par une action libre (*i.e.* sans terme quadratique) d'opérateurs fermioniques (*i.e.* de matrices qui satisfont à la relation d'anticommutation des fermions). D'ailleurs, malgré une recherche relativement approfondie, nous n'avons pas trouvé de modèle de vertex intégrable tel que le modèle de chaînes de forces ci-dessus, où les degrés de liberté sur les liens sont des entiers non bornés (nous l'appellerons « modèle bosonique »). Ce modèle semble donc assez original de ce point de vue, même s'il n'est pas exclu qu'il puisse être un cas particulier d'*Ansätze* de Bethe emboîtés. Si tel est le cas, il présente tout de même l'avantage d'être résolu par un *Ansatz* de Bethe simple (il n'est pas besoin de résoudre une hiérarchie, qui serait d'ailleurs infinie, d'EAB).

Une question naturelle face à la constatation précédente est : peut-on construire un modèle similaire, mais où les degrés de liberté peuvent prendre seulement un nombre fini de valeurs ? En particulier, peut-on construire un modèle de « fermions », où les degrés de liberté sont binaires ? Si l'*Ansatz* de Bethe du modèle des chaînes de forces est un *Ansatz* de Bethe emboîté caché, quels en sont les composants élémentaires ? C'est en cherchant à répondre à ces questions que nous avons naturellement été conduits à étudier le modèle suivant, qui permet de répondre positivement aux deux premières questions.

13.2 Un modèle d'empilements

13.2.1 *Ansatz* de Bethe et définition du modèle

Pour faire une telle construction (d'un modèle semblable au précédent mais à degrés de liberté binaires), nous avons renversé le raisonnement habituel : plutôt que de chercher un *Ansatz* de Bethe qui résout un modèle défini par un jeu de vertex dont on suppose (ou sait, grâce à des lois de conservation, à une étude numérique, ou à une étude des équations de Yang-Baxter) qu'il est soluble, nous avons cherché quel modèle de vertex définissait un certain *Ansatz* de Bethe. Cet *Ansatz* est obtenu en remplaçant, dans l'*Ansatz* introduit ci-dessus pour le modèle des chaînes de forces, le facteur d'échange $A_{uu'}/A_{u'u} = -u'/u$ par -1 , et de même pour $A_{vv'}/A_{v'v}$, de sorte que toutes les configurations où deux ou plusieurs particules de même type (L ou R) occupent le même site ou le même lien ont un poids statistique nul, comme nous l'avons discuté dans le cas de modèle de pavages aléatoires (paragraphes 12.2.1 et 12.2.2). Les EAB s'écrivent alors, d'après les équations 13.14,

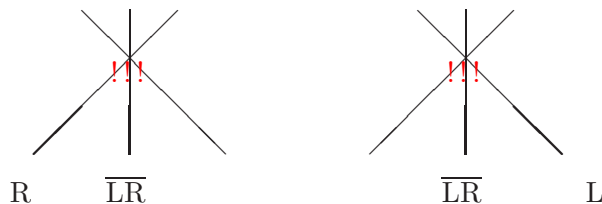
$$\begin{aligned} u_{i_0}^L &= (-1)^{n_L-1} \prod_{j=1}^{n_R} \alpha \left(1 - w^2 \frac{v_j}{u_{i_0}} \right)^{-1} \quad \text{pour } 1 \leq i_0 \leq n_L \\ v_{j_0}^L &= (-1)^{n_R-1} \prod_{i=1}^{n_L} \alpha^{-1} \left(1 - w^2 \frac{v_{j_0}}{u_i} \right) \quad \text{pour } 1 \leq j_0 \leq n_R. \end{aligned} \quad (13.20)$$

Remarquer que nous avons introduit un facteur α pour chaque croisement de particules L et R (dans le modèle des chaînes de forces, α était pris égal à un).

Modèle sur réseau triangulaire ?

Peut-on interpréter cet *Ansatz* comme un modèle de vertex-6 sur réseau triangulaire ? Les blocs $n_L = 0$ et $n_R = 0$ de la matrice de transfert sont alors les mêmes que dans le modèle de chaînes de forces précédent, et les valeurs propres ont une expression inchangée. Le bloc

$n_L = n_R = 1$ est aussi inchangé; en particulier des paires liées \overline{LR} peuvent se former et se dissocier. En revanche, dans les blocs $n_L \geq 2$ et/ou $n_R \geq 2$, il faut interdire non seulement les configurations où deux particules de même type occupent la même position, mais aussi les configurations « dangereuses » telles que celles où une particule R (resp. L) est sur le vertex-6 immédiatement à gauche (resp. à droite) d'un lien vertical occupé par une paire liée :



Avec ces restrictions, on peut construire sur ordinateur une matrice de transfert explicitement pour de petites tailles de réseau et de petits nombres de particules. Un comptage simple montre que l'*Ansatz* de Bethe propose plus de vecteurs propres que les blocs de la matrice de transfert n'en peuvent accueillir, ne serait-ce que dans le bloc $n_L = n_R = 1$. Ce n'est pas forcément un problème si ces vecteurs ne sont pas linéairement indépendants : pour le modèle de pavages carrés-triangles on trouve la bonne dimension pour le sous-espace vectoriel engendré par les vecteurs de l'*Ansatz*, comme nous l'avons discuté au paragraphe 12.2.2. Mais il se trouve que, dans le bloc $n_L = 1, n_R = 2$, la plus grande valeur propre donnée par l'*Ansatz* est strictement supérieure à la plus grande valeur propre de la matrice de transfert (diagonalisée par l'ordinateur), donc il y a ici réellement une inadéquation entre l'*Ansatz* de Bethe et le modèle candidat (sur réseau triangulaire). Pour résoudre ce problème, nous avons alors cherché, et trouvé, un modèle à particules L et R sur réseau carré qui corresponde à l'*Ansatz* de Bethe ci-dessus; nous donnons deux formulations du modèle, et il y en a sûrement d'autres. La première formulation est reliée directement à l'*Ansatz* de Bethe ci-dessus. La deuxième, qui s'en déduit, conduit à un *Ansatz* de Bethe plus complexe car elle oblige à distinguer lignes paires et lignes impaires sur le réseau, mais elle permet une interprétation plus simple comme modèle de vertex à trois couleurs.

Première formulation sur réseau carré du modèle d'empilements

Le réseau carré est pris dans l'orientation où les liens sont verticaux ou horizontaux (et non à quarante-cinq degrés). Les abscisses des particules sont toutes prises entières (modulo L , la largeur du réseau). La forme générique de l'*Ansatz* dans le bloc (n_L, n_R) est la suivante :

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}) = \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_{n_L}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{n_R}} A_{\dots} \prod_{i=1}^{n_L} u_{\pi(i)}^{x_i} \prod_{j=1}^{n_R} v_{\sigma(j)}^{y_j} \quad (13.21)$$

comme à l'éq. (13.12), mais sans facteurs B^L et B^R , et sachant que les facteurs A_{\dots} se déduisent de l'un d'entre eux (fixé arbitrairement à une valeur non nulle) par permutations successives, en utilisant les facteurs d'échange $A_{vu}/A_{uv} = (1 - wv/u)/\alpha$ et $A_{uu'}/A_{u'u} = A_{vv'}/A_{v'v} = -1$. Les valeurs propres sont les nombres

$$\lambda = \left(\prod_{i=1}^{n_L} u_i \right) \left(\prod_{j=1}^{n_R} v_j^{-1} \right) \quad (13.22)$$

où les u_i et v_j sont les solutions des EAB (13.20). Remarquer qu'il n'y a pas ici de facteur $\epsilon = \pm 1$, du fait que toutes les positions des particules sont entières. Une particule L (resp. R) seule se propage, d'une ligne à la suivante (vers le haut), en se décalant d'un site vers la gauche (resp. droite), et ces propagations ont un poids unité. Lorsque deux particules, une L et une R, arrivent sur le même site (cela se produit notamment dans le bloc $n_L = n_R = 1$), elles peuvent se croiser comme si l'autre n'était pas là (poids statistique α pour chaque croisement), mais

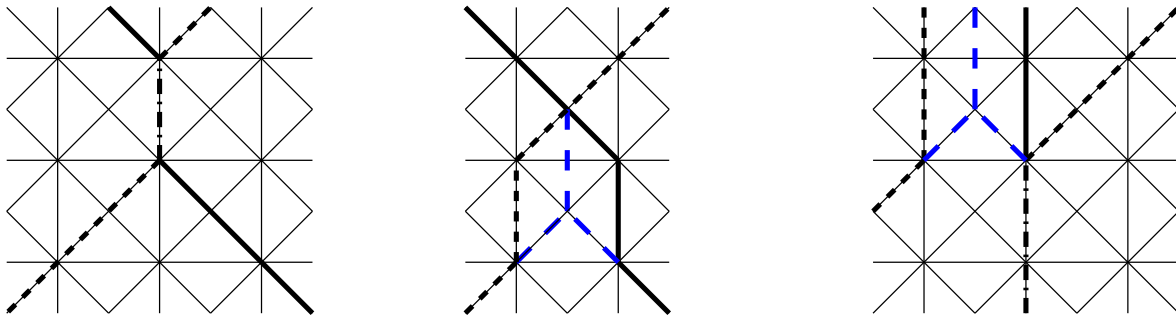
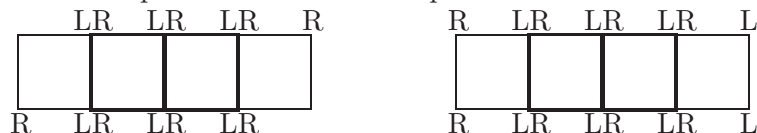


FIG. 13.2 – Les deux types de paires liées \overline{LR} dans le modèle d'empilement. **À gauche** : quand une particule R (trajectoire en trait gras interrompu court) et une L (trait gras continu) arrivent sur le même site, elles peuvent emprunter conjointement les liens verticaux situés à l'aplomb (elles forment une \overline{LR} qui se propage sur ces liens puis finit par se dissocier — trait gras mixte). **Au centre** : quand une particule R et une L arrivent sur des sites immédiatement voisins, la R étant à gauche de la L, elles peuvent emprunter des liens verticaux face-à-face (mais chacune emprunte un lien vertical différent). On interprète cela comme la formation d'une \overline{LR} au centre d'un carré élémentaire (d'une plaquette) du réseau, et qui se propage le long des liens verticaux, non représentés, qui joignent les centres des plaquettes. Les traits gras interrompus longs montrent cette interprétation symétrisée « physique », tandis que les traits gras continu resp. interrompu court indiquent les trajectoires « mathématiques » des particules R resp. L. **À droite** : quand une particule R seule arrive en direction d'une trajectoire verticale de \overline{LR} , elle oblige la \overline{LR} à se dissocier pour empêcher que deux R partagent le même site ou le même lien. Ici, la nouvelle R se recombine aussitôt avec la L issue de la dissociation pour former une \overline{LR} du deuxième type (*i.e.* qui se propage au milieu des plaquettes et non sur les liens verticaux). Les traits gras interrompus longs indiquent comment on peut interpréter les trajectoires des particules L et R (traits gras continu et interrompu court) en termes d'une \overline{LR} .

elles peuvent aussi former une paire liée \overline{LR} (juste après s'être croisées, donc là encore avec le poids statistique α) qui se propage ensuite sur un ou plusieurs liens verticaux, avant de se dissocier. La propagation d'une \overline{LR} sur un lien vertical a le poids w^2 (et donc w^{2v} pour une propagation sur v liens verticaux, en sus du facteur α initial). Ce mécanisme de formation d'une \overline{LR} suppose que les particules L et R étaient à deux sites d'écart, comme on le voit à gauche de la figure 13.2. Quand elles sont à un site d'écart seulement, un autre mécanisme (au centre de la figure 13.2) entre en jeu : les particules peuvent se croiser simplement (le point mathématique de croisement étant situé au centre d'une plaquette du réseau), ou bien former une \overline{LR} d'un deuxième type : chaque particule emprunte un lien vertical différent, mais les deux liens se font face. Cette \overline{LR} se propage verticalement (les particules L et R continuant leur chemin sur leurs liens verticaux respectifs), puis se dissocie, et la L et la R, qui se croisent au moment de la dissociation, reprennent alors leurs trajectoires obliques. Ce deuxième type de \overline{LR} peut s'interpréter comme indiqué sur la figure 13.2 en prolongeant mentalement les trajectoires d'approche et d'éloignement de la L et de la R jusqu'aux centres des plaquettes, et en ajoutant une trajectoire verticale fictive pour la \overline{LR} , de centre de plaquette en centre de plaquette, entre les « vraies » trajectoires verticales de la L et de la R.

Notons que si, à chaque donnée de trajectoires des particules L ou R qui suivent les principes énoncés ci-dessus (propagation simple ou association en \overline{LR} des deux types), on peut faire correspondre facilement une unique décoration des sommets qui indique leur contenu en particules de chaque type (quatre motifs de décoration suffisent donc), l'inverse n'est pas vrai. D'une part l'interprétation en termes de \overline{LR} du premier ou du deuxième type la décoration d'une plaquette du réseau nécessite parfois de considérer un nombre arbitrairement grand de plaquettes (l'interprétation peut donc être qualifiée de non locale), d'autre part il y a parfois

plusieurs possibilités d'interprétation. Dans l'exemple suivant :



les deux carrés du centre (en gras), sans contexte, peuvent avoir plusieurs interprétations (par exemple celle de trois \overline{LR} du premier type qui se propagent le long des liens verticaux). Le contexte permet de lever cette ambiguïté mais cela oblige à tenir compte de la valeur des quatre plaquettes : dans le contexte de gauche, on voit qu'il s'agit en fait de particules L et R se propageant obliquement (les particules R seules à gauche et à droite forcent cette interprétation), tandis que dans le contexte de droite on voit qu'il s'agit de \overline{LR} du deuxième type. Il peut même y avoir une ambiguïté qui ne peut être levée : c'est quand le groupe de plaquettes ambiguës n'a plus de bord, du fait de la condition au bord périodique dans la direction horizontale. Lorsque tous les sites sont occupés par une particule L et une R, cette condition au bord nous autorise à considérer soit que les particules L et R se propagent toutes obliquement, soit qu'elles forment toutes des paires liées \overline{LR} du premier type se propageant sur liens verticaux, soit qu'elles forment des \overline{LR} du deuxième type se propageant entre les liens verticaux. Le poids statistique d'une telle configuration est la somme des poids des trois interprétations possibles (cette situation rappelle les deux possibilités pour le bloc $n_R = 0$ du modèle à six vertex au paragraphe 12.2.2, p. 243). La conséquence de tout ceci est que le modèle ne peut pas directement être vu comme un modèle de spins (à quatre valeurs) sur les sommets du réseau carré avec interactions de plaquettes. Nous y reviendrons au paragraphe 13.3.

Le poids statistique de la formation et de la propagation sur v lignes avant dissociation d'une \overline{LR} du deuxième type est le même que pour le premier type : αw^{2v} ; cependant, le poids de croisement α est ajouté lors de la dissociation et non lors de l'association. Les deux types de trajectoires verticales peuvent donc être distingués près des bords inférieur et/ou supérieur du réseau si l'on utilise une condition au bord ouverte (par opposition à une condition au bord périodique dans la direction verticale), un type ayant le facteur α et l'autre non quand la trajectoire verticale s'interrompt à cause du bord — par « distinguer » nous entendons qu'on peut favoriser un type au détriment de l'autre en jouant sur le poids α . Remarquer que si l'un est favorisé au bord supérieur du réseau, l'autre le sera de la même manière au bord inférieur du réseau. De toute façon, dans la limite d'un réseau infiniment haut, ou bien si les conditions au bord sont périodiques dans la direction verticale, cette distinction disparaît. Notons également qu'il est facile de modifier le modèle pour que les trajectoires verticales des \overline{LR} du premier type prennent aussi le poids α lors de la dissociation et non lors de l'association (les deux types de trajectoires verticales sont alors quasiment indistinguables statistiquement, à ceci près qu'ils commencent et se terminent sur des sites d'ordonnées entières pour l'un, demi-entières pour l'autre, si l'on repère les lignes horizontales de liens du réseau par des ordonnées entières). En effet, il suffit de décréter qu'une \overline{LR} du premier type (celui qui se propage sur les liens verticaux du réseau) est constituée d'une particule R à gauche de la particule L et non à droite, autrement dit que les deux particules ne se croisent pas quand elles forment la \overline{LR} , mais quand la \overline{LR} se dissocie, comme pour le deuxième type de \overline{LR} , et de modifier en conséquence l'*Ansatz* de Bethe éq. (13.21) : on doit rajouter un facteur $B_{uv} := A_{uv}/A_{vu}/\alpha = 1/(1 - w^2v/u)$ pour chaque \overline{LR} (du premier type) qui emprunte un lien vertical. Pour être exhaustif, mentionnons qu'il est aussi possible de mettre le facteur de croisement α lors de la formation des \overline{LR} du premier et du deuxième type, en laissant le mécanisme de formation des \overline{LR} du premier type comme au début de ce paragraphe (croisement L-R lors de l'association sur un sommet du réseau) et en modifiant celui des \overline{LR} du deuxième type (d'abord croisement L-R avec poids α , puis propagation éventuelle de la L et de la R sur des liens verticaux en vis-à-vis, mais avec la L à gauche de la R, contrairement à ce que l'on voit sur la figure 13.2). L'*Ansatz* de Bethe présenté ici est le plus simple des $2 \times 2 = 4$ cas possibles. Tout ceci ne change en rien les EAB (13.20), et c'est normal car les EAB ne prennent pas en compte les conditions au bord dans la direction verticale, qui seules peuvent distinguer les différents choix pour le moment

où le poids α intervient comme nous l'avons expliqué. Ces choix sont tous équivalents à la limite thermodynamique.

La contrainte « fermionique » de ce modèle (deux particules de même type ne peuvent occuper le même site ou le même lien) empêche une particule L ou R seule de croiser sans interaction une trajectoire verticale de \overline{LR} , alors que c'était possible dans le modèle de chaînes de forces : si un trublion s'approche latéralement d'une trajectoire de \overline{LR} (figure 13.2, à droite), il oblige la L et la R qui forment la \overline{LR} à se séparer suffisamment tôt pour éviter la coïncidence de deux particules de même type. Le trublion peut alors reformer une \overline{LR} avec la particule complémentaire issue de l'ancienne \overline{LR} (la nouvelle \overline{LR} se propageant maintenant sur une trajectoire légèrement décalée), ou simplement la croiser.

Les règles précédentes de propagation, association et dissociation des particules suffisent à définir le modèle, et l'on peut facilement vérifier que les blocs $n_L + n_R \leq 3$ de la matrice de transfert du modèle qu'elles définissent sont diagonalisés par l'*Ansatz* de Bethe (13.21). Ici encore, nous n'avons pas tenté de démontrer que c'est le cas pour tous les blocs, mais nous avons vérifié que le spectre de la matrice de transfert (obtenu par diagonalisation directe sur ordinateur) coïncide bien avec les valeurs propres prédites par l'*Ansatz* de Bethe pour de petites tailles de blocs (par exemple $n_L = 1, n_R = 2$ et $L = 4$, $n_L = n_R = 2$ et $L = 5$, ou $n_L = n_R = 3$ et $L = 4$).

Deuxième formulation sur réseau carré du modèle d'empilements

En observant la figure 13.2, on peut avoir l'idée de chercher une formulation du même modèle en termes d'un modèle de spins à quatre valeurs (vide, L, R et \overline{LR}) sur les plaquettes plus petites et à quarante-cinq degrés (ces plaquettes sont les carrés que dessinent les lignes obliques sur la figure 13.2). De plus, cette formulation permet d'unifier les deux types de \overline{LR} , dans la mesure où il n'y a plus de distinction entre liens verticaux et liens joignant les centres des grandes faces carrées : toutes les trajectoires accessibles aux \overline{LR} ont maintenant le même statut, ce sont les diagonales verticales des petites faces carrées. On se convainc assez facilement qu'il y a bijection entre les configurations de trajectoires des particules L, R et \overline{LR} dont le comportement a été précisé au paragraphe précédent et les configurations formées à partir des dix-sept plaquettes à côtés obliques et à décorations de spins dans les coins suivantes : les $4 \times 4 = 16$ faces-4 fabriquées en superposant l'une des quatre décorations possibles pour les morceaux de trajectoires de propagation simple de L (figure 13.3A) et l'une des quatre décorations possibles pour les morceaux de trajectoires de propagation simple de R (figure 13.3B), plus la face de propagation verticale (figure 13.3C). Le poids statistique de ces faces peut être pris égal à w^2 pour la face de propagation verticale, α pour les faces où une L et une R viennent à la rencontre l'une de l'autre dans le coin supérieur (il y a 2×2 telles faces) et l'unité pour les douze faces restantes.

Les modèles de spins peuvent souvent être reformulés (tout en gagnant en simplicité) en termes de modèles de vertex ou de faces sur le réseau dual ; c'est aussi le cas ici. Le réseau dual est le réseau carré à liens obliques dont les sommets sont situés aux milieux des liens verticaux et horizontaux du réseau carré de départ, fig. 13.2. On peut décider de décorer les liens de ce réseau dual suivant les trajectoires de particules qu'ils coupent. Mais les trajectoires verticales des \overline{LR} posent problème (c'est le coin d'une plaquette, et non un lien, qui « coupe » les trajectoires verticales). Nous allons voir que le problème est résolu si l'on réinterprète ces trajectoires verticales comme le résultat d'un rebond de la particule R et de la particule L lorsqu'elles se sont rencontrées : la particule R est répartie vers la gauche et la L vers la droite, seulement pour un site, puis elles ont repris leur trajectoire normale. La figure 13.4 montre la réinterprétation des différentes configurations de la figure 13.2 (le réseau dual est représenté en traits fins interrompus). Il y a encore bijection entre les configurations du paragraphe précédent et les configurations de trajectoires des particules L et R qui se croisent ou rebondissent.

Le passage au réseau dual à partir de cette reformulation en termes de particules L et R qui rebondissent mène bien à un modèle de faces ou de vertex. Affectons à chaque lien (oblique) du

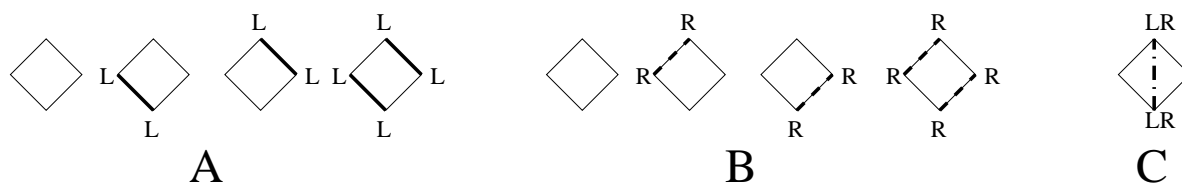


FIG. 13.3 – Comment construire les plaquettes d’un modèle de spins pour la deuxième formulation du modèle d’empilements. Chaque nœud (coin d’une plaquette) porte un spin à valeurs dans l’ensemble $\{\text{vide}, L, R, LR\}$. Les plaquettes autorisées sont spécifiées par leur décoration, c’est-à-dire par les valeurs des quatre spins qu’elles relient. Pour former une des plaquettes décorées autorisées, on peut soit superposer une des quatre décorations de propagation de particule(s) L (A) et une des quatre décorations de propagation de particule(s) R (B), soit prendre la décoration de propagation verticale (C) (il y a donc en tout dix-sept plaquettes décorées distinctes). Les lignes dessinées sur les côtés des plaquettes indiquent l’interprétation en termes de trajectoires pour faire le lien avec la première formulation mais ne suffisent pas à elles seules à définir un modèle de faces-4 (on pourrait confondre la face C avec la face vide).

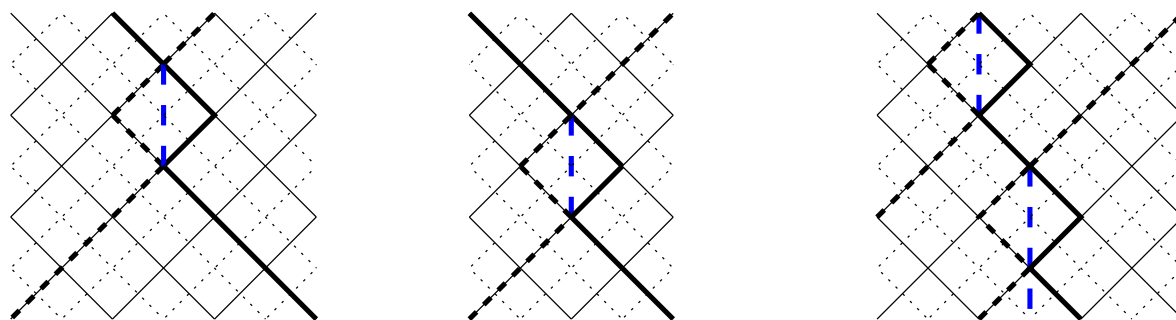


FIG. 13.4 – Les configurations de la figure 13.2 (données pour la première formulation du modèle d’empilements) selon les termes de la deuxième formulation du modèle d’empilements : ici, on ne distingue plus deux types de \overline{LR} , et les \overline{LR} sont en fait la conséquence d’un « rebond » l’une sur l’autre de deux particules L et R qui se sont rencontrées. Les trajectoires des particules L (resp. R) sont représentées en traits gras continus (resp. interrompu court). Les traits verticaux gras interrompus longs indiquent l’interprétation en termes de propagation verticale de \overline{LR} .

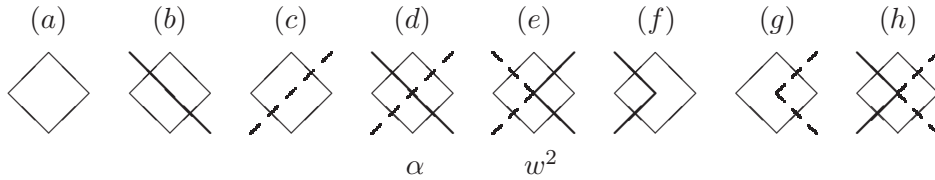


FIG. 13.5 – Les huit faces-4 de la deuxième reformulation du modèle d'empilements. Les décorations des côtés sont données par la couleur de la ligne qui les coupe : vide, L (trait gras continu) ou R (trait gras interrompu). Nous avons prolongé les lignes pour indiquer l'interprétation des faces en termes de trajectoires de particules L et R. Les poids statistiques sont indiqués sous les faces-4 (les poids unité sont omis) et leurs noms au-dessus.

réseau dual une couleur qui indique quelle trajectoire il coupe : aucune, une trajectoire de L ou une trajectoire de R. Ceci définit à partir d'une configuration de trajectoires une configuration d'un modèle de vertex (ou de faces) à trois couleurs. Seules huit faces sont possibles ; elles sont indiquées fig. 13.5. On vérifie réciproquement que toute configuration construite à partir de ces faces-4 définit une configuration de trajectoires de particules L et R qui rebondissent valable.

Comme la formulation en termes de particules L et R qui rebondissent est équivalente à la formulation du paragraphe précédent, l'*Ansatz* de Bethe de départ est bien sûr valable. On peut aussi introduire un autre *Ansatz* – faisons-le pour redémontrer par un autre moyen l'équivalence des deux formulations. Ici, le réseau carré étant pris dans l'orientation où les liens sont obliques, nous sommes obligés de distinguer lignes paires et lignes impaires. Nous reprenons les conventions du paragraphe 13.1.2, avec des positions entières ou demi-entières pour les particules L et R. Ici, les positions sont forcément entières sur les lignes paires et demi-entières sur les lignes impaires (les positions intermédiaires sur liens verticaux n'existent pas). La forme générique d'un *Ansatz* possible dans le bloc (n_L, n_R) est la suivante :

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_{n_L}; y_1, y_2, \dots, y_{n_R}) = \sum_{\pi \in \mathfrak{S}_{n_L}} \sum_{\sigma \in \mathfrak{S}_{n_R}} A_{\dots} [B_{u\dots v\dots} \dots] \prod_{i=1}^{n_L} u_{\pi(i)}^{x_i} \prod_{j=1}^{n_R} v_{\sigma(j)}^{y_j} \quad (13.23)$$

comme à l'éq. (13.21), mais avec un facteur $B_{uv} = A_{uv}/A_{vu}/\alpha$ pour chaque paire de particules R,L situées sur des sites voisins immédiats, la R étant à gauche de la L. Les facteurs A_{\dots} se déduisent de l'un d'entre eux (fixé arbitrairement à une valeur non nulle) par permutations successives, en utilisant les facteurs d'échange $A_{vu}/A_{uv} = (1 - wv/u)/\alpha$ et $A_{uu'}/A_{u'u} = A_{vv'}/A_{v'v} = -1$. Les valeurs propres sont les nombres

$$\lambda = \left(\prod_{i=1}^{n_L} u_i^{\frac{1}{2}} \right) \left(\prod_{j=1}^{n_R} v_j^{-\frac{1}{2}} \right) \quad (13.24)$$

où les u_i et v_j sont les solutions des EAB (13.20). Montrons rapidement comment l'on peut trouver la valeur du facteur d'échange L-R et de B_{uv} en étudiant le bloc $n_L = n_R = 1$ de la matrice de transfert. Deux particules L et R sur le même site proviennent forcément d'une configuration où elles étaient sur des sites immédiatement voisins, la R à gauche de la L, et ceci a le poids α car il y a croisement des particules. En multipliant à gauche par $\langle x; x; p |$ (avec $x + p/2$ entier) la relation $\lambda |\Psi\rangle = \epsilon \sqrt{u/v} |\Psi\rangle = M' |\Psi\rangle$ à laquelle le vecteur propre $|\Psi\rangle$ de la matrice de transfert M' obéit, on trouve

$$A_{uv} = \alpha A_{vu} B_{uv} \quad (13.25)$$

d'où la valeur de B_{uv} . Un deuxième cas intéressant est celui qui mène à la situation où la R et la L sont sur des sites immédiatement voisins, la R à gauche de la L : soit la R et la L se sont

propagées simplement (poids unité), soit elles étaient sur le même site et ont « rebondi » l'une sur l'autre (poids $w^2/\alpha : w^2$ car on doit interpréter le rebond comme la propagation d'une \overline{LR} sur un lien vertical, et $1/\alpha$ pour compenser le poids α au moment où la L et la R vont se rencontrer de nouveau, car il n'y a pas vraiment de croisement ici). En multipliant à gauche la relation de vecteur propre par $\langle x + 1/2; x - 1/2; p |$ (avec $x + p/2$ demi-entier), on trouve

$$A_{vu}B_{uv} = A_{vu} + \frac{w^2}{\alpha} A_{uv} \frac{v}{u} \quad (13.26)$$

d'où le facteur d'échange L-R annoncé ci-dessus. Les facteurs d'échange L-L et R-R se déduisent de la même façon que d'habitude (cf. chap. 12) pour des modèles « fermioniques » où deux particules de même type ne peuvent occuper le même site.

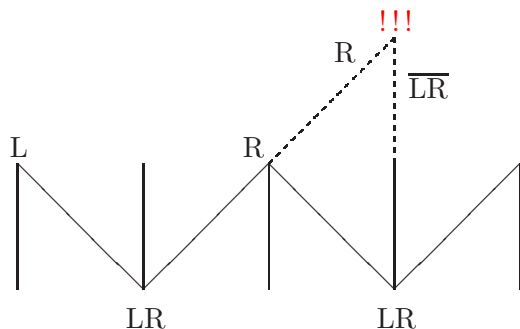
Sans surprise, les facteurs d'échange et donc les EAB sont les mêmes que pour la première formulation du modèle d'empilements, donc les deux modèles sont équivalents (les configurations peuvent être mises en bijection). La seule différence est la présence ici de racines carrées, donc de facteurs ϵ , dans les valeurs propres. Si l'on tient compte du fait qu'une ligne du réseau de la première formulation correspond exactement à deux lignes du réseau de la deuxième formulation, on voit que la matrice de transfert M de la première formulation est le carré de la matrice de transfert M' de la deuxième formulation. Il faut donc élever les valeurs propres de M' au carré si l'on veut les comparer à celles de M , alors les racines carrées et les coefficients ϵ disparaissent et l'on retrouve exactement le même spectre.

Pourquoi le modèle d'empilements est un modèle d'empilements

D'après ce qui a été dit ci-dessus, les configurations du modèle fermionique peuvent être vues comme un ensemble de trajectoires de particules L et R qui suivent les liens d'un réseau triangulaire (la direction de ce réseau coïncidant, pour fixer les idées, avec la direction verticale), avec les règles de propagation suivantes :

- Une particule L qui arrive sur un site en repart dans la direction oblique SE-NW (ou bas-droite–haut-gauche) lorsqu'elle est seule sur ce site,
- De même, une particule R qui arrive sur un site en repart dans la direction oblique SW-NE (ou bas-gauche–haut-droite) lorsqu'elle est seule sur ce site,
- Deux particules de même type (L ou R) ne peuvent occuper le même site (« contrainte fermionique »),
- Lorsqu'une particule L et une R arrivent sur le même site (ensemble sur un lien vertical ou séparément sur deux liens obliques), elles peuvent en repartir ensemble sur un lien vertical (on dit alors qu'elles forment une paire liée \overline{LR}) ou séparément, chacune sur son lien oblique.

Notons bien que certains « choix » entre propagation verticale et propagation oblique pour une paire de particules $\{L, R\}$ qui arrivent sur le même site sont forcés par ce qui se passe sur les sites voisins à cause de la contrainte fermionique, alors que dans le modèle « bosonique » de chaînes de forces chaque paire de particules $\{L, R\}$ pouvait prendre sa décision (mariage ou divorce) indépendamment de ce que font les voisins. Par exemple, si, dans la configuration ci-dessous :



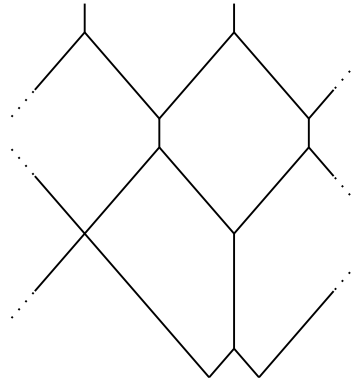
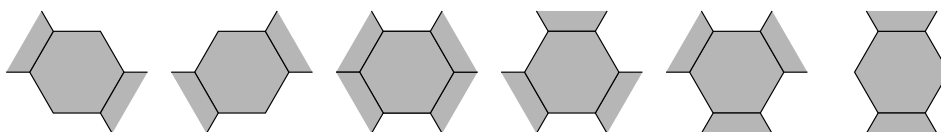


FIG. 13.6 – Exemple de configuration du modèle fermionique dans la formulation comme trajectoires de particules L et R sur réseau triangulaire (qui n'est pas représenté). Les conditions aux limites sont cylindriques : les bords gauche et droit sont confondus, et les trajectoires se raccordent suivant les pointillés.

la particule L et la R qui étaient sur le vertex-6 en bas à gauche ont décidé de ne pas former une paire liée \overline{LR} , la particule L et la R qui sont sur le vertex-6 en bas à droite ne peuvent pas le faire non plus : si elles le faisaient, la particule R de gauche viendrait occuper le même site que la particule R de droite (celle qui forme la \overline{LR}) après parcours des liens en traits interrompus.

Une conséquence des règles de propagation énoncées ci-dessus est que les trajectoires des particules L et R forment des *cellules* ou *domaines* dont les côtés sont parallèles aux directions du réseau triangulaire et de longueurs, exprimées en tailles de liens du réseau, entières. Ces domaines sont généralement hexagonaux, et parfois à cinq ou quatre côtés quand l'un des côtés verticaux ou les deux ont une longueur nulle, mais leurs côtés obliques ont toujours une longueur au moins égale à un (sinon, un vertex-6 au moins aurait autour de lui deux côtés verticaux et au moins deux côtés obliques opposés, ce qui l'obligerait à contenir une particule de chaque type (L et R) pour former les côtés verticaux plus au moins une particule L ou une R pour former les côtés obliques, mais la contrainte fermionique lui interdit de contenir deux L ou deux R). Un exemple de configurations de domaines (*i.e.* de trajectoires) est montré figure 13.6. La distinction entre longueurs minimales des côtés obliques (un) et verticaux (zéro) empêche l'invariance du modèle sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$. Le poids statistique w^2 est placé sur chaque segment vertical et le poids α sur chaque croisement de particules L et R, donc chaque cellule a le poids α multiplié par le poids $\sqrt{w^2}$ à la puissance égale à la somme des longueurs de ses côtés verticaux ($\sqrt{w^2}$ et non w^2 car le poids placé sur un côté vertical est réparti entre les deux cellules auxquelles il appartient).

De là, ce modèle fermionique peut être aisément traduit en modèle d'empilements de grains hexagonaux sur un réseau hexagonal à faces (plaquettes) identiques, les grains ayant exactement la forme et la taille des faces, avec les contraintes suivantes : les grains sont contraints à se superposer exactement aux faces (un grain ne peut pas chevaucher plusieurs faces du réseau), et, quand un grain noue des contacts (avec les grains voisins éventuellement présents), le motif de ces contacts doit être l'un des motifs ci-dessous :



Cette dernière contrainte assure que chaque empilement (avec son réseau de contacts) peut être interprété comme une configuration de trajectoires de particules L et R du modèle fermionique comme définies ci-dessus (en particulier, deux particules L ou R de même type ne peuvent

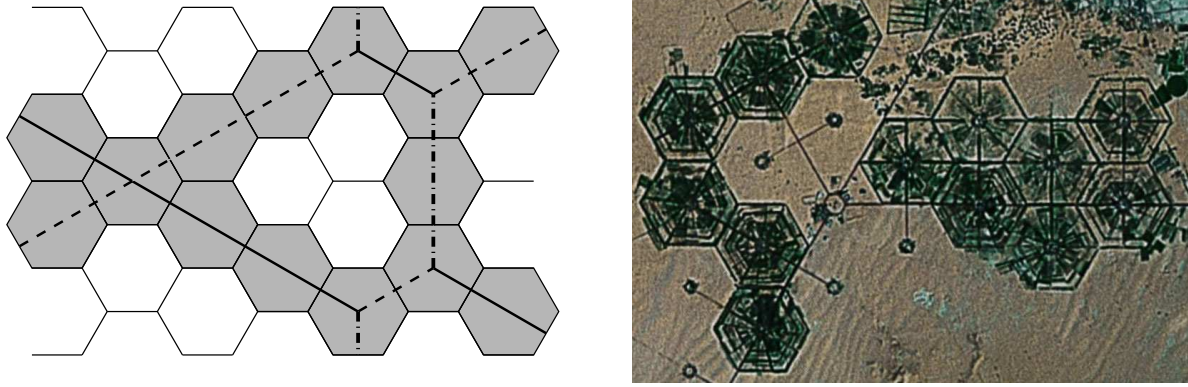


FIG. 13.7 – À gauche, exemple de configuration du modèle fermionique vu comme modèle d'empilements d'hexagones. Les hexagones colorés sont les « grains » ; ils ne peuvent occuper que les positions alignées sur le réseau hexagonal dessiné. L'interprétation en termes de trajectoires de particules L et R (ou encore de parois de domaines) est donnée en traits gras (continus pour les particules L, interrompus longs pour les particules R et mixtes pour les paires liées \overline{LR}). La règle fermionique (deux particules de même type ne peuvent occuper un même vertex-6, c'est-à-dire ici un même centre d'hexagone) se traduit par un certain nombre de motifs de contacts impossibles pour les « grains » hexagonaux (voir texte). À droite, exemple de configuration qui ne fait pas partie du modèle car la règle de conservation des particules n'est pas respectée (photographie par satellite du sud-est lybien, au lieu de latitude Nord $7^{\circ}50'$ et longitude Est $23^{\circ}15'$, publiée par Google Earth).

se croiser ni même occuper la même position). Réciproquement, à toute configuration de trajectoires de particules L et R du modèle fermionique on peut associer un empilement avec un réseau de contacts donné. La figure 13.7 montre un exemple d'un tel empilement. L'absence d'invariance du modèle sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ se manifeste ici par le fait que seule une configuration de contact d'un « grain » hexagonal avec quatre voisins est possible (la troisième configuration en partant de la gauche dans la liste des six configurations ci-dessus). Un contact entre deux « grains » hexagonaux selon un côté horizontal est affecté du poids w^2 ; un croisement entre particules L et R, c'est-à-dire une configuration où un grain a quatre contacts (forcément obliques) et l'une des deux configurations où il a deux contacts obliques (ou les deux à condition de répartir le poids) a le poids α . D'une certaine manière, α permet de compter les grains stables vis-à-vis du flambage des arches : il y a un poids α par grain reposant sur deux contacts en dessous de lui.

13.2.2 Comptage des solutions des EAB

Les EAB 13.20 peuvent être mises sous la forme plus symétrique

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i_0 \leq n_L \quad \frac{\tilde{u}_{i_0}^L}{w^L} &= (-1)^{n_L-1} \alpha^{-n_R} \prod_{i=1}^{n_R} (1 - \tilde{u}_{i_0} \tilde{v}_i) \\ \forall 1 \leq i_0 \leq n_R \quad \frac{\tilde{v}_{i_0}^L}{w^L} &= (-1)^{n_R-1} \alpha^{-n_L} \prod_{i=1}^{n_L} (1 - \tilde{u}_i \tilde{v}_{i_0}) \end{aligned} \quad (13.27)$$

où $\tilde{u} := \frac{w}{u}$ et $\tilde{v} := wv$, et sous la forme logarithmique, analogue à (13.16),

$$\begin{aligned} \forall 1 \leq i_0 \leq n_L \quad & L \ln(\tilde{u}_{i_0}) - \sum_{i=1}^{n_R} \ln(1 - \tilde{u}_{i_0} \tilde{v}_i) - L \ln(w) + n_R \ln(\alpha) \\ & - (n_L - 1)\pi i = 2C_{i_0} \pi \hat{i} \\ \forall 1 \leq i_0 \leq n_R \quad & L \ln(\tilde{v}_{i_0}) - \sum_{i=1}^{n_L} \ln(1 - \tilde{u}_i \tilde{v}_{i_0}) - L \ln(w) + n_L \ln(\alpha) \\ & - (n_R - 1)\pi i = 2D_{i_0} \pi \hat{i}. \end{aligned} \quad (13.28)$$

Cette forme est convertie en un schéma de résolution itératif suivant le même principe que pour (13.17).

Remarquons que w et α n'interviennent que sous la forme des combinaisons w^L/α^{n_R} et w^L/α^{n_L} et que, dans un bloc (n_L, n_R) donné, on peut se ramener au cas $\alpha = 1$ quitte à faire le changement de variables supplémentaire

$$\bar{u}_i := \alpha^{\frac{n_R - n_L}{2L}} \tilde{u}_i, \quad \bar{v}_i := \alpha^{\frac{n_L - n_R}{2L}} \tilde{v}_i, \quad \bar{w} := \alpha^{-\frac{n_L + n_R}{2L}} w \quad (13.29)$$

(les EAB s'écrivent alors, pour les \bar{u}_i , \bar{v}_j et \bar{w} , comme les équations 13.27 mais avec $\alpha = 1$). Nous n'allons pas faire ce changement de variables dans la suite car il est spécifique à un bloc de la matrice de transfert, alors que nous aurons besoin de considérer des nombres de particules variables (α pourra même servir à paramétrer ces nombres).

Le nombre de solutions des EAB (13.27) est au plus de $L^{n_L + n_R}$, mais, comme dans les cas précédents, le prétendu vecteur propre que l'on obtient quand deux u_i ou deux v_j sont identiques est nul (à cause du facteur d'échange -1). Donc l'*Ansatz* de Bethe produit au plus $\binom{L}{n_L} \times \binom{L}{n_R}$ vecteurs propres non nuls. Or c'est justement le nombre de configurations que l'on peut former en plaçant n_L particules L et n_R particules R sur L sites sans recouvrement de particules de même type, c'est-à-dire la taille du bloc n_L, n_R de la matrice de transfert, donc l'*Ansatz* de Bethe donne le bon nombre de vecteurs propres. Ceci est confirmé par la diagonalisation numérique; la matrice de transfert n'a pas ici de valeur propre nulle. Pour le schéma de résolution itératif, on peut choisir les constantes C_i et D_j dans un intervalle discret de L entiers, par exemple $[0, L - 1]$, et de sortes que les C_i d'une part, D_j d'autre part soient distincts. Les valeurs propres de plus grand module s'obtiennent avec le même choix de constantes C et D qu'à l'éq. (13.18), à ceci près qu'il faut changer la valeur de d : $d := \lfloor \frac{n_R - n_L}{2} \rfloor + \delta$. Un choix de constantes qui donne les « deuxièmes plus grandes valeurs propres » est celui que l'on obtient à partir des constantes qui donnent accès aux « premières », en changeant C_1 en $C_{n_L} + 1$. Pour les « troisièmes », on peut changer D_{n_R} en $D_{n_R} + 1$ (choix qui donnait les « deuxièmes » valeurs propres pour le modèle de chaînes de forces).

13.2.3 Configurations fermioniques et configurations bosoniques ; tailles de cellules

Il est clair qu'une configuration du modèle fermionique (trajectoires de particules L et R sur réseau triangulaire comme à la figure 13.6) est aussi une configuration possible du modèle bosonique : du point de vue des trajectoires de particules, la seule différence entre les deux modèles est que le modèle bosonique lève la contrainte que deux particules du même type (L ou R) ne peuvent occuper le même nœud du réseau. Inversement, peut-on voir toute configuration du modèle bosonique comme une superposition de configurations du modèle fermionique ? On peut donner un algorithme qui effectue une décomposition d'une configuration bosonique en superposition de configurations : partir d'un lien quelconque occupé par au moins une particule L ou R ou au moins une paire \overline{LR} suivant l'orientation de ce lien et suivre les liens dans la même direction tant qu'il est possible d'interpréter les vertex rencontrés comme la propagation en ligne droite de l'une des particules du type choisi initialement. Quand ce n'est plus possible, parce que le lien de l'autre côté du vertex traversé ne contient aucune particule,

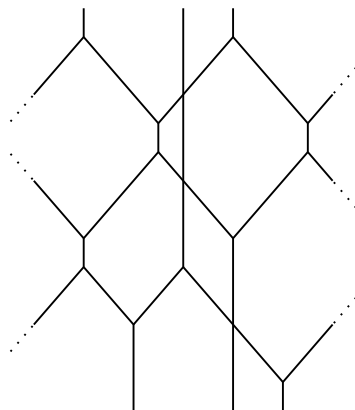


FIG. 13.8 – Un exemple de configuration du modèle bosonique qui ne peut pas être décomposée en superposition linéaire de configurations du modèle fermionique à cause des conditions aux limites périodiques entre bord gauche et bord droit. Les lignes pointillées indiquent où se situent les raccords gauche-droite.

la particule dont nous suivions la trace s'est forcément scindée. Poursuivre alors la recherche selon le même principe en suivant les deux particules issues de cette scission et en ajoutant de nouvelles particules à la liste des particules pistées uniquement en cas de besoin. Quand toutes les particules pistées ont atteint l'un des bords (supérieur ou inférieur) du réseau ou que toutes les trajectoires se referment si les conditions aux limites périodiques sont toriques, on peut « soustraire » à la configuration bosonique la configuration formée des trajectoires des particules qui ont été suivies, c'est-à-dire faire la soustraction des nombres de particules, lien par lien, de la configuration de départ et de la configuration formée par ces trajectoires. On peut alors recommencer l'opération et soustraire itérativement des configurations jusqu'à ce que le réseau soit vide. Les configurations ainsi isolées et soustraites, à chaque étape, sont-elles des configurations du modèle fermionique ? En fait, à cause des conditions aux limites périodiques, pas toujours, comme le montre l'exemple de la figure 13.8. En revanche, si le réseau avait des conditions aux bords libres sur les quatre côtés (haut et bas *et* gauche et droite), ce serait le cas, et l'on pourrait voir toute configuration bosonique comme superposition de configurations fermioniques. Comme les conditions aux bords ne devraient plus avoir d'influence sur les propriétés massiques à la limite thermodynamique, nous pouvons dans le reste de ce paragraphe prendre le cas de conditions aux bords libres et supposer que la décomposition ci-dessus livre des configurations du modèle fermionique. Pour ce modèle, une configuration est constituée de cellules hexagonales. Dans le cas $n_L = n_R$, la largeur moyenne de ces cellules est simplement $L/n_L = L/n_R$, et le rapport d'aspect (hauteur/largeur) des cellules est fonction du nombre moyen de liens verticaux, donc de w . Alors l'existence de la décomposition d'une configuration bosonique en superposition de configurations fermioniques permet de définir une largeur et une hauteur de cellules pour le modèle de chaînes de forces : il suffit de prendre la moyenne des largeurs et hauteurs de cellules mesurées pour toutes les configurations fermioniques qui forment la superposition. Cette largeur et cette hauteur définissent deux échelles de longueur naturelles dans les milieux granulaires statiques et nous verrons au chapitre suivant qu'elles peuvent s'interpréter comme la longueur d'influence d'un défaut ponctuel dans le réseau ou longueur de relaxation (parfois appelée *healing length* en anglais). Nous ne savons pas si la distribution de ces longueurs sur les composantes fermioniques de la distribution est auto-moyennante.

Il devrait être possible de définir ces longueurs de manière équivalente en explorant une configuration bosonique selon une marche aléatoire : partir d'un lien non vide et se donner un sens et l'une des deux directions à 60° de ce lien, avancer dans la direction de ce lien avec le sens donné jusqu'au sommet suivant, tirer au sort si l'on continue dans la même direction

ou si l'on emprunte l'autre direction fixée avec des probabilités proportionnelles aux nombres de particules sur les liens qui partent du sommet où l'on est arrivé dans ces deux directions, avancer dans cette direction jusqu'au sommet suivant et recommencer le processus (si l'on a choisi l'autre direction, le choix est alors entre poursuivre dans cette autre direction et progresser dans la direction initiale). La marche aléatoire est formée de segments orientés alternativement dans les deux directions. En prenant la moyenne des longueurs de segments dans chacune des directions, on définit deux longueurs qui devraient pouvoir être interprétées comme les longueurs moyennes des côtés des cellules hexagonales dans ces deux directions. Il serait intéressant d'étudier les distributions de ces longueurs et de voir si elles coïncident bien avec la première définition.

13.3 Les modèles précédents et les équations de Yang-Baxter

Nous avons vu aux paragraphes 12.1.2 et 12.3 que, selon ce qui est généralement admis, tout modèle intégrable discret sur réseau à deux dimensions se rattache à une famille de solutions des équations de Yang-Baxter (EYB). Il est naturel de se demander à quelle(s) famille(s) les deux modèles définis ci-dessus se rattachent. De plus, cette information nous permettrait de décrire précisément pour quels choix des poids statistiques les modèles restent intégrables, et donc s'il est possible de les généraliser et/ou de calculer directement, analytiquement, d'autres quantités que les grandeurs conjuguées (par transformation de Legendre) de w et α . Malheureusement, bien que nous ayons trouvé des reformulations prometteuses (exposées ci-dessous), nous n'avons pas mené cette étude à son terme car elle se révèle relativement technique. En tout cas, elle a déjà l'avantage de situer à peu près les modèles que nous avons étudiés dans la liste des modèles intégrables connus dans la littérature : le modèle de chaîne de forces ne se réduit pas aux modèles les plus simples abondamment étudiés, et le modèle d'empilements est probablement une limite singulière d'un modèle de vertex à trois couleurs (mais *pas* du modèle de Perk et Schultz $A_2^{(1)}$). Nous avons aussi cherché sans succès de quel modèle de vertex le modèle des trimères triangulaires introduit et résolu par A. Verberkmoes et B. Nienhuis [303, 304] (nous sommes arrivés au résultat potentiellement intéressant que ce modèle peut être reformulé en un modèle de vertex à trois branches dont les branches peuvent prendre quatre couleurs).

13.3.1 Le modèle des chaînes de forces

Le modèle de chaînes de forces est un modèle de vertex-6 (défini sur un réseau triangulaire). D'après le paragraphe 12.2.1, on peut s'attendre à ce qu'il soit un cas limite de modèles de vertex-4 sur réseau de Kagomé, ou bien que ce soit en fait un modèle de faces triangulaires, les vertex-6 étant décomposables sur le réseau dual. Et de fait, cette deuxième possibilité (qui par ailleurs implique la première) s'applique ici. Pour le montrer, reformulons le modèle en utilisant un réseau hexagonal. Cette construction est expliquée sur un exemple figure 13.9. On peut se convaincre assez facilement de l'équivalence des modèles illustrés à gauche (le modèle de départ) et au centre de la figure, dans la mesure où les particules L et R sont conservées et ont le comportement habituel qu'on leur connaît. On peut ensuite construire facilement une unique configuration du modèle 3 (à droite) à partir d'une configuration du modèle 2 (au centre), en décorant les liens du modèle 3 d'après les trajectoires de particules L et R dans le modèle 2 qu'ils coupent, et en rajoutant les lignes ondulantes verticales pour indiquer les départs par le haut des \overline{LR} . Les faces triangulaires que l'on trouve dans les configurations 3 ainsi obtenues ne sont pas n'importe lesquelles ; elles vérifient une loi de conservation : une particule L, qui arrive nécessairement par le bas ou la droite d'une face triangulaire, doit repartir, et ce par le haut ou la gauche, et de même pour les particules R. De plus, une particule L ou R arrivée par le bas d'une face triangulaire ne peut repartir par le haut que si son partenaire de \overline{LR} fait de même, c'est-à-dire que si la face triangulaire a une ligne ondulante sur le côté vertical. Il est « fastidieux mais facile », comme on dit, de vérifier qu'à chaque configuration 3 constituée des faces triangulaires qui obéissent à ces règles on peut faire

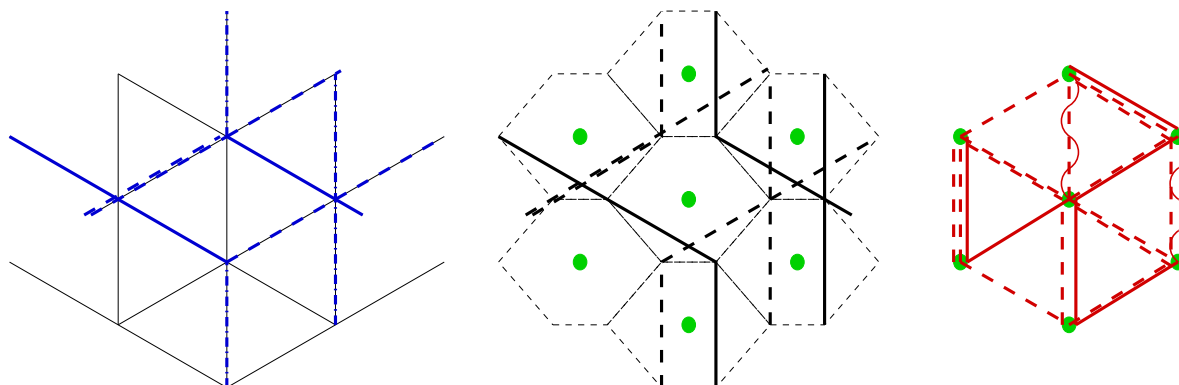


FIG. 13.9 – Illustration sur un exemple de la reformulation du modèle de chaînes de forces comme modèle de faces triangulaires. **À gauche** : une configuration du modèle de départ, que l'on peut voir comme un modèle de vertex-6. Les trajectoires des particules L resp. R resp. \overline{LR} sont en traits gras continus resp. interrompu resp. mixte. **Au centre** : Chaque vertex du réseau triangulaire de départ est remplacé par un segment horizontal contenant deux sites (un à chaque extrémité), dont celui de gauche accueille toutes les particules R et celui de droite toutes les particules R (mais cette convention pourrait aussi bien être inversée). Les liens verticaux sont supprimés. Les liens obliques sont maintenus, et relient maintenant les extrémités des segments horizontaux qui remplacent les vertex. Les trajectoires des particules se déduisent simplement des trajectoires de départ, une particule L ou R voyageant de vertex en vertex, c'est-à-dire sur le nouveau réseau de segment horizontal en segment horizontal. Les trajectoires verticales de \overline{LR} , en particulier, sont désormais des couples de trajectoires verticales de L et de R face-à-face. **À droite** : La deuxième et dernière étape de la transformation consiste à passer au réseau dual du réseau hexagonal au centre de la figure. Les sites de ce réseau dual sont représentés par des disques. Les liens du réseau dual sont décorés de façon à indiquer le nombre de trajectoires de particules de chaque type (L et R) qu'ils croisent dans le réseau du centre de la figure. Ici, les traits gras *ne sont* donc *pas* des trajectoires de particules L et R. De plus, une ligne verticale ondulante indique qu'une paire liée \overline{LR} s'est formée sur (ou continue à se propager depuis) le milieu du lien vertical correspondant (qui était un vertex dans le modèle de départ) ; il y a une ligne ondulante pour chaque \overline{LR} (nombre entier naturel, donc). Si l'on avait choisi l'autre convention pour le placement des particules L et R sur les segments horizontaux dans la première reformulation, il faudrait changer la convention sur les lignes verticales ondulantes : elles renseigneraient sur l'arrivée par le bas d'une \overline{LR} sur le site (du modèle de départ) situé au milieu du lien vertical, et non sur le départ de ce site par le haut d'une \overline{LR} . Le modèle défini par cette dernière transformation est sur réseau triangulaire avec des décorations sur les liens. C'est en fait un modèle de faces triangulaires, car on peut changer la décoration d'un lien librement du moment que les faces triangulaires que ce lien forme (avec sa nouvelle décoration) sont dans la liste des faces autorisés, et indépendamment des décorations des autres liens situés sur les vertex-6 dont ce lien fait partie.

correspondre une unique configuration du modèle 2, ce qui montre que les modèles 2 et 3 sont en bijection (et ont en particulier la même fonction de partition). Remarquer qu'on peut définir des configurations 3 à partir des configurations 2 sans utiliser de lignes ondulantes, mais alors il n'y a pas bijection : les faces triangulaires que l'on trouve avec ce dernier procédé autorisent les particules L ou R non appariées à voyager verticalement. Reste à préciser comment définir les poids statistiques de ces faces triangulaires ; une des nombreuses façons possibles consiste à donner à chaque face la racine carrée du poids du vertex-6 qui est à cheval sur le lien vertical de la face. C'est-à-dire, à donner le poids $w^{v/2}$ aux faces qui ont v lignes ondulantes.

La construction précédente permet-elle de comprendre à quelle famille de solutions des EYB le modèle des chaînes de forces se rattache ? En principe, oui ; une construction similaire à celle utilisée pour le modèle des pavages aléatoires [267] permet de définir un modèle de vertex-4 en groupant deux par deux les faces-3, et le paramètre spectral du modèle de vertex-4 doit prendre une valeur telle que les poids des vertex-4 se factorisent [295]. Mais le fait que les degrés de liberté sont ici non bornés rend la tâche plus difficile et nous ne l'avons pas menée à bien. On peut aussi se poser la question suivante : le modèle de faces triangulaires défini en se restreignant aux faces-3, parmi celles que nous avons trouvées ci-dessus, qui mettent en jeu au plus n_L particules L et n_R R, se rattache-t-il à une famille de solutions des EYB ? Remarquer que cela ne revient pas au même que de se limiter à un bloc n_L, n_R de la matrice de transfert du modèle de chaînes de forces : par exemple, on peut construire sur un réseau de largeur L une configuration à L paires liées aussi bien qu'une configuration vide avec les quelques faces-3 qui mettent en jeu au plus une particule de chaque type (en se restreignant aux faces-3 qui ont *exactement* un nombre donné de particules L et R, on trouve des configurations qui sont dans un bloc de la matrice de transfert où n_L et n_R sont forcément des multiples de L). Là encore, nous n'avons pas fait aboutir cette démarche, même si elle est plus simple que le cas du modèle complet du fait que les degrés de liberté sont finis : disons simplement que pour le cas où les faces-3 portent zéro ou une particule de chaque type, en associant les faces-3 deux par deux le long des liens verticaux on forme des faces-4 qui vérifient la règle de Perk et Schultz à trois couleurs [292, 293, 294] — mais pas *toutes* les faces-4 qui ont cette propriété, seulement sept sur les quinze, donc nous avons probablement affaire à une limite singulière,

13.3.2 Le modèle d'empilements

Voyons maintenant le cas du modèle d'empilements, où le nombre de particules L et R par sommet ou par lien est d'emblée limité. Nous avons vu lors de sa définition en termes de particules L et R au paragraphe 13.2.1 qu'une reformulation en termes d'un modèle de spins à quatre degrés de liberté n'était pas directement possible. Revenons brièvement là-dessus. On place sur chaque sommet du réseau carré un spin à quatre degrés de liberté (vide, L, R et \overline{LR}). Pour des configurations de particules L et R qui font partie du modèle d'empilements, chaque plaquette du réseau carré vérifie des lois de conservation des particules L et R : une L ou une R qui arrive en bas doit repartir en haut. Normalement elle repart en diagonale, mais elle peut repartir verticalement si elle fait partie d'une \overline{LR} sur un lien vertical (elle a alors un partenaire sur le même site qu'elle) ou encore si elle a un partenaire qui se propage verticalement en face d'elle sur l'autre lien vertical de la plaquette. Les plaquettes décorées par les spins qui vérifient ces lois de conservation sont au nombre de cent. On peut associer facilement à toute configuration de particules L et R une unique configuration de plaquettes (il suffit d'indiquer par les spins le contenu en particules de chaque sommet du réseau), et réciproquement une configuration construite à partir des seules plaquettes qui satisfont aux lois de conservation peut être interprétée en termes de particules. Cependant, il y a une ambiguïté en ce qui concerne les poids statistiques comme on l'a vu au paragraphe 13.2.1, et la plaquette dont les quatre coins portent la décoration \overline{LR} peut être interprétée (si l'on ne tient pas compte du contexte) aussi bien comme le croisement de particules L et R (poids α^2 : un croisement au centre de la plaquette et quatre croisements aux coins) que comme la propagation sur les liens verticaux de deux \overline{LR} (poids w car chaque \overline{LR} n'appartient que pour moitié à cette plaquette)

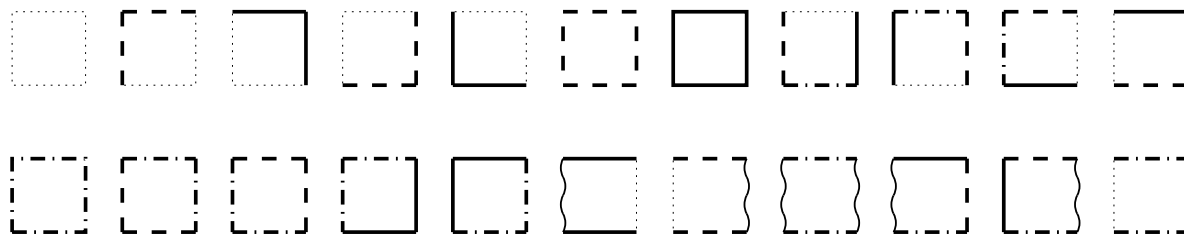


FIG. 13.10 – Liste des faces-4 autorisées dans la reformulation du modèle d’empilements comme modèle de faces-4. Les décorations des côtés des faces-4 indiquent combien de trajectoires de particules L et R ces traits coupent : trait fin pointillé pour zéro trajectoires, trait gras continu pour une particule L, trait gras interrompu pour une R, trait gras mixte pour une L et une R, ligne grasse ondulée pour aucune particule mais si le côté est au milieu d’une \overline{LR} du deuxième type (ce décor n’est accessible qu’aux côtés verticaux).

ou comme la propagation d’une \overline{LR} au centre de la plaquette accompagnée de la propagation de deux \overline{LR} sur les plaquettes immédiatement à gauche et à droite (poids w). Dans le cas particulier où $\alpha^2 = w$, l’ambiguïté disparaît et le modèle d’empilements est équivalent au modèle de spins. Dans le cas contraire il n’y a pas équivalence.

On peut toutefois utiliser une construction similaire à celle utilisée pour le modèle de chaînes de forces. On part de la première formulation du modèle d’empilements (celle avec deux types de \overline{LR}). On définit un réseau carré dérivé en plaçant les nouveaux sites au milieu des liens horizontaux du réseau de départ, puis l’on décore les liens de ce réseau dérivé de façon à indiquer combien de trajectoires de particules L et R (au plus une de chaque, donc en tout quatre possibilités) chaque lien coupe. De plus, quand une particule L et une R voyagent verticalement face à face (paire liée \overline{LR} du deuxième type), on place une décoration spéciale (une ligne ondulée par exemple) sur le lien vertical du réseau dérivé qui se trouve à mi-chemin entre les deux trajectoires verticales. Les liens verticaux (resp. horizontaux) dérivés ont donc un degré de liberté à cinq (resp. quatre) valeurs. Ce procédé produit une configuration de faces-4. Comme précédemment, les faces-4 produites ne sont pas n’importe lesquelles mais obéissent à des règles de conservation, et on peut montrer que, réciproquement, une configuration de ces faces-4 peut être transformée sans ambiguïté en une configuration de particules L et R sur le réseau de départ. Les vingt-deux faces-4 possibles sont listées figure 13.10. On peut penser que cette reformulation du modèle d’empilements est une limite singulière [267] d’un modèle de faces à cinq couleurs (en particulier, le caractère singulier provient de ce qu’une des couleurs est interdite sur les côtés horizontaux des faces) [273]. Mais il apparaît que nous n’avons pas affaire à un modèle des familles $X_n^{(1)}$ avec $X = A, B, C, D$ car la seule possibilité d’avoir des vertex à trois couleurs seulement comme on en trouve sur la figure 13.10 serait la famille $B_n^{(1)}$: cas $\mu, \nu, -\mu, -\nu$ de [273] avec $\mu = 0$ ou $\nu = 0$, mais même cela ne convient pas puisque deux décorations devraient être mises en correspondance avec la couleur 0. Nous aurions donc affaire à une limite singulière d’un modèle intégrable qui correspond à une représentation non fondamentale d’une algèbre de Lie.

Enfin, on peut utiliser la deuxième formulation du modèle d’empilements, celle qui utilise huit faces-4 à trois couleurs (listées fig. 13.5). Ces faces-4 (vues comme des vertex-4) vérifient la règle de Perk et Schultz (pour chaque vertex, le nombre de pattes de chaque couleur est pair, c’est-à-dire vaut zéro, deux ou quatre) donc forment un sous-ensemble des vertex du modèle $A_2^{(1)}$. Mais une étude exhaustive des poids de ce modèle, donnés p. 251, nous a conduit à conclure que les vertex de notre modèle d’empilement fermionique ne sont *pas* une limite singulière du modèle $A_2^{(1)}$ (nous ne reproduisons pas ici les calculs, élémentaires mais quelque peu fastidieux, et nous espérons ne pas nous être trompés en les menant !). Remarquer que l’on peut changer la convention de coloration des côtés d’un certain type (par exemple les côtés haut-gauche–bas-droite) sans perturber les possibilités de raccord entre vertex — c’est-à-dire

faire une permutation de l'ensemble des trois couleurs (vide, L, R) pour ces côtés. Chaque permutation définit un jeu de huit vertex. Cependant tous ont un ou deux vertex unicolores, et de plus seul le jeu de départ vérifie la règle de Perk et Schultz.

13.3.3 Discussion élémentaire sur les généralisations des poids statistiques

Discussion à partir des EAB. Faute d'une description exhaustive (qui aurait reposé sur les EYB) des poids statistiques que l'on peut choisir pour les deux modèles tout en maintenant l'intégrabilité, faisons une discussion élémentaire de ces poids fondée sur l'*Ansatz* de Bethe. On voit facilement que les *Ansätze* de Bethe que nous avons utilisés peuvent être munis de poids supplémentaires. Par exemple un poids β pour chaque particule L (resp. R) qui se propage simplement (sans croisement ni formation de \overline{LR}). Cependant, dans la mesure où il y a conservation du nombre de particules L (resp. R), la contribution de β au poids total d'une configuration se prévoit facilement au sein de chaque bloc de la matrice de transfert : chaque particule L (resp. R) contribue par une puissance de β égale au nombre de lignes H du réseau, moins le nombre de situations où il y a eu croisement ou propagation de \overline{LR} . Mais, quitte à redéfinir α et w , cette contribution peut être mise sous la forme simple β^H pour chaque particule, et β joue simplement le rôle d'une fugacité. Il n'est pas besoin de recourir à des techniques compliquées pour tenir compte de β : il suffit de faire le calcul avec $\beta = 1$ comme précédemment (bloc par bloc) et de rajouter le facteur adéquat à la fin. De plus, dans les situations physiques où n_L (resp. n_R) est contraint (par l'environnement de l'empilement, par les conditions aux bords, etc.), β ne joue aucun rôle. De même, on peut attribuer des poids différents de l'unité aux vertex de la figure 13.5. Mais mettre de tels poids sur les trois premiers vertex (vide ou propagation simple) n'apporte pas grand'chose comme on vient de le voir (la contribution du vide se déduit elle aussi de n_L , n_R et des contributions en α et w). Mettre des poids β , β' , β'' sur les trois derniers vertex (de façon cohérente : si l'on pondère par β et β' les changements de direction des particules L et R au sixième et septième vertex, il faut pondérer de la même manière le huitième vertex et prendre $\beta'' = \beta\beta'$ pour préserver l'intégrabilité par *Ansatz* de Bethe) n'apporte pas grand'chose non plus car on peut absorber ces poids en redéfinissant w (bloc par bloc).

D'ailleurs, même α peut être absorbé par changement de variables, bloc par bloc, comme on l'a vu (les équations 13.29 donnent ce changement de variables pour le modèle d'empilements, et elles sont aussi valables pour le modèle de chaînes de forces comme on le voit facilement). Bref, il semble que, tant que l'on reste dans le cadre des *Ansätze* de Bethe utilisés jusqu'ici, w constitue le cas le plus général utile de poids statistique, les autres poids étant des potentiels chimiques qui contrôlent les nombres de particules L et R. Cependant, quand α est absorbé par changement de variables, les normes des racines u_i et v_j des EAB sont changées, et les courbes des u_i et $1/v_j$ peuvent ou non se toucher suivant la valeur de α . Il sera donc crucial dans la suite d'utiliser les poids w , α et la fugacité des particules pour assurer le contact des courbes et calculer analytiquement la fonction de partition à la limite thermodynamique.

Aussi bien pour le modèle fermionique que pour le modèle bosonique, w et α n'interviennent dans les EAB que dans les combinaisons w^L/α^{n_L} et w^L/α^{n_R} . Par conséquent, si $n_L = n_R$, changer w et α en gardant ces combinaisons inchangées ne change pas les valeurs des solutions \tilde{u}_i et \tilde{v}_j des EAB, donc ne change pas les propriétés physiques des configurations. Seul le facteur $w^{(n_L+n_R)/2}$ des valeurs propres, équation (13.13), change. Tirons-en des conséquences. Posons $p := \ln w - \rho \ln \alpha$ et $q := \ln w + \rho \ln \alpha$ où $\rho := n_L/L = n_R/L$. D'après ce que nous venons de dire, à la limite thermodynamique où $\ln Z$ est asymptotiquement égal à $\ln \lambda_0$,

$$\left. \frac{\partial \ln Z}{\partial q} \right|_p = \frac{n_L + n_R}{4} = \frac{n}{2} \quad (13.30)$$

car $\ln w = (p + q)/2$. Par ailleurs, en écrivant la différentielle de $\ln Z$ à l'aide de p et q d'une

part et de $\ln w$ et $\ln \alpha$ d'autre part et en identifiant les expressions, nous arrivons à

$$\left. \frac{\partial \ln Z}{\partial q} \right|_p = \langle v \rangle + \frac{\langle c \rangle}{2\rho} \quad (13.31)$$

où $\langle v \rangle$ est le nombre moyen de liens verticaux dans les configurations (w a l'exposant $2v$ dans la contribution d'une configuration à la fonction de partition Z) et $\langle c \rangle$ le nombre moyen de croisements de particules L et R (α a l'exposant c). D'où la relation

$$\frac{n}{2} = \langle v \rangle + \frac{\langle c \rangle}{2\rho}. \quad (13.32)$$

Discussion directe des poids des vertex. Dans le cas du modèle (fermionique) d'empilements pris dans sa deuxième reformulation, le nombre de vertex est fini (les huit vertex-4 ou faces-4 sont dessinés figure 13.5) et il est facile de faire une discussion directe des poids statistiques indépendants — cette discussion est d'ailleurs un préalable quasi incontournable de tout modèle exactement soluble [258, 288, 289]. Le principe est simple : les nombres de faces-4 de chaque type sont soumis à un certain nombre de contraintes (règles de conservation *etc.*) qui induisent à leur tour des contraintes sur les poids statistiques, conjugués de ces nombres de faces-4 par des transformations de Legendre. Notons a à h les huit faces-4 de la figure 13.5 et n_a à n_h le nombre de faces-4 de chaque type dans une configuration donnée du modèle. Si les conditions aux limites sont périodiques (topologie du tore) ou si l'on néglige les quelques faces qui sont sur le bord du réseau devant ceux qui sont à l'intérieur, chaque côté oblique SW-NE sans particule inférieur droit d'une face-4 de type a , c ou f est apparié à un côté oblique SW-NE sans particule supérieur gauche d'une face-4 de type a , c ou g , donc

$$n_a + n_c + n_f = n_a + n_c + n_g$$

d'où

$$n_f = n_g. \quad (13.33)$$

Nous aurions d'ailleurs pu trouver cette dernière relation directement, et indépendamment des conditions aux limites périodiques haut-bas du moment que le bord gauche et le bord droit du réseau sont identifiés : en effet, une face f correspond à une particule L qui reprend sa direction normale de propagation après avoir rebondi. Comme elle a forcément rebondi sur une particule R, nous sommes sûrs qu'il existe un R qui, au même moment, reprend sa direction normale de propagation après avoir rebondi. Ce peut être sur une face-4 de type h avec une autre particule L qui reprend sa direction, mais alors le problème est reporté jusqu'à ce que l'on trouve une face-4 de type g . Il y en a forcément une car une suite ininterrompue de faces-4 h est impossible : compte tenu de la condition au bord gauche-droite, la face f interromprait cette série. Ceci prouve qu'à toute face f sur une ligne correspond une face g donc $n_g \geq n_f$; de même $n_f \geq n_g$ puis $n_f = n_g$. Donc les poids statistiques des faces-4 f et g viennent toujours ensemble (*i.e.* avec la même puissance) et l'on peut en supprimer un des deux (c'est-à-dire le prendre égal à un, ou égal à l'autre, ou...). Ensuite, la conservation des n_L particules L et des n_R particules R sur une ligne conduit à écrire

$$n_b + n_d + n_e + n_f + n_h = n_L, \quad n_c + n_d + n_e + n_g + n_h = n_R$$

d'où

$$n_b - n_c = n_L - n_R \quad (13.34)$$

par soustraction et

$$n_b + n_c + 2(n_d + n_e + n_f + n_h) = n_L + n_R \quad (13.35)$$

par addition (contraintes exactes indépendamment des conditions aux limites périodiques haut-bas). Une ligne de largeur L contient forcément L faces-4 donc

$$n_a + n_b + n_c + n_d + n_e + n_f + n_g + n_h = L. \quad (13.36)$$

Le comptage des côtés de faces-4 ayant un segment de trajectoire de particules mène à

$$n_e = n_f + n_h \quad (13.37)$$

(qui n'est vraie strictement qu'en cas de condition au bord périodique haut-bas). Enfin, à ces cinq contraintes linéaires (dont on peut vérifier qu'elles sont indépendantes) s'ajoute une contrainte quadratique [313, 289, 290] :

$$n_b n_c + n_b n_e + n_c n_e = n_d \left(n_a + \frac{n_f + n_g}{2} \right). \quad (13.38)$$

On trouve cette contrainte en comptant les nombres de faces-4 de chaque type dans *l'intérieur* (sans les faces-4 des bords) d'une cellule hexagonale dans une configuration du modèle (fermionique) comme défini par l'exemple sur la figure 13.11 à gauche (ce que nous appelons par commodité « l'intérieur » de la cellule est coloré). À chaque cellule hexagonale on peut associer une face-4 de type d donc le nombre moyen de cellules par ligne du réseau est n_d (c'est aussi le nombre moyen par ligne $\langle c \rangle$ de croisements de particules L et R). Calculons l'aire moyenne de « l'intérieur » d'une cellule (bords non compris) de deux façons différentes : la première consiste à décomposer cette cellule en trois parallélogrammes (éventuellement dégénérés) qui s'appuient sur ses côtés, comme indiqué fig. 13.11 à gauche, et livre $N_b N_c + N_b N_e + N_c N_e$ (où les N_x sont les nombres moyens de faces-4 de type x dans une cellule, c'est-à-dire n_x/n_d). En effet, les bords verticaux de la cellule sont constitués de faces-4 de type e , et les bords obliques de faces-4 de types b et c suivant leur direction. La deuxième façon compte simplement les faces-4 dans l'intérieur de la cellule (privé des bords) et trouve $N_a + (N_f + N_g)/2$ (les faces-4 de type f et g se trouvent chacune pour moitié dans l'intérieur car elles sont le long des côtés verticaux, d'où d'ailleurs une interprétation de la relation $n_e = n_f + n_h = n_g + n_h$; les faces-4 de type h , qui ne se trouvent quand dans les cellules aplaties (*i.e.* où les deux côtés verticaux sont distants d'une unité) comme celle de la figure 13.11 à droite, ne sont jamais dans l'intérieur d'une cellule mais comptent pour les bords). En écrivant que ces deux aires moyennes sont égales et en multipliant chaque membre de l'égalité obtenue par n_d on trouve la contrainte quadratique (13.38). La contrainte (13.38) n'est exacte qu'à la limite d'un réseau infini ou si les conditions aux limites sont toriques (nous l'avons vérifiée pour des configurations générées par simulation Monte Carlo avec conditions aux limites toriques). En faisant le même comptage non pas pour « l'intérieur » des cellules mais pour les cellules tout entières, comme indiqué sur la figure 13.11 à droite où les cellules sont colorées tout entières, nous arrivons à :

$$(N_b + 1)(N_c + 1) + (N_b + 1)N_e + (N_c + 1)N_e = N_a + N_f + N_g + N_b + N_c + N_e + N_h + N_d \quad (13.39)$$

pour une cellule (le membre de droite exprime simplement que l'aire d'une cellule est la somme des contributions de tous les types de faces-4), soit, pour une configuration entière à conditions aux limites toriques ou à la limite thermodynamique et en utilisant la contrainte linéaire que la somme des densités des huit types de faces-4 égale bien sûr l'unité,

$$(n_b + n_d)(n_c + n_d) + (n_b + n_d)n_e + (n_c + n_d)n_e = n_d \quad (13.40)$$

si les n_x désignent les densités de faces-4 de type x (s'ils désignent les *nombres* de faces-4, il faut multiplier le membre de droite par le nombre total de faces-4 de la configuration). Chacune des contraintes quadratiques ci-dessus est indépendante des cinq contraintes linéaires (l'une peut être déduite de l'autre si l'on combine celle-ci avec les contraintes linéaires). Combinée avec certaines de ces cinq contraintes, elles permettent de retrouver, dans le cas $n_L = n_R$, la relation (13.32). Les nombres de faces-4 n_x sont ainsi soumis, à la limite thermodynamique ou pour un réseau à conditions aux limites toriques, à six contraintes indépendantes, donc nous pouvons éliminer six des huit poids statistiques (suivant le même raisonnement que celui pour les poids de f et de g ci-dessus). Par exemple, nous pouvons nous ramener à l'un des poids α et w comme sur la figure 13.5, plus un poids pour l'une des faces-4 parmi a , f , g et h .

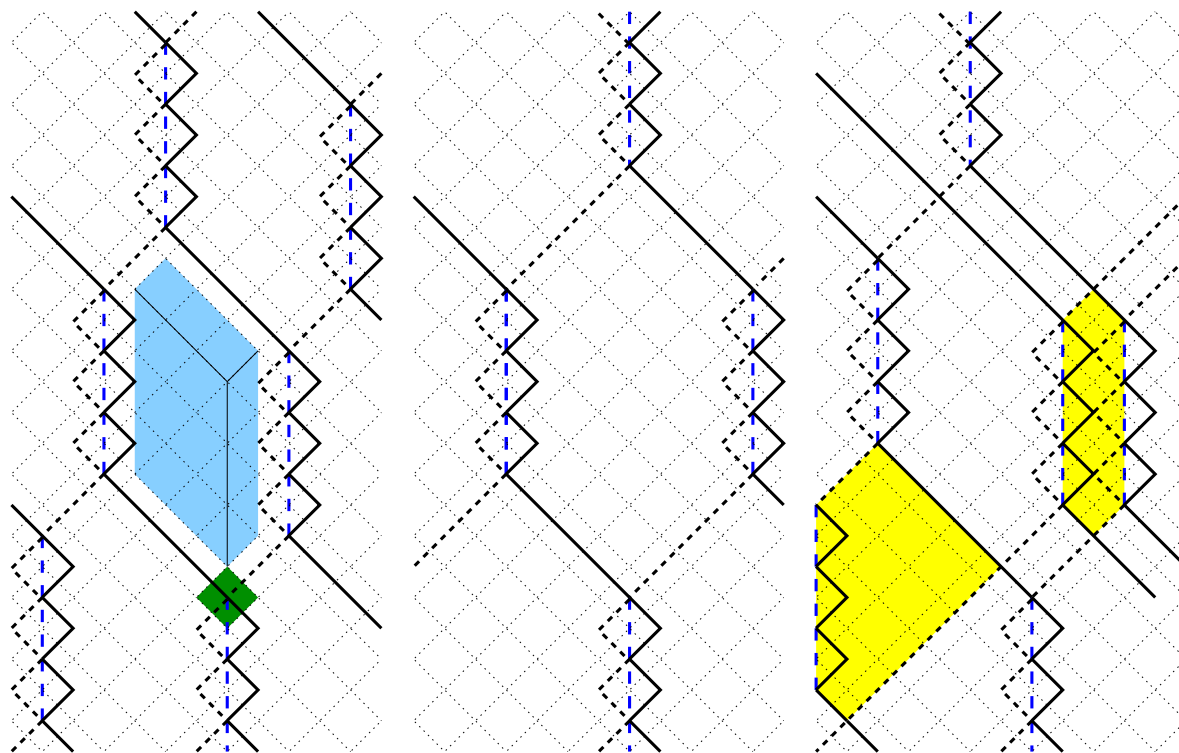


FIG. 13.11 – Quelques configurations du modèle fermionique d'empilements selon la deuxième formulation en termes de particules L (trajectoires en traits gras continus) et R (trajectoires en traits gras interrompus courts), où l'on peut voir les cellules hexagonales. L'interprétation des « rebonds » de particules L et R en termes de paires liées \overline{LR} (dont les trajectoires forment les bords verticaux des cellules) est donnée en traits gras interrompus longs. **À gauche** : configuration qui ne possède pas l'invariance sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$. La zone colorée claire est ce que nous appelons « l'intérieur » (sans les bords) de la cellule qui la contient ; l'unique face-4 de type d de cette cellule s'appuie est colorée en foncé (avec la convention qu'on attribue à une cellule la face-4 de type d qui se trouve en dessous). Les traits continus fins indiquent un découpage de cette zone en trois parallélogrammes qui s'appuient sur ses bords pour le calcul de son aire. **Au centre** : configuration qui possède cette invariance. **À droite** : configuration irrégulière avec une cellule hexagonale aplatie (zone colorée de droite). Ici les zones colorées sont les cellules tout entières et pas seulement leurs « intérieurs ». La zone colorée de gauche montre une cellule dégénérée, qui n'est pas hexagonale mais pentagonale car l'un des côtés verticaux est de longueur nulle. Dans cette même configuration on trouve aussi des cellules doublement dégénérées, qui n'ont que quatre côtés. Les côtés obliques, en revanche, ont une longueur toujours supérieurs ou égale à une unité (à cause de la face-4 de type d de la cellule).

- Les poids w et α ne sont pas indépendants (si n_L et n_R sont connus). La preuve : ils interviennent uniquement sous la forme des combinaisons w^L/α^{n_L} et w^L/α^{n_R} dans les EAB, ce qui se traduit pour les observables conjuguées de ces poids par la relation établie ci-dessus $n/2 = \langle v \rangle + \langle c \rangle / (2\rho)$, soit encore $2n_e + n_d/\rho = n/2$ ou bien, en combinant cette relation avec une des relations linéaires ci-dessus,

$$\frac{n_b + n_c}{2n_d} = \frac{1}{\rho} - 1. \quad (13.41)$$

L'on peut interpréter cette relation ainsi : n_d est le nombre de cellules hexagonales, donc $(n_b + n_c)/(2n_d) + 1$ est la taille moyenne d'un côté oblique d'hexagone (+1 pour compter la taille de coin à coin), et cette taille moyenne est logiquement égale à la distance moyenne entre particules de même type, $1/\rho = L/n$.

- Une fois choisi un poids parmi w et α (ou les deux en sachant qu'ils ne sont pas indépendants), il reste à choisir un autre poids. Par exemple, en pondérant les faces-4 de type h , nous pourrions distinguer, compter, favoriser ou défavoriser les situations où une cellule verticale est aplatie et où ses deux côtés verticaux se touchent (ce qui fait apparaître des faces-4 de type h) par rapport aux situations où les côtés verticaux ne se touchent pas (ils sont séparés par des vertex de type a , f et g). Nous pourrions alors connaître indépendamment n_f et n_h et pas seulement leur somme $n_f + n_h = n_e$, puis en déduire les nombres de tous les types de faces-4. Cependant, il semble que cela ferait perdre le caractère intégrable du modèle (nous n'avons pas trouvé d'*Ansatz* de Bethe qui permette de diagonaliser la matrice de transfert quand on rajoute un tel poids), donc nous prendrons les poids autres que w et α égaux à un.

Pour le modèle de chaînes de forces (bosonique), la discussion analogue des poids statistiques est plus compliquée car il y a un nombre infini de vertex/de faces-4. Nous ne l'avons pas menée.

Remarquons que l'interprétation des configurations du modèle fermionique en termes de cellules hexagonales permet de définir une bijection avec les configurations du modèle de pavages carrés-triangles. En effet, il existe une bijection entre ces pavages et des parois de domaines (constituées par les carrés) contraintes à avoir l'une des trois directions d'un réseau triangulaire (voir par exemple la figure 5 à gauche de [290]). On peut aussi voir cela en construisant une interprétation de ces pavages en termes de particules L et R qui peuvent former des paires liées : cette interprétation suppose de choisir la direction d'un côté d'un carré comme verticale et elle respecte la symétrie gauche-droite autour de cette verticale ; ce n'est pas la même construction que les bijections entre pavages et configurations de trajectoires de particules L et R de [313, 288] ou de [289] (en particulier, les particules L et R n'ont pas les mêmes propriétés). Si l'on attribue les poids statistiques t à chaque triangle et q^4 à chaque carré d'un pavage, les poids statistiques des huit faces-4 obtenues à partir d'un pavage par notre construction sont, dans l'ordre de la figure 13.5, t^2 , q^4 , q^4 , t^2 , q^2 , tq , tq et q^2 . Cette bijection entre pavages carrés-triangles et modèle fermionique est peu adéquate à l'étude du modèle de pavages car une même ligne de faces-4 du modèle fermionique peut avoir une aire différente dans le pavage correspondant suivant sa décoration en particules L et R : l'aire d'une configuration de faces-4 est le nombre de faces-4, mais l'aire du pavage correspondant est le nombre de triangles multiplié par l'aire $a^2\sqrt{3}/4$ d'un triangle, si les côtés des triangles et des carrés mesurent a , plus le nombre de carrés multipliés par l'aire a^2 d'un carré, soit encore

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln q} \frac{a^2}{4} + \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln t} \frac{\sqrt{3}a^2}{4}. \quad (13.42)$$

Par conséquent, maximiser (en fonction des paramètres intensifs t et q) la fonction de partition ou, en pratique, la valeur propre dominante de la matrice de transfert, ne revient *pas* au même que maximiser l'entropie par unité d'aire comme le fait remarquer P. A. Kalugin — des trois bijections de [313, 288], [289] et celle-ci, seule celle de [289] possède la propriété de conserver l'aire.

13.4 Résolution des EAB en cas de contact des courbes des solutions

13.4.1 Calcul

Comme nous l'avons déjà évoqué, aussi bien pour le modèle bosonique que pour le modèle fermionique, en choisissant bien la valeur de w à densités de particules par ligne $n_L/L = n_R/L$ fixées (ou inversement), il est possible de faire en sorte que les courbes où se massent les racines des EAB à la limite thermodynamique se disposent comme sur le cas E de la figure 12.12, les courbes étant, selon le point où elles coupent l'axe des abscisses, de gauche à droite, celle des u_i/w , celle des wv_j , celle des $-w/u_i$ et celle des $-1/(wv_j)$. Les équations 13.29 indiquent qu'en changeant de plus la valeur de α , on peut se ramener au cas F de la figure : les quatre courbes se touchent en deux points sans se croiser (nécessairement, le module de ces points de contact vaut un car ils sont à la fois sur la courbe des $1/\tilde{u}_i$ et sur celle des $-\tilde{u}_i$). Alors on ne peut franchir deux fois de suite la même courbe sans franchir les trois autres. La méthode de P. A. Kalugin exposée p. 240 fonctionne ici aussi. Nous posons (pour le modèle bosonique)

$$\begin{aligned}
 F_L(z) &:= \ln(z) + \frac{1}{L + n_L - n_R} \left[\sum_{j=1}^{n_R} \ln(z - \tilde{v}_j) - \sum_{i=1}^{n_L} \ln \tilde{u}_i + L \ln w \right] \\
 F_R(z) &:= \ln(z) + \frac{1}{L + n_R} \left[- \sum_{i=1}^{n_L} \ln(\tilde{u}_i - z) - \sum_{j=1}^{n_R} \ln \tilde{v}_j - L \ln w + \sum_{i=1}^{n_L} \ln \tilde{u}_i \right] \quad (13.43)
 \end{aligned}$$

où $\tilde{u}_i := u_i/w$ et $\tilde{v}_j := wv_j$ sont définis à partir des solutions u_i et v_j des EAB (13.14). Les fonctions F_L et F_R prennent des valeurs imaginaires pures le long des courbes des \tilde{u}_i et des \tilde{v}_j respectivement. Nous allons calculer les dérivées $f_L(z)$ et $f_R(z)$ des fonctions F_L et F_R . La densité des racines \tilde{u}_i (resp. \tilde{v}_j) le long de leur courbe est $-(L + n_L - n_R)/(2\pi i)f_L(z)$ (resp. $+(L + n_R)/(2\pi i)f_R(z)$), si bien que l'on peut écrire les équations qui définissent f_L et f_R à la limite thermodynamique à l'aide d'intégrales sur ces courbes :

$$f_L(z) = 1/z - \frac{\sigma}{2\pi i} \int_{\tilde{v}_{n_R}}^{\tilde{v}_1} \frac{f_R(\tilde{v})}{z - \tilde{v}} d\tilde{v} \quad f_R(z) = 1/z + \frac{\sigma^{-1}}{2\pi i} \int_{\tilde{u}_1}^{\tilde{u}_{n_L}} \frac{f_L(\tilde{u})}{z - \tilde{u}} d\tilde{u} \quad (13.44)$$

où $\sigma := (L + n_L)/(L + n_L - n_R)$. Pour le modèle fermionique, c'est la même chose avec $\sigma = L/(L - n_R)$. f_L (resp. f_R) a un pôle en zéro et une coupure le long de la courbe des \tilde{v} (resp. des \tilde{u}). La classe de fonctions $f(z) := a_L f_L(z) + a_R f_R(z)$ est fermée sous la continuation analytique et les opérateurs de prolongement de f à travers les coupures \tilde{u} resp. \tilde{v} sont spécifiés par les matrices qui agissent sur le vecteur (a_L, a_R) :

$$\Gamma_{\tilde{u}} : \begin{pmatrix} 1 & -\sigma^{-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \Gamma_{\tilde{v}} : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \sigma & 1 \end{pmatrix}. \quad (13.45)$$

Quand les courbes des \tilde{u} et \tilde{v} se touchent, seul compte l'opérateur $\Gamma_{\tilde{u}}\Gamma_{\tilde{v}}$ (ou $\Gamma_{\tilde{v}}\Gamma_{\tilde{u}}$) qui est idempotent d'ordre six. Donc, en posant $f(z)dz = g(t)dt$ et $t^6 = (z - b)/(z - \bar{b})$ où b est l'extrémité commune des courbes dans le demi-plan supérieur (on suppose les constantes C_i et D_i dans les EAB choisies de sorte que les courbes des racines des EAB soient symétriques par rapport à l'axe des abscisses) et \bar{b} son complexe conjugué, on peut exprimer $f(z)$. Les pôles de $g(t)dt$ sont les mêmes que ceux de $f(z)dz$ et avec les mêmes résidus. Ils sont situés aux images par $z \mapsto t$ de 0 et ∞ . $g(t)dt$ est analytique partout ailleurs. Posons $b =: |b| \exp(i\gamma)$ avec $0 \leq \gamma < \pi$. Les pôles de $g(t)dt$ sont en $\exp[i\gamma/3 + (2k + 1)\pi/6]$ et en $\exp[ik\pi/6]$ avec $k \in \{0, 1, 2, 3, 4, 5\}$ et leurs résidus se calculent facilement. On peut alors exprimer $g(t)dt$ comme somme sur les pôles p de $dt r/(t - p)$ où r est le résidu en p , puis $g(t)$ en sachant que $g(0)$ doit s'annuler pour que $g(0)dt$ soit imaginaire pur le long de deux vecteurs non

colinéaires comme pour le modèle des pavages carrés-triangles. La condition $g(0) = 0$ impose en particulier

$$\frac{n_L}{L} = \frac{n_R}{L} = \sqrt{3} \frac{\cos \frac{\pi+\gamma}{3}}{\sin \frac{\gamma}{3} + \frac{1}{2}} \quad (13.46)$$

pour le modèle bosonique et

$$\frac{n_L}{L} = \frac{n_R}{L} = \frac{\sqrt{3}}{\cos \frac{\gamma}{3}} \left(\sin \frac{\pi - \gamma}{3} - \sin \frac{\pi}{6} \right) \quad (13.47)$$

pour le modèle fermionique (ces expressions valent respectivement $\sqrt{3}$ et $(3 - \sqrt{3})/2$ en $\gamma = 0$). γ permet donc de paramétrer les densités de particules L et R par ligne du réseau. Par ailleurs, ceci prouve que la condition de contact des courbes des \tilde{u} et \tilde{v} impose $n_L = n_R$. On calcule ensuite $f_L(z)$ et $f_R(z)$ puis $F_L(z)$ et $F_R(z)$ d'où w , le produit des \tilde{u}_i et celui des \tilde{v}_j (qui vaut l'inverse de celui des \tilde{u}_i). Plus précisément, nous en déduisons non pas w mais $\ln w - (n_R/L) \ln \alpha$ car c'est cette combinaison qui apparaît dans les EAB comme nous l'avons vu. Cette combinaison vaut, pour le modèle bosonique et en posant $d := \gamma/3$,

$$\begin{aligned} & (-3 \ln(-\cos(d) * 3^{(1/2)+2-\sin(d)}) + 6 * \sin(d) * \ln(\cos(d) * 3^{(1/2)+2+\sin(d)}) \\ & - 3 \ln(-\sin(d)+1) + 3 * \ln(\sin(d)+1) + 3 * \sin(d) * \ln(\sin(d)+1) + \\ & 2 * \cos(d) * 3^{(1/2)} * \ln(-\cos(d) * 3^{(1/2)+2-\sin(d)}) + \\ & 2 * \cos(d) * 3^{(1/2)} * \ln(\cos(d) * 3^{(1/2)+2-\sin(d)}) \\ & - \cos(d) * 3^{(1/2)} * \ln(\sin(d)+1) + 3 * \cos(d) * 3^{(1/2)} * \ln(-\sin(d)+1) \\ & - 3 * \cos(d) * 3^{(1/2)} * \ln(3) - 2 * 3^{(1/2)} * \ln(2) * \cos(d) \\ & - 9 * \sin(d) * \ln(3) + 3 * \sin(d) * \ln(-\sin(d)+1) + \\ & 6 * \sin(d) * \ln(\cos(d) * 3^{(1/2)+2-\sin(d)}) - 6 * \sin(d) * \ln(2) + \\ & 3 * \ln(\cos(d) * 3^{(1/2)+2+\sin(d)}) \\ &) / 2 / (-2 + \cos(d) * 3^{(1/2)} - \sin(d)) \end{aligned}$$

et, pour le modèle fermionique,

$$\begin{aligned} & (-\ln(\cos(d/2 - \pi/12)^2) * \cos(d/2 - \pi/12) \\ & + \ln(\sin(d/2 + \pi/12)^2) * \sin(d/2 + \pi/12) \\ & - \ln(\cos(d/2 + \pi/12)^2) * \sqrt{3} * \cos(d/2 + \pi/12) \\ & + \ln(\sin(d/2 - \pi/12)^2) * \sqrt{3} * \sin(d/2 - \pi/12) \\ &) / 2 / \cos(d/2 + \pi/4) + (\ln(27) / 2 - 4 * \ln(2) - \ln(\cos(d/2 + \pi/4)^2)) \end{aligned}$$

Pour $\gamma = 0$, ces expressions valent respectivement (avec $\rho := n_R/L$)

$$\ln w - \rho \ln \alpha = \sqrt{3} \ln(2808 - 1620\sqrt{3}) + \ln(875448\sqrt{3} - 1516320) \approx \ln 1,474066142 \quad (13.48)$$

et

$$\ln w - \rho \ln \alpha = \sqrt{3} \ln(2 - \sqrt{3}) + \ln(6\sqrt{3}) \approx \ln 1,061865881. \quad (13.49)$$

Tous les calculs précédents gagnent bien sûr à être faits à l'aide d'un logiciel de calcul formel. Nous ne donnons pas ici les expressions des produits des \tilde{u} et des \tilde{v} mais nous les avons calculées ; elles permettent de donner une expression analytique de la plus grande valeur propre λ_0 de la matrice de transfert grâce à l'équation (13.13) et à l'équation analogue pour le modèle fermionique.

Les calculs précédents indiquent des conditions *nécessaires* au contact sans croisement des courbes des \tilde{u} et des \tilde{v} , et elles ne sont pas suffisantes. En effet, même si la combinaison de poids statistiques $\ln w - (n_R/L) \ln \alpha$ et les densités de particules n_L/L et n_R/L ont les bonnes valeurs, il n'est pas dit que la valeur propre de plus grand module de la matrice de transfert est celle qui correspond à ce secteur (n_L, n_R) . En particulier, si l'on a ajouté une fugacité (un poids statistique $f^{(n_L+n_R)}$ sur chaque configuration), cette fugacité peut favoriser les secteurs de la matrice de transfert avec des nombres de particules très grands ou très petits (c'est-à-dire rendre leurs valeurs propres plus grandes que celles du secteur sélectionné par la condition de contact des courbes des \tilde{u} et \tilde{v}). Cependant, comme seule la combinaison $\ln w - (n_R/L) \ln \alpha$

est fixée, il est possible, en changeant w et en maintenant la valeur de cette combinaison, de faire en sorte que la valeur propre de ce secteur soit bien la valeur propre dominante : changer w change le facteur en w des valeurs propres, d'après l'expression (13.13), sans que les \tilde{u} et \tilde{v} changent. Mathématiquement, le fait que la valeur propre soit dominante peut s'écrire

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial n} = 0 \quad (13.50)$$

où $n := n_L = n_R$. On trouve par exemple (numériquement) que c'est le cas pour $\gamma = 0$ et $\alpha = 1$ (donc $w \approx 1,061865881$) pour le modèle fermionique, et pour $\gamma = 0$ et $w = 1$ pour le modèle bosonique.

Le calcul analytique de l'entropie (dont le principe est expliqué au paragraphe 15.2.3) n'est possible que si nous connaissons les valeurs de w et de α ; nous ne l'avons donc pas fait. Probablement la connaissance de w et α à la fois nécessite-t-elle d'étudier ce qui se passe au voisinage des situations de contact des courbes des \tilde{u} et \tilde{v} et pas seulement en ces situations elles-mêmes, à la manière de [289]. Nous avons fait le calcul analytique dans le cas particulier $\gamma = 0$; pour le modèle bosonique nous trouvons

$$\frac{\partial \ln Z}{\partial \ln \alpha} = 1 \quad (13.51)$$

et l'entropie par unité d'aire du réseau $s \approx 0,448052290172$, et pour le modèle fermionique $s \approx 0,103970895768$ (qui se compare bien avec la valeur $0,103972$ obtenue par résolution numérique des EAB pour $L = 153$, $n_L = n_R = 97$, $\alpha = 1$ et $w = 1,061866$).

13.4.2 Interprétation en termes de symétries

La situations de contact des courbes des \tilde{u} et \tilde{v} correspond à l'invariance statistique des configurations des modèles sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ (et sous les réflexions gauche-droite puisque $n_L = n_R$). En effet :

- Pour le modèle bosonique, on constate numériquement que $\langle v \rangle / n = 1/3$ où $\langle v \rangle$ est le nombre moyen de paires liées \overline{LR} sur une ligne de liens du réseau (délimitée par deux lignes de nœuds, une paire et une impaire), c'est-à-dire le nombre moyen de quanta de forces qui voyagent sur un *demi*-lien vertical du réseau triangulaire. Or c'est cette valeur qui assure l'invariance par rotation : sur chaque ligne du réseau, en moyenne $\langle v \rangle$ particules d'un type donné (L ou R) font partie d'une paire liée, donc d'un segment vertical de chaîne de forces, et $n - \langle v \rangle$ font partie d'un segment oblique. La longueur moyenne d'un segment vertical de chaîne de forces vaut $2\langle v \rangle$ pas du réseau (car v compte les *demi*-liens verticaux) et la longueur moyenne d'un segment oblique vaut $n - \langle v \rangle$. S'il y a invariance statistique sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$, ces deux longueurs moyennes sont égales et $\langle v \rangle / n = 1/3$. Dans ce cas, la force moyenne exercée par une configuration dans la direction verticale sur le bord supérieur ou inférieur du réseau vaut un sixième de la somme des forces moyennes exercées dans les six directions du réseau.
- Pour le modèle fermionique, $\langle v \rangle / (n - \langle c \rangle) = 1/3$ ou encore $\langle v \rangle = (1/\rho - 1)\langle c \rangle$ d'où $n_b = n_c = n_e$: la taille moyenne d'un côté vertical de cellule hexagonale (formé de faces-4 de type e) est égale à celle d'un côté oblique (formé de faces-4 de type b ou c suivant la direction). On trouve alors, pour les densités de faces-4 par ligne, à l'aide des relations linéaires et quadratiques données plus haut, $n_d/L = \langle c \rangle/L = \rho(3/\rho - 2)$, $n_b/L = n_c/L = n_e/L = \langle v \rangle/L = \rho(1 - \rho)/(3 - 2\rho)$ et, comme toujours, $n_g = n_f$, $n_f + n_h = n_e$ et, avec la contrainte quadratique, l'expression de l'aire moyenne en nombre de faces-4 de l'intérieur de chaque cellule hexagonale,

$$\frac{n_a + n_f}{n_d} = 3 \frac{n_e^2}{n_d^2} = 3 \frac{\langle v \rangle^2}{\langle c \rangle^2} = 3 \left(\frac{1}{\rho} - 1 \right)^2. \quad (13.52)$$

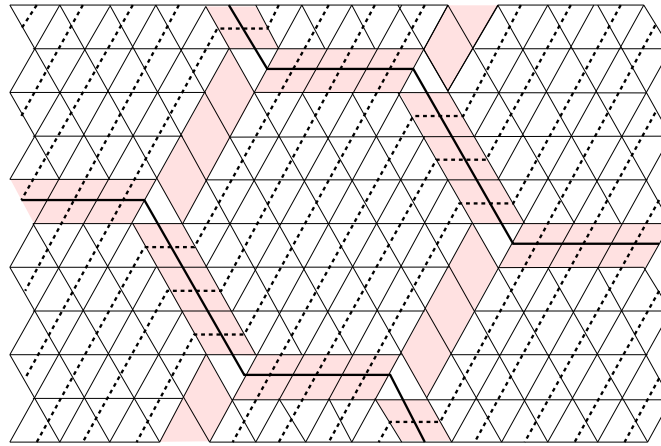


FIG. 13.12 – Une configuration de trajectoires des particules L et R, dans la reformulation du modèle des pavages aléatoires carrés-triangles à l'aide de telles particules vue p. 225, qui possède l'invariance sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$. Les trajectoires des particules L sont en traits gras continus, celles des particules R en traits gras interrompus. Le pavage du plan à l'aide de carrés et de triangles équilatéraux est obtenu en déformant les angles du réseau triangulaire de manière que les losanges ici présents (nous les avons colorés pour qu'ils se distinguent mieux) deviennent des carrés. Cette configuration prouve par l'exemple que, contrairement à ce qui se passe pour notre modèle (fermionique) d'empilements, l'invariance sous les rotations ne nécessite pas que les nombres de particules L et R soient égaux (mais ces nombres vérifient une certaine relation [289, 290]). Quand ils sont de plus égaux, ce qui n'est pas le cas ici, les fractions d'aires occupées (dans les pavages) par les carrés et les triangles sont égales et l'aire moyenne de l'intérieur d'une cellule hexagonale, comptée en nombre de triangles, vaut deux. Dans la configuration ci-dessus, les amas, colorés, de carrés séparent deux types de régions : des régions constituées d'un seul triangle, d'aire un, et des régions hexagonales constituées de plusieurs triangles qui, si les nombres de particules L et R étaient égaux, contiendraient deux triangles.

La relation

$$1/\rho_{\text{fermions}} - 1 = 1/\rho_{\text{bosons}} \quad (13.53)$$

peut être interprétée comme le fait que le coin inférieur d'un hexagone occupe une unité dans le modèle fermionique (dans les configurations de ce modèle, les côtés obliques des cellules hexagonales ont au moins une unité de long à cause de la contrainte de non coïncidence de particules de même type sur un même site).

Symétrie « maximale ». Pour comprendre ce qui se passe dans le cas particulier où le contact des courbes a lieu sur l'axe des ordonnées ($\gamma = 0$), comparons avec le modèle de pavages carrés-triangles étudié par M. Widom et P. A. Kalugin (voir pp. 224 et 236). **Pour le modèle de pavages carrés-triangle :** les valeurs des paramètres intensifs pour lesquelles les courbes des solutions des EAB se touchent (donc pour lesquelles il est possible de faire un calcul analytique) correspondent aux pavages (configurations de carrés et de triangles) dont la mesure de probabilité possède l'invariance sous les rotations d'angles multiples de $\pi/3$. Les configurations de trajectoires de particules L et R obtenues par reformulation du modèle, quant à elles, sont alors statistiquement invariantes sous les rotations d'angles multiples de $2\pi/3$. Appelons ce phénomène « petite » symétrie. Un exemple est montré, en termes de trajectoires de particules L et R, figure 13.12. Le cas très particulier (appelons-le symétrie « maximale ») où les courbes des solutions des EAB se touchent *sur l'axe des ordonnées* ($\gamma = 0$) correspond à l'invariance statistique des pavages (configurations de carrés et de triangles) sous les rotations d'angles multiples de $\pi/6$ et plus seulement $\pi/3$; c'est dans ce cas que l'entropie par unité d'aire est maximale. Les fractions de l'aire occupées par les carrés et par les triangles sont alors égales

(et valent un demi). En termes de trajectoires de particules L et R comme sur la figure 13.12, la symétrie « maximale » correspond au cas où, en plus de l'invariance sous les rotations d'angles multiples $2\pi/3$, les nombres de particules L et R sont égaux ($n_L = n_R$), ce qui équivaut à ce que l'aire moyenne, en nombre de triangles, de l'intérieur d'une cellule hexagonale soit un comme nous allons le voir, ou encore à la covariance supplémentaire sous l'échange des particules L et R. Explicitons le rapport entre aire des cellules et nombres de particules : comme l'a montré P. A. Kalugin [289], il existe une infinité de configurations périodiques particulières pour lesquelles les cellules sont toutes des hexagones réguliers de côté l et dont les nombres n_L et n_R de particules satisfont à

$$\frac{n_L}{L} = \frac{l+1}{3l^2+l+1}, \quad \frac{n_R}{L} = \frac{3l^2+l}{3l^2+l+1} \quad (13.54)$$

où L est la largeur d'une ligne, et nous argumentons comme lui que l'on peut prolonger les résultats obtenus pour ces configurations particulières (où l est entier) à toutes les configurations (l est alors la taille moyenne d'un côté de cellule ; on peut déjà passer d'une configuration à hexagones réguliers à une configuration plus irrégulière en déplaçant les limites des cellules, comme pour les mouvements de « respiration » que nous verrons au paragraphe 14.4.4). L'aire de l'intérieur d'une cellule hexagonale (sans compter les bords) est $3l^2$ paires de triangles (sur la figure 13.12, la cellule hexagonale du centre a pour côté $l = 3$ et elle contient $6l^2 = 54$ triangles). Quand $n_L = n_R$, les relations ci-dessus entraînent $3l^2 = 1$ donc l'aire moyenne des cellules hexagonales des configurations quelconques vaut deux triangles (la longueur moyenne d'un côté l valant $1/\sqrt{3}$). Pour chaque cellule hexagonale, il y a $6l^2$ triangles dans la cellule et 2 qui assurent les jonctions des rangées de carrés, et $3l$ carrés, donc la fraction de l'aire du pavage correspondant occupée par les triangles vaut (un triangle a l'aire $a^2\sqrt{3}/4$ si un carré a l'aire a^2)

$$\frac{(6l^2+2)\sqrt{3}/4}{(6l^2+2)\sqrt{3}/4+3l} = \frac{3l^2+1}{(\sqrt{3}l+1)^2} \quad (13.55)$$

qui vaut un demi si $l = 1/\sqrt{3}$ (ici encore, en admettant qu'on peut prolonger ce résultat qui n'a été obtenu en principe que pour des valeurs de l entières).

Pour le modèle fermionique : la « petite » symétrie des configurations de particules L et R est l'invariance sous les rotations d'angles multiples de $2\pi/3$, et la symétrie « maximale », atteinte dans le cas où $\gamma = 0$, est caractérisée par $\rho = (3 - \sqrt{3})/2$ donc l'aire moyenne de « l'intérieur » d'une cellule en nombre de faces-4, donnée par la relation (13.52), vaut exactement un (il y a en moyenne autant de faces-4 a , f et g prises ensemble que de faces-4 d). Attention cependant à une différence importante : ici, la symétrie maximale n'est *pas* caractérisée par $n_L = n_R$ car cette dernière relation est vraie déjà quand la « petite » symétrie est réalisée (la différence vient du fait que l'invariance gauche-droite est *brisée* lors de la reformulation du modèle des pavages en trajectoires de particules L et R mais *conservée* dans les modèles bosonique et fermionique). Toujours dans le cas de symétrie maximale, l'aire moyenne d'une cellule (« intérieur » et bords compris) vaut $4\sqrt{3}/3+2 = 1/n_d$ où n_d est donné ci-dessous : nous trouvons, pour les fractions des faces-4 de chaque type,

$$n_b = n_c = n_e = n_f + n_h = n_g + n_h = 1 - \frac{\sqrt{3}}{2}, \quad n_d = n_a + n_f = \sqrt{3} - \frac{3}{2}. \quad (13.56)$$

Pour le modèle bosonique, nous n'avons pas cherché s'il existe une telle relation entre nombres de vertex, mais nous verrons au dernier chapitre que le cas particulier $\gamma = 0$ correspond à la transition de *jammings*, c'est-à-dire à la limite des empilements isostatiques, marginalement stables.

Les résultats précédents ne sont pas rigoureux ; un point de départ possible pour démontrer que la condition de contact des courbes des solutions des EAB coïncide avec l'invariance sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ pourrait être d'étudier l'effet sur les EAB de la transformation qui change les particules L en \overline{LR} , les \overline{LR} en R et les R en L (les EAB doivent être invariantes en cas de symétrie).

Chapitre 14

Simulations Monte-Carlo

LES techniques de résolution des modèles intégrables discrets nous ont permis de calculer un certain nombre de propriétés des modèles que nous avons introduits. Néanmoins, s'il est en principe possible de calculer toutes les observables à partir du spectre et des vecteurs propres de la matrice de transfert auxquels on a accès grâce à l'*Ansatz* de Bethe, en pratique cet accès reste très théorique pour certaines quantités et il se révèle utile de recourir à des simulations Monte Carlo pour les « mesurer ». En particulier, ces simulations Monte Carlo vont nous permettre de montrer qu'au point de l'espace des paramètres qui présente la symétrie maximale, les configurations de chaînes de forces correspondent à un empilement isostatique, donc à la transition de « jamming » — nous développerons ce point au chapitre suivant. Dans ce chapitre, nous expliquons le principe des simulations Monte Carlo que nous avons réalisées.

14.1 Principes généraux d'une simulation Monte Carlo

Dans les simulations Monte Carlo utilisées en physique statistique, le principe est d'approximer la somme exacte (normalisée) sur toutes les configurations qui définit la moyenne d'une observable à la limite thermodynamique par une somme normalisée, calculée à l'aide d'un ordinateur, sur un grand nombre de configurations, tirées au sort parmi toutes les configurations possibles, pour un système de taille finie. L'approximation est donc double : d'une part, le système a une taille finie donc les moyennes empiriques obtenues avec la simulation seront entachées d'erreurs systématiques (on parle de « corrections de taille finie »), d'autre part, pour une taille donnée, les résultats différeront de la valeur exacte de la moyenne parce que l'on n'aura pas sommé sur *toutes* les configurations.

Pour maîtriser la première source d'erreurs on utilise en général des techniques d'extrapolation (comme les *lois d'échelles des tailles finies*, *finite-size scaling* en anglais) à partir de données obtenues pour des tailles de systèmes différentes.

En ce qui concerne l'approximation d'une somme exacte sur un nombre exponentiel (en la taille du système) de configurations par une somme sur un nombre fini de configurations tirées indépendamment au sort, on a recours à deux outils théoriques : d'une part, la loi des grands nombres de la statistique, d'autre part, l'*échantillonnage selon l'importance* (*importance sampling* en anglais). Cette approximation s'écrit formellement, si $A(\mathcal{C})$ désigne la valeur dans la configuration \mathcal{C} de l'observable à mesurer et $w(\mathcal{C})$ le poids statistique de cette configuration :

$$\frac{\sum_{\text{toutes les configurations } \mathcal{C}} w(\mathcal{C})A(\mathcal{C})}{\sum_{\text{toutes les configurations } \mathcal{C}} w(\mathcal{C})} \approx \frac{\sum_{N \text{ configurations } \mathcal{C}} w(\mathcal{C})A(\mathcal{C})}{\sum_{N \text{ configurations } \mathcal{C}} w(\mathcal{C})}. \quad (14.1)$$

La loi des grands nombres (nous entendons par là le théorème de la limite centrale) nous assure que la distance entre la moyenne exacte (membre de gauche ci-dessus) et la moyenne empirique (membre de droite, somme sur N de configurations tirées uniformément au sort parmi toutes les configurations) diffère d'une quantité qui fluctue mais dont la loi de probabilité converge en loi vers une loi normale (dite aussi gaussienne) de moyenne nulle et dont l'écart-type tend vers zéro comme $N^{-1/2}$. On peut estimer, connaissant la distribution des valeurs de l'observable à mesurer sur les N configurations que l'on a tirées au sort avec l'ordinateur, un *intervalle*

de confiance autour de la moyenne empirique où la moyenne exacte doit se trouver avec, disons, 68% de chances. Si cet intervalle paraît trop grand, il est possible de le raccourcir en augmentant le nombre N de configurations considérées (aux dépens du temps de calcul sur ordinateur).

Échantillonnage selon l'importance. Le raisonnement précédent ne précise pas à quelle vitesse (selon N) la loi de probabilité $P(e)$ de l'écart e entre moyenne empirique et moyenne exacte converge vers une loi gaussienne. Et l'on peut facilement imaginer un cas défavorable où cette convergence est très lente : si la plupart des configurations ont une contribution nulle à la moyenne empirique, seul un petit nombre de configurations ayant une contribution significative, tant que N est petit devant le nombre total \mathcal{N} de configurations, le tirage au sort uniforme des N configurations d'essai a peu de chances de choisir les configurations « significatives » donc la moyenne empirique sera très loin de la moyenne exacte. La convergence sera très lente et il faudra attendre que N soit d'ordre \mathcal{N} (en général exponentiellement grand en la taille du système) pour que la loi $P(e)$ soit gaussienne et donc que l'intervalle de confiance qu'elle prédit ait un sens. Une telle situation se produit notamment quand les configurations \mathcal{C} sont celles d'un système thermodynamique (gaz, liquide, etc.), pondérées à l'aide d'un poids de Boltzmann $w(\mathcal{C}) := \exp(-E/T)$ où T est la température ($k_B = 1$) et E l'énergie de la configuration. Quand la température T tend vers 0, on arrive à un régime où la plupart des configurations sont quantités négligeables dans la moyenne (de E par exemple), seules les configurations d'énergie E proche de l'énergie du fondamental contribuant. Pour remédier à ce problème, on remplace le tirage au sort uniforme des N configurations par un tirage au sort biaisé tel que la probabilité de tirer au sort une configuration soit proportionnelle à son poids (et, au moment de calculer la moyenne empirique, on fait comme si le poids $w(\mathcal{C})$ valait un). Ce procédé est appelé échantillonnage selon l'importance. Plus précisément, le tirage au sort biaisé consiste en une marche aléatoire biaisée sur l'espace des configurations. Les probabilités des transitions (des pas de la marche aléatoire) sont choisies de sorte que la marche passe, dans chaque configuration, un temps proportionnel au poids de la configuration. Les configurations de poids faibles ne seront que peu explorées dans ce processus, mais ce n'est pas grave car elles ne contribuent que de façon négligeable à la moyenne. Inversement, si quelques configurations dominent cette moyenne parce qu'elles ont un poids statistique important, la marche aléatoire les explorera de façon quasi certaine même si on ne la laisse évoluer que « peu de temps » (nous allons préciser ci-dessous ce que nous entendons par là) et la moyenne empirique sera déjà beaucoup plus proche de la moyenne exacte qu'avec un tirage au sort uniforme.

Non indépendance statistique des configurations explorées. Les configurations explorées par la marche aléatoire ne sont en général *pas* statistiquement indépendantes, puisque chaque configuration ressemble à son prédécesseur dans la suite de configurations tirées au sort (la marche aléatoire progressant, en général, « à petits pas »). Au contraire, la fonction de corrélation entre deux configurations explorées par la marche aux dates respectives t et t' décroît la plupart du temps comme $\exp(-|t - t'|/\tau)$, où τ est un temps caractéristique, dit *de mélange*, de la marche aléatoire (ou de la simulation Monte Carlo). Ce temps est relié aux valeurs propres de la matrice qui encode les taux de transitions entre configurations de la marche aléatoire (la plus grande valeur propre doit être $\lambda_0 = 1$ et, si λ_1 est la valeur propre de plus grand module après λ_0 , à supposer qu'elle soit unique, $\exp(-1/\tau) = \lambda_1$, de façon similaire à ce que nous avons vu pour les longueurs de corrélation et la matrice de transfert). En conséquence, rien ne permet d'affirmer que la différence entre la moyenne empirique sur N configurations consécutives explorées par la marche aléatoire et la moyenne exacte a une distribution dont l'écart-type décroît aussi vite que $1/\sqrt{N}$. Pour estimer l'erreur entre moyenne empirique et moyenne exacte, il est en général plus sage de faire plusieurs simulations indépendantes (plusieurs marches aléatoires) et de comparer leurs résultats — là, le théorème de la limite centrale s'applique.

Un théorème de convergence des simulations Monte Carlo. Voyons comment on réalise la marche aléatoire en pratique. Une manière commode (et de loin la plus utilisée) consiste

à utiliser la condition dite d'équilibre détaillé (CÉD). Donnons d'abord un résultat général sur les marches aléatoires. Soit $p(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1)$ la probabilité que la marche aléatoire atteigne la configuration \mathcal{C}_2 quand elle est dans la configuration \mathcal{C}_1 . Ces probabilités sont supposées constantes. On définit la *mesure [de probabilité] d'équilibre* de la marche aléatoire comme la limite, quand le nombre (entier) de pas que l'on a effectué tend vers $+\infty$, de la mesure de probabilité sur les configurations (l'aléa porte sur le pas que la marche a faits à chaque étape, parmi les pas qu'elle aurait pu faire).

Theorème 1 *Si, de toute configuration on peut atteindre toute autre en un nombre fini de pas (à taille du système fixée), c'est-à-dire si la marche aléatoire est irréductible, si, pour toute transition $\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_2$ possible dans la marche aléatoire, la transition réciproque $\mathcal{C}_2 \rightarrow \mathcal{C}_1$ est aussi possible, et si, pour au moins une configuration \mathcal{C} , la marche a le choix entre deux successeurs distincts (par exemple « rester dans \mathcal{C} avec probabilité $0 < p < 1$ ou bien aller en $\mathcal{C}' \neq \mathcal{C}$ avec probabilité $0 < 1 - p < 1$ »), la mesure d'équilibre sur les configurations $p_\infty(\mathcal{C})$ existe, est unique et satisfait à la condition d'équilibre détaillé :*

$$\forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad p(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1) p_\infty(\mathcal{C}_1) = p(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2 | \mathcal{C}_2) p_\infty(\mathcal{C}_2). \quad (14.2)$$

La condition « d'équilibre détaillé » (*detailed balance* en anglais), que l'on pourrait appeler (plus heureusement ?) « condition d'équilibre jusque dans les détails » ou « condition d'équilibre point par point », traduit mathématiquement le fait que même les flux de probabilité entre deux configurations quelconques sont en équilibre : si l'on simulait un grand nombre de systèmes en même temps et de manière indépendante, l'on observerait que le nombre de systèmes qui passent, à un instant donné, d'une configuration \mathcal{C}_1 à une configuration \mathcal{C}_2 est en moyenne le même que celui des systèmes qui passent de \mathcal{C}_2 à \mathcal{C}_1 . Ceci n'est pas nécessaire pour qu'il existe équilibre du système, il peut y avoir équilibre global sans que chaque échange possible entre configurations soit lui-même en équilibre. Par exemple, dans un système à quatre configurations 0, 1, 2, 3 avec taux 1/3 pour chacune des transitions $i \rightarrow i, i \rightarrow i + 1, i \rightarrow i + 2$ pour $i \in \mathbb{Z}_4$ — les numéros des transitions sont pris *modulo* quatre —, la cinétique converge inmanquablement vers l'état d'équilibre où les quatre configurations sont équiprobables, mais la CÉD est violée car la transition $1 \rightarrow 2$ est possible sans que $2 \rightarrow 1$ le soit.

On peut montrer le théorème précédent à l'aide du théorème de Perron-Frobenius par exemple ; voir [314] pour une preuve élémentaire de la convergence des simulations Monte Carlo et des références. Si la première hypothèse ci-dessus (irréductibilité) n'est pas vérifiée, il est possible que l'ensemble des configurations visitées par la marche aléatoire ne soit pas égal à l'ensemble de toutes les configurations et dépende de la configuration initiale. Si au contraire elle est vérifiée, la configuration initiale n'a, à la limite $t \rightarrow +\infty$, plus d'influence. La troisième hypothèse ci-dessus sert à éviter les situations où la marche aléatoire fait un cycle ($A \rightarrow B \rightarrow A \rightarrow B \rightarrow \dots$) ou, plus généralement, celles où la mesure d'équilibre n'est pas définie parce que la marche aléatoire oscille entre plusieurs « mesures d'équilibre » (par exemple, dans une simulation du modèle d'Ising à spins ± 1 , si on renverse exactement un spin à chaque pas de temps, la parité du nombre de spins +1 dépend de la parité de la date t , donc il y a en quelque sorte deux mesures d'équilibre, une pour les dates paires et une pour les dates impaires, suivant la parité du nombre de spins à $t = 0$). Quand la première et la troisième hypothèse sont vérifiées, la marche aléatoire est *ergodique* : quelle que soit la configuration de départ, après un temps suffisamment long (mais fini) la probabilité d'être dans n'importe quelle configuration est strictement positive. Enfin, la deuxième hypothèse est clairement nécessaire pour l'écriture de la formule 14.2 (puisque c'en est une conséquence si les probabilités p_∞ de visiter \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 ne sont pas nulles).

Le résultat précédent peut être utilisé pour construire une marche aléatoire dont la mesure d'équilibre est la loi de probabilité p (connue) où chaque configuration \mathcal{C} a le poids $w(\mathcal{C})$. En effet, comme la mesure d'équilibre est, d'après le théorème, unique, il suffit de choisir les taux de transition de la marche aléatoire de sorte que la CÉD 14.2 soit vérifiée pour $p_\infty = p$, ou même plus simplement pour $p_\infty = w$ (ce qui nous dispense de calculer le coefficient de normalisation

de p — la fonction de partition —, lequel est souvent très difficile d'accès). L'équation 14.2, valable à la fois pour p et pour p_∞ , entraîne que p et p_∞ soient proportionnelles, donc égales puisqu'elles sont normalisées.

Règle de Metropolis. En pratique les algorithmes de simulation Monte Carlo utilisent deux étapes à chaque pas de temps : dans une première étape, ils génèrent une nouvelle configuration \mathcal{C}' à partir de la configuration actuelle \mathcal{C} , puis ils acceptent ou rejettent ce choix avec une certaine probabilité, suivant une règle telle que la règle de Metropolis citée ci-dessous : en cas de *rejet*, on considère que la configuration à l'état suivant reste \mathcal{C} , sinon elle devient \mathcal{C}' . Notons $p_{\text{gener}}(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C})$ la probabilité de générer \mathcal{C}' quand l'algorithme est dans l'état \mathcal{C} . Il est rarement facile de programmer l'algorithme de sorte que les probabilités p_{gener} vérifient la CÉD pour la loi de probabilité p souhaitée. En revanche, il est facile de rajouter l'étape d'acceptation ou de rejet telle que le changement $\mathcal{C} \rightarrow \mathcal{C}'$ soit accepté uniquement avec une certaine probabilité $p_{\text{accept}}(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C})$. La probabilité de faire une transition de \mathcal{C} à \mathcal{C}' avec ce mécanisme de génération et acceptation est

$$p(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C}) = p_{\text{accept}}(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C})p_{\text{gener}}(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C}) \quad (14.3)$$

donc, pour que la CÉD soit vérifiée, il suffit de choisir les p_{accept} de sorte que (en combinant les équations précédentes)

$$\forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad \frac{p_{\text{accept}}(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1|\mathcal{C}_1)}{p_{\text{accept}}(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2|\mathcal{C}_2)} = \frac{p_{\text{gener}}(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2|\mathcal{C}_2) w(\mathcal{C}_2)}{p_{\text{gener}}(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1|\mathcal{C}_1) w(\mathcal{C}_1)}. \quad (14.4)$$

Cette équation ne contraint que le *rapport* des probabilités d'acceptation p_{accept} , pas les probabilités elles-mêmes. Ces probabilités sont bien sûr comprises entre 0 et 1, et, pour diminuer le temps de mélange de la simulation, il est intuitif sinon clair que les p_{accept} doivent être aussi grands que possible. Pour cela, nous utilisons la règle de Metropolis qui préconise de choisir

$$\forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad p_{\text{accept}}(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1|\mathcal{C}_1) := \min \left(1, \frac{p_{\text{gener}}(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2|\mathcal{C}_2) w(\mathcal{C}_2)}{p_{\text{gener}}(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1|\mathcal{C}_1) w(\mathcal{C}_1)} \right). \quad (14.5)$$

Problème de la convergence en temps infini. Ce mécanisme (génération de configurations puis acceptation ou rejet suivant la règle de Metropolis) suffit à assurer que la marche aléatoire « converge » vers la loi de probabilité p voulue, mais, d'une part, on ne connaît pas explicitement la vitesse de convergence (ou le temps caractéristique τ' que met la loi de probabilité, initialement dépendante de la configuration initiale, donc arbitraire, à relaxer vers la loi p — voir [315] pour une méthode de calcul explicite de cette durée), d'autre part la loi p n'est mathématiquement atteinte qu'au bout d'une infinité de pas. Nous traitons cette difficulté de la façon suivante. Nous estimons d'abord le temps de relaxation (ou temps d'équilibrage) τ' numériquement, en observant les courbes de relaxation, pour une observable A donnée, lors de deux séries de simulations Monte Carlo qui partent de deux configurations initiales où A a des valeurs très différentes, et différentes de la valeur moyenne commune atteinte. Un exemple d'une telle relaxation pour l'observable « nombre de quanta de forces verticaux » est montré figure 14.1. Ensuite, comme les résultats issus de la simulation Monte Carlo seront toujours accompagnés d'une barre d'erreur (ou intervalle de confiance), nous considérons qu'il suffit d'arrêter la simulation après n pas de temps (et de prendre les moyennes sur les configurations générées par n pas de simulation, en faisant comme si ces configurations étaient distribuées selon la loi p) quand $\exp(-n/\tau')$ est nettement inférieur à l'erreur relative sur les quantités à mesurer.

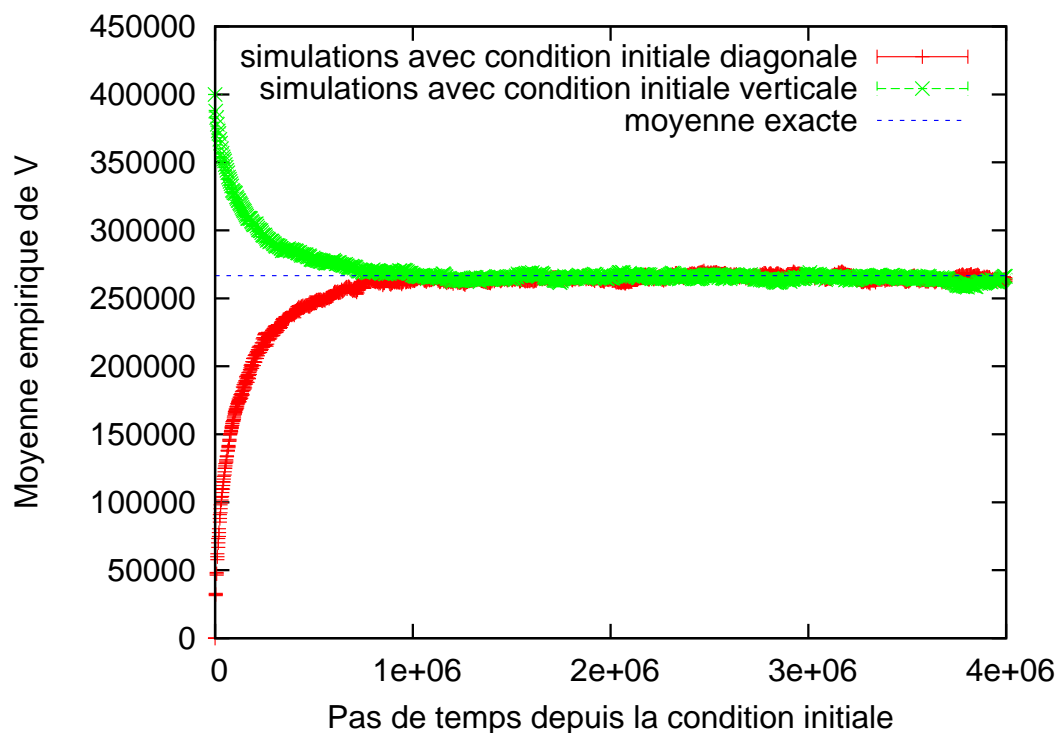


FIG. 14.1 – La relaxation, lors de simulations Monte Carlo, de la moyenne empirique du nombre de quanta de forces verticaux dans des configurations du modèle de chaînes de forces. Les courbes montrent la moyenne (avec barre d'erreur) des résultats obtenus lors de trois simulations indépendantes en fonction du nombre de pas de simulations effectués depuis la configuration initiale, et en partant d'une configuration où tous les quanta de forces sont verticaux (courbe supérieure) et d'une configuration où tous les quanta de forces sont obliques (courbe inférieure). Système de taille $L = 30$, $H = 40$ avec $n := n_L = n_R = 10000$ particules de chaque type et $w = 1.004495$. On constate que, dans les deux cas, la moyenne empirique relaxe vers la moyenne exacte (dont on sait qu'elle vaut $2/3 nH = 266666, \bar{6}$), avec un temps caractéristique de l'ordre de $2 \cdot 10^5$ pas de temps.

14.2 Simulations Monte Carlo pour le modèle d'empilements

Chi va piano, va sano e va lontano.

Proverbe italien

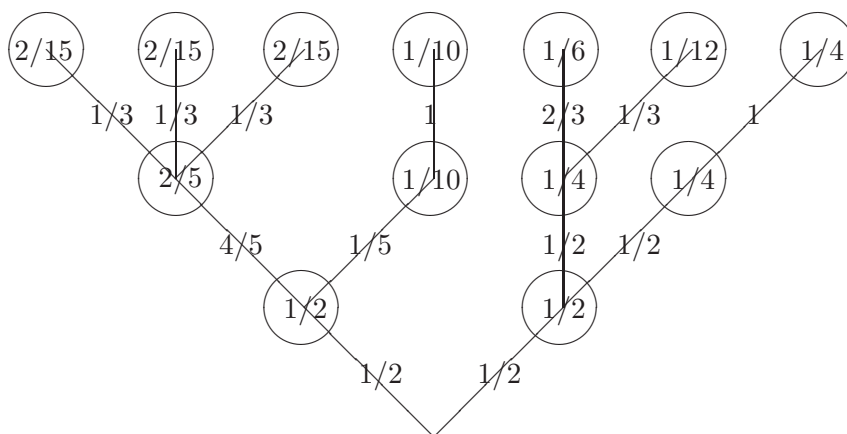
Nous nous plaçons sur un réseau de largeur L et de hauteur H finies, avec conditions aux limites périodiques dans la direction horizontale et libre dans la direction verticale. Le réseau a donc la topologie d'un cylindre tronqué aux deux bouts.

La simulation Monte Carlo de nos modèles (chaînes de forces et empilement) présente une difficulté particulière qui tient à l'absence de *mouvements locaux*, c'est-à-dire de mouvements simples qui produisent une configuration \mathcal{C}' peu différente d'une configuration \mathcal{C} (dans la simulation d'un modèle d'Ising, les mouvements locaux les plus simples sont les retournements des spins). Une idée naturelle est de changer le « choix » d'une paire de particules, L, R, située sur un nœud du réseau : si, dans \mathcal{C} , elles partaient chacune de leur côté (en forces obliques), on peut les faire voyager ensemble (en force verticale) dans \mathcal{C}' , et vice versa. Ce changement n'est pas local car, comme on s'en rend vite compte en étudiant des configurations typiques, il a des répercussions à grande distance : si, dans \mathcal{C} , la particule L se propageait obliquement et avait des partenaires R avec qui elle formait des paires liées, ces partenaires se retrouvent seuls dans \mathcal{C}' si la particule L change sa direction de propagation. Ce n'est pas en soi un problème, mais en pratique il est possible que, quand la simulation propose de remplacer la configuration actuelle \mathcal{C} par une configuration \mathcal{C}' fort différente, le poids statistique de \mathcal{C}' soit très différent de celui de \mathcal{C} (*i.e.* très inférieur à celui-ci) et que le changement soit presque toujours rejeté, conformément à la règle de Metropolis 14.5. Il s'avère, au moins pour le modèle de chaînes de forces, plus efficace de faire de nombreux petits pas acceptés avec une probabilité raisonnable que de grands pas quasiment toujours refusés — en accord avec le proverbe cité ci-dessus... De plus, même si les particules L et R mises en jeu dans ce changement prétendument local sont seules ou n'interagissent pas avec les autres, quand elles prennent la décision de se séparer en un nœud, elles s'engagent pour $L/2$ lignes de réseau — la distance nécessaire avant qu'elles se retrouvent de nouveau sur un même nœud, quand L est pair. Donc le poids statistique en jeu dans un tel changement n'est pas d'ordre 1, mais d'ordre $w^{L/2}$ (poids d'une chaîne verticale de hauteur $L/2$, tandis que celui des chaînes obliques est 1), et l'un des deux mouvements a toutes les chances d'être souvent rejeté.

Par ailleurs, même si l'on fait abstraction de la possible lenteur de la convergence vers la mesure d'équilibre, ces répercussions à longue distance compliquent notablement l'utilisation de la condition d'équilibre détaillé. Imaginons qu'on change volontairement le « choix » (association ou dissociation) d'une paire L, R sur un nœud. Il faut ensuite traiter les nœuds dont le contenu en particules L et R est obligé de varier suite au « changement volontaire » pour que la contrainte fermionique soit respectée (parlons de « changements involontaires ») — voir p. 272. Une première stratégie consiste à ne jamais faire de choix sur ces nœuds : on se donne une procédure déterministe qui indique combien de paires liées \overline{LR} on forme en fonction du contenu du nœud (en nombres de particules L et R). Le danger de cette approche est qu'il est tout sauf certain qu'elle vérifie la deuxième hypothèse du théorème de convergence que nous avons cité ci-dessus, à savoir que si une transition $\mathcal{C}_1 \rightarrow \mathcal{C}_2$ est possible, la transition réciproque $\mathcal{C}_2 \rightarrow \mathcal{C}_1$ doit l'être aussi. Par exemple, si la prescription sur un nœud à changement involontaire est « former aussi peu de paires liées que possible », il est très probable que beaucoup de mouvements verront leur nombre de paires liées (de quanta de forces verticaux) diminuer et que les mouvements réciproques ne seront pas possibles. Alors la condition d'équilibre détaillé ne sera pas vérifiée et la mesure d'équilibre de la simulation sera probablement fautive (différente de la mesure du modèle défini au chapitre précédent). Nous n'avons donc pas retenu cette stratégie. Si, au contraire, on s'autorise sur ces nœuds à changement involontaire à choisir entre plusieurs possibilités (par exemple, de 0 à $\min(n_L, n_R)$ quanta verticaux issus

du nœud s'il contient n_L resp. n_R particules L resp. R), le nombre de configurations \mathcal{C}' que l'on peut former à partir d'une configuration \mathcal{C} n'est pas constant, mais dépend fortement de la configuration \mathcal{C} . Pire, les configurations \mathcal{C}' ne seront pas forcément générées avec la même probabilité p_{gener} à partir de \mathcal{C} , et calculer cette probabilité peut être difficile. Par exemple, soit une configuration avec deux particules L et deux R sur un même nœud d'une ligne de largeur L grande. Il y a à ce stade trois choix possibles : deux paires liées \overline{LR} se forment, une se forme (une particule L partant obliquement vers la gauche et une R vers la droite) ou bien les deux particules L partent obliquement vers la gauche et les deux R partent obliquement vers la droite. Si les quatre particules décident de se propager verticalement, il y aura sur la ligne suivante encore trois choix. En revanche, si les quatre se propagent obliquement, il n'y aura qu'un seul choix. Si les choix sont faits de façon équiprobable, la probabilité de tirer la configuration avec propagation oblique sera trois fois plus grande que celle de tirer la configuration avec que des paires liées. Or il est nécessaire de connaître cette probabilité p_{gener} pour calculer les taux de rejet (14.5). Précisons tout de suite comment nous avons traité ce problème.

Repondération des configurations pour contrebalancer la différence de probabilités de générations. Formellement, la construction de la configuration \mathcal{C}' à partir de \mathcal{C} se ramène à un certain nombre de choix, faits dans un ordre donné, les suivants dépendant des précédents. Par exemple, nos simulations Monte Carlo tirent au sort une ligne de \mathcal{C}' après l'autre, et les choix de propagation pour les particules faits sur une ligne conditionnent les choix sur la ligne suivante puisqu'il y a conservation des particules. On peut représenter ces choix dans un arbre dont la racine est le point de départ commun à toutes les configurations \mathcal{C}' que l'algorithme peut engendrer à partir de \mathcal{C} , dont chaque branche représente un choix et chaque nœud une configuration partiellement construite. Les configurations \mathcal{C}' accessibles à partir de \mathcal{C} sont les feuilles de l'arbre. Les branches issues de la racine correspondent aux « choix volontaires ». Notons sur chaque branche la probabilité d'emprunter cette branche à partir du nœud précédent, et sur chaque nœud la probabilité que ce nœud soit atteint à partir de la racine. Dans l'exemple précédent, la racine serait la situation où un nœud de la ligne inférieure contient L, L, R, R, et trois branches en partiraient (elles correspondraient aux trois choix possibles pour la propagation vers la ligne de nœuds immédiatement supérieure). Voici un exemple plus compliqué :



Dans cet exemple, les probabilités de génération p_{gener} des différentes configurations ne sont pas uniformes. Mais pour que la cinétique Monte Carlo ait tout de même la mesure uniforme pour mesure d'équilibre, il suffit d'ajouter une étape de rejet avec la règle de Metropolis, où chacune des configurations générées \mathcal{C}' est munie d'un poids statistique *qui dépend de la configuration de départ* \mathcal{C} égal à l'inverse de la probabilité p_{gener} de générer cette configuration \mathcal{C}' à partir de la configuration de départ \mathcal{C} . Si l'on souhaite que la mesure d'équilibre coïncide avec la mesure qui correspond aux poids statistiques du modèle physique au lieu de la mesure uniforme, il suffit de munir \mathcal{C}' du poids égal au produit de son poids w selon le modèle physique (ce poids w est intrinsèque et ne dépend que de \mathcal{C}') et du poids $1/p_{\text{gener}}(\mathcal{C}' \leftarrow \mathcal{C}|\mathcal{C})$. Par exemple, la CÉD

s'écrit, pour deux configurations \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 de poids $w = 1$ telles que, sans la repondération, la probabilité de générer \mathcal{C}_2 à partir de \mathcal{C}_1 soit $2/15$ et que la probabilité de générer \mathcal{C}_1 à partir de \mathcal{C}_2 soit $1/6$, et qui sont donc munies des poids respectifs 6 et $15/2$,

$$1 \times 2/15 \times p(\mathcal{C}_1) = \frac{6}{15/2} \times 1/6 \times p(\mathcal{C}_2).$$

Ce qui se simplifie en $p(\mathcal{C}_1) = p(\mathcal{C}_2)$, de sorte qu'à l'équilibre \mathcal{C}_1 et \mathcal{C}_2 aient bien la même probabilité. L'avantage de ce schéma est qu'on n'a pas besoin de connaître les probabilités de génération ou de stocker l'arbre : le poids supplémentaire d'une configuration est égal au produit des inverses des probabilités des différentes branches que l'on a empruntées pour arriver à cette configuration. Il suffit de connaître (et de noter), au moment où l'on fait un choix pour générer une partie de la configuration \mathcal{C}' à partir de \mathcal{C}_1 et \mathcal{C} , la probabilité de faire ce choix parmi les autres choix possibles. Cette probabilité se calcule en pratique très simplement.

Mouvements verticaux. Notre simulation Monte Carlo du modèle d'empilements peut employer comme premier ingrédient des mouvements inspirés du principe précédent. La mesure de probabilité des configurations *n'est pas* une mesure produit sur les choix faits aux différents nœuds, du fait de la conservation des particules L et R, qui elle-même exprime la contrainte d'équilibre des forces sur chaque nœud (*a contrario*, les configurations du modèle- q sont munies d'une loi produit ; S. Ostojic et D. Panja ont montré [209], à la suite de travaux de J. H. Snoeijer et de ses collaborateurs [212], comment la mesure uniforme sur les configurations de forces *continues* peut être vue comme un modèle- q avec corrélations de q entre les nœuds ; autrement dit, ne pas tenir compte des corrélations entre nœuds conduit à perdre des éléments importants de la physique des milieux granulaires à l'équilibre statique). Néanmoins, notre première procédure de génération des configurations génère ces configurations selon une loi produit par simplicité de programmation ; c'est l'usage de la règle de Metropolis qui permet de faire en sorte que la mesure d'équilibre de la simulation soit tout de même correcte. Cette procédure tire au sort uniformément un numéro de ligne de nœuds (entre 0 et H), et elle se propose de modifier uniquement les lignes de liens situées au-dessus de la ligne de nœuds ainsi choisie. Le contenu en particules L et R de cette ligne de nœuds est connu d'après l'ancienne configuration \mathcal{C} . Sur chaque nœud, si b_{\max} est le plus petit des nombres n_L et n_R de particules L et R sur le nœud, l'on peut former de 0 à b_{\max} quanta de forces verticaux. On tire au sort le nombre b de quanta verticaux réellement formés suivant la loi de probabilité où le poids de b est w^b , c'est-à-dire où la probabilité de tirer b est $w^b(1-w)/(1-w^{b_{\max}+1})$ (ou simplement $b_{\max} + 1$ quand $w = 1$), puis on écrit les contenus en particules L et R des liens issus de ce nœud. Quand cela est fait pour tous les nœuds de la ligne, une ligne de liens vient d'être tirée au sort et l'on peut passer à la ligne (de nœuds) suivante, et ainsi de suite jusqu'au bord du réseau (les conditions aux limites en haut et en bas du réseau sont ouvertes). Ensuite on applique la règle de Metropolis pour savoir si on accepte de remplacer l'ancienne configuration par celle qu'on vient de générer. Cette dernière est munie du poids égal au produit sur les nœuds des inverses des probabilités de générer b quanta verticaux multipliés par w^b , soit en fait le produit sur les nœuds de $(1-w)/(1-w^{b_{\max}+1})$. Autrement dit, elle est munie d'un poids effectif *intrinsèque* qui se calcule simplement en fonction des nombres n_L et n_R de particules sur chaque nœud (*via* b_{\max}). La quantité correspondante pour l'ancienne configuration se calcule donc facilement en examinant le contenu de ses nœuds.

Le processus complet (choix d'une ligne de nœuds, tirage au sort des nombres b de quanta verticaux et acceptation ou rejet) est appelé un « pas vertical ». Si le réseau comptait seulement une ligne de liens, cette procédure donnerait directement accès à la mesure physique correcte (conditionnée à la ligne de nœuds en bas), car les nœuds situés sur une même ligne ne sont pas directement corrélés. Dans le cas contraire, on sait que l'utilisation de la règle de Metropolis assure que la mesure d'équilibre est bien la mesure physique. En pratique, le temps de mélange de la marche aléatoire sur les configurations est trop long pour que cet algorithme soit efficace dès que la hauteur du réseau dépasse une dizaine de lignes. Autrement dit, si on l'utilise tel

quel, on constate que seules les quelques premières lignes en haut du réseau sont modifiées : les changements qui s'attaquent aux lignes plus basses sont quasiment tous rejetés, signe que les sous-configurations générées sont trop éloignées de la mesure d'équilibre. Mais l'on peut remédier à cela en segmentant le tirage au sort de la nouvelle configuration : on suppose qu'une partie, de hauteur h , de la configuration \mathcal{C}' est déjà connue, et l'on tire les trois lignes de liens suivantes par une mini-simulation Monte Carlo (c'est-à-dire que l'on fait comme si le réseau avait la hauteur $h + 3$ et que l'on choisissait toujours de modifier la portion comprise entre $y = h$ et $y = h + 3$). Après un nombre de pas de temps de cette simulation tel que l'équilibre sur ces trois lignes puisse être considéré comme atteint (voir le critère au précédent paragraphe), on passe à la portion $h + 3 \leq y \leq h + 6$, et ainsi de suite. À la fin, une nouvelle configuration entière \mathcal{C}' a été générée, et on lui applique la règle de Metropolis (modifiée comme indiqué plus haut pour compenser les différences de probabilités de génération). L'idée est que, si le temps de mélange d'une configuration de hauteur H est $\exp H$, il est plus intéressant de mélanger successivement H configurations de hauteur 1 (temps $H \exp 1$) qu'une seule configuration de hauteur H .

Précisons le poids qu'il faut mettre sur la configuration \mathcal{C}' pour compenser les différences de probabilités de génération. On traite le cas de la réunion de deux sous-configurations (de trois lignes de liens chacune), A et B, et la généralisation sera immédiate. À l'issue de la mini-simulation qui a généré la première moitié (A) de la configuration totale, c'est-à-dire les trois premières lignes, on a obtenu une sous-configuration A avec une probabilité proportionnelle à son poids, $w^{v(A)}$, où $v(A)$ est le nombre de quanta de forces verticaux dans A. Ensuite, A ayant été choisi, on a tiré B avec une autre mini-simulation Monte Carlo, avec la probabilité $p(B|A)$ égale à $w^{v(B)}$ divisé par la somme des poids des autres possibilités pour la deuxième portion qui se raccorde à A, $w^{v(B)} + w^{v(B')} + \dots$. Lors de l'application de la règle de Metropolis à l'ensemble AB, il suffit de mettre le poids $(w^{v(A)} + w^{v(A')} + \dots)/w^{v(A)}(w^{v(B)} + w^{v(B')} + \dots)/w^{v(B)}w^{v(A)+v(B)}$ où A'... resp. B'... sont les sous-configurations qu'on aurait pu mettre à la place de A resp. B, autrement dit le produit des fonctions de partition sur A et B. Comme il est difficile de calculer ces fonctions de partition pour A et B conditionnée à se raccorder à A, on en prend des approximations en sommant les termes w^v des sous-configurations générées (acceptées ou pas) au cours des mini-simulations qui génèrent A et B. L'erreur entre vraies fonctions de partition et ces approximations est du même ordre de grandeur que celle entre moyenne empirique et moyenne exacte, donc on ne commet pas d'erreur de principe avec cet algorithme. En pratique, pour un réseau de largeur 20 et des portions de 3 lignes de haut, un temps de mélange de 1000 pas pour chaque mini-simulation est suffisant pour le modèle d'empilements. Remarquer que les produits des fonctions de partition sur A et B ne sont pas des quantités intrinsèques de A et B facilement mesurables, nous n'y avons accès que par les mini-simulations. Donc, au moment d'appliquer la règle de Metropolis, il n'est pas question de recalculer cette quantité pour l'ancienne configuration \mathcal{C} (ce serait coûteux en temps) : on utilise au contraire la valeur que l'on a noté au moment où \mathcal{C} elle-même a été générée et acceptée.

Une dernière précision importante concerne le tirage au sort des quanta de forces verticaux sur les nœuds pour le modèle d'empilement (modèle fermionique). En effet, la contrainte « fermionique » (deux particules de même type ne peuvent emprunter le même lien) force parfois le choix sur un nœud quand le choix a déjà été fait sur un nœud voisin. Il faut tenir compte de ces contraintes supplémentaires. Une façon de faire consiste à traiter d'abord les nœuds qui ont une seule particule (L ou R), puis à faire un double parcours séquentiel des nœuds pas encore traités, d'abord vers la gauche en traitant les nœuds dont le choix est forcé par leur voisin de droite, puis vers la droite pour les nœuds qui restent et en tenant compte cette fois du forçage par les voisins de gauche.

Cette procédure (avec le découpage en mini-simulations des portions) donne de bons résultats pour le modèle fermionique, où le nombre de configurations \mathcal{C}' générées à partir d'une configuration \mathcal{C} donnée n'est pas trop grand. On peut même se payer le luxe de modifier la configuration tout entière à chaque pas de temps (plutôt que de tirer au sort une ligne de nœuds

au-dessous de laquelle on ne modifie rien) sans que le temps de mélange devienne prohibitif. Pour le modèle bosonique (modèle de chaînes de forces) en revanche, le temps de mélange est beaucoup trop grand — la quasi-totalité des configurations sont refusées si le réseau dépasse une largeur et une hauteur de 10 nœuds, si bien que nous serons forcés d'utiliser une autre algorithmme, décrit au paragraphe suivant.

Mouvements horizontaux. Le lecteur suspicieux (à juste titre!) a sans doute déjà noté un défaut des pas (ou mouvements) verticaux décrits ci-dessus : ils ne constituent pas une cinétique irréductible. En effet, le contenu des nœuds de la ligne tout en bas ne varie jamais. Et même si l'on faisait également des pas verticaux vers le bas (en modifiant cette fois une moitié inférieure du réseau), il y aurait toujours un problème : on sait que la propagation des particules conduit à la propriété 13.1 pour la somme S des positions des particules, donc les mouvements verticaux ne permettent pas de changer, pour une ligne donnée du réseau, la valeur de S . Pour remédier à cela, nous ajoutons la possibilité d'un mouvement qualifié d'horizontal où l'on tire d'abord le contenu des nœuds de la ligne tout en bas du réseau puis où l'on effectue un mouvement vertical en partant de cette ligne. Cela permet à une particule L ou R de changer de colonne dans le réseau. Le tirage au sort de la ligne de nœuds en bas est effectué en tirant au sort séparément les contenus en particules L et R (puisque la mesure complète est la mesure produit sur les particules L et R). Pour chaque type de particules, on place n_L (resp. n_R) nombres un et $L-n_L$ (resp. $L-n_R$) nombres 0 dans un tableau de taille L et l'on tire au sort uniformément une permutation aléatoire des éléments du tableau (ceci fonctionne pour le modèle fermionique où un nœud, c'est-à-dire une case du tableau, contient au plus une particule ; pour le modèle bosonique on peut tirer uniformément une permutation aléatoire de n_L nombres 1 et $L - 1$ nombres zéro et considérer que, dans la permutation ainsi tirée, les nombres zéro sont les délimiteurs des nœuds, le nombre de particules dans un nœud étant donné par le nombre de uns entre les zéros qui délimitent ce nœud). De cette manière, les différentes configurations de la ligne de nœud de départ sont générées avec probabilité uniforme et l'on n'a pas besoin de repondération.

Mélange des deux types de mouvements. Chacun des deux types de mouvements (verticaux et horizontaux) satisfait à la condition d'équilibre détaillé, mais l'un au moins n'est pas irréductible. Celui-ci converge vers la restriction de la mesure de probabilité à un ensemble de configurations où il est irréductible, les configurations ayant des probabilités proportionnelles aux poids statistiques corrects (la constante de proportionnalité, c'est-à-dire la fonction de partition, n'est pas celle du modèle puisque la normalisation se fait sur un nombre restreint de configurations). Le résultat du « mélange » de ces deux types de mouvement (par exemple, à chaque pas de temps on tire au sort avec des probabilités p_0 et $1 - p_0$ non nulles fixées quel type de mouvement on fait) converge-t-il quand même vers la mesure d'équilibre voulue ? La réponse est oui, car ce mélange est clairement irréductible (l'un des types de mouvement est irréductible et il est réalisé avec une probabilité non nulle) et satisfait à la condition d'équilibre détaillé, donc aux hypothèses du théorème cité au paragraphe précédent : il suffit d'écrire la condition d'équilibre détaillé pour chaque type de mouvement,

$$\begin{aligned} \forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad p'(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1) w(\mathcal{C}_1) &= p'(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2 | \mathcal{C}_2) w(\mathcal{C}_2) \\ \forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad p''(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1) w(\mathcal{C}_1) &= p''(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2 | \mathcal{C}_2) w(\mathcal{C}_2) \end{aligned} \quad (14.6)$$

où w désigne comme d'habitude le poids statistique des configurations, et d'additionner la première équation multipliée par p_0 et la deuxième multipliée par $1 - p_0$ pour obtenir la condition d'équilibre détaillé pour le mélange des deux types de mouvements, dont les taux de transition sont simplement les quantités

$$p(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1) = p_0 p'(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1) + (1 - p_0) p''(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1). \quad (14.7)$$

Si l'on opte pour un mélange où l'on fait alternativement q_v pas verticaux puis q_h pas horizontaux (q_h et q_v étant des entiers strictement positifs), on ne peut pas utiliser le théorème

de convergence vu dans ce chapitre car les probabilités de transition ne sont pas constantes (elles dépendent de $t \bmod (q_h + q_v)$ où t est le numéro du pas de temps). En revanche, on peut utiliser un théorème plus général qui prouve (uniquement) la convergence vers une mesure d'équilibre en regroupant les pas de temps par paquets de $q_h + q_v$ (on peut utiliser le théorème de Perron-Frobenius ou celui de [314]) puis, ceci étant assuré, remarquer que la mesure d'équilibre doit satisfaire à la condition d'équilibre détaillé :

$$\forall \mathcal{C}_1, \mathcal{C}_2 \quad \frac{p_\infty(\mathcal{C}_2)}{p_\infty(\mathcal{C}_1)} = \frac{p'(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1)}{p'(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2 | \mathcal{C}_2)} = \frac{p''(\mathcal{C}_2 \leftarrow \mathcal{C}_1 | \mathcal{C}_1)}{p''(\mathcal{C}_1 \leftarrow \mathcal{C}_2 | \mathcal{C}_2)} = \frac{w(\mathcal{C}_2)}{w(\mathcal{C}_1)} \quad (14.8)$$

donc coïncide avec la mesure de poids statistiques w .

Pour vérifier que l'association des mouvements verticaux et horizontaux constitue une cinétique dont la mesure d'équilibre est bien la mesure du modèle d'empilements, où chaque configuration apparaît avec la probabilité proportionnelle à w^v où v est le nombre de quanta de forces verticaux, et surtout pour tester le programme de simulation étant donné sa complexité, nous avons fait des simulations sur de petits réseaux (par exemple $L = 3$, $H = 4$, $n_L = n_R = 2$ où il y a 63 configurations) et nous avons comparé les résultats (moyennes de v et de v^2 , probabilité d'une certaine configuration, etc.) avec les résultats obtenus en calculant la fonction de partition exacte avec la matrice de transfert. Le test a été concluant (après corrections!).

14.3 Simulations Monte Carlo pour le modèle de chaînes de forces

Beware of bugs in the above code ; I have only proved it correct, not tried it.

Donald E. Knuth

Mouvements verticaux locaux. Il s'avère que la cinétique ci-dessus produit des configurations trop éloignées des configurations typiques de la mesure physique et qui sont presque tout le temps rejetées dès que les dimensions du réseau dépassent environ 10 nœuds de largeur et de hauteur. Nous avons donc mis au point une autre cinétique, qui construise des configurations \mathcal{C}' aussi proches que possible d'une configuration de départ \mathcal{C} . Pour cela, reprenons l'idée initiale des mouvements locaux. Comme on l'a vu, si l'on modifie les choix pour la propagation des particules L et R en un nœud, cela a des répercussions à grande distance du nœud en question, et il faut gérer ces « choix involontaires » en assurant la réversibilité (et la condition d'équilibre détaillé) de la cinétique mais en faisant en sorte que \mathcal{C}' reste proche de \mathcal{C} . Une méthode qui fonctionne en pratique est la suivante : à chaque pas de temps, on choisit un nœud du réseau. Les lignes de liens situées en dessous de ce nœud ne seront pas modifiées. Sur la ligne de liens immédiatement au-dessus de ce nœud, seuls les liens issus de ce nœud sont modifiés : soit comme plus haut b_{\max} le nombre maximal de quanta de forces verticaux qui peuvent s'y former. On tire le nombre b de quanta verticaux formés en ce nœud uniformément au sort entre 0 et b_{\max} . Ensuite on forme les lignes de liens les unes après les autres jusqu'au bord supérieur du réseau, en appliquant à chaque nœud la procédure suivante : soient b, b_{\max} les anciennes valeurs du nombre de quanta verticaux issus du nœud (et du nombre maximal) et b'_{\max} la nouvelle valeur du nombre maximal. Si $b'_{\max} = b_{\max}$, on choisit $b' = b$ comme nouvelle valeur. Si $b'_{\max} < b_{\max}$, on choisit la valeur de b' telle que le rapport b'/b'_{\max} soit le plus proche possible de b/b_{\max} (quand deux valeurs de b sont à égale distance, on tire au sort uniformément entre les deux). Si $b'_{\max} > b_{\max}$, on tire au sort uniformément entre toutes les valeurs de b' telles que le mouvement inverse $((b', b'_{\max}, b_{\max}) \rightarrow b)$ soit possible. Ceci assure la réversibilité de la cinétique, condition nécessaire à la condition d'équilibre détaillé. De plus, pour chaque nœud on note le nombre de choix qu'on avait pour b et l'on pondère la configuration \mathcal{C}' générée

par le produit de ces valeurs (suivant le mécanisme de repondération exposé ci-dessus, pour compenser la non-uniformité des probabilités de génération p_{gener}).

Pour diminuer le taux de rejet et donc le temps de mélange de la cinétique, le nœud à modifier est choisi non pas uniformément, mais suivant une loi où la probabilité de tirer un nœud est proportionnelle à la valeur de b_{max} pour ce nœud, c'est-à-dire au nombre de choix qu'il offre. Ainsi, le premier choix fait par la cinétique (« choix volontaire » sur le nœud choisi) mène à une probabilité de génération p_{gener} uniforme pour toutes les configurations issues d'une configuration donnée. Le poids de compensation de la non-uniformité est seulement égal au nombre total de choix possibles, c'est-à-dire à la somme des b_{max} sur tous les nœuds.

Enfin, comme toujours on utilise la règle de Metropolis avec le poids égal au produit du poids physique $w^{v(C')}$ et du poids de compensation.

Nous pourrions aussi programmer de tels mouvements verticaux pour le modèle fermionique, c'est-à-dire faire un « choix volontaire » sur un seul nœud (puis gérer ses répercussions en restant aussi proche que possible de la configuration de départ) au lieu de faire des choix volontaires sur toute une ligne de nœuds. Le progrès attendu (en termes de temps de relaxation) est cependant faible, car, comme b_{max} vaut toujours zéro ou un dans ce modèle fermionique, il est difficile de ne pas s'écarter de la configuration de départ lorsqu'on traite les répercussions à grande distance du choix volontaire. De toute façon, l'algorithme que nous avons employé pour le modèle fermionique a été suffisamment efficace pour l'usage que nous voulions en faire.

Mouvements horizontaux. Comme précédemment, les mouvements verticaux seuls n'assurent pas l'irréductibilité de la cinétique. On fait donc, tous les dix pas, un pas horizontal sur la ligne de nœuds tout en bas du réseau (suivi d'un pas vertical qui régénère toutes les lignes à partir de cette ligne de nœuds, car les changements sur celle-ci ont des répercussions dans tout le réseau). Un tel pas horizontal consiste à déplacer un certain nombre de particules L d'un nœud vers un autre, ou bien un certain nombre de particules R d'un nœud vers un autre, ou bien un certain nombre de paires liées $\overline{\text{LR}}$ d'un nœud au sens large (un vrai nœud ou bien le milieu d'un lien vertical, de coordonnée demi-entière sur la figure de la page 256) vers un autre nœud au sens large. Le choix du nombre de particules L ou R ou $\overline{\text{LR}}$ à déplacer est tel que les différentes configurations c' de la ligne de nœuds tout en bas soient générées avec la même probabilité comme expliqué ci-dessous. Cette probabilité p_{gener} est alors égale au nombre total de configurations de cette ligne de nœuds accessibles à partir de l'ancienne configuration c de cette ligne, et donc pour corriger la non-uniformité de p_{gener} (qui dépend tout de même encore de c), on munit c' du poids de compensation égal à ce nombre total de configurations accessibles ; de même, la configuration de départ c est munie du poids égal au nombre de configurations accessibles depuis c' . La règle de Metropolis est utilisée comme toujours avec les poids du modèle multipliés par les poids de compensation. L'avantage de ce genre de mouvements horizontaux (sur un tirage au sort complet de la ligne de départ par exemple) est que le changement est faible, donc la configuration C' générée après construction de toutes les lignes du réseau n'est pas trop éloignée de la configuration de départ et le taux d'acceptation doit être raisonnable.

Comment faire des mouvements horizontaux uniformes. Soit une ligne contenant trois deux et deux particules. Comme toujours dans notre modèle, les particules sont *indiscernables*, donc il y a trois configurations possibles : (2, 0), (1, 1) et (0, 2). Si l'on fait un mouvement horizontal en tirant uniformément une particule et un nœud d'arrivée et en transférant cette particule de son nœud de départ vers le nœud d'arrivée, la probabilité de passer de (2, 0) à (1, 1) est 1/2 tandis que la probabilité de passer de (1, 1) à (2, 0) est 1/4. Ce tirage n'est donc pas uniforme. Déplacer en bloc toutes les particules d'un nœud de départ vers un nœud d'arrivée n'est pas non plus satisfaisant (pas ergodique). En revanche, une procédure correcte est de tirer uniformément un indice de départ entre 1 et n inclus (où n est le nombre de particules) et un nœud d'arrivée, et de déplacer vers le nœud d'arrivée les particules que l'on choisit comme suit : si l'indice de départ i est inférieur ou égal au nombre de particules dans le premier nœud, on prend i particules dans ce nœud. Sinon, on retranche le nombre de particules

contenues dans le premier nœud à i , et l'on reprend la recherche à partir du deuxième nœud avec l'indice i ainsi diminué. Et ainsi de suite. Dans l'exemple précédent, quand on part de $(2, 0)$ on engendre $(1, 1)$ avec probabilité $1/4$ (cas où l'indice $i = 1$), $(0, 2)$ avec probabilité $1/4$ (cas où l'indice $i = 2$) et $(2, 0)$ avec probabilité $1/2$, tandis que, quand on part de $(1, 1)$, on engendre $(2, 0)$ et $(0, 2)$ avec probabilité $1/4$ chacun (et $(1, 1)$ avec probabilité $1/2$).

L'association des mouvements verticaux et horizontaux est ergodique et chaque mouvement vérifie la condition d'équilibre détaillé donc, comme pour le modèle fermionique, la cinétique résultant de cette association a pour mesure d'équilibre la mesure du modèle bosonique. On vérifie en comparant les résultats de simulation sur de petits réseaux ($L = 2, H = 4, n_L = n_R = 3$ par exemple) que la simulation reproduit bien les résultats exacts obtenus avec la matrice de transfert (écrite et itérée avec un logiciel de calcul formel). En particulier, il s'est avéré utile pour déboguer le programme de mesurer dans la simulation les taux de transitions entre les différentes configurations, ce qui est possible pour de petits systèmes où il y a quelques dizaines de configurations; on doit vérifier dans ce test que les taux de transition sont bien uniformes quand $w = 1$. Enfin, pour des systèmes de taille plus intéressante (par exemple $L = H = 40$ avec de $n_L = n_R = 15$ à 30000 particules), le temps de mélange ou d'équilibrage est tout à fait raisonnable (4.10^6 pas de temps dans l'exemple, ce qui prend quelques minutes sur un ordinateur de bureau de 2006). La figure 14.1 déjà discutée indique l'allure de la relaxation de la simulation Monte Carlo et montre que la configuration initiale perd progressivement son influence sur le système quand la cinétique le fait évoluer.

14.4 D'autres manières de faire les simulations

Les algorithmes détaillés ci-dessus ne sont bien sûr pas les seuls envisageables et l'on peut de toute façon les améliorer. Discutons cependant quelques algorithmes utilisés pour des modèles voisins et justifions pourquoi ceux que nous avons employés nous paraissent les plus adéquats.

14.4.1 Algorithme de Metropolis sur q pour le cas de forces continues.

S. Ostojic et D. Panja ont utilisé des simulations Monte Carlo pour étudier [237, 209] ce que prédit l'approche thermodynamique d'Edwards pour la réponse d'un empilement bidimensionnel régulier (triangulaire) de disques identiques parfaitement lubrifiés. Leur modèle est très similaire au modèle (bosonique) de chaînes de forces étudié dans ce mémoire, la principale différence étant que les forces y sont des grandeurs réelles positives, donc continues, tandis que nous traitons de forces discrétisées (par ailleurs, leurs conditions aux limites sont inverses des nôtres : périodiques dans notre direction haut-bas et ouvertes dans notre direction gauche-droite). Ils observent eux aussi que manipuler directement les intensités des forces est délicat (à cause des répercussions à longue portée d'un changement local), mais que les configurations peuvent être paramétrées avantageusement par un scalaire q qui décrit, pour chaque nœud, la proportion de la pression, reçue par le nœud de la part de ses voisins de gauche, qu'il transmet dans la direction « en haut à droite » par rapport à celle qu'il transmet dans la direction « en bas à droite » (la « propagation » des forces ayant ici lieu de gauche à droite). Toutes les valeurs de l'intervalle $[0, 1]$ sont accessibles au paramètre q d'un nœud donné. La mesure uniforme d'Edwards sur les forces n'est pas une mesure produit ni une mesure uniforme sur les configurations des paramètres q (les paramètres q des différents nœuds sont corrélés), mais en revanche il est possible de changer la valeur d'un paramètre q sur un nœud sans briser l'équilibre des forces, c'est-à-dire sans devoir traiter de répercussions à longue portée. Ils peuvent donc utiliser un algorithme de Metropolis dont les pas élémentaires consistent à changer un q sur un seul nœud; le taux de rejet des pas est calculé en tenant compte de la mesure exacte sur les configurations des q .

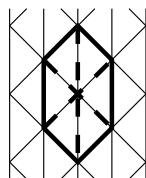
Nous pouvons aussi reformuler les configurations de forces du modèle bosonique en configurations de paramètres q , en utilisant la bijection de [209]. Néanmoins, les paramètres q que

nous obtenons alors ne sont pas continus, mais discrets (ce sont des nombres rationnels compris entre 0 et 1 inclus). Pire, l'ensemble des valeurs accessibles au paramètre q d'un nœud dépend des valeurs des paramètres q de ses voisins ! Par conséquent, modifier la valeur de q sur un nœud a des répercussions à longue portée sur les autres nœuds, et nous n'aurions pas pu utiliser l'algorithme de [209].

14.4.2 Algorithme utilisant des mouvement locaux en « roue de chariot ».

B. Tighe *et al.* ont utilisé un autre algorithme pour le même modèle (empilements bidimensionnels de disques identiques parfaitement lubrifiés, qui forment un réseau triangulaire). Ils souhaitent étudier les prédictions de l'approche d'Edwards (avec une mesure uniforme sans aucun poids statistique sur les configurations à l'équilibre statique) pour la loi de probabilité $p(f)$ des intensités des forces entre grains, et voir en particulier si cette loi est exponentielle à la limite $f \rightarrow +\infty$ (ils concluent que ce n'est le cas qu'à la limite d'un empilement infiniment anisotrope) [239].

Leur algorithme repose sur l'utilisation de mouvements locaux qu'ils appellent « mouvements en roue de chariot » (*wheel moves* en anglais). Considérons les liens en gras sur le réseau ci-dessous :



Les liens en traits gras interrompus sont comme les six rayons d'une roue de chariot, tandis que ceux en traits gras continus forment sa jante. Supposons que la configuration de forces portées par les liens réalise l'équilibre statique de chaque nœud (*i.e.* de chaque grain). Si l'on ajoute une quantité $\Delta f \geq 0$ à toutes les forces portées par les rayons et qu'on la retire à celles portées par les six segments de la jante, la nouvelle configuration obtenue est aussi compatible avec l'équilibre statique de chaque grain (il faut juste s'assurer que $|\Delta f|$ est assez petit pour qu'aucune force ne devienne négative). La simulation Monte Carlo réalisée par B. Tighe *et al.* tire à chaque pas de temps un nœud (qui sera le centre de la roue de chariot), uniformément sur le réseau, et une variation Δf , uniformément parmi les variations assez proches de zéro pour qu'aucune force ne devienne négative lors du mouvement, et effectue le mouvement correspondant. Les conditions aux limites sont toriques donc le système n'a pas de bord. Comme les configurations ne sont pas pondérées, il n'y a en principe jamais besoin de rejeter un mouvement, la mesure d'équilibre étant la mesure uniforme. Pour générer des configurations où la pression (imposée sur les bords) est plus importante dans une direction que dans l'autre, il suffit de choisir une configuration initiale compatible avec ces pressions, l'anisotropie étant ensuite conservée par la cinétique.

Cet algorithme est très élégant et, en principe, très rapide, puisque les mouvements sont simples à programmer et toujours acceptés. Néanmoins il pose plusieurs problèmes. Tout d'abord, comme le remarquent les auteurs, il n'est pas ergodique. Par exemple, si, dans la configuration initiale, toutes les forces obliques sont nulles (ou bien si toutes les forces verticales sont nulles), on ne peut faire aucun mouvement en roue, et le réseau n'évolue pas (alors qu'il y a une infinité de configurations où toutes les forces obliques sont nulles). Ajouter quelques forces obliques (resp. verticales) ne suffit pas non plus, il en faut une certaine densité. Le problème n'est résolu que si l'on choisit, comme B. Tighe *et al.*, de se restreindre aux configurations qui sont dans l'intérieur de l'ensemble des configurations possibles. Quand la simulation part d'une telle configuration, elle n'atteint jamais le bord, et quand elle part du bord, elle est coincée.

Comme B. Tighe *et al.* souhaitent étudier des empilements (réguliers) où un certain nombre de contacts entre grains sont interdits, ils ont généralisé ces mouvements élémentaires

en *multiwheel moves*, où l'on fait, en une seule étape, une combinaison linéaire de mouvements élémentaires en roue de chariots et dont les coefficients sont tels que les forces sur les contacts interdits restent bien nulles (un tel mouvement ne peut en général changer les forces que d'un montant Δf plus restreint que ceux des mouvements élémentaires qui le composent, à cause des nombreuses contraintes à respecter). Il s'agit en fait de chercher un élément dans le noyau d'une matrice de taille $n_0 \times n_l$, où n_0 est le nombre de liens qui ne peuvent pas porter de force et n_l le nombre total de liens (d'ordre LH). Ce type de mouvements est efficace mais, comme ils l'indiquent, nécessite un équilibrage long car les mouvements composites ne changent les forces que d'un petit montant et concernent des parties du réseau beaucoup plus grandes qu'un mouvement élémentaire (par ailleurs, l'ensemble des configurations accessibles a des « coins » moins accessibles que pour un réseau où tous les contacts sont possibles, donc le mélange dans cet ensemble est intrinsèquement plus lent). Nous ajoutons que cet algorithme à mouvements composites suppose une programmation relativement complexe (donc un risque d'erreur substantiel).

Ensuite, il ne nous paraît pas clair que cet algorithme satisfait à la condition d'équilibre détaillé (en tout cas, ce n'est pas montré dans [239]). En effet, le nombre de configurations que l'on peut générer à partir d'une configuration \mathcal{C} donnée dépend du nombre de choix pour le centre de la roue (qui est indépendant de \mathcal{C}), mais aussi de l'intervalle où l'on peut choisir Δf . Or cet intervalle dépend de la roue choisie et de \mathcal{C} , donc les probabilités de génération des nouvelles configurations ne sont pas uniformes, et la condition d'équilibre détaillé nous semble violée. Le fait que les variables soient continues ne change rien au problème : pour des variables continues il faut raisonner en termes de densité de probabilité, et les densités ne sont pas uniformes. Ou bien, si l'on remarque que les nombres manipulés par l'ordinateur sont *in fine* discrets (même pour des nombres à virgule flottante), on retrouve le même problème. Néanmoins, B. Tighe *et al.* ont pris soin de comparer les résultats obtenus numériquement pour certaines observables sur un réseau de taille 3×3 avec les résultats exacts, et ils concluent à un bon accord. Il est possible que la violation de la condition d'équilibre détaillé ait lieu de telle sorte que la mesure d'équilibre soit une bonne approximation de la mesure uniforme (au moins pour les observables étudiés) : comme le nombre de configurations est gigantesque, les variables étant continues, la simulation Monte Carlo ne passe quasiment jamais deux fois par la même configuration dans le temps (forcément petit devant le nombre gigantesque de configurations) qui lui est alloué, donc la non uniformité de sa mesure d'équilibre est inférieure aux barres d'erreur.

En ce qui concerne nos modèles, le problème de l'ergodicité se pose de façon encore plus cruciale du fait du caractère discret des forces : en ce cas, les configurations qui sont sur « le bord » de leur ensemble représentent (pour un système de taille finie) une proportion significative de toutes les configurations, notamment dans les cas où le poids statistique w est petit ou grand par rapport à un. Par exemple, pour le modèle bosonique dans le cas où chaque lien porte une force inférieure ou égale à un, les seuls mouvements en roue de chariot possibles sont ceux pour lesquels la roue a des forces sur la jante mais pas sur les rayons, ou l'inverse. On peut construire de nombreux exemples où aucun de ces mouvements n'est possible, et il est probable que les superpositions linéaires acceptables de mouvements élémentaires soient très peu nombreuses (puisque, dans le modèle à forces continues, la plupart de ces superpositions ont des variations de force Δf petites et sont ici inutilisables, Δf devant être un entier non nul). Donc utiliser les mouvements en roue de chariot pour simuler nos modèles ne semble pas adéquat.

14.4.3 Algorithme utilisant la diffusion de défauts.

Un travail d'il y a déjà quinze ans, dû à M. Oxborrow et C. Henley, étudiait les pavages aléatoires carrés-triangles (que nous avons longuement vus au chapitre 12) à l'aide de simulations Monte Carlo [313]. Ici encore, le modèle étudié est proche des nôtres, puisque l'on peut faire une bijection entre notre modèle (fermionique) d'empilements et le modèle des pavages

carrés-triangles.

Leur simulation Monte Carlo procède comme suit : une configuration initiale est générée à l'aide d'une règle d'inflation, qui, alternativement, dilate la configuration obtenue et en subdivise les triangles et carrés en triangles et carrés plus petits ; on part d'un carré initial et l'on applique la règle d'inflation jusqu'à ce que la configuration obtenue ait le nombre de faces élémentaires (carrés et triangles équilatéraux) voulu. Ensuite, elle introduit deux défauts dans le pavage : un carré et un triangle accolés sont transformés en un triangle et deux losanges munis d'une orientation. Ces losanges orientés (les défauts) diffusent suivant trois règles, qui s'appliquent en fonction de l'environnement du défaut, et avec des choix stochastiques quand plusieurs règles sont applicables (ce qui arrive). Enfin, quand les losanges se retrouvent accolés au-dessus d'un triangle équilatéral, on peut les fusionner de nouveau et reformer un carré et un triangle accolés, avant, éventuellement, de recommencer un cycle création-diffusion-destruction. Les règles de diffusion des défauts conservent les nombres de triangles et de carrés.

Cet algorithme est lui aussi très élégant, mais difficile à étudier : M. Oxborrow et C. Henley ne donnent pas de preuve de son ergodicité. Ils indiquent simplement qu'il existe une bijection entre les pavages et les configurations de parois de domaines sur réseaux hexagonaux (avec jonctions à 120°) étudiées par Coppersmith *et al.* [316], et ces derniers ont montré que les mouvements de « respiration » des cellules hexagonales, dans lesquels un domaine croît (resp. décroît) au détriment (resp. au profit) de ses voisins, sont ergodiques et satisfont à la condition d'équilibre détaillé. Mais cet argument est insuffisant, et nous pensons que l'algorithme n'est en particulier pas ergodique quand, dans une configuration (un pavage), tous les carrés sont loin les uns des autres. En effet, dans ce cas aucune des règles de mouvement des défauts ne peut être appliquée et l'algorithme est bloqué ! Par ailleurs, on ne sait pas si ce type de mouvements satisfait à la condition d'équilibre détaillé.

Nous aurions pu essayer de construire un algorithme fondé sur la même idée : choix d'un lien ou d'un nœud, brisure d'une contrainte et création de deux défauts à cet endroit qui diffusent ensuite (par exemple, on peut couper la trajectoire d'une particule L ou R et faire diffuser les deux bouts des demi-trajectoires ainsi obtenues), terminaison quand les défauts se retrouvent. Mais tout porte à croire que nous aurions aussi eu des difficultés au moins à satisfaire à la condition d'équilibre détaillé (ou à prouver qu'elle est satisfaite).

14.4.4 Algorithme fondé sur la « respiration » de cellules hexagonales.

Le travail [316] que citent M. Oxborrow et C. Henley étudie des configurations de domaines hexagonaux sur un réseau hexagonal (où chaque domaine hexagonal a six côtés de longueur non nulle). Une configuration est un pavage du plan à l'aide d'hexagones éventuellement irréguliers, mais dont les côtés sont toujours parallèles à trois directions à 120° fixées à l'une de l'autre, et de longueurs multiples toujours non nuls d'une longueur élémentaire (le pas du réseau sous-jacent).

L'algorithme employé choisit à chaque pas de temps un hexagone (un domaine) au hasard et lui fait subir une homothétie (dilatation ou contraction) autour de son centre, d'un rapport — tiré au sort uniformément — tel qu'aucun hexagone (ni celui qui a été choisi ni ses voisins) ne soit aplati. Même si l'hexagone qui « respire » ainsi garde ses proportions, ce n'est pas le cas de ses voisins et la combinaison des mouvements déforme rapidement un pavage régulier un pavage irrégulier.

On conçoit que cet algorithme est ergodique. S. Coppersmith *et al.* ajoutent que « l'on vérifie aisément que [cette] procédure satisfait à la condition d'équilibre détaillé » (sans donner la preuve) ; nous laissons le lecteur juger si cette preuve est effectivement facile à trouver.

Nous pourrions aussi essayer d'utiliser ce type de mouvements. La différence entre les configurations du modèle fermionique et ces configurations d'hexagones tient à la topologie des hexagones : dans le modèle fermionique, les domaines délimités par les trajectoires de particules L, R et \overline{LR} peuvent être des parallélogrammes (des hexagones dégénérés). Mais il

devrait être possible d'adapter l'algorithme pour en tenir compte. Ensuite, pour le modèle bosonique nous pourrions utiliser la décomposition d'une configuration bosonique en superposition de configurations fermioniques : on extrait une configuration fermionique, on la fait évoluer par respiration d'un domaine, puis on la resuperpose. Une manière de s'assurer que la condition d'équilibre détaillé est vérifiée serait d'utiliser le schéma de repondération vu plus haut : en particulier, il est difficile de savoir *a priori* combien il y a de façons d'extraire une configuration fermionique d'une configuration bosonique (et ce nombre dépend probablement de la configuration bosonique, d'où une mesure d'équilibre non uniforme si la simulation Monte Carlo est écrite de façon naïve), mais l'on peut noter à chaque choix lors de cette extraction l'inverse de la probabilité de faire le choix et appliquer à la fin la règle de Metropolis avec le poids supplémentaire égal au produit de ces inverses.

Chapitre 15

Résultats physiques

VOYONS enfin quels enseignements pour la physique des milieux granulaires nous pouvons tirer des modèles introduits ci-dessus. Rappelons tout d'abord quel(s) empilement(s) nous pouvons espérer modéliser ainsi, selon ce qui a été discuté au paragraphe 13.1.1 : étant donné sa géométrie (réseau triangulaire (plan) régulier), le modèle des chaînes de forces devrait en premier lieu être comparé avec un empilement régulier de disques monodisperses (ou de cylindres monodisperses, comme des pailles à boisson ou des troncs d'arbres identiques, en supposant l'invariance par translation longitudinale) et parfaitement lubrifiés (les forces de contact sont toujours dirigées d'un nœud du réseau vers un autre, ou autrement dit sont normales à la surface des grains). Comme nous l'avons argumenté au paragraphe 13.1.1, il n'est pas exclu qu'il puisse modéliser des empilements aléatoires si certaines quantités sont universelles ou robustes (la distribution des intensités des forces entre grains semble robuste) : S. Ostojic *et al.* ont montré que les exposants critiques de la transition de percolation des réseaux de forces avec contraintes d'équilibre statique de chaque grain sont les mêmes pour de nombreux cas (avec ou sans frottements en particulier) [173, 174]. Nous nous restreignons cependant dans la suite au cas d'un empilement régulier par simplicité et, comme le fait remarquer S. Edwards [225], même un cas simple est riche d'enseignements : “We emphasize that although real granular materials have many features ignored within the proposed framework it is essential for making progress to *derive* equations of stress transmission for the simplest model, as opposed to guessing and postulating.”¹

Rappelons aussi que, même si l'empilement est régulier et les grains identiques, il reste encore beaucoup de degrés de liberté, que l'on peut attribuer à des mouvements microscopiques des grains autour de leur position idéale. Sous l'effet de déplacements même microscopiques des grains, d'une part des contacts entre grains peuvent être ouverts ou fermés (force transmise nulle ou finie), d'autre part les forces entre grains peuvent fluctuer largement. Clairement, notre modèle ne prend pas directement en compte le désordre de contacts (*i.e.* les configurations de contacts ouverts et fermés) : sur chaque sommet du réseau triangulaire, les forces peuvent toujours être transmises dans six directions, alors que dans la pratique la géométrie le plus souvent désordonnée des empilements impose un nombre de coordination strictement inférieur à cette limite théorique. En particulier, on sait qu'un empilement bidimensionnel de disques *polydisperses* et sans frottements soumis à une contrainte suffisamment faible est isostatique, *i.e.* a un nombre de coordination moyen de quatre [199, 200]. Pour bien comprendre ce phénomène, prenons le cas d'un empilement bidimensionnel de disques identiques sans frottements. Mathématiquement, dans un tel empilement, $z = 6$ puisque chaque disque est entouré de six disques dont les centres forment un hexagone régulier, mais on se convainc facilement qu'en pratique, pour des contraintes suffisamment faibles, chaque disque n'a de contacts qu'avec quatre de ses six voisins (deux contacts possibles sont donc ouverts). En effet, la situation où un disque a cinq ou six contacts est géométriquement instable vis-à-vis d'une dispersion infime des tailles de disques, ou vis-à-vis d'une fluctuation infime des forces qu'il subit de la part de ses voisins, de même que les quatre pieds d'une table ou d'une chaise vides reposent rarement tout en même temps sur le sol. La seule configuration stable est celle où les contacts forment

¹« Nous insistons que le fait que, bien que beaucoup de propriétés des matériaux granulaires réels soient ignorées dans l'approche que nous proposons, il est essentiel pour progresser de *déduire* les équations de transmission des contraintes pour le modèle le plus simple, plutôt que de les deviner ou de les postuler. »

un X autour du disque (et pas une patte d'oie par exemple). Un tel empilement réagit à un accroissement modéré de contrainte en déformant son réseau de contacts tout en maintenant une coordination moyenne de quatre. Cependant, si les contraintes deviennent trop importantes pour la rigidité des disques, ceux-ci peuvent se déformer (de façon anisotrope) et nouer davantage de contacts avec leurs voisins (penser à un empilement de guimauves ou de balles de mousse que l'on comprimerait), de même que les quatre pieds d'une chaise en plastique et/ou métal (légèrement déformable) finissent par toucher le sol quand elle est suffisamment chargée. Dans ce cas, pour peu que le réseau de contacts ne soit pas trop éloigné d'un réseau régulier, notre modèle devient pertinent : le tout est de savoir qui, de la polydispersité et de la déformation, l'emporte (plus une chaise est bancale, plus il faut être lourd pour que ses quatre pieds touchent terre quand on s'assoit dessus). À la limite d'une contrainte, donc d'une déformation, faibles, on s'attend à retrouver une coordination moyenne de quatre ; or nous allons justement voir surgir cette coordination quatre dans le régime où les quanta de forces sont peu nombreux (mais ce régime est *a priori* peu physique car les intensités des forces y sont discrètes).

Une dernière précision : dans tous les cas, le poids des grains est pris nul ; cela correspond à un empilement en apesanteur, ou sur un plan horizontal. On peut aussi penser que cela correspond à un empilement où toutes les contraintes sauf un ensemble de mesure de probabilité nulle sont nettement plus grandes que le poids d'un grain, mais cette situation ne semble pas se produire en pratique : la distribution des intensités des forces a expérimentalement une densité non nulle en zéro (paragraphe 11.1).

15.1 Lois de probabilité de l'intensité des forces

Un premier régime intéressant est celui où l'on fait tendre les nombres n_L et n_R de particules L et R présentes sur chaque ligne ² de longueur L vers l'infini *avant* de passer à la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$. Nous allons voir qu'il prédit des distributions de probabilité réalistes pour les intensités des forces entre grains.

En principe nous devrions aussi passer à la limite de hauteur du réseau $H \rightarrow +\infty$ (c'est-à-dire approximer la fonction de partition par la puissance H^e du plus grand module λ_0 de valeur propre de la matrice de transfert) seulement après avoir pris n_L et n_R infinis, mais cela peut s'avérer plus difficile car il faut alors étudier le comportement de λ_1/λ_0 pour n_L et n_R grands (où λ_1 est, rappelons-le, le deuxième plus grand module de valeur propre de la matrice de transfert, distinct de λ_0 — il y a souvent plusieurs valeurs propres de module λ_0). Nous considérons que chaque particule L ou R représente un quantum de force et que ce quantum est inversement proportionnel à n_L et n_R de sorte que la force totale exercée sur l'empilement (par l'extérieur) est finie. Cette limite $n_L, n_R \rightarrow +\infty$ permet de retrouver le cas de forces à intensités continues, comme dans un vrai empilement : un contact peut en principe porter n'importe quelle force dans l'intervalle réel borné par 0 et par la force totale exercée sur l'empilement.

Dans ce régime, un examen des configurations typiques du modèle (quelques-unes sont visibles fig. 15.1) montre qu'un grain subit quasiment toujours six forces non nulles (on aurait pu imaginer que la probabilité qu'une force soit nulle soit finie) : par exemple, pour $w = 1.00150$ et $n_L = n_R = 30000$ particules sur un réseau de $L = 30$ nœuds par ligne et $H = 40$ lignes, la probabilité — invariante par rotation d'angle 60° — qu'un contact ne porte pas de force est de l'ordre de 0,1 %, tandis que le nombre moyen de particules d'un type donné sur chaque lien est 1000 (nous allons voir ci-dessous qu'en revanche la *densité* de probabilité des forces en 0 est finie, comme dans les vrais milieux granulaires). De nombreuses configurations de forces sont possibles ; le système est fortement hyperstatique. Notre modèle peut correspondre à des grains suffisamment élastiques, voire plastiques, pour que leurs déformations assurent toujours la présence de six contacts : quand un grain est fortement comprimé dans une direction, il

²Ces nombres sont conservés d'une ligne à l'autre comme on l'a vu.

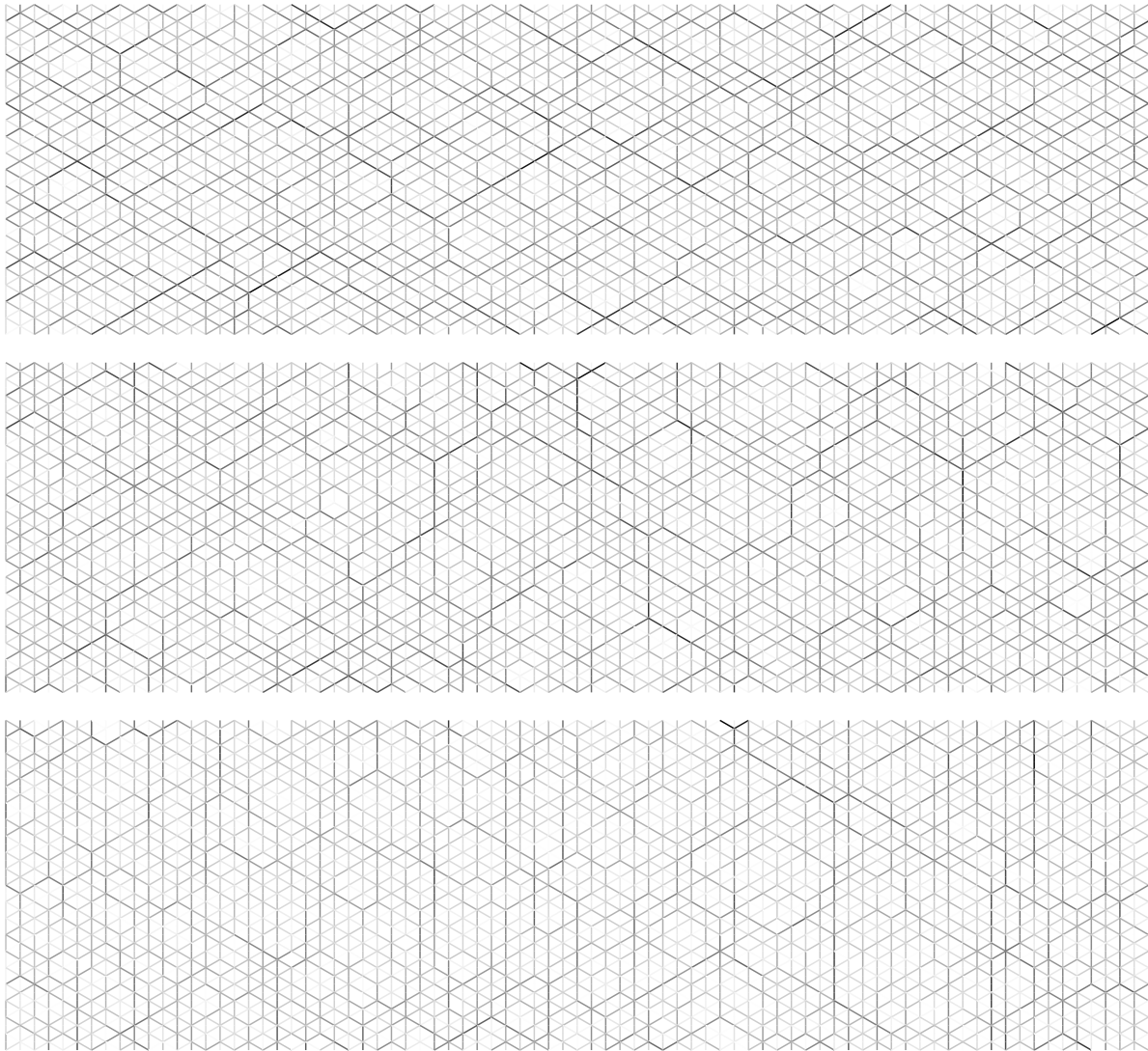


FIG. 15.1 – Trois configurations typiques du modèle de chaînes de forces dans le régime de forces continues. Le niveau de gris de chaque lien est proportionnel au nombre de quanta de forces qu'il véhicule (blanc \leftrightarrow force nulle). Dans chacun des cas, le réseau a $L = 40$ nœuds par ligne, $H = 40$ lignes, se referme sur lui-même dans la direction horizontale et a des bords supérieur et inférieur libres (conditions aux bords cylindriques). Sur chaque ligne du réseau sont présentes $n_L = 10000$ particules L et $n_R = 10000$ particules R. Les trois configurations sont des représentants tirés au sort uniformément (à l'aide d'une simulation Monte Carlo) parmi les ensembles statistiques ayant les valeurs respectives du poids w des liens verticaux, de haut en bas, $w = 1$, $w = 1,006016594$ et $w = 1,012$. La valeur de w pour la configuration du centre est celle qui assure l'isotropie, au sens où un tiers du nombre total de quanta de forces présents sur les liens sont sur les liens verticaux (et donc aussi un tiers sur les liens obliques gauches et un tiers sur les liens obliques droits, par invariance gauche-droite). Dans la configuration en haut, les contraintes sont plutôt dirigées « horizontalement » (la pression que ressentirait une planche, de longueur égale à plusieurs diamètres de grains, insérée dans l'empilement en position verticale est supérieure à celle que ressentirait une planche insérée en position horizontale ; seulement 26 % des quanta de forces sont sur un lien vertical) et dans celle en bas elles sont plutôt dirigées « verticalement » (situation inverse ; 40 % des quanta de forces sont sur un lien vertical).

se détend dans l'autre (ce peut être une conséquence de la conservation du volume), ce qui l'amène à nouer des contacts dans cette direction.

Comme nous l'avons vu, le poids statistique w permet de sélectionner des configurations ayant une certaine anisotropie (il favorise, ou défavorise, la formation de paires liées \overline{LR} au détriment du simple croisement des particules L et R). Plus précisément, w permet de contrôler le nombre moyen de quanta de forces sur les liens verticaux (c'est-à-dire le nombre de \overline{LR}). Bien entendu, comme le poids des particules est pris nul, la notion de verticalité n'a pas de sens ici, donc il faut comprendre « liens verticaux » comme « liens dans une direction arbitraire mais fixe ». Sur la figure 15.1), la configuration en haut possède un premier type d'anisotropie où deux directions portent des contraintes fortes et la troisième des contraintes faibles (en moyenne), et la situation en bas a une « direction forte » et deux « directions faibles ». Écrivons la fonction de partition comme une somme sur les configurations \mathcal{C} sur réseau de taille $L \times H$ de particules L et R qui vérifient les lois de conservation à chaque vertex (c'est-à-dire comme une somme sur les configurations de forces sur les liens qui vérifient la règle de l'équilibre statique de chaque nœud), en notant $v(\mathcal{C})$ le nombre de \overline{LR} :

$$Z(L, H, n_L, n_R, w) = \sum_{\mathcal{C}} w^{v(\mathcal{C})} = \sum_v \mathcal{N}(v) w^v = \sum_v e^{S(v) + v \ln(w)}. \quad (15.1)$$

Dans l'expression ci-dessus, nous avons regroupé les configurations qui partagent la même valeur de v (il y en a $\mathcal{N}(v) = \exp[S(v)]$). S est une entropie. Si l'on admet qu'à la limite thermodynamique la somme discrète peut en quelque manière être transformée en intégrale sur un v continu et que l'on peut donc écrire une équation de point col, le lien entre w et la moyenne $\langle v \rangle$ de v s'écrit

$$\langle v \rangle = \frac{d \ln Z}{d \ln w}. \quad (15.2)$$

Clairement, Z et $\langle v \rangle$ sont des fonctions croissantes de w en tant que polynômes de w à coefficients positifs.

On peut considérer que les configurations sont « isotropes » (mais c'est un abus de langage que nous efforcerons d'éviter dans la suite, préférant parler d'invariance sous certaines rotations, pour un nombre fini d'angles) quand la valeur de $\langle v \rangle$ que l'on mesure ou calcule est la même que celle que l'on trouverait si l'on tournait le réseau d'un tiers de tour ($2\pi/3$), c'est-à-dire quand elle représente un tiers de tous les quanta de forces présents sur le réseau. L'« isotropie » requiert déjà que $n_L = n_R =: n$. Dans ce cas, le nombre total de quanta de force obliques gauches est $Hn - v$ (chaque particule L qui n'est pas engagée dans une \overline{LR} constitue un quantum de force sur un lien oblique gauche), le nombre total de quanta de force obliques droites est $Hn - v$, le nombre total de quanta de force verticaux est v (mais ils forment seulement $v/2$ liens verticaux car notre paramétrage du réseau triangulaire en lignes paires et impaires découpe chaque lien vertical en deux demi-liens et une paire \overline{LR} qui parcourt un lien contribue de deux unités à v) donc la condition d'isotropie s'écrit $v/2 = 2Hn - 5v/2$ ou encore $v = 2Hn/3$ (voir aussi la discussion du paragraphe 13.4.2). Elle n'est pas remplie quand $w = 1$, mais pour une valeur strictement supérieure (par exemple $w \approx 1,006$ si $n_L = n_R = 10000$, $L = 40$ et $H = 40$ — cf. fig. 15.1). Nous avons vu à la section 13.4 comment il est possible de calculer exactement cette valeur à la limite thermodynamique grâce à l'*Ansatz* de Bethe. Pour rendre plausible, à défaut de prouver, que $w = 1$ ne réalise pas l'anisotropie, argumentons que la valeur médiane de v/H est strictement inférieure à celle du nombre de quanta de force sur un lien oblique (notons cette dernière variable aléatoire o). La probabilité que o sur le lien oblique gauche qui arrive (d'en bas) sur un nœud soit supérieure à la médiane m de o est par définition $1/2$. De même pour le lien oblique droit qui arrive d'en bas sur le même nœud. Mais la probabilité que les *deux* variables soient *en même temps* supérieures à leur médiane m , ce qui est nécessaire pour que v sur le lien vertical qui part du nœud vers le haut soit supérieur à m quand aucune \overline{LR} n'arrive d'en bas sur le nœud, n'est que d'un quart si l'on considère (c'est une approximation) ces deux variables comme décorréées, si bien que la médiane de v est vraisemblablement plus faible que celle de o .

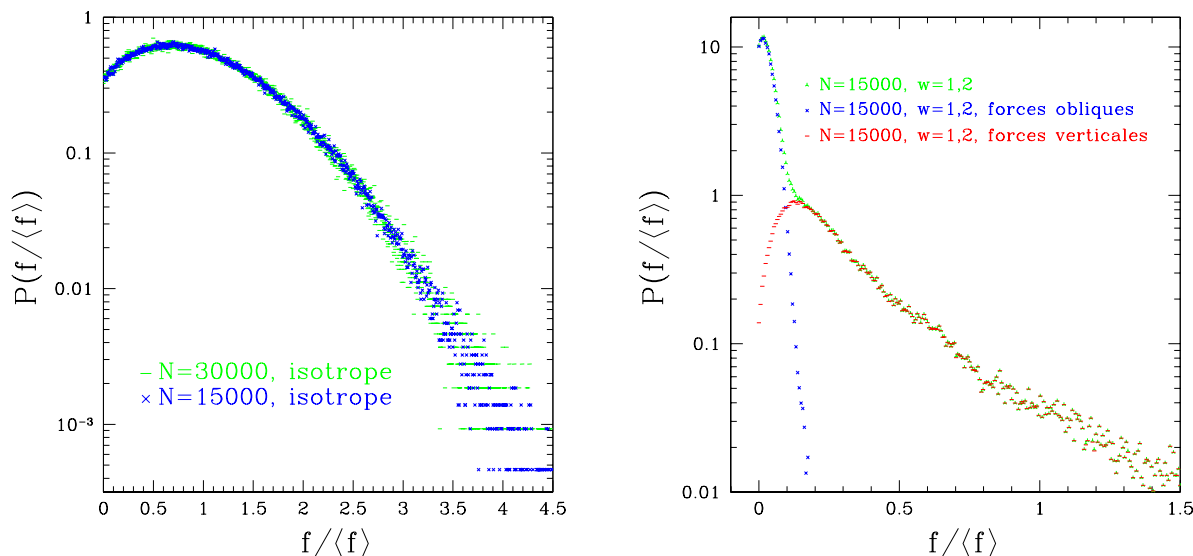


FIG. 15.2 – Estimations des densités de probabilité des intensités des forces à la limite des forces continues $n_L = n_R \gg L$ à l'aide des simulations Monte Carlo. **À gauche** : Cas isotrope. Nous traçons la densité de probabilité de la force moyenne par lien $f/\langle f \rangle$ sur un réseau de taille $L = 30$, $H = 40$ pour $n = 30000$ et $n = 15000$ particules avec les valeurs de w respectives qui assurent l'invariance par rotation de 60° , 1,001498873 et 1,002995484 (donc $\langle f \rangle$ vaut respectivement 30000/90 et 15000/90 car les $n_L = n$ particules L et les $n_R = n$ particules R se répartissent sur les $3L$ liens de chaque ligne du réseau). Les deux distributions sont confondues, ce qui prouve l'existence d'une limite « des forces » continues $n/L \rightarrow +\infty$. La distribution présente les caractéristiques attendues : une queue large non exponentielle [239], un maximum et une probabilité non nulle d'observer une force f nulle. Les distributions des forces verticales et obliques sont identiques à la distribution tracée ici (celle de toutes les forces sans distinction). **À droite** : Cas où l'invariance par rotation d'angle 60° est brisée (réseau de taille $L = 30$, $H = 40$ avec $n = 15000$ particules de chaque type et $w = 1, 2$). Les distributions des intensités des forces obliques, d'une part, verticales, d'autre part, ont la même forme qualitative que dans le cas « isotrope », avec des valeurs moyennes non égales, mais la distribution des intensités des forces sans distinction de direction a une forme différente car c'est la composée des deux distributions précédentes. Remarquer qu'ici la queue de distribution est quasi exponentielle car la situation est très isotrope, comme dans [239].

La figure 15.1 montre qualitativement l'effet de w sur les configurations et discute les deux types d'anisotropie possibles. Expérimentalement, de telles configurations anisotropes pourraient être observées dans un dispositif où l'on peut contrôler les pressions exercées sur un empilement régulier suivant deux directions. Par ailleurs, conjointement avec un choix judicieux du rapport de n_L à n_R , w peut permettre d'étudier les situations anisotropes dues au cisaillement (fig. 11.1).

Voyons maintenant l'allure des distributions de probabilité des intensités des forces. La figure 15.2 à gauche montre une estimation, fondée sur nos simulations Monte Carlo, de cette distribution dans le cas « isotrope » (invariant sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$) pour $n_L = n_R$ grand. Comme cette invariance requiert que la densité de particules par ligne $n_L/L = n_R/L$ prenne une valeur irrationnelle ($\sqrt{3}$ d'après les résultats de la section 13.4), toute simulation sur un réseau de taille finie, pour laquelle la densité est bien sûr rationnelle, sera légèrement fautive. Pour essayer de minimiser les effets de taille finie nous choisirons dans toute la suite des tailles de réseau L qui apparaissent en tant que dénominateur ou soient un multiple simple d'un dénominateur qui apparaît dans la suite des approximations de $\sqrt{3}$ (ou de $(3 - \sqrt{3})/2$ pour le modèle fermionique d'empilements) obtenues par troncature de son développement en

fraction continue : $19/11$, $26/15$, $71/41$, $97/56$, $265/153$, *etc.* (ou, pour le modèle fermionique, $7/11$, $19/30$, $26/41$, $71/112$, *etc.*). Nous constatons d'une part que la distribution de probabilité semble avoir une limite bien définie quand $n_L = n_R \rightarrow +\infty$, car les résultats pour $n_L = n_R = 30000$ et $n_L = n_R = 15000$ ne sont pas notablement différents. D'autre part, cette distribution est en bon accord qualitatif avec les distributions obtenues dans la littérature à partir de modèles supposant une mesure plate sur les configurations [235, 236, 182, 238, 239], elles-mêmes en accord qualitatif avec les distributions expérimentales. En particulier, la distribution a une queue large, un maximum autour de la force moyenne et une valeur non nulle de la probabilité qu'une force soit nulle. La figure 15.2 à droite montre que le modèle peut reproduire, si l'on change w , ce qui se passe lorsque l'empilement est comprimé de façon anisotrope : les forces dans les directions obliques et verticales ont chacune une distribution de même allure que la distribution isotrope, mais comme les forces moyennes de ces distributions ne coïncident pas, la distribution totale des forces (quelle que soit leur orientation) a une allure différente, « à deux bosses ». Ceci est connu, et le fait que nous retrouvions ce phénomène constitue un test positif pour notre approche.

15.2 La transition de *jamming*

15.2.1 Distribution de probabilité des intensités des forces

D'après la phénoménologie du *jamming*, quand on diminue la pression exercée sur l'empilement, la force moyenne et le maximum de $P(f)$ se décalent vers l'axe $f = 0$, qu'ils atteignent à la limite de la stabilité de l'empilement. Dans notre modèle, diminuer la contrainte ne peut se faire qu'en diminuant le nombre moyen de particules L et R par site du réseau, et nous risquons de sortir du régime où ce nombre moyen est suffisamment grand pour que le modèle soit une bonne approximation d'un système réel à forces continues. Voyons tout de même ce qui se passe. La figure 15.3 montre, à gauche, l'allure de la densité de probabilité pour des petites valeurs de la densité de particules par vertex n/L (et dans le cas invariant par rotations d'angles 60°). Bien entendu, pour les petites valeurs de n/L , la distribution est discrète. Mais on observe malgré tout une transition entre une situation où la dérivée $P'(0)$ de la densité de probabilité de l'intensité des forces f est strictement négative à une situation où $P'(0) > 0$ avec existence d'un maximum qui se décale progressivement vers les grandes valeurs de f , comme pour la transition de *jamming* — comparer avec la figure 11.2 de la section 11.1. Or le cas limite a l'air de se produire en la valeur de n/L qui correspond à la symétrie gauche-droite des courbes limites des EAB, $n/L = \sqrt{3}$. Est-ce une coïncidence ? Nous allons voir que non.

15.2.2 Nombre de coordination

Définissons le nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ d'une configuration du modèle de chaînes de forces de la manière suivante : pour chaque vertex entouré d'au moins trois liens qui portent des forces non nulles, nous comptons ce nombre de liens, et nous divisons le total du nombre de liens ainsi trouvé par le nombre de vertex considérés. Autrement dit, nous laissons de côté les vertex sans force et les vertex où toutes les forces se propagent en ligne droite (*i.e.* où il n'y a que deux liens, forcément diamétralement opposés, qui portent des forces). On peut interpréter cette manière de compter comme une approche où, dans les configurations du modèle, les vertex à trois « liens non nuls » et plus représentent les centres de grains de tailles et de formes variables, tandis que les vertex à deux « liens non nuls » ne correspondent pas à des grains mais assurent simplement la propagation des forces (ils sont à l'intérieur des grains, entre deux centres de grains). Quoi qu'il en soit, ce comptage est motivé par le fait que, si un vertex possède seulement deux « liens non nuls », une des deux équations d'équilibre statique pour ce vertex est trivialement vérifiée ($0 = 0$) et ce vertex ne contribue pas à l'hyperstaticité de l'empilement. Seuls comptent les vertex à trois « liens non nuls » et plus pour l'hyperstaticité. Les valeurs de $\langle z \rangle$, nombre de coordination des vertex à trois « liens non nuls » et plus,

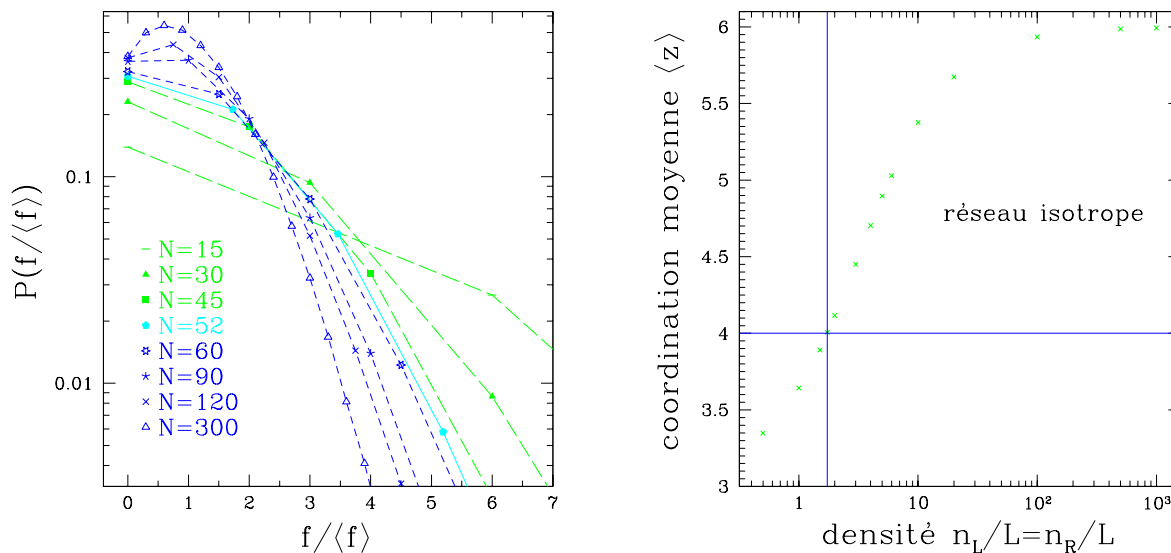


FIG. 15.3 – Le phénomène de *jamming* dans le modèle de chaînes de forces. **À gauche** : Densités de probabilité (estimées par simulations Monte Carlo) pour l'intensité des forces f , rapportée au nombre moyen de particules L et R par sommet du réseau, sur un réseau de taille $L = 30$ et $H = 40$ pour les nombres de particules indiqués sur la figure (15 à 300). Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. Les distributions sont discrètes et les lignes servent uniquement de guide pour l'œil. On constate que, quand n augmente, la distribution développe un maximum local. La densité $n/L = \sqrt{3}$ de particules pour laquelle est le mieux approximée par $n = 52$. **À droite** : Données obtenues par simulation Monte Carlo pour le modèle bosonique de chaînes de forces sur un système de largeur $L = 30$ et de hauteur $H = 40$ dans la situation d'invariance par rotation de 60° . En ordonnées est porté le nombre de coordination z moyen des grains qui ont trois voisins ou plus; en abscisses la densité $\rho = n_L/L = n_R/R$ de particules L et R par ligne. Les barres d'erreur sont plus petites que les symboles. Si $z < 4$, l'empilement est isostatique mais instable. Pour $z > 4$, l'empilement est hyperstatique. Pour $z = 4$, l'empilement est isostatique à la limite de la stabilité, c'est-à-dire au point de la transition de *jamming*. On constate que le point où $z = 4$ (indiqué par la ligne horizontale) coïncide parfaitement avec le point de symétrie maximale du modèle, atteint en $\rho = \sqrt{3}$ (ligne verticale du modèle) : on y trouve $4 = 4,006 \pm 0,003$ (ce qui est en principe incompatible avec la valeur théorique 4, mais cette valeur numérique est obtenue pour un système de taille finie où ρ est rationnel et ne peut valoir exactement $\sqrt{3}$; il est très vraisemblable que l'accord serait meilleur pour un système plus grand).

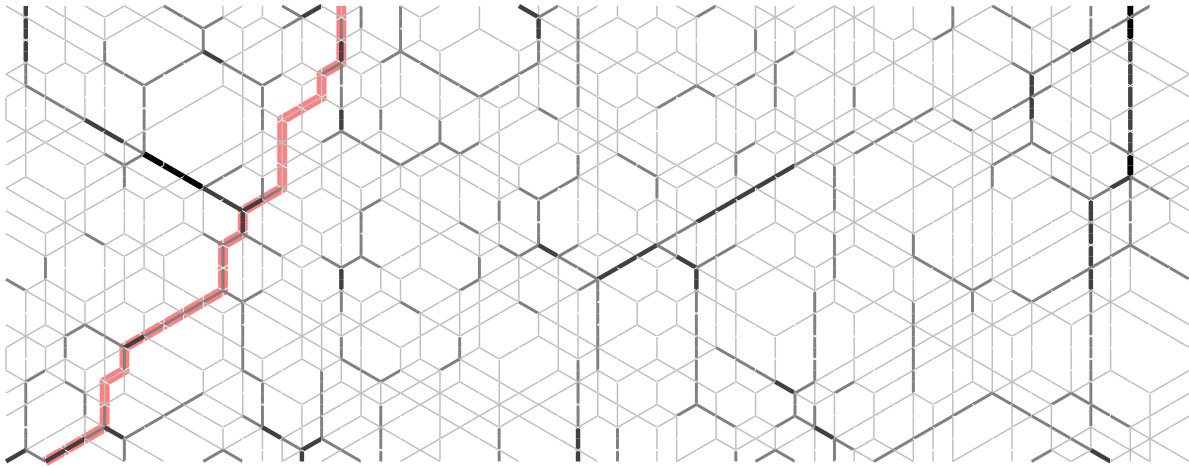


FIG. 15.4 – Une configuration typique, obtenue par simulation Monte Carlo, du modèle (bosonique) de chaînes de forces au seuil du *jamming* : $L = 30$, $n_L = n_R = 52$, $H = 40$ et $w = 1,474066142$. Pour ces valeurs des paramètres, on observe seulement cinq intensités de forces possibles (de zéro à quatre particules). Les intensités sont traduites ici, exceptionnellement, par l'épaisseur du trait en sus du niveau de gris (blanc, trait fin \leftrightarrow force nulle). La trajectoire représentée en traits très épais est un exemple de trajectoire de marche aléatoire dirigée avec choix des virages selon l'intensité des forces qui pourrait servir à définir, par la distribution de probabilité des longueurs de ses segments verticaux et obliques, une taille typique de cellules hexagonales dans les configurations bosoniques (voir texte plus loin).

moyenné sur les vertex et sur les configurations à invariance par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ qui partagent la même densité de particules $n_L/L = n_R/L$, sont tracées figure 15.3 à droite en fonction de la densité n/L . Il s'agit d'estimations par simulation Monte Carlo. On constate que $\langle z \rangle$ est strictement inférieur à quatre si n/L est strictement inférieur à la valeur $\sqrt{3}$ pour laquelle les courbes limites des solutions de EAB se touchent en position symétrique. Cela signifie que, pour ces valeurs de n/L , les empilements qui correspondent aux configurations du modèle sont instables : il y a en moyenne plus d'équations (deux par grain/vertex à au moins trois « liens non nuls ») que d'inconnues ($\langle z \rangle/2$ par grain/vertex) dans le système linéaire qui traduit l'équilibre statique de tous les grains. La valeur quatre de $\langle z \rangle$ est atteinte exactement quand $n/L = \sqrt{3}$ (comme discuté dans la légende de la figure, le terme « exactement » a l'air faux si l'on s'en tient au résultat $\langle z \rangle = 4,006 \pm 0,003$, mais il faut se rappeler qu'il y a des effets de taille finie, notamment sur n/L qui est forcément rationnel et approxime mal $\sqrt{3}$ — que $\langle z \rangle$ atteigne quatre en un point voisin de $n/L = \sqrt{3}$ mais strictement différent serait incompréhensible étant donné le rôle particulier que la valeur $\sqrt{3}$ joue). Les configurations correspondent donc à des empilements isostatiques : il y a deux équations et deux inconnues par grain/vertex à au moins trois « liens non nuls ». Enfin, si $n/L > \sqrt{3}$, le système devient hyperstatique : $\langle z \rangle$ est strictement supérieur à quatre et atteint six à la limite $n/L \rightarrow +\infty$, donc chaque grain a strictement plus d'inconnues (deux à trois en moyenne) que d'équations (deux exactement).

Une configuration typique du modèle dans le cas limite du *jamming* ($n_L/L = n_R/L = \sqrt{3}$ et invariance par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$) est montrée figure 15.4.

15.2.3 Maximum de l'entropie

Grâce à l'intégrabilité de nos modèles, nous avons accès à l'entropie S des empilements, c'est-à-dire au logarithme (népérien) du nombre de configurations qui partagent les mêmes valeurs des paramètres macroscopiques (densités de particules L et R et poids w — le paramètre α est pris ici égal à un par simplicité mais nous pourrions le traiter). Le principe est très

similaire à celui que nous avons vu p. 19 dans le cas d'un modèle de mécanique statistique où le poids de chaque configuration \mathcal{C} était $\exp[-E(\mathcal{C})/(kT)]$ — ici le poids est $w^{v(\mathcal{C})}$, où $v(\mathcal{C})$ est le nombre de segments verticaux (chacun sur un demi-lien vertical du réseau triangulaire) de chaînes de forces (comptés avec leur multiplicité) de la configuration \mathcal{C} . Nous écrivons la fonction de partition (qui est, à la limite d'un réseau de hauteur H très grande, la somme des puissances H^{es} des valeurs propres de plus grand module λ_0 de la matrice de transfert) en regroupant les configurations selon leur valeur de v :

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} e^{v(\mathcal{C}) \ln w} = \sum_v e^{v \ln w} \sum_{\mathcal{C} \text{ ayant } v(\mathcal{C})=v} 1 = \sum_v e^{v \ln w + S(v)} \quad (15.3)$$

où $S(v)$ est l'entropie définie ci-dessus (la dépendance de S en les nombres ou densités de particules L et R est ici implicite). En admettant qu'il y a concentration de la mesure et que la somme sur v qui exprime Z est fortement dominée (à la limite thermodynamique d'un réseau infini avec paramètres intensifs n_L/L , n_R/L et w fixés) par l'un de ses termes, c'est-à-dire que $\ln Z = H \ln \lambda_0 + o(1)$ est asymptotiquement égal à $v^* \ln w + S(v^*)$ pour un certain v^* , nous pouvons calculer S analytiquement ou numériquement à l'aide de la formule

$$S(v) = \ln Z(w^*) - v \ln w^* \quad (15.4)$$

où w^* est « le » w^* qui sélectionne v par transformation de Legendre dans la somme Z , c'est-à-dire tel que

$$\frac{\partial H \ln \lambda_0}{\partial \ln w}(\ln w^*) = v. \quad (15.5)$$

La figure 15.5 montre la courbe, non pas de l'entropie S directement, mais de la densité s d'entropie (c'est-à-dire l'entropie S par unité d'aire du réseau, quantité intensive, finie à la limite thermodynamique) *divisée par* la densité $\rho := n_L/L = n_R/L$ de particules L et R par ligne, en fonction de ρ , et dans le cas invariant par les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ (et symétrique gauche-droite : $n_L = n_R$). C'est-à-dire : pour chaque valeur de ρ , nous prenons la valeur de w qui assure cette invariance et nous traçons le point d'abscisse ρ et d'ordonnée égale à $s(\rho, w)/\rho$. On constate que, dans l'ensemble statistique restreint aux configurations invariantes sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$, s/ρ (qui est aussi l'entropie par ligne et par particule) admet un maximum en $\rho \approx \sqrt{3}$, c'est-à-dire au point où les courbes des solutions des équations de l'*Ansatz* de Bethe (EAB) non seulement se touchent (invariance sous les rotations) mais en plus sont symétriques par rapport à l'axe des ordonnées (cas F sur la figure 12.12). Bien que nous n'ayons pas fait le calcul analytique de l'entropie s (contrairement à P. A. Kalugin [289, 290]), nous sommes convaincus qu'il ne s'agit pas d'une coïncidence et que, comme dans le cas des pavages carrés-triangles, le point où les courbes des solutions des EAB sont en position symétrique joue un rôle particulier.

Voyons une conséquence du fait que s/ρ est maximum en ce point pour un raisonnement de mécanique statistique comme celui de S. F. Edwards. Soit $n_L = n_R$ particules L et R placées au hasard sur une (même) ligne d'un réseau triangulaire de géométrie cylindrique (circonférence L , hauteur H) et avec la contrainte, sur leurs interactions lorsqu'elles se croisent, que leurs trajectoires forment des configurations statistiquement invariantes sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$. Le paramètre libre, dans cette expérience de pensée, est la densité ρ de particules par unité de longueur sur une ligne donnée. Si toutes les configurations sont équiprobables (avec tout de même conditionnement à l'invariance statistique sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$), les densités ρ obtenues le plus souvent sont celles qui maximisent l'entropie (à $n_L = n_R$ fixé). L'entropie S d'une configuration typique vaut, à la limite thermodynamique,

$$S = H L s(\rho) = H n \frac{s(\rho)}{\rho} \quad (15.6)$$

où n désigne $n_L = n_R$ et $\rho := n/L$. Comme H et n sont imposés, la valeur typique (et moyenne s'il y a concentration de la mesure) de ρ est celle qui maximise $s(\rho)/\rho$, c'est-à-dire, d'après

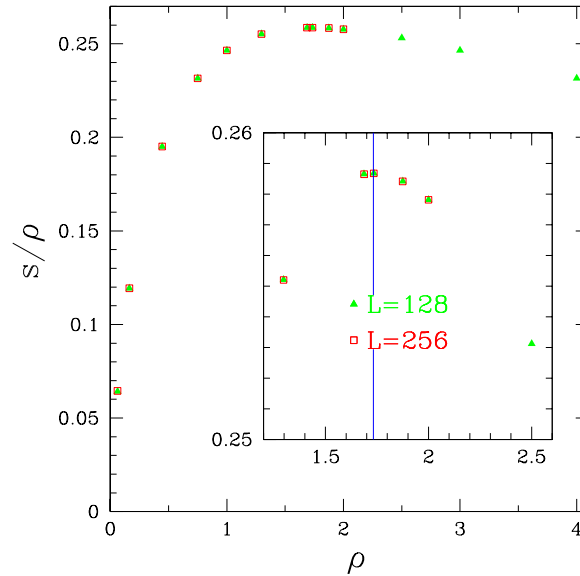


FIG. 15.5 – Courbes numériques de l'entropie s par unité d'aire divisée par la densité ρ de particules L (ou R) par ligne, en fonction de $\rho := n_L/L = n_R/L$, dans le cas symétrique gauche-droite ($n_L = n_R$) et invariant sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ (cette invariance est obtenue en choisissant la valeur de w de façon adéquate pour chaque valeur de ρ selon les résultats analytiques de la section 13.4). Ces courbes sont obtenues par résolution numérique des équations de l'*Ansatz* de Bethe pour les largeurs de réseau $L = 128$ et 256 (la différence entre les données pour les deux largeurs est plus petite que la taille des points sur le graphe ci-dessus). L'insert montre un grossissement de la région au voisinage du maximum, dont la valeur de ρ coïncide très bien (numériquement) avec la valeur de ρ où les courbes des solutions des EAB se touchent en position symétrique — cette valeur, $\rho = \sqrt{3}$, est indiquée par le segment de droite vertical. La valeur de l'entropie s en ce point a été calculée analytiquement au paragraphe 13.4.1 ; nous trouvons $s/\rho = 0.2586831103\dots$

la courbe précédente, $\rho^* = \sqrt{3}$, pour laquelle les courbes solutions des EAB se touchent en position symétrique. Si la circonférence L du cylindre est inférieure à la circonférence $L^* = n/\rho^*$ qui permet de maximiser l'entropie, l'entropie est plus faible qu'en L^* car les configurations sont plus compactées donc plus ordonnées, mais les « empilements » correspondants ne sont pas forcément instables : il peuvent être stabilisés par la pression extérieure, qui les contraint à être tassés. $\langle z \rangle$ est strictement supérieur à quatre d'après ce que nous avons vu et les « empilements » sont hyperstatiques. Si au contraire $L < L^*$, la configuration vue comme un empilement est en quelque sorte instable car l'entropie pourrait augmenter si le volume (l'aire) diminuait et cet effet ne peut pas être compensé par la pression extérieure ; ceci rappelle l'instabilité prédite par la théorie de Van der Waals des fluides et qui s'interprète comme une transition de phases du premier ordre (avec construction de Maxwell). Justement, dans ce cas où $\rho < \rho^*$, le nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ est plus faible qu'à l'isostaticité, signe d'instabilité mécanique. Le cas intermédiaire $\rho = \rho^*$ correspond au maximum de l'entropie et à $\langle z \rangle = 4$. Si ce raisonnement qualitatif est assez intéressant, il faut bien garder à l'esprit que ρ n'est *pas* la densité de *grains*, mais la densité de particules L et R, qui ne sont que des particules fictives utiles au comptage des configurations.

15.3 *Jamming* et percolation

Les configurations de notre modèle de chaînes de forces sont tirées au sort avec la distribution uniforme (conditionnée à un certain nombre de particules L et R et, *via* le poids statistique w , à un certain rapport d'anisotropie entre pressions verticale et horizontale). En cela, ce modèle se place dans le cadre de l'hypothèse d'Edwards [224], qui prescrit de moyenner uniformément sur toutes les configurations « bloquées » (c'est-à-dire à l'équilibre statique) d'un empilement pour trouver ses propriétés macroscopiques. Cependant, comme nous l'avons déjà discuté à la section 11.3, cette hypothèse en est bien une et il n'y a pas de raison qu'elle soit vraie. Pour la tester, il faut générer des configurations bloquées selon la dynamique qui a vraiment lieu lors de la compaction de grains et chercher si la distribution de configurations obtenue est (ou non) uniforme, ou tout au moins chercher si les moyennes des quantités microscopiques sont égales à celles prédites par la distribution uniforme. Voir la section 11.3 pour une discussion des confirmations et infirmations déjà connues (en particulier l'infirmité [242, 243]).

Nous n'avons pas fait un tel calcul. Il serait intéressant de le faire. Une façon pourrait être la suivante : mimer, par simulation numérique (dynamique moléculaire par exemple), la dynamique de compaction de grains bidimensionnels hexagonaux initialement répartis au hasard dans le plan avec une certaine densité d . Une expérience ressemblante a été réalisée par R. Blumenfeld *et al.* [317], où des morceaux de carton plans (grains anisotropes avec frottements importants) sont répartis au hasard sur un plan horizontal et où une planche parcourt ce plan à vitesse constante, ramassant les morceaux de carton comme la voiture-balai des courses cyclistes. Les morceaux de carton s'accumulent contre la planche et forment un empilement bidimensionnel. On peut aussi imaginer que la planche est immobile et que les morceaux de carton « tombent » vers cette planche, comme dans une expérience de compaction de sable. Des photographies d'empilements ainsi formés sont visibles figure 15.6. L'allure de l'empilement formé dépend bien sûr de la densité d initiale des morceaux de carton dans le plan : si d est très faible, il est très peu probable que deux « grains » s'ajoutent en même temps à l'empilement, donc l'empilement obtenu a été construit quasiment grain par grain. Ce qui veut dire que chaque grain était déjà à l'équilibre statique alors qu'il était encore à la surface du tas, et qu'il a eu le temps de minimiser son énergie potentielle avant que d'autres grains n'arrivassent. La valeur attendue pour le nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ est quatre (chaque grain a noué deux contacts en dessous de lui lorsque sa chute a été arrêtée à la surface du tas, puis en moyenne il a arrêté deux grains qui lui tombaient dessus) et R. Blumenfeld *et al.* mesurent $3,7 \pm 0,1$ (cette valeur est inférieure à quatre parce que, notent les auteurs,

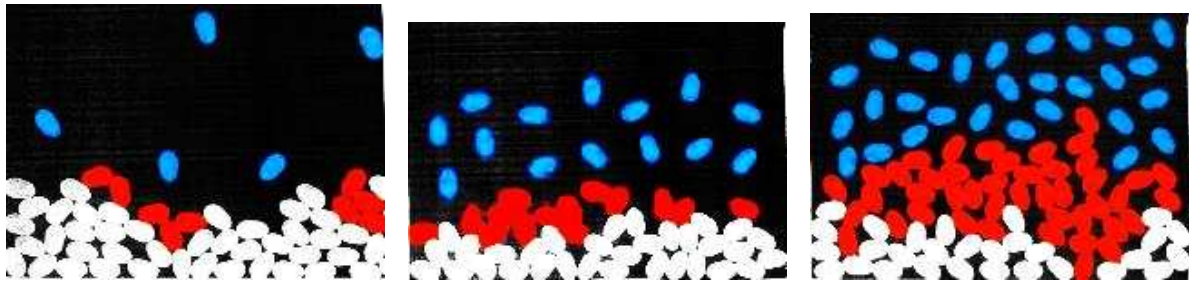


FIG. 15.6 – (Photographies extraites de [317]) Trois empilements de grains bidimensionnels de carton obtenus expérimentalement par R. Blumenfeld *et al.*. Les grains qui n'ont pas de voisins sont distribués au hasard avec les densités, de gauche à droite, 0,024, 0,142 et 0,236. Ils s'accablent en bas, entraînés par leur support horizontal, où ils forment un empilement d'autant plus compact qu'ils étaient initialement peu denses. Il se forme un front dont la dynamique est très intéressante à étudier et qui conditionne probablement les propriétés des empilements statiques mais que nous laissons de côté dans ce mémoire.

quand un grain tombe il a tendance à disloquer l'empilement des autres grains déjà stabilisés). Inversement, si d est élevée, les grains tombent quasiment tous en même temps, et il peut se former des arches, où les grains ne sont à l'équilibre statique que parce qu'ils s'appuient les uns sur les autres. On pressent qu'il existe une densité limite d_c au-delà de laquelle, presque sûrement, un nombre infini (à la limite thermodynamique) de grains sont à l'équilibre statique avant même tout mouvement des grains, autrement dit qu'il existe un réseau de forces percolant dans la configuration initiale des grains. R. Blumenfeld *et al.* mesurent la densité critique (de leurs grains) $0,465 \pm 0,005$ au seuil de la percolation, où le nombre de coordination moyen vaut $3,1 \pm 0,1$, ce qui est proche de la limite d'isostaticité (3 pour des grains avec frottements). Intuitivement, l'entropie (par unité d'aire) des empilements devrait être une fonction croissante de la densité initiale, l'entropie des empilements formés grain par grain étant plus faible que celle des empilements, très désordonnés, où quasiment aucun réarrangement de la situation complètement aléatoire de départ n'est nécessaire pour stabiliser l'ensemble de grains, car un réseau de forces y percole dès le début. L'entropie par unité d'aire serait maximale à la limite de l'isostaticité, de manière analogue à ce que nous avons vu plus haut pour le modèle intégrable (bosonique) des chaînes de forces. Cependant, R. Blumenfeld *et al.* ne donnent pas d'estimation de l'entropie.

Une percolation semblable, dans un modèle bidimensionnel sur réseau à dilution *de liens* (et non *de grains*) et sans frottements a été étudiée théoriquement dans [84] ; on sait qu'il s'agit d'une transition de phases discontinue, comme la percolation de cœur ou percolation *bootstrap*, et que la densité critique *de liens* tend vers un à la limite thermodynamique [84, 239]. Mais cela ne veut pas dire que la proportion de contacts (ou de liens *actifs*, *i.e.* qui portent une force non nulle) tend aussi vers un : à la limite de cette percolation, l'empilement est isostatique donc chaque grain a en moyenne quatre contacts, et la proportion de liens actifs est au plus de $4/6 = 2/3$. Pour le cas d'un empilement sans frottements mais polydisperse (donc pas sur réseau), S. Ouaguenouni et J.-N. Roux estiment numériquement la proportion de liens actifs à $0,396 \pm 0,005$ [211]. Nous donnons dans la suite des résultats numériques pour la percolation des réseaux de forces avec dilution *de grains* (ou de sites) et sans frottements. En attendant, concluons sur une possible étude numérique de la compaction : pour faire simple, la compaction pourrait être isotrope ; cela devrait aussi permettre de diminuer les effets de bord (la planche de l'expérience précédente impose une « cristallisation » locale aux grains à son voisinage [212], de même que les bords durs resp. mous de S. Ouaguenouni et J.-N. Roux imposent des densités relativement plus faibles resp. fortes de liens actifs en leur voisinage). Cela reviendrait à tasser les grains non pas en les ramassant à l'aide d'une planche-balai, mais en faisant se contracter la nappe de la table sur laquelle ils sont. Ou, de manière équivalente, à

faire se gonfler tous en même temps et de manière isotrope tous les grains (ils se déplaceraient pour éviter de s'interpénétrer).

Ce que nous avons étudié est le cas limite de la percolation d'un réseau de forces dans une configuration diluée de grains bidimensionnels monodisperses sur réseau. Nous plaçons, sur chaque site d'un réseau hexagonal, indépendamment, un grain hexagonal avec probabilité p (la fraction de sites du réseau qui sont vides est donc $1 - p$), et nous demandons s'il existe une configuration de forces (continues, c'est-à-dire dont le module est un nombre réel) entre ces grains qui laisse chaque grain à l'équilibre statique. Deux grains peuvent exercer deux forces l'un sur l'autre s'ils se touchent sur le réseau. Les empilements obtenus ressemblent à ce que l'on voit sur la figure 13.7 p. 274. Le réseau a la forme d'un hexagone régulier et les conditions aux limites sont périodiques. Une telle configuration d'équilibre statique existe forcément si $p = 1$ et ne peut pas exister si $p = 0$; comme l'existence d'une telle configuration est une propriété monotone (voir la définition section 2.1), il existe un seuil p_c qui sépare (à la limite thermodynamique des grandes configurations) les régions de percolation et de non-percolation. Nous déterminons ce seuil numériquement pour des configurations de tailles finies en construisant explicitement les réseaux de forces qui percolent selon la procédure expliquée plus loin et nous trouvons que les réseaux produits ont un nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ égal à quatre. Cela signifie, selon la discussion du paragraphe 11.2.1, que les configurations où un réseau percole « tout juste », c'est-à-dire celles où la percolation existe mais peut être supprimée par retrait d'un seul grain, sont isostatiques (le système d'équations linéaires qui traduit l'équilibre statistique de chacun des grains a avec grande probabilité une solution unique), ou encore sont situées au point de *jamming*.

15.3.1 Percolations des réseaux de forces « fermioniques », « bosoniques » et continues

Relation entre les trois percolations. Il n'a pas échappé au lecteur perspicace que le caractère *continu* des forces de l'étude de la percolation que nous venons d'évoquer ne coïncide pas avec le caractère discret des forces du modèle de chaînes de forces (modèle « bosonique ») et encore moins au caractère bimodal des contacts en tout-ou-rien du modèle « fermionique ». Nous pouvons en fait définir *a priori* trois seuils de percolation : en partant du réseau hexagonal vide et en ajoutant les grains un par un, nous rencontrerons trois instants où il sera possible, pour la première fois, en s'appuyant uniquement sur les grains présents et sur les contacts entre grains qui se touchent sur le réseau, de construire une configuration de forces continues (*i.e.* de modules réels positifs) laissant les grains à l'équilibre statique, une configuration de forces discrètes (*i.e.* de modules entiers naturels) laissant les grains à l'équilibre statique, et une configuration de forces discrètes que l'on peut interpréter comme une configuration du modèle fermionique (discuté p. 273) pour un choix arbitraire mais fixe de direction « verticale » (puisque le modèle fermionique n'est pas invariant sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$). Comme nous l'avons vu au paragraphe 13.2.3, une configuration du modèle fermionique est automatiquement une configuration du modèle bosonique (*i.e.* de forces discrètes), et, trivialement, une configuration du modèle de forces discrètes constitue une configuration de forces continues, les nombres entiers naturels étant aussi des réels positifs ou nuls. Donc nous sommes assurés que les trois seuils d'apparition de configurations non vides au fur et à mesure de l'ajout des grains sont dans l'ordre suivant :

$$p_{\text{forces continues}} \leq p_{\text{bosons}} \leq p_{\text{fermions}}. \quad (15.7)$$

En fait, comme le système d'équations linéaires qui traduisent l'équilibre statique de chaque grain (que l'on peut écrire formellement $A\vec{x} = \vec{0}$ où A est une matrice carrée et \vec{x} le vecteur des $3N$ intensités de forces inconnues, où N est le nombre de grains) peut être ramené à un système à coefficients entiers, nous sommes certains que, s'il existe une configuration de forces continues (non toutes nulles), c'est-à-dire si la matrice A a un noyau non réduit au vecteur

nul, il en existe en particulier une à coefficients dans le corps des rationnels, et donc, quitte à multiplier par le plus petit commun multiple des dénominateurs des intensités des forces, il existe au moins une solution non triviale à coefficients entiers. Ainsi, les deux premiers seuils sont égaux :

$$p_{\text{forces continues}} = p_{\text{bosons}} \leq p_{\text{fermions}}. \quad (15.8)$$

L'étude numérique dont nous donnons le principe ci-dessous fournit en revanche de nombreux contre-exemples à l'égalité des *trois* seuils.

Principe de l'étude numérique. La taille du réseau est fixée. Le réseau est pris en forme d'hexagone régulier (pour favoriser l'invariance par rotation d'angles $\pm 2\pi/3$) avec conditions aux limites périodiques (pour limiter l'amplitude des effets de taille finie), comme nous l'avons dit. Pour chaque échantillon, nous tirons uniformément au sort une permutation des grains hexagonaux du réseau, qui spécifie dans quel ordre les grains seront placés, et nous recherchons par dichotomie à partir de quel nombre de grains (placés dans l'ordre) une configuration de forces continues resp. du modèle fermionique non triviale et compatible avec les grains existe. Plus précisément, nous recherchons d'abord le seuil fermionique car sa recherche est, au moins pour les petites tailles de réseau (*i.e.* ≤ 30), plus rapide que la recherche du seuil des forces continues, puis nous utilisons ce seuil comme borne supérieure de l'intervalle de départ de la dichotomie. Contrairement à la démarche, similaire, de [239], nous autorisons tous les contacts possibles entre grains présents. Pour rechercher si une configuration non triviale du modèle fermionique existe, nous utilisons un programme de résolution d'instances du problème SAT — ce problème est défini et étudié dans la première partie de ce mémoire, au chapitre 3 —, le solveur MiniSAT [64]. Le problème de l'existence d'une configuration est traduit en instance du problème SAT de la façon suivante :

- À chaque lien entre grains, on associe une variable booléenne destinée à valoir « vrai » si le lien véhicule une particule L ou R ou \overline{LR} et « faux » sinon (en particulier, les liens aux extrémités desquels on ne trouve pas deux grains hexagonaux ont leur variable d'office à faux).
- Pour chaque grain présent, on écrit les vingt-quatre clauses sur les six variables de liens du grain qui sont satisfaites si et seulement si ces six variables forment l'un des sept motifs de contacts autorisés (le motif vide : toutes les variables à « faux », plus les six configurations listées p. 273). On peut trouver ces clauses en écrivant la table de vérité des configurations de contacts autorisées parmi les $2^6 = 64$ configurations possibles et en appliquant la méthode de Quine-McCluskey à cette table.
- On ajoute la clause obtenue en concaténant avec des opérateurs « OU » toutes les variables de liens. Cette clause impose que l'un au moins des liens porte une particule, *i.e.* que la configuration soit non triviale.

Avant de lancer le solveur SAT sur une instance, l'instance est simplifiée en tenant compte des variables qui sont forcément à « faux » car leurs liens n'ont pas deux grains aux extrémités. Pour rechercher une configuration de forces continues, nous utilisons l'algorithme du simplexe (brièvement discuté au début du chapitre 3). Le système à résoudre, sur les variables des intensités des forces des liens du réseau qui ont deux grains à leurs extrémités, est formé des $2N$ équations d'équilibre statique pour les N grains, des $3N$ inéquations qui stipulent que les intensités des forces sont bornées par la force totale exercée sur l'empilement (prise égale à un) et de la fonction objectif, prise égale à la somme des intensités de toutes les forces. En pratique, nous considérons toutes les $3N$ inconnues et nous mettons à zéro dans les équations les coefficients des inconnues qui correspondent à des contacts inexistantes. L'algorithme du simplexe cherche une solution des contraintes (équations et inéquations) qui maximise la fonction objectif. La solution triviale (toutes les intensités égales à zéro) est toujours valable, donc pour savoir s'il existe une configuration de forces continues il suffit de voir si la valeur atteinte de la fonction objectif est nulle ou strictement positive. Nous avons testé plusieurs implémentations de l'algorithme du simplexe. Celle fournie avec le logiciel libre Scilab a le

défaut de ne souvent pas converger ou, pire, de « trouver » des solutions grossièrement fausses (des variables prenant des valeurs négatives). Celle proposée par [35], et que B. Tighe *et al.* semblent avoir employée [239] puisqu'ils ne citent pas d'autre source, est terriblement lente en comparaison (plusieurs heures contre une minute quand le côté L de l'hexagone dépasse une quinzaine de sites), même si un prétraitement qui consiste à repérer les variables nulles à coup sûr et à simplifier le système en les en retirant accélère notablement les choses. Pire : cette routine est instable numériquement et a fréquemment tendance à entrer dans une boucle infinie. Un moyen d'y remédier est de faire des calculs exacts avec des rationnels ou tout au moins des flottants à grande précision. Des rationnels à précision non bornée (implémentation du logiciel libre GNU MP, type `mpq_t`) sont prohibitivement lents quand L dépasse la dizaine. Des rationnels à précision bornée (numérateur et dénominateur entiers de 32 ou 64 bits ; implémentation de notre cru) sont plus rapides mais donnent lieu à des débordements de capacité (donc des résultats faux) quand L dépasse la dizaine. Des nombres à virgule flottante en « simple » ou « double précision » ne suffisent pas, comme on l'a vu (l'algorithme boucle indéfiniment). Des nombres à virgule flottante à précision fixe mais plus grande (double-doubles et quad-doubles dans l'implémentation de Yozo Hida *et al.*) sont très lents (et les double-doubles ne sont pas suffisamment précis quand L dépasse la dizaine). La lenteur est pire encore avec les nombres à virgule flottante à précision arbitraire (GNU MP, type `mpf_t`). Par exemple, pour résoudre une instance de taille $L = 10$, il faut, sur un ordinateur de bureau et en l'absence de boucle infinie de l'algorithme, 3,30 secondes avec des nombre à virgule flottante en double précision, 46,65 pour les double-doubles et 79,17 pour les `mpf_t` à 128 bits (les calculs avec rationnels sont plus lents). Enfin, l'excellente implémentation du logiciel libre GNU Linear Programming Kit permet une résolution rapide, exacte, avec très peu de boucles indéfinies — ce qui prouve l'importance d'utiliser de bonnes heuristiques (voir la discussion de ce qu'est une heuristique à la section 3.2). Nous avons résolu des instances du problème jusqu'à la taille $L = 30$ (7599 instances). La figure 15.7 montre la distribution cumulée du nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ pour différentes tailles ; on constate qu'elle se concentre autour de la valeur quatre, ce qui était attendu à la transition de *jamming*.

Dans le cas de forces d'intensités continues, la procédure décrite ci-dessus recherche une configuration qui maximise la somme des intensités des forces, mais *pas* le nombre de forces strictement positives, par exemple. On peut comprendre la différence en imaginant qu'il existe deux solutions linéairement indépendantes au système d'équations d'équilibre statique (pour une certaine configuration des grains) qui n'ont pas les mêmes liens porteurs de forces non nulles mais pour lesquelles au moins un lien porte une force non nulle dans les deux solutions. Du fait de la contrainte que tout lien (et ce lien « commun » en particulier) doit porter une force au plus égale à un, une superposition linéaire de ces deux configurations doit utiliser des coefficients p et q tels que $p + q = 1$ (et $p, q \geq 0$). La valeur de la fonction objectif pour la superposition est alors la somme pondérée par p et q de ses deux valeurs pour les deux configurations, et elle est strictement inférieure au maximum de ces deux valeurs sauf si elles sont égales. Donc l'algorithme du simplexe sélectionne une seule de ces deux configurations, ce qui signifie qu'il laisse des liens avec des forces nulles. Une configuration qui minimise le nombre de liens avec des forces nulles est assez facile à construire : on applique répétitivement l'algorithme du simplexe, en choisissant à chaque étape la fonction objectif de sorte que seuls les liens qui ne portaient pas de force dans les solutions trouvées jusqu'à présent y contribuent, jusqu'à temps que seule la solution triviale soit trouvée. Il suffit alors d'additionner toutes les solutions trouvées. Quelle procédure devons-nous choisir ? Celle qui maximise la somme des intensités des forces, celle qui maximise le nombre de liens qui portent une force non nulle, une autre ? En fait, nous constatons que la procédure qui maximise le nombre de liens qui portent une force non nulle produit des empilements loin de la transition de *jamming*, car leur valeur de $\langle z \rangle$ est nettement supérieure à quatre. Un exemple est montré fig. 15.8 : à gauche, la configuration qui maximise la somme des intensités, et à droite celle qui maximise le nombre de liens à force non nulle. Si la configuration de gauche a un nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ proche de quatre, c'est-à-dire de la valeur attendue au seuil de la transition de *jamming*,

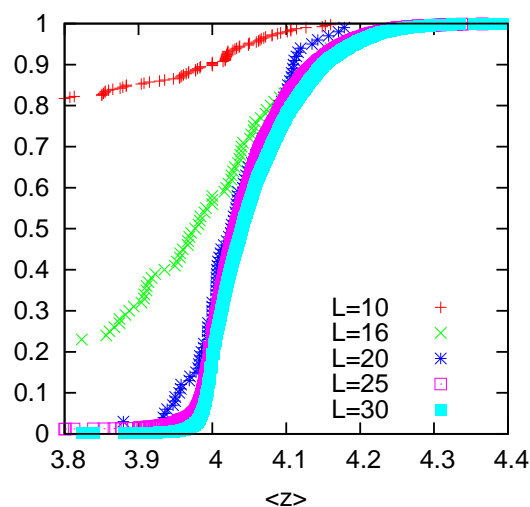


FIG. 15.7 – Distribution cumulée du nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ des empilements où un réseau de forces continues percole (voir texte pour la définition de la procédure numérique de construction de ces empilements) pour des réseaux en forme d'hexagones réguliers à conditions aux limites périodiques de tailles L de 10 à 30. Attention, malgré leur allure familière, ces courbes ne représentent *pas* la proportion de sites dans l'amas percolant de la percolation de liens ou de sites ! Les effets de taille finie s'effondrent quand L passe de 16 à 20, donc la longueur de corrélation de la transition de phase continue de percolation d'un réseau de forces est ici de l'ordre de 16. Pour de grands réseaux ($L \gg 1$), la probabilité d'observer $\langle z \rangle < 4$ est très faible ; il y a comparativement beaucoup plus de réseaux avec $\langle z \rangle > 4$. La valeur de $\langle z \rangle$ la plus probable (celle qui maximise la densité de probabilité, c'est-à-dire la dérivée des courbes ci-dessus) est quatre comme attendu au seuil du *jamming*.

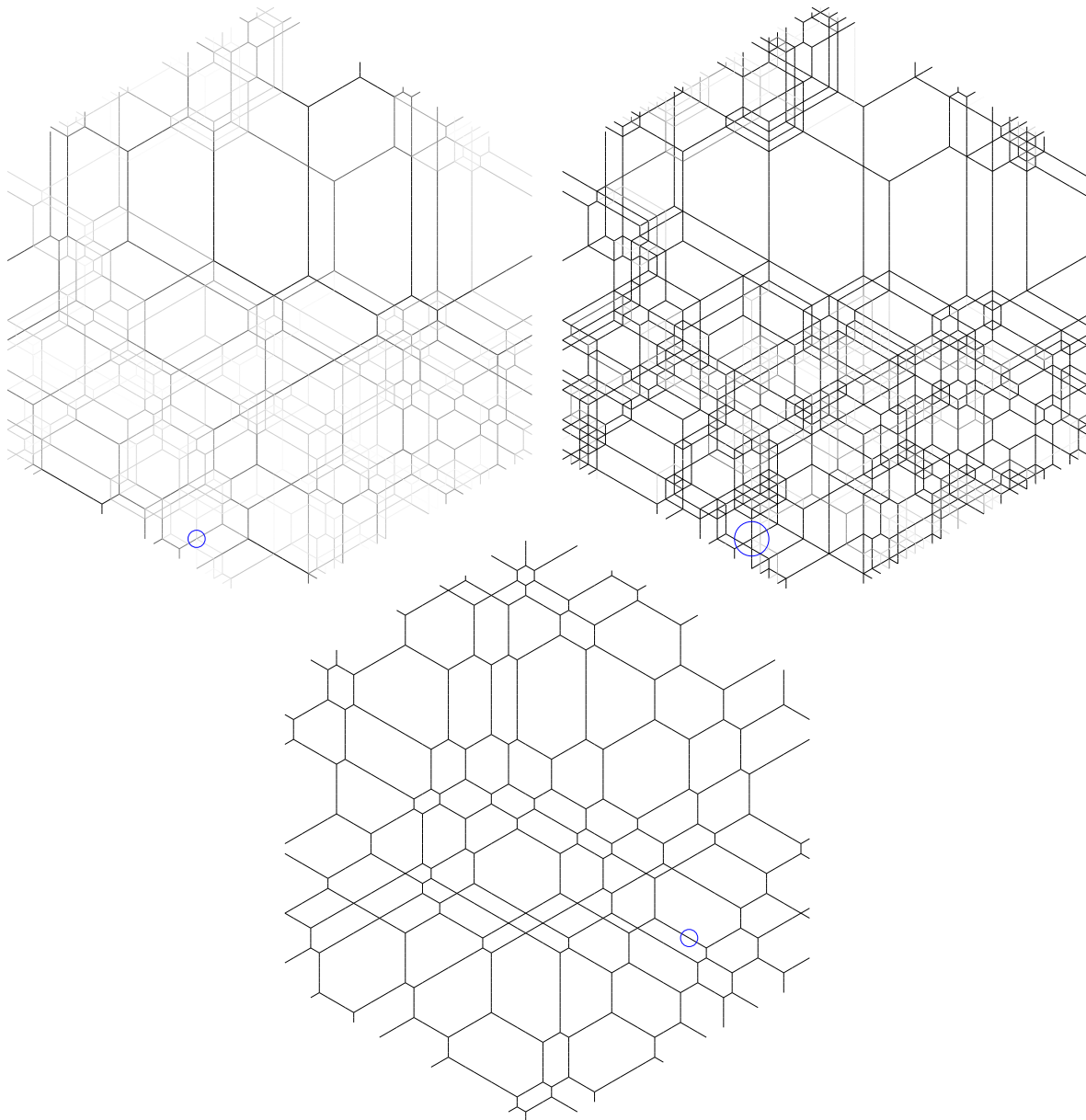


FIG. 15.8 – **En haut**, configurations de forces continues (codées par le niveau de gris des traits : blanc \leftrightarrow force nulle) obtenues par l'algorithme du simplexe sur réseau de côté 30 sites à conditions aux limites périodiques et qui maximisent la somme des intensités portées par les liens (à gauche) ou, pour la même configuration de grains exactement, le nombre de liens qui portent une force non nulle. La configuration des grains qui sous-tend ces configurations de forces est telle qu'il existe au moins un grain (au moins celui qui est au centre du cercle en bas du réseau) tel que, si l'on retire ce grain, il n'est plus possible de trouver une configuration de forces continues (non toutes nulles). La construction de gauche conduit à une valeur du nombre de coordination moyen de $\langle z \rangle = 4.003022$ (proche de la valeur quatre attendue à la transition de *jamming*) et de $\langle z \rangle = 4.812372$ à droite. **En bas**, configuration du modèle fermionique : elle est obtenue en ajoutant aux configurations précédentes des grains un par un jusqu'à ce qu'une telle configuration existe. Le dernier grain ajouté est indiqué (au centre du cercle). Il y a 2366 sites occupés par un grain sur les 2700 sites, contre 2295 dans les configurations en haut.

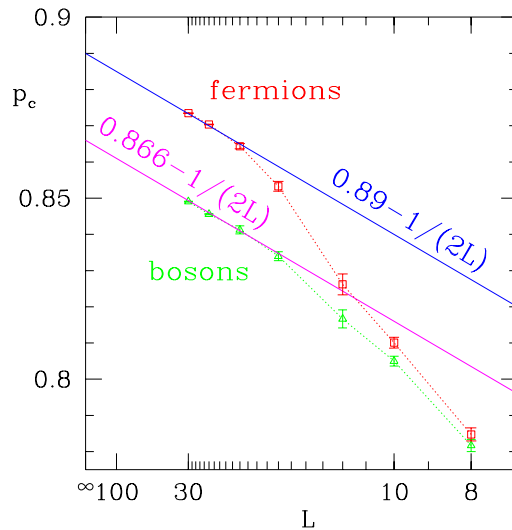


FIG. 15.9 – Estimations numériques des seuils p_c de percolation *de grains* des réseaux de forces continues (ou « bosoniques ») d’une part, et des configurations du modèle fermionique d’autre part. Ils sont déterminés selon la procédure indiquée plus haut : des grains sont ajoutés au hasard un par un jusqu’à ce qu’une configuration non triviale de forces continues resp. du modèle fermionique dont les forces non nulles n’empruntent que des liens reliant deux grains présents existe. En ordonnées sont portés les proportions de grains présents au seuil de percolation (nombre de grains présents divisé par le nombre de grains maximal possible, c’est-à-dire le nombre de sites dans l’hexagone-réseau), avec les barres d’erreur. En abscisses sont portés les inverses des longueurs L des côtés des hexagones-réseaux. Les lignes brisées guident l’œil. Les deux droites sont des extrapolations grossières à $L = +\infty$.

celui de la configuration de droite en est très éloigné. Nous ne le prouvons pas à l’aide d’un graphe, mais ce comportement est observé pour la plupart des configurations. La procédure qui maximise le nombre de liens à force non nulle est donc à proscrire. Idéalement, la procédure retenue devrait mimer ce qui se passe dans un système physique (la façon dont les contacts s’établissent sans déplacement macroscopique de grains du fait de la percolation) ; nous allons nous contenter de la procédure qui maximise la somme des intensités car elle est simple et suffit à notre propos (tester l’hypothèse d’Edwards).

Quelques résultats numériques. La figure 15.9 montre nos estimations numériques pour le seuil de percolation de réseaux de forces continues (ou « bosoniques ») d’une part, de configurations du modèle fermionique (avec direction verticale fixée) d’autre part. Nous constatons que le seuil de percolation *de grains* des forces continues à la limite thermodynamique $L = +\infty$ pourrait être $\sqrt{3}/2 \approx 0,866$. La situation est donc différente de la percolation *de liens* étudiée dans [84, 239], où le seuil à la limite thermodynamique est 1. Le seuil de percolation fermionique est strictement supérieur au seuil de percolation des forces continues ; c’est peut-être dû à la brisure de symétrie des trois directions du réseau par le modèle fermionique. Rappelons que le modèle fermionique possède une direction particulière (la « verticale »). Nous pourrions refaire la même étude en cherchant le point d’existence d’une configuration d’au moins une des trois variantes du modèle fermionique (chaque variante faisant un choix différent parmi les trois directions du réseau pour sa « verticale ») et voir si les résultats en sont affectés.

15.3.2 L’hypothèse d’Edwards est ici fautive

Nous savons que des calculs analytiques [231] ont montré que l’hypothèse d’Edwards est fautive pour certaines chaînes (unidimensionnelles) de spins avec cinétique contrainte, mais des travaux numériques récents portant sur des systèmes granulaires comme [182] semblent la

confirmer. Voyons ce que nous pouvons en dire.

Si l'hypothèse d'Edwards était vraie, c'est-à-dire si la mesure *uniforme* sur les configurations à l'équilibre statique d'un empilement était « la bonne », les propriétés macroscopiques des configurations de forces obtenues par la procédure décrite ci-dessus (ajouter les grains un par un jusqu'à ce qu'une configuration de forces continues respectant la condition d'équilibre de chaque grain existe, et prendre parmi les configurations possibles la configuration qui maximise la somme des intensités des forces sur les liens) devraient coïncider avec les propriétés prédites par la mesure uniforme, ou tout au moins par la mesure uniforme conditionnée à être au seuil du *jamming* et invariante sous les rotations d'angles $\pm\pi/3$ (rotations $\pm 2\pi/3$ composées avec les réflexions), puisque les empilements percolants sont construits selon une procédure qui possède ces invariances. Si la valeur moyenne d'une quantité macroscopique prédite par cette mesure diffère de celle observée pour les empilements au seuil de percolation, la conclusion *stricto sensu* est que la mesure de probabilité uniforme des configurations à l'équilibre statique, *avec ce conditionnement*, ne coïncide pas avec la mesure réelle produite par la construction numérique de configurations percolantes. On pourra donc arguer qu'il faut conditionner à la valeur d'autres observables macroscopiques (par exemple l'observable dont la valeur moyenne diffère!) mais nous rejetons par avance cette objection : la mécanique statistique des gaz considère les configurations à pression et volume (ou pression et température ou volume et température) fixés comme équiprobables. Ces observables (pression et volume par exemple) paramètrent entièrement les interactions du gaz et de son environnement à la limite thermodynamique et pour des interactions à courte portée : les molécules du gaz ne « perçoivent » de l'environnement que l'existence de parois qui fixent le volume et imposent une certaine pression (ou une certaine température). De même, dans le modèle « bosonique » de chaînes de forces, l'effet de l'environnement sur l'empilement, qui n'est « perçu » qu'aux bords, est d'imposer une certaine pression sur l'empilement et de limiter le volume. Contrairement à un gaz, un milieu granulaire peut, dans une certaine mesure, supporter une pression anisotrope, donc à « la » pression doit être adjoint un paramètre d'anisotropie. Mais une fois connus le nombre de quanta de forces par unité de longueur et le paramètre w qui règle l'anisotropie, l'effet de l'environnement sur l'empilement est entièrement paramétré (à la limite thermodynamique) et il n'est pas fondé physiquement de rajouter d'autres paramètres macroscopiques, *i.e.* de conditionner davantage la mesure uniforme. La mesure « d'Edwards » est alors censée prédire les valeurs de toutes les observables macroscopiques ; si ce n'est pas le cas nous considérerons qu'elle n'est pas valable.

Considérons le modèle bosonique de chaînes de forces. Il est paramétré par les densités de quanta de forces gauches et droits par unité de longueur (n_L/L et n_R/R) et par le poids statistique w . Plaçons-nous dans la situation où les configurations sont statistiquement invariantes sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ et les réflexions (ou les rotations d'angles $\pm Pi/3$). Cela fixe $n_L = n_R$ et lie $n_L/L = n_R/L$ et w . Choisissons de plus la valeur de w qui correspond à $\langle z \rangle = 4$. n_L/L , n_R/L et w traduisent entièrement l'effet de l'environnement sur l'empilement. Si l'hypothèse d'Edwards est vraie, les valeurs des observables macroscopiques doivent correspondre, à la limite thermodynamique, avec celles mesurées numériquement sur les configurations percolantes (rappelons que le seuil de percolation du modèle bosonique est égal au seuil de percolation des forces continues). Or ce n'est pas du tout le cas, quantitativement, pour les observables « nombre moyen de sites autour desquels aucun lien ne porte de force » (que le site soit ou non occupé par un grain ; nous nous intéressons ici à une propriété intrinsèque des réseaux de forces et pas de l'arrangement des grains) et « nombre moyen de sites autour desquels au moins trois liens portent des forces », comme on peut le voir sur la figure 15.10. Qualitativement, on peut voir la différence entre les configurations de la figure 15.4 (mesure uniforme conditionnée à l'invariance par rotations et à $\langle z \rangle = 4$) et de la figure 15.8 à gauche : dans le premier cas, les forces ont des intensités discrètes entre zéro et quatre, alors que dans le deuxième cas elles sont quasiment continues et les chaînes de forces ont l'air beaucoup plus inhomogènes tant dans leur intensité que dans leur répartition spatiale (et elles sont moins denses).

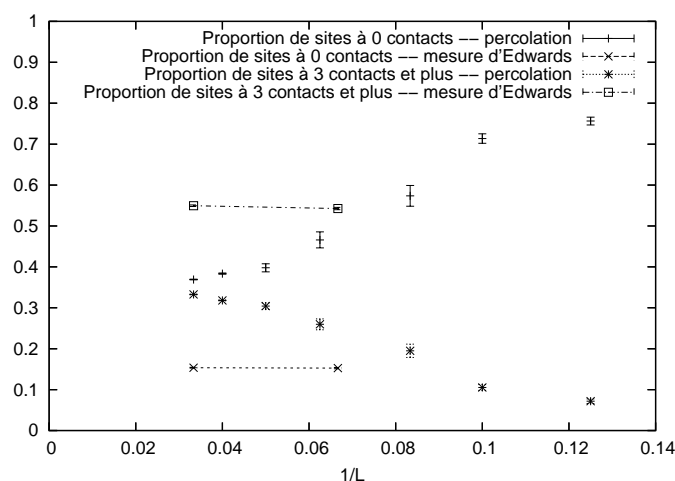


FIG. 15.10 – Comparaison des valeurs des observables « proportion de sites autour desquels aucun lien ne porte de force non nulle » (parmi tous les sites, et indépendamment de l’occupation ou non de chaque site par un grain) et « proportion de sites autour desquels au moins trois liens portent des forces non nulles » pour les configurations percolantes de réseaux de forces continues (ou bosoniques) obtenues par la procédure numérique expliquée plus haut et pour les configurations du modèle (intégrable) bosonique avec la mesure uniforme conditionnée à l’invariance par rotation d’angles $\pm 2\pi/3$ et au nombre de quanta de forces tel que les réseaux de forces soient à la limite de l’isostaticité, obtenues par la méthode de simulation Monte Carlo expliquée au chapitre précédent. Un « lien qui porte une force non nulle » est appelé « contact » dans la légende de la figure, car il implique la présence de deux grains à ses extrémités et que ceux-ci soient en contact. En abscisse est porté $1/L$ où L est la taille de l’hexagone-réseau pour les configurations percolantes, et $1/L$ où L est la largeur du réseau pour les configurations du modèle bosonique (les deux points correspondent à $L = 30$, hauteur $H = 40$ à gauche et $L = 15$, $H = 30$ à droite). Les lignes droites pointillées qui relient les points relatifs à l’hypothèse de la mesure uniforme guident l’œil mais ne sont pas significatives. On constate le désaccord flagrant entre les deux ensembles statistiques (percolation et mesure uniforme). Les effets de taille finie semblent faibles pour les configurations à mesure uniforme et nettement plus importants pour les configurations percolantes. Nous ne savons pas si les proportions de sites à zéro et au moins trois contacts sont égales à la limite thermodynamique (en tout cas elles sont strictement supérieures à un tiers si la convergence est monotone, comme elle l’est pour les valeurs de $L \leq 30$ sur la figure).

15.4 Réponses statiques d'un empilement à une surpression

15.4.1 Définition d'une longueur mésoscopique

Un certain nombre d'études de la réponse d'un milieu granulaire à une perturbation (surpression localisée par exemple) introduisent la notion de longueur mésoscopique. Il s'agit de la longueur sur laquelle l'effet de cette perturbation (ou bien l'effet des bords) se fait sentir, et ce pourrait aussi être la longueur de corrélation des chaînes de forces. Le but est de définir au-delà de quelle longueur un milieu granulaire est bien approximé par des équations macroscopiques comme celles de la mécanique des milieux continus. La référence [210], en particulier, s'efforce de définir un « élément de volume représentatif », et elle évalue la longueur mésoscopique à environ dix tailles de grains. D'après cette référence, aussi bien la longueur de corrélation de la distribution spatiale des contraintes que la longueur de relaxation d'une perturbation que la longueur de pénétration de l'effet des bords livrent la même évaluation. Nous proposons une autre définition de la longueur mésoscopique, fondée sur l'interprétation des configurations de forces entre grains en termes de trajectoires de particules L et R : comme nous l'avons discuté au paragraphe 13.2.3, une configuration du modèle bosonique de chaînes de forces peut être décomposée en superposition de configurations du modèle fermionique (sauf si les conditions aux limites sont périodiques, mais en ce cas nous pouvons considérer une région du réseau très grande mais qui n'inclut pas les bords et la voir comme une configuration à bords libres), et pour les configurations fermioniques nous pouvons définir de manière naturelle les dimensions des cellules délimitées par les trajectoires des particules L et R (ces dimensions des cellules sont aussi du même ordre de grandeur que les longueurs de corrélations dans les trois directions des configurations du modèle fermionique). Ces dimensions fournissent une définition naturelle de la longueur mésoscopique (ou des longueurs mésoscopiques en cas de non invariance sous les rotations d'angles $\pm 2\pi/3$). Dans le cas où les grains ne sont pas monodisperses et où l'empilement est non pas cristallin, mais désordonné, nous avons proposé à la fin du paragraphe 13.2.3 une autre définition des longueurs mésoscopiques qui devrait être équivalente aux dimensions des cellules dans le cas cristallin, et qui repose sur les longueurs moyennes des segments d'une marche aléatoire dirigée (cette marche aléatoire progresse autour de deux directions à 60° l'une de l'autre par pas entre grains et, à chaque grain atteint, elle choisit la direction où elle quitte ce grain au hasard, proportionnellement aux intensités des forces qu'exerce ce grain dans ces deux directions — voir un exemple figure 15.4). Remarquer que cette façon de définir des tailles de cellules et des longueurs mésoscopiques est indépendante de la mesure de probabilité des configurations : même si l'hypothèse d'Edwards est fautive, nous pouvons tout de même interpréter une configuration de forces dans un empilement cristallin comme des trajectoires de particules L et R. Nous n'avons malheureusement pas vérifié numériquement si l'étude de ces marches aléatoires livre bien des longueurs compatibles avec les tailles de cellules, ni si les distributions des tailles de cellules sont auto-moyennantes, en particulier entre les différentes configurations fermioniques qui, superposées, forment une configuration bosonique. Dans la suite, nous ne donnons des résultats que pour les modèles intégrables fermionique et bosonique.

La figure 15.11 montre la distribution, estimée d'après des simulations Monte Carlo, des tailles de cellules pour des configurations du modèle fermionique dans la situation invariante par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$.

15.4.2 Tailles des cellules et réponses statiques d'un empilement

Montrons que la taille de cellules délimitées par les trajectoires des particules L et R intervient naturellement dans la réponse d'un empilement. Soit un empilement au sens du modèle intégrable fermionique où l'on impose, sur la ligne en bas de l'empilement dans un réseau de taille $L \times H$ avec conditions aux limites périodiques gauche-droite, la présence de $n_L = n_R$ particules L et R placées librement d'une part et celle de $n_L' = 1$ particule L et $n_R' = 1$ R placées en un point fixe d'autre part (disons le centre de la ligne en bas du réseau).

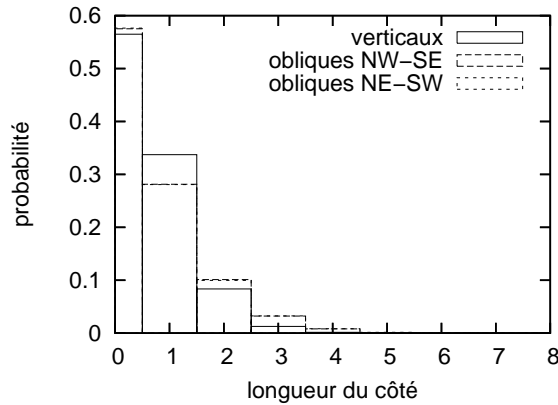


FIG. 15.11 – Distribution de probabilité (estimée d’après des simulations Monte Carlo) des tailles des côtés (verticaux, obliques NW-SE et obliques NE-SW) des cellules des configurations du modèle fermionique pour un réseau de largeur $L = 16$ et hauteur $H = 20$ avec $n_L = n_R = 10$ particules L et R et $w = 1.069805176$ (cette valeur assure l’invariance par rotation d’angles $\pm 2\pi/3$).

Si $n_L' = n_R'$ étaient nuls, nous aurions la situation étudiée jusqu’ici ; les empilements seraient statistiquement invariants par translation dans la direction horizontale. Quand $n_L' = n_R'$ vaut un, il y a toujours au moins une chaîne de forces qui prend naissance au centre de la ligne en bas du réseau. Il est entropiquement plus favorable que les particules soient réparties uniformément (en moyenne) sur les lignes du réseau donc on peut s’attendre à ce que, « après » quelques lignes, c’est-à-dire quelques lignes du réseau au-dessus de la ligne tout en bas, la non-uniformité s’estompe et que les $n_L + n_L' = n_R + n_R'$ particules se répartissent uniformément. Combien de lignes doit-on « attendre » avant d’observer cette uniformité ? La réponse est bien entendu de l’ordre de la taille des cellules, qui est aussi la longueur de corrélation des configurations : la chaîne de forces qui prend naissance au centre de la ligne en bas du réseau conserve sa direction sur cette longueur, puis, au-delà, elle commence à interagir avec les trajectoires des autres particules et la densité de particules s’uniformise. C’est ce que l’on observe si l’on superpose un grand nombre de configurations obtenues par simulations Monte Carlo du modèle fermionique (figure non reproduite ici). Si nous répétons cette « expérience » avec le modèle bosonique, nous observons le même phénomène, à une différence près : ici nous pouvons choisir $n_L' = n_R'$ arbitrairement grands. Quand $n_L' = n_R' = 1$, la relaxation de cet « excès » de particules L et R fait intervenir une seule composante fermionique (dans la décomposition d’une configuration bosonique en superposition linéaire de configurations fermioniques définie au paragraphe 13.2.3), et a lieu sur une longueur de l’ordre d’une taille de cellules fermionique. Quand $n_L' = n_R'$ est de l’ordre de $n_L = n_R$ ou nettement supérieure, la relaxation « utilise » toutes les composantes fermioniques de la superposition et les particules L et R libres en bas du réseau ne sont pas suffisamment nombreuses pour perturber les particules L' et R' en une distance finie donc, quand le réseau a la géométrie d’un cylindre (conditions aux limites périodiques gauche-droite), la relaxation a lieu sur une longueur de l’ordre de la largeur L du réseau : il faut attendre que les particules localisées au centre de la ligne en bas du réseau, et dont les trajectoires sont contenues dans le « cône de lumière » de ce point, aient atteint la ligne où les conditions aux limites périodiques permettent aux particules parties vers la gauche d’interagir avec celles parties vers la droite et donc d’uniformiser, de mélanger la distribution des particules. Autrement dit, la réponse d’un empilement à une force localisée dépend fortement du rapport entre l’intensité de cette force et l’intensité moyenne des forces non localisées : si ce rapport est faible, la force localisée relaxe rapidement, c’est-à-dire sur une longueur finie à la limite $L \rightarrow +\infty$. L’anisotropie de la réponse est peu marquée. Si ce rapport est élevé au contraire, la réponse est fortement anisotrope et contenue dans un « cône de

lumière », et la longueur de relaxation est de l'ordre de la largeur du réseau dans une géométrie cylindrique, donc la réponse macroscopique est de caractère hyperbolique. C'est exclusivement ce dernier régime qui est discuté dans les références [202, 209, 237], mais il nous semble capital de faire la distinction entre les différents régimes et de discuter leurs caractéristiques et le *cross-over* qui les relie. La référence [202] prend soin, en revanche, de discuter le lien entre réponse elliptique et réponse hyperbolique : elle montre que la réponse macroscopique peut très bien être elliptique (c'est-à-dire que les équations aux dérivées partielles qui la régissent sont elliptiques, avec le même signe devant les dérivées secondes par rapport aux deux coordonnées spatiales) tout en ayant l'allure d'une réponse hyperbolique avec deux directions privilégiées et une longueur de relaxation grande, pour peu que l'élasticité du milieu soit fortement anisotrope.

Les différents comportements qualitatifs distingués ci-dessus sont observés sur la figure 15.12. En haut, nous voyons l'allure de la réponse dans le cas où l'intensité de la force localisée est égale à la force totale exercée de manière répartie en bas du réseau (33 quanta de forces de chaque type, L et R, sont exercés de manière répartie et 33 de manière localisée). La réponse est fortement anisotrope et la longueur de relaxation est de l'ordre de la taille du réseau. En bas, seul un quantum de force est exercé de manière localisée. La réponse est alors d'amplitude plus faible (comparer les niveaux de gris de la réponse et du fond) et elle relaxe sur une longueur plus courte (la taille du réseau, limitée par le temps de calcul des simulations Monte Carlo, est malheureusement trop petite pour apprécier si la longueur de relaxation est finie ou si c'est une fraction de L). La longueur de relaxation est de l'ordre de la taille des cellules hexagonales des configurations fermioniques que l'on obtient en décomposant les configurations bosoniques comme indiqué au paragraphe 13.2.3, et nous observons bien qu'elle est plus grande à droite qu'à gauche, où la densité de particules L et R par ligne est plus faible, donc les cellules hexagonales plus grandes.

Jusque là, nous n'avons pratiquement pas exploité le caractère intégrable des modèles que nous avons introduits pour étudier leur réponse à une force localisée (si ce n'est pour calculer analytiquement la valeur de w qui assure l'anisotropie). Mais nous pouvons en tirer grand profit en calculant, à partir de la solution (numérique à défaut de mieux) des équations de l'*Ansatz* de Bethe (EAB), la longueur de relaxation du modèle. Soit λ_0 et λ_1 les deux valeurs propres de plus grand module de la matrice de transfert (ou, plus précisément, une valeur propre de chacun des deux plus grands modules — nous choisissons pour λ_0 celle qui est réelle positive et pour λ_1 une de celles qui a le plus petit argument). Nous constatons numériquement que λ_1 correspond, pour le modèle bosonique et au voisinage du contact des courbes des solutions des EAB, à une excitation que P. A. Kalugin appelle *Umklapp* [312] (voir le paragraphe 13.1.5, p. 264). λ_0 et λ_1 permettent de définir deux longueurs : d'une part, en écrivant $\lambda_1/\lambda_0 = \exp[-1/\xi]$, nous définissons la longueur $\xi > 0$ de relaxation des excitations associées à λ_1 . D'autre part, comme λ_1 n'est pas réelle, son argument k définit une longueur d'onde $2\pi/k$ — l'excitation qui correspond à λ_1 , c'est-à-dire le vecteur propre de la matrice de transfert associé à λ_1 , est donc une excitation non localisée, avec une certaine longueur d'onde caractéristique, et son amplitude est divisée par e après ξ lignes du réseau de topologie cylindrique. Ces deux longueurs sont tracées figure 15.13. On constate qu'à la limite thermodynamique $L \rightarrow +\infty$ à $\rho = n_L/L = n_R/L$ fixé la longueur de corrélation ξ est d'ordre L , ce qui signifie que la perturbation associée au vecteur propre de valeur propre λ_1 est à longue portée : elle ne s'atténue que sur une hauteur (ou profondeur) de l'ordre de la largeur de l'empilement. L'atténuation est d'autant plus rapide (ξ est d'autant plus petit) que ρ est grand. Ce résultat peut sembler incompatible avec la discussion précédente, selon laquelle une perturbation localisée s'atténue sur longueur de l'ordre d'une taille de cellule fermionique — longueur finie à la limite thermodynamique. Le paradoxe est levé si l'on remarque que cette excitation-ci est délocalisée : elle n'a pas un support fini, mais au contraire prend naissance sur toute la base de l'empilement. C'est dans l'espace des nombres d'ondes k qu'elle est localisée (puisque, comme nous l'avons déjà dit, la valeur propre λ_1 a un argument non congru à π modulo 2π), et elle s'exprime comme une somme d'un nombre non borné d'excitations

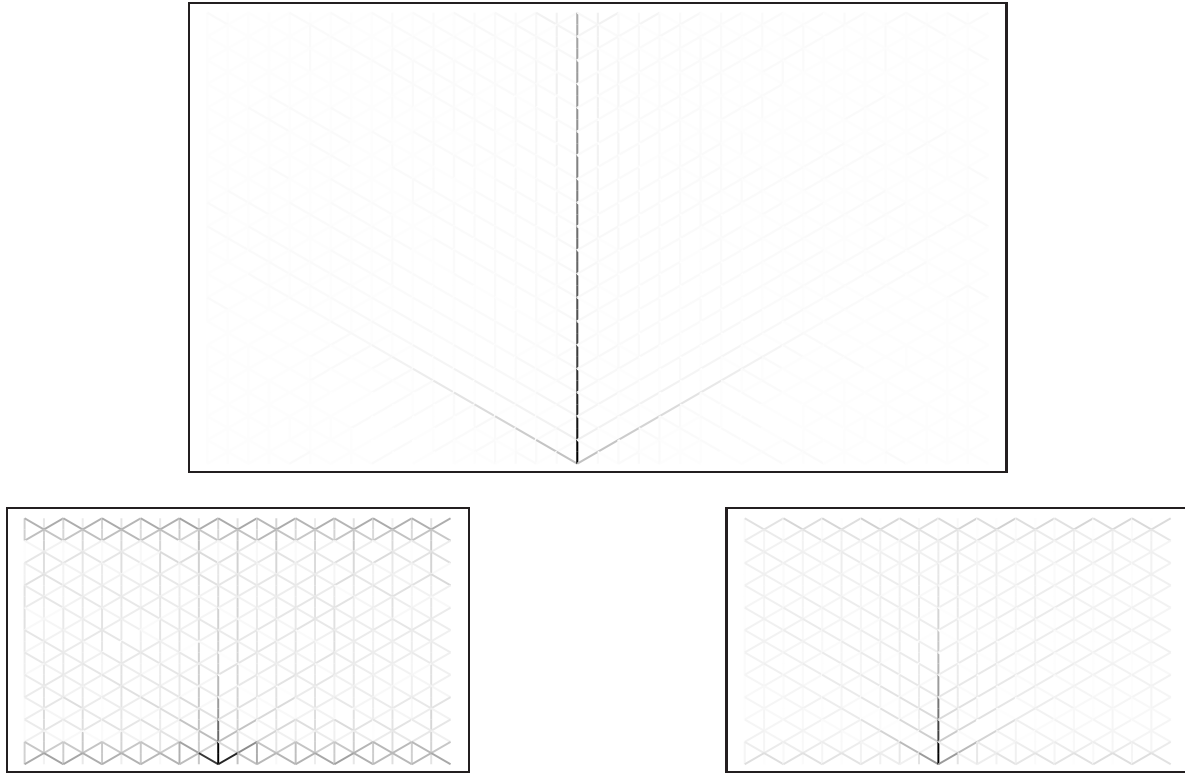


FIG. 15.12 – Réponse d'un empilement à une force localisée selon le modèle bosonique des chaînes de forces. **En haut** : si la force localisée, imposée en un point en bas du réseau, est du même ordre que la force totale répartie de façon homogène en bas du réseau, la réponse de l'empilement est à longue portée. La réponse est de type hyperbolique (les trois directions du réseau sont privilégiées). L'allure de cette réponse n'est pas la même que dans [209] ; pour reproduire les résultats de cette référence (où la réponse est située principalement le long de deux directions à 60° l'une de l'autre alors qu'ici elle est située le long d'une direction et, dans une moindre mesure, le long de deux autres directions), nous devrions exercer la force localisée sur l'un des côtés *verticaux* du réseau. Les paramètres utilisés pour obtenir cette figure par simulation Monte Carlo sont $L = 19$, $H = 38$, $n_L = n_R = 33$ (nombre de particules L et R libres le long de la ligne en bas du réseau) et $w = 1.473553572$ (ce qui assurerait l'invariance par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ sans la force localisée en bas), et nous ajoutons 33 particules de chaque type localisés au centre de la ligne en bas (chaque ligne contient donc 66 quanta L et autant de R). La figure montre le résultat de la moyenne de 10000 simulations ; le niveau de gris d'un lien est d'autant plus sombre que la force moyenne qu'il porte s'écarte de la force moyenne qu'il porterait si les quanta de forces étaient répartis uniformément. **En bas** : réponse à une force localisée « infinitésimale » (c'est-à-dire que nous imposons, en plus de la force répartie sur la ligne en bas du réseau, une force localisée d'intensité un quantum, qui est la plus faible intensité accessible). Le réseau a pour taille $L = 11$, $H = 22$. Il contient $n_L = n_R = 19$ particules réparties librement en bas plus une placée au centre (à gauche) et $n_L = n_R = 4$ particules réparties librement en bas plus une placée au centre (à droite). $w = 1.474577515$ à gauche et 1.472381103 à droite assureraient l'invariance par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$ sans la force localisée en bas. On constate que la réponse à la force localisée est d'autant plus concentrée au voisinage du point où cette force est exercée que le nombre de quanta par ligne est important, ce qui s'interprète facilement en termes de tailles de cellules hexagonales des configurations fermioniques de la décomposition des configurations bosoniques du modèle : plus $n_L = n_R$ est petit, plus les cellules hexagonales sont grandes, et plus les chaînes de forces qui prennent naissance au point où la force est exercée voyagent sans perturbation avant de se « dissoudre » du fait des interactions avec les autres particules.

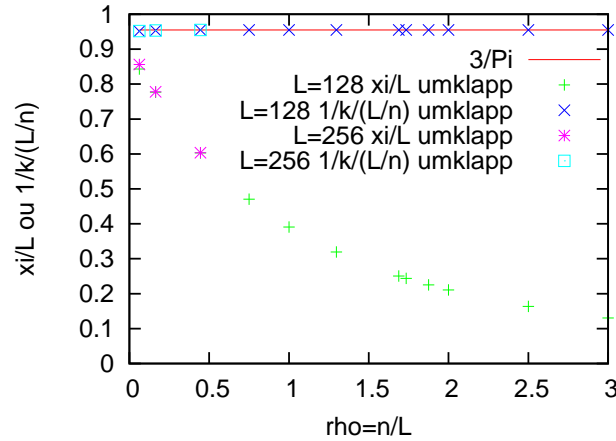


FIG. 15.13 – Longueur de relaxation ξ (rapportée à la largeur L du réseau de topologie cylindrique) pour les largeurs $L = 128$ et $L = 256$ et nombre d'ondes $1/k$ (rapporté à la distance moyenne L/n entre particules de même type, L ou R, sur une ligne de largeur L du réseau) des excitations « de basse énergie » correspondantes, en fonction de la densité $\rho = n/L$ de particules L et R sur chaque ligne du réseau ($n_L = n_R$), et pour la valeur de w (pour chaque valeur de ρ) qui assure l'invariance par rotations d'angles $\pm 2\pi/3$. Ces résultats sont tirés de la résolution numérique des EAB du modèle bosonique. Les points pour $L = 128$ et $L = 256$ sont confondus sauf aux petites densités $\rho \ll 1$ où les effets de taille finie se font encore sentir. La ligne horizontale a pour ordonnée $3/\pi$; elle sert à montrer (numériquement) que $k = \pi/3\rho$.

localisées. Le nombre d'onde k calculé d'après la solution numérique des EAB est en très bon accord avec la formule

$$k = \frac{\pi}{3}\rho, \quad (15.9)$$

et il est naturel que la longueur d'onde de l'excitation fasse intervenir $1/\rho$, puisque c'est la distance moyenne entre deux particules de même type (deux L ou deux R) sur une ligne du réseau. Pour observer une telle excitation à longue portée dans un empilement expérimental, on pourrait imaginer de placer les grains bidimensionnels sur une tôle ondulée ayant la bonne longueur d'onde. Si les propriétés des empilements sont correctement prédites par le modèle bosonique (ce qui est tout sauf certain puisque nous avons que l'hypothèse d'Edwards sur lequel ce modèle repose est fausse), la densité ρ des empilements stables est supérieure ou égale à $\sqrt{3}$ (en dessous de cette densité, $\langle z \rangle$ n'atteint même pas la valeur d'isostaticité quatre et il n'y a pas d'empilement mécanique stable), donc la longueur d'onde $2\pi/k = 6/\rho$ des excitations « fondamentales » est inférieure ou égale à $2\sqrt{3} \approx 3,4641016$. Même si ces prédictions reposant sur l'hypothèse d'Edwards ont de bonnes chances d'être fausses, il nous semblerait intéressant de réaliser des expériences où un empilement est placé sur une tôle ondulée (ou une « boîte à œufs » à trois dimensions) et de voir l'effet produit pour différentes longueurs d'onde.

Un dernier commentaire avant de clore ce chapitre et, avec lui, ce (trop ?) long mémoire de thèse : W. G. Ellenbroek *et al.* [187] étudient la réponse, à une force localisée, d'empilements bidimensionnels sans frottements, à la limite du *jamming*, et *désordonnés*. Ils trouvent une longueur de relaxation l^* qui diverge avec la distance à la transition : $l^* \sim 1/\Delta z$ où Δz est la différence entre le nombre de coordination moyen $\langle z \rangle$ et le nombre de coordination moyen en cas d'isostaticité (ici, quatre). Ceci est bien entendu fort différent de ce que nous avons discuté plus haut, où la longueur de corrélation (ou de relaxation) était finie au voisinage de la transition (du premier ordre) de *jamming*. Nous spéculons que ces résultats peuvent être compris dans le cadre de la théorie des transitions de phases désordonnées vue rapidement p. 22 : quand l'empilement est (suffisamment) désordonné, c'est-à-dire pour des systèmes plus grands que la longueur de corrélation du désordre, la transition de phase discontinue est « lissée » en transition de phase du deuxième ordre avec longueur de corrélation qui diverge au voisinage du seuil.

Conclusion



*Il me reste du passé
Une chose à retenir
On ne chantait pas très bien
Nous n'étions pas les pires*

Eddy Mitchell, *Mon Flash-Back*

REPRENONS les principaux résultats de cette thèse et donnons des perspectives d'études ultérieures. La première partie a montré que le phénomène d'universalité critique se rencontre aussi en informatique théorique — dans un cas particulier, certes, mais très général à l'intérieur de son domaine, les algorithmes de résolution de problèmes de satisfaction complets fondés sur une recherche en profondeur d'abord dans l'arbre des combinaisons de valeurs des variables. Grâce au caractère de champ moyen de la distribution « K -SAT aléatoire », nous avons pu calculer exactement les exposants critiques et donner l'expression analytique par quadrature de la fonction d'échelle dans le cas $(2+p)$ -SAT avec $p > 2/5$ et K -SAT avec $K \geq 3$ (dans le cas $(2+p)$ -SAT avec $p < 2/5$, cette fonction d'échelle est définie implicitement à partir d'une équation aux dérivées partielles que l'on ne peut résoudre par quadrature). Il serait intéressant de voir jusqu'où la classe d'universalité de la propagation unitaire s'étend : d'une part pour d'autres problèmes (problèmes de décision avec variables à valeurs continues, problèmes d'optimisation : MAX-SAT, de comptage : #SAT, etc.), d'autre part quand la distribution d'instances est radicalement différente de la distribution « uniforme » « K -SAT aléatoire » — par exemple pour une distribution « sans échelle » où la probabilité de trouver une variable qui apparaît dans l contraintes décroît algébriquement avec l .

La deuxième partie a mis en place un formalisme permettant de calculer perturbativement mais systématiquement la fonction de grandes déviations du nombre de sites malades pour l'état métastable du processus de contact sur réseau \mathbb{Z}^D , sur arbre de Cayley T_d , etc. au voisinage de la limite de champ moyen (graphe complet) $D \rightarrow +\infty$. En particulier nous en déduisons la durée de vie de l'état métastable. Nous avons déjà indiqué de nombreuses pistes d'élargissement : le formalisme est prêt pour le cas de variables à un nombre fini mais quelconques de valeurs ou pour des variables à lois de Poisson, et il semble assez facile et prometteur d'étudier les deux modèles de biologie des populations que nous avons cités à la fin de cette partie. Il serait aussi intéressant d'utiliser ce formalisme sur les modèles à contraintes cinétiques comme le modèle de Fredrickson-Andersen. Très intéressante aussi, mais plus ambitieuse semble-t-il d'après notre remarque sur les variables corrélées, l'étude d'algorithmes locaux de recherche de solutions aux instances du problème SAT.

Dans la troisième partie, enfin, où nous avons construit et étudié deux modèles bidimensionnels exactement solubles pour la statique des milieux granulaires, montré que la transition de phase du modèle bosonique peut s'interpréter comme une transition de *jamming*, et infirmé l'hypothèse d'Edwards dans un cas réaliste d'empilement, de nombreuses questions restent ouvertes. Du point de vue des modèles intégrables, d'abord : à quelle(s) famille(s) de solutions des équations de Yang-Baxter ces modèles se rattachent-ils ? Le modèle bosonique est-il un cas particulier d'*Ansätze* de Bethe emboîtés ? La construction d'un modèle bosonique à partir d'un modèle fermionique et vice versa peut très certainement se généraliser ; que donne-t-elle dans le cas général ? Quelles seraient les équations de l'*Ansatz* de Bethe pour la formulation de nos modèles où le réseau est tourné d'un angle droit, et que vaudraient alors les longueurs de corrélation ? Peut-on mieux comprendre quelles symétries apparaissent aux points de contact des courbes limites des racines des équations de l'*Ansatz* de Bethe ? Peut-on calculer analytiquement l'entropie pour toute valeur de γ ? Peut-on étendre le calcul analytique à des situations plus générales, par exemple à l'aide d'un prolongement analytique pour une densité de racines négative [299] ? Quels résultats apporterait une étude selon la méthode de [312] du spectre de la matrice de transfert au point de contact des courbes des solutions des EAB en position symétrique par rapport à l'axe des nombres imaginaires purs (cette méthode permet de trouver

la valeur de la charge centrale dans le cas où le modèle possède la symétrie conforme [71]) ? Peut-on utiliser les résultats d'intégrabilité pour calculer la distribution des intensités des forces entre grains ou plus généralement exploiter les informations que nous avons sur les vecteurs propres de la matrice de transfert ? D'un point de vue physique, comment les résultats se généralisent-ils en dimension trois ? À des systèmes de grains avec friction, ou avec polydispersité des grains ? Si la mesure uniforme d'Edwards n'est pas la bonne, comme le montre la comparaison avec les résultats numériques pour la transition de percolation, peut-on néanmoins donner des renseignements sur la vraie mesure ? Voire trouver un modèle exactement soluble qui reproduirait cette mesure de probabilité ?

En tout cas, l'approche de la mécanique statistique initiée par J. C. Maxwell, L. Boltzmann, J. W. Gibbs, A. Einstein et d'autres est toujours très vivante et a su prendre son envol du berceau de la physique de la matière condensée pour se montrer féconde dans bien d'autres cadres, de l'informatique à la biologie. Nous serions heureux d'avoir pu contribuer à l'enrichir, fût-ce de manière infime.

Bibliographie

- [1] Micheal Aizenman and Jan Wehr. Rounding of first-order phase transitions in systems with quenched disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 62(21):2503–2506, May 1989.
- [2] Kenneth Hui and A. Nihat Berker. Random-field mechanism in random-bond multicritical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62(21):2507–2510, May 1989.
- [3] Subir Sachdev. *Quantum phase transitions*. Cambridge University Press, Cambridge, U.K., 1999.
- [4] Thomas Bourdel, L. Khaykovich, Julien Cubizolles, J. Zhang, Frédéric Chevy, M. Teichmann, L. Tarruell, S. J. J. M. F. Kokkelmans, and Christophe Salomon. Experimental study of the BEC-BCS crossover region in Lithium 6. *Phys. Rev. Lett.*, 93(5):050401–1–4, 2004, cond-mat/0403091.
- [5] Paul Erdős and Alfréd Rényi. On random graphs. *Publ. Math. Debrecen*, 6:290–297, 1959.
- [6] Paul Erdős and Alfréd Rényi. On the evolution of random graphs. *Publ. Math. Inst. Hungar. Acad. Sci.*, 5:17–61, 1960.
- [7] Marc Mézard, Giorgio Parisi, and Miguel Angel Virasoro. *Spin glass theory and beyond*. World Scientific, Singapore, 1987.
- [8] Vladimir Kazakov. Modèles de matrices (cours de l'École doctorale “physique de la région parisienne”), 2002.
- [9] Ehud Friedgut. Sharp thresholds of graph properties, and the k -SAT problem. *Journal of the American Mathematical Society*, 12(4):1017–1054, May 1999.
- [10] Ehud Friedgut. Hunting for sharp thresholds. *Random Structures Algorithms*, 26(1–2):37–51, 2005.
- [11] Karry Kesten. The critical probability of bond percolation on the square lattice equals $1/2$. *Commun. Math. Phys.*, 74(1):41–59, February 1980.
- [12] Fa-Yueh Wu. The Potts model. *Rev. Mod. Phys.*, 54(1):235–268, January 1982.
- [13] Joel H. Spencer. Random graphs. Lecture notes presented at the school on “Statistical physics, probability theory and computational complexity”, Trieste, 26th August–4th September 2002.
- [14] S. Janson, T. Łuczak, and A. Ruciński. *Random Graphs*. Wiley, 2000.
- [15] Dietrich Stauffer. *Introduction to percolation theory*. Taylor and Francis (London and Philadelphia), 1985.
- [16] Hsiao-Ping Hsu, Simon C. Lin, and Chin-Kun Hu. Universal scaling functions for bond percolation on planar-random and square lattices with multiple percolating clusters. *Phys. Rev. E*, 64:016127–1–8, June 2001.

- [17] M. E. J. Newman, S. H. Strogatz, and D. J. Watts. Random graphs with arbitrary degree distribution and their applications. *Phys. Rev. E*, 64:026118–1–17, July 2001.
- [18] Dimitris Achlioptas and Ehud Friedgut. A sharp threshold for k -colorability. *Random Structures Algorithms*, 14:63–70, 1999.
- [19] Eli Ben-Naim, P. L. Krapivsky, and S. Redner. Extremal properties of random structures. *Lecture Notes in Physics*, in press, 2004, cond-mat/0311552.
- [20] Michael Molloy and Bruce Reed. The size of the giant component of a random graph with a given degree sequence. *Combin. Probab. Comput.*, 7:295–305, 1998.
- [21] L. Viana and Allan J. Bray. Phase diagrams for dilute spin-glasses. *J. Phys. C – Solid State Phys.*, 18:3037, 1985.
- [22] Marc Mézard, Thierry Mora, and Riccardo Zecchina. Clustering of solutions in the random satisfiability problem. *Phys. Rev. Lett.*, 94:197205–1–4, May 2005, cond-mat/0504070.
- [23] Dimitris Achlioptas, A. Naor, and Y. Peres. Rigorous location of phase transitions in hard optimization problems. *Nature*, 435:759–764, 2005.
- [24] Kenneth G. Wilson and J. Kogut. The renormalization group and the ϵ expansion. *Phys. Rep.*, 12(2):75–199, August 1974.
- [25] Claude Itzykson and Jean-Bernard Zuber. *Quantum field theory*. Dover, 2005.
- [26] Christina Goldschmidt. Critical random hypergraphs: the emergence of a giant set of identifiable vertices. *Annals of Probability*, 33(4):1573–1600, July 2005, math.PR/0401208.
- [27] D. J. Watts and S. H. Strogatz. Collective dynamics of ‘small-world’ networks. *Nature*, 393:440–442, 1998.
- [28] Albert-Laszlo Barabási and R. Albert. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 286:509–512, 1999.
- [29] R. Albert and Albert-Laszlo Barabási. Statistical mechanics of complex networks. *Rev. Mod. Phys.*, 74(1):47–97, January 2002.
- [30] Suhan Ree. Generation of scale-free networks using a simple preferential rewiring dynamics. Preprint, January 2006, cond-mat/0601590.
- [31] F. Bassetti, M. Cosentino Lagomarsino, B. Bassetti, and P. Jona. Complex networks at the toss of a coin. Preprint, April 2006, cond-mat/0604024.
- [32] Jesús Gómez-Gardeñez and Yamir Moreno. From scale-free to Erdős-Rényi networks. Preprint, April 2006, cond-mat/0604100.
- [33] Paul L. Krapivsky and Bernard Derrida. Universal properties of growing networks. *Physica A*, 340:714–724, 2004, cond-mat/0408161.
- [34] Stuart Russel and Peter Norvig. *Artificial Intelligence: A Modern Approach, 2nd edition*. Prentice Hall, 2002.
- [35] William H. Press, Brian P. Flannery, Saul A. Teukolsky, and William T. Vetterling. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, Cambridge (UK) and New York, 2nd edition, 1992.

- [36] K.-H. Borgwardt. The average number of pivot steps required by the simplex-method is polynomial. *Mathematical Methods of Operations Research (ZOR)*, 26(1):157–177, December 1982.
- [37] V. Klee and G.J. Minty. *How Good is the Simplex Algorithm?*, pages 159–175. Academic Press, New York, 1972.
- [38] Daniel A. Spielman and Shang-Hua Teng. Smoothed analysis of algorithms: Why the simplex algorithm usually takes polynomial time. *Journal of the ACM*, 51(3):385–463, May 2004.
- [39] M. R. Garey and D. S. Johnson. *Computers and Intractability: a guide to the theory of NP-completeness*. W. H. Freeman and Co., New York, 1979.
- [40] Christos H. Papadimitriou and Kenneth Steiglitz. *Combinatorial Optimization*. Dover, 1998.
- [41] Stephan Mertens. Computational complexity for physicists. *Computing in Science and Engineering*, 4(3):31–47, May-June 2002, cond-mat/0012185.
- [42] Stephan Mertens. *The Easiest Hard Problem: Number Partitioning*, pages 125–139. Oxford University Press, New York, 2004, cond-mat/0310317.
- [43] David S. Dean, David Lancaster, and Satya N. Majumdar. Statistical mechanics of combinatorial optimization problems with site disorder. *Phys. Rev. E*, 72(2):026125–1–14, August 2005, cond-mat/0504448.
- [44] Bengt Aspvall, Michael F. Plass, and Robert Endre Tarjan. A linear-time algorithm for testing the truth of certain quantified boolean formulas. *Inf. Process. Lett.*, 8:121–123, 1979.
- [45] Rémi Monasson and Riccardo Zecchina. Statistical mechanics of the random k-sat model. *Phys. Rev. E*, 56(2):1357–1370, August 1997, cond-mat/9606215.
- [46] Olivier Martin. *Probing spin glasses with heuristic optimization algorithms*, chapter 3, pages 23–46. Wiley VCH Verlag, Berlin, 2004, cond-mat/0408556.
- [47] Martin Davis and Hillary Putnam. A computing procedure for quantification theory. *Journal of the ACM*, 7:201–215, 1960.
- [48] Martin Davis, George Logemann, and Donald W. Loveland. A machine program for theorem proving. *Communications of the ACM*, 5(7):394–397, 1962.
- [49] Michael J. Fischer and Michael O. Rabin. Super-exponential complexity of presburger arithmetic. In *Proceedings of the SIAM-AMS Symposium in Applied Mathematics*, volume 7, pages 27–41, 1974.
- [50] Greg Nelson and Derek C. Oppen. A simplifier based on efficient decision algorithms. In *POPL '78: Proceedings of the 5th ACM SIGACT-SIGPLAN symposium on Principles of programming languages*, pages 141–150, New York, NY, USA, 1978. ACM Press.
- [51] Manindra Agrawal, Neeraj Kayal, and Nitin Saxena. PRIMES is in P. *Annals of Mathematics*, 160(2):781–793, 2004.
- [52] Bart Selman, Henry A. Kautz, and Bram Cohen. Local search strategies for satisfiability testing. In David S. Johnson and Michael A. Trick, editors, *Cliques, Coloring, and Satisfiability: Second DIMACS Implementation Challenge, October 11-13, 1993*, volume 26 of *DIMACS Series in Discrete Mathematics and Theoretical Computer Science*, pages 521–532. AMS, 1996.

- [53] Bart Selman, Henry A. Kautz, and Bram Cohen. Noise strategies for improving local search. In *Proceedings of the Twelfth National Conference on Artificial Intelligence (AAAI'94)*, pages 337–343, Seattle, 1994.
- [54] Christos H. Papadimitriou. On selecting a satisfying truth assignment. In *Proceedings of the 32nd Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science, San Juan, Puerto Rico, 1–4 October 1991*, pages 163–169, 1991.
- [55] John Ardelius and Erik Aurell. Behavior of heuristics and state space structure near sat/unsat transition. Preprint, January 2006, cond-mat/0601703.
- [56] Olivier C. Martin. *Iterated local search*, volume 57 of *International Series in Operations Research and Management Science*, pages 321–353. Kluwer, 2002, math.OC/0102188.
- [57] Uwe Schöning. A probabilistic algorithm for k-sat and constraint satisfaction problems. *FOCS*, 00:410, 1999.
- [58] John Franco and R. P. Swaminathan. Average case results for satisfiability algorithms under the random clause model. *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, 20:357–391, 1997.
- [59] Alexis C. Kaporis, Lefteris M. Kirousis, and Efthimios G. Lalas. The probability analysis of a greedy satisfiability algorithm. In *Proc. 10th Ann. European Symp. on Algorithms*, pages 574–585, 2002.
- [60] Olivier Dubois, Yacine Boufkhad, and Jacques Mandler. Typical random 3-sat formulae and the satisfiability threshold. In *Proc. 11th ACM-SIAM Symposium on Discrete Algorithms*, pages 126–127, 2000.
- [61] David Bruce Wilson. On the critical exponents of random k -sat. *Random Structures and Algorithms*, 21(2):182–195, 2002, math.PR/0005136.
- [62] Simona Cocco, Olivier Dubois, Jacques Mandler, and Rémi Monasson. Rigorous decimation-based construction of ground pure states for spin glass models on random lattices. *Phys. Rev. Lett.*, 90:047205, 2003.
- [63] Joaõ Marquês-Silva and T. Glass. Combinatorial equivalence checking using satisfiability and recursive learning. In *Design, automation and test in Europe — Conference and exhibition 1999 Proceedings*, pages 145–149. AMS, 1999.
- [64] Niklas Eén and Niklas Sörensson. An extensible sat-solver. In *Theory and applications of satisfiability testing: 6th international conference, SAT 2003, Santa Margherita Ligure, Italy, May 5-8, 2003, Selected Revised Papers*, volume 2919 of *Lecture notes in computer science*, pages 502–518. Springer, Berlin/Heidelberg, 2004.
- [65] Alan Frieze and Stephen Suen. Analysis of two simple heuristics on a random instance of k-sat. *J. Algorithms*, 20(2):312–355, 1996.
- [66] Simona Cocco and Rémi Monasson. Heuristic average case analysis of the backtrack resolution of random 3-satisfiability instances. *Theor. Comp. Sci.*, A 320:345, 2004.
- [67] Rémi Monasson. A generating function method for the average-case analysis of dpll. *Lecture Notes in Computer Science*, 3624:402–413, 2005.
- [68] Ming-Te Chao and John Franco. Probabilistic analysis of a generalization of the unit-clause literal selection heuristics for the k-satisfiability problem. *Inform. Sci.*, 51(3):289–314, 1990.

- [69] Gilles Dequen and Olivier Dubois. kcdfs: an efficient solver for random k -sat formulae. *Lecture Notes in Computer Science 2919, Theory and Applications of Satisfiability Testing*, pages 486–501, 2004.
- [70] Rémi Monasson, Riccardo Zecchina, Scott Kirkpatrick, Bart Selman, and L. Toyansky. Phase transition and search cost in the $2+p$ -sat problem. In *4th Workshop on Physics and Computation*, Boston University, November 1996.
- [71] Philippe Christe and Malte Henkel. *Introduction to conformal invariance and its applications to critical phenomena*. Lecture notes in physics. Springer, 1993.
- [72] Satya N. Majumdar and Alain Comtet. Airy distribution function: From the area under a brownian excursion to the maximal height of fluctuating interfaces. *J. Stat. Phys.*, 119:777, 2005, cond-mat/0409566.
- [73] Satya N. Majumdar. Brownian functionals in physics and computer science. Preprint, October 2005, cond-mat/0510064.
- [74] Boris Pittel, Joel Spencer, and Nicholas Wormald. Sudden emergence of a giant k -core in a random graph. *Journal of Combinatorial Theory Series B*, 67(1):111–151, May 1996.
- [75] Ming-Te Chao and John Franco. Probabilistic analysis of two heuristics for the 3-satisfiability problem. *SIAM J. Comput.*, 15(4):1106–1118, 1986.
- [76] Dimitris Achlioptas. Lower bounds for random 3-sat via differential equations. *Theor. Comp. Sci.*, 265(1–2):159–185, 2001.
- [77] Nicholas C. Wormald. Differential equations for random processes and random graphs. *The Annals of Applied Probability*, 5(4):1217–1235, November 1995.
- [78] Béla Bollobás, Christian Borgs, Jennifer T. Chayes, Jeong Han Kim, and David Bruce Wilson. The scaling window of the 2-SAT transition. *Random Structures and Algorithms*, 18(3):201–256, 2001.
- [79] Dimitris Achlioptas and Gregory B. Sorkin. Optimal myopic algorithms for random 3-SAT. In *IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*, pages 590–600, 2000.
- [80] David Aldous. Brownian excursions, critical random graphs and the multiplicative coalescent. *Annals of Probability*, 25:812–854, 1997.
- [81] Lev D. Landau and E. M. Lifschitz. *Physique théorique — physique statistique*. Éd. Mir, Moscou, 1984.
- [82] N. G. van Kampen. *Stochastic processes in physics and chemistry*. Elsevier, 1992.
- [83] Joan Adler. Bootstrap percolation. *Physica A*, 171:453–470, 1991.
- [84] Robert Connelly, Konstantin Rybnikov, and Stanislav Volkov. Percolation of the loss of tension in an infinite triangular lattice. *J. Stat. Phys.*, 105(1–2):143–171, October 2001.
- [85] Bernard Derrida. An exactly soluble non-equilibrium system: the asymmetric simple exclusion process. *Phys. Rep.*, 301(1–3):65–83, July 1998.
- [86] Felix Ritort and Peter Sollich. Glassy dynamics of kinetically constrained models. *Adv. Phys.*, 52(4):219–342, 2003, cond-mat/0210382.
- [87] Thomas M. Liggett. *Interacting Particle Systems*. Springer, 1985.
- [88] Thomas M. Liggett. *Stochastic Interacting Systems: Contact, Voter and Exclusion Processes*. Springer, 1999.

- [89] Guilhem Semerjian and Rémi Monasson. Relaxation and metastability in a local search procedure for the random satisfiability problem. *Phys. Rev. E*, 67(6):066103–1–18, June 2003, cond-mat/0301272.
- [90] Wolfgang Barthel, Alexander K. Hartmann, and Martin Weigt. Solving satisfiability problems by fluctuations: The dynamics of stochastic local search algorithms. *Phys. Rev. E*, 67(6):066104–1–15, June 2003, cond-mat/0301271.
- [91] Rick Durrett. *The contact process: 1974–1989*, volume 27 of *Lectures in applied mathematics*, pages 1–18. American Mathematical Society, 1992.
- [92] T. E. Harris. Contact interactions on a lattice. *Annals of Probability*, 2(6):969–988, December 1974.
- [93] F. Schlögl. Chemical reaction models for non-equilibrium phase transitions. *Z. Phys. A Hadrons and Nuclei*, 253(2):147–161, April 1972.
- [94] Francesco Ginelli, Haye Hinrichsen, R. Livi, D. Mukamel, and A. Torcini. Contact processes with long-range interactions. Preprint, June 2006, cond-mat/0606450.
- [95] Mathew D. Penrose. The threshold contact process: a continuum limit. *Probability Theory and Related Fields*, 104:77–96, 1996.
- [96] Marzio Cassandro, Antonio Galves, Enzo Olivieri, and Maria Eulália Vares. Metastable behavior of stochastic dynamics: a pathwise approach. *J. Stat. Phys.*, 35:603–634, 1984.
- [97] Adilson Simonis. Metastability of the d-dimensional contact process. *J. Stat. Phys.*, 83(5–6):1225–1239, June 1996.
- [98] J. D. Gunton, M. San Miguel, and P. S. Sahni. The dynamics of first order phase transitions. In Domb and Lebowitz, editors, *Phase transitions and critical phenomena*. Academic Press, London, 1983.
- [99] Yossi Farjoun and John C. Neu. Resolving paradoxes of classical nucleation theory. Preprint, June 2006, cond-mat/0606020.
- [100] Robert B. Griffiths, Chi-Yuan Weng, and James S. Langer. Relaxation times for metastable states in the mean-field model of a ferromagnet. *Phys. Rev.*, 149(1):301–305, September 1966.
- [101] Russell Lyons. Phase transitions on nonamenable graphs. *J. Math. Phys.*, 41(3):1099–1126, March 2000.
- [102] Roberto H. Schonmann. Multiplicity of phase transitions and mean-field criticality on highly non-amenable graphs. *Commun. Math. Phys.*, 219:271–322, 2001.
- [103] Marcia Salzano. Infinitely many contact process transitions on a tree. *J. Stat. Phys.*, 97(3/4):817–826, 1999.
- [104] Rick Durrett and Paul Jung. Two phase transitions for the contact process on small worlds. Preprint; submitted to *Stoch. Processes Appl.*
- [105] Ronald Dickman. Nonequilibrium lattice models: series analysis of steady states. *J. Stat. Phys.*, 55(5–6):997–1026, June 1989.
- [106] Iwan Jensen and Ronald Dickman. Series analysis of the generalized contact process. *Physica A*, 203(2):175–188, February 1994.
- [107] Munir M. S. Sabag and Mário J. de Oliveira. Conserved contact process in one to five dimensions. *Phys. Rev. E*, 66(3):036115–1–5, September 2002.

- [108] Tânia Tomé and Mário J. de Oliveira. Nonequilibrium model for the contact process in an ensemble of constant particle number. *Phys. Rev. Lett.*, 86(25):5643–5646, June 2001.
- [109] Ronald Dickman and Ronaldo Vidigal. Quasi-stationary distributions for stochastic processes with an absorbing state. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 35(5):1147–1166, February 2002, cond-mat/0110557.
- [110] Peter Grassberger and K. Sundermeyer. Reggeon field-theory and markov-processes. *Phys. Lett. B*, 77(2):220–222, 1978.
- [111] J. L. Cardy and R. L. Sugar. Directed percolation and reggeon field-theory. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 13(12):L423–L427, 1980.
- [112] Hans-Karl Janssen. On the non-equilibrium phase-transition in reaction-diffusion systems with an absorbing stationary state. *Z. Phys. B*, 42(2):151–154, 1981.
- [113] Peter Grassberger. On phase transitions in schlögl 2nd model. *Z. Phys. B*, 47(4):365–374, 1982.
- [114] Chris J. Neugebauer, S. V. Fallert, and S. N. Taraskin. The contact process in heterogeneous and weakly-disordered systems. Preprint, May 2006, cond-mat/0605713.
- [115] Vlad Elgart and Alex Kamenev. Towards classification of phase transitions in reaction-diffusion models. Preprint, May 2006, cond-mat/0605041.
- [116] Frédéric van Wijland. Universality class of nonequilibrium phase transitions with infinitely many absorbing states. *Phys. Rev. Lett.*, 89(19):190601–1–4, November 2002, cond-mat/0209202.
- [117] Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg. Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions. *Rev. Mod. Phys.*, 68(1):13–125, January 1996, cond-mat/9510091.
- [118] Antoine Georges and Jonathan Yedidia. How to expand around mean-field theory using high-temperature expansions. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 24(9):2173–2192, May 1991.
- [119] L. V. Keldysh. Diagram technique for nonequilibrium processes. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 47:1515, 1964.
- [120] P. C. Martin, E. D. Siggia, and H. A. Rose. Statistical dynamics of classical systems. *Phys. Rev. A*, 8(1):423–437, July 1973.
- [121] Leo P. Kadanoff and Jack Swift. Transport coefficients near the critical point: A master-equation approach. *Phys. Rev.*, 165(1):310, January 1968.
- [122] B. U. Felderhof. Spin relaxation of the ising chain. *Rep. Math. Phys.*, 1:215–234, 1971.
- [123] B. U. Felderhof. Note on spin relaxation of the ising chain. *Rep. Math. Phys.*, 2(2):151–152, 1971.
- [124] Harvey A. Rose. Renormalized kinetic theory of nonequilibrium many-particle classical systems. *J. Stat. Phys.*, 20(4):415–447, April 1979.
- [125] Peter Grassberger et M. Scheunert. Fock-space methods for identical classical objects. *Fortschritte Phys.-Prog. Phys.*, 28:547–578, 1980.
- [126] M. Doi. Second quantization representation for classical many-particle system. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 9(9):1465–1477, September 1976.

- [127] Hans-Karl Janssen. On a lagrangian for classical field dynamics and renormalization group calculations of dynamical critical properties. *Z. Phys. B*, 23(4):377–380, 1976.
- [128] R. Bausch, Hans-Karl Janssen, and H. Wagner. Renormalized field-theory of critical dynamics. *Z. Phys. B*, 24(1):113–127, 1976.
- [129] Cirano de Dominicis. Techniques de renormalisation de la théorie des champs et dynamique des phénomènes critiques. *J. Phys. Colloq. (Paris)*, 37(1):C1–247–C1–253, 1976.
- [130] L. Peliti. Path integral approach to birth-death processes on a lattice. *J. Physique*, 46:1469–1483, September 1985.
- [131] Benjamin P. Lee. Renormalization group calculation for the reaction $ka \rightarrow \emptyset$. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 27(8):2633–2652, April 1994, cond-mat/9311064.
- [132] Benjamin P. Lee and John Cardy. Renormalization group study of the $a+b \rightarrow 0$ diffusion-limited reaction. *J. Stat. Phys.*, 80:971–, 1995, cond-mat/9412063.
- [133] Benjamin P. Lee and John Cardy. Comment on renormalization group study of the $a+b \rightarrow 0$ diffusion-limited reaction. *J. Stat. Phys.*, 87:951–, 1997, cond-mat/9612070.
- [134] John L. Cardy. Renormalisation group approach to reaction-diffusion problems. In Jean-Michel Drouffe and Jean-Bernard Zuber, editors, *The Mathematical Beauty of Physics*, pages 113–125, Singapore, June 1996. World Scientific, cond-mat/9607163.
- [135] Alexei Andreanov, Giulio Biroli, Jean-Philippe Bouchaud, and Alexandre Lefèvre. Field theories and exact stochastic equations for interacting particle systems. Preprint, February 2006, cond-mat/0602307.
- [136] Haye Hinrichsen. Nonequilibrium critical phenomena and phase transitions into absorbing states. *Advances in Physics*, 49:815–958, 2000, cond-mat/0001070.
- [137] Uwe C. Täuber. Field theory approaches to nonequilibrium dynamics. Lecture Notes for Luxembourg Summer School “Ageing and the Glass Transition”, November 2005, cond-mat/0511743.
- [138] Michael Assaf and Baruch Meerson. Spectral formulation and wkb approximation for rare-event statistics in reaction systems. Preprint, 2006, cond-mat/0606210.
- [139] L. Bertini, A. De Sole, D. Gabrielli, Gianni Jona-Lasinio, and C. Landim. Current fluctuations in stochastic lattice gases. *Phys. Rev. Lett.*, 94(3):030601–1–4, January 2005, cond-mat/0407161.
- [140] John W. Negele and Henri Orland. *Quantum many-particle systems*. Frontiers in physics — Lecture note series. Addison-Wesley, 1988.
- [141] Lawrence S. Schulman. *Techniques and applications of path integration*. Wiley, 1981.
- [142] John R. Klauder. The action option and a feynman quantization of spinor fields on terms of ordinary c-numbers. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 11(2):123–168, 1960.
- [143] John R. Klauder. Path integrals and stationary-phase approximations. *Phys. Rev. D*, 19(8):2349–2356, April 1978.
- [144] John R. Klauder and Bo-Sture Skagerstam. *Coherent states: applications in physics and mathematical physics*. World Scientific Publishing, 1985.
- [145] J. M. Radcliffe. Some properties of coherent spin states. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 4:313, 1971.

- [146] L. M. Narducci, C. M. Bowden, V. Bleumel, G. Garrazana, and R. A. Tuft. Multitime-correlation functions and the atomic coherent-state representation. *Phys. Rev. A*, 11:973–980, 1975.
- [147] R. Gilmore. *Applications of coherent states in thermodynamics and dynamics*, page 105. Plenum Publishing Corporation, New York, 1980.
- [148] Michael E. Fisher and David S. Gaunt. Ising model and self-avoiding walks on hypercubical lattices and “high-density” expansions. *Phys. Rev. A*, 133(1A):A224–A239, January 1964.
- [149] David S. Gaunt and Junior George A. Baker. Low-temperature critical exponents from high-temperature series: The ising model. *Phys. Rev. B*, 1(3):1184–1210, February 1970.
- [150] Jonathan S. Yedidia and Antoine Georges. The fully frustrated ising model in infinite dimensions. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 23:2165–2171, 1990.
- [151] Antoine Georges, Marc Mézard, and Jonathan S. Yedidia. Low-temperature phase of the ising spin glass on a hypercubic lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 64(24):2937–2940, June 1990.
- [152] Antoine Georges and Jonathan S. Yedidia. Onsager reaction terms for quantum many-body systems: Application to antiferromagnetic and superconducting order in the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 43(4):3475–3482, February 1991.
- [153] Jean-Pierre Hansen and Ian R. McDonald. *Theory of simple liquids – 2nd edition*. Academic Press, London, 1986.
- [154] Frédéric van Wijland. Field theory for reaction-diffusion processes with hard-core particles. *Phys. Rev. E*, 63(2):022101–1–4, January 2001, cond-mat/0010491.
- [155] Ronald Dickman and Ronaldo Vidigal. Path integrals and perturbation theory for stochastic processes. *Brazilian Journal of Physics*, 33(1):73–93, March 2003, cond-mat/0205321.
- [156] Mikhail Stepanov and Michael Chertkov. Instanton analysis of low-density-parity-check codes in the error-floor regime. Preprint, 2006, cs.IT/0601070.
- [157] Hendrik Jan Hilhorst and Frédéric van Wijland. Equivalence of stationary state ensembles. *Phys. Rev. E*, 65(3):035103–1–3, February 2002, cond-mat/0111168.
- [158] Mário J. de Oliveira. Equivalence of ensembles in creation-annihilation nonequilibrium models. *Phys. Rev. E*, 67(2):027104–1–4, February 2003.
- [159] Irina Mihalcescu, Weihong Hsing, and Stanislas Leibler. Resilient circadian oscillator revealed in individual cyanobacteria. *Nature*, 430:81–85, July 2004.
- [160] Tobias Reichenbach, Mauro Mobilia, and Erwin Frey. Coexistence versus extinction in the stochastic cyclic lotka-volterra model. Preprint, q-bio.PE/0605042.
- [161] A. J. McKane and T. J. Newman. Predator-prey cycles from resonant amplification of demographic stochasticity. *Phys. Rev. Lett.*, 94(21):218101–1–4, June 2005, q-bio/0501023.
- [162] Étienne Guyon and Jean-Paul Troadec. *Du sac de billes au tas de sable*. Odile Jacob (Paris), 1994. 306 p.
- [163] Onuttom Narayan. Vector lattice model for stresses in granular materials. *Phys. Rev. E*, 63(1):010301–1–4, January 2001.

- [164] Loïc Vanel, Daniel Howell, D. Clark, R. P. Behringer, and Éric Clément. Memories in sand: Experimental tests of construction history on stress distributions under sandpiles. *Phys. Rev. E*, 60(5):R5040–5043, November 1999.
- [165] E. Kolb, Chay Goldenberg, S. Inagaki, and Éric Clément. Reorganization of a 2d disordered granular medium due to a small local cyclic perturbation. *Soumis à J. Stat. Mech.: Theory and Exp. (JSTAT)*, December 2005, cond-mat/0512660.
- [166] Éric Clément et Dominique Salin. Milieux granulaires (cours du D.E.A. de physique des liquides de l'École doctorale "physique de la région parisienne"), 2001.
- [167] Tomaso Aste, Tiziana Di Matteo, and Enrico Galleani d'Agliano. Stress transmission in granular matter. *J. Phys.: Condens. Matter*, 14(9):2391–2402, March 2002, cond-mat/0112311.
- [168] Junfei Geng, G. Reydellet, Éric Clément, and R. P. Behringer. Green's function measurements of force transmission in 2d granular materials. *Physica D*, 182(3–4):274–303, August 2003, cond-mat/0211031.
- [169] Tomaso Aste. Volume fluctuations and geometrical constraints in granular packs. *Phys. Rev. Lett.*, 96(1):018002–1–4, January 2006, cond-mat/0507260.
- [170] J. Brujic, G. Marty, C. Song, C. Briscoe, and Hernán A. Makse. Fluorescent contacts measure the coordination number and entropy of a 3d jammed emulsion packing. Preprint, May 2006, cond-mat/0605752.
- [171] John F. Wambaugh. Graph percolation as an analog to granular force networks. Preprint, March 2006, cond-mat/0603314.
- [172] Farhang Radjai, Dietrich E. Wolf, Michel Jean, and Jean-Jacques Moreau. Bimodal character of stress transmission in granular packings. *Phys. Rev. Lett.*, 80(1):61–64, January 1998.
- [173] Srdjan Ostojic and Bernard Nienhuis. Fractal nature of force networks in jammed matter. Preprint; to appear in the proceedings of *Traffic and Granular Flow 2005*, March 2005, cond-mat/0503426.
- [174] Srdjan Ostojic, Ellák Somfai, and Bernard Nienhuis. Scale invariance and universality of force networks in static granular matter. *Nature*, 439:828, 2006, cond-mat/0601047.
- [175] C. H. Liu, Sydney R. Nagel, D. A. Schecter, S. N. Coppersmith, Satya Majumdar, Onuttom Narayan, and T. A. Witten. Force fluctuations in bead packs. *Science*, 269(5223):513–514, July 1995.
- [176] Daniel M. Mueth, Heinrich M. Jaeger, and Sydney R. Nagel. Force distribution in a granular medium. *Phys. Rev. E*, 57(3):3164–3169, March 1998.
- [177] Daniel L. Blair, Nathan W. Mueggenburg, Adam H. Marshall, Heinrich M. Jaeger, and Sidney R. Nagel. Force distributions in three-dimensional granular assemblies: Effects of packing order and interparticle friction. *Phys. Rev. E*, 63(4):041304–1–8, April 2001.
- [178] Grunde Løvoll, Knut Jørgen Måløy, and Eirik G. Flekkøy. Force measurements on static granular materials. *Phys. Rev. E*, 60(5):5872–5878, November 1999.
- [179] S. Joseph Antony. Evolution of force distribution in three-dimensional granular media. *Phys. Rev. E*, 63(1):011301–1–13, January 2001.

- [180] Corey S. O'Hern, Stephen A. Langer, Andrea J. Liu, and Sidney R. Nagel. Force distributions near jamming and glass transitions. *Phys. Rev. Lett.*, 86(1):111–114, January 2001, cond-mat/0005035.
- [181] Corey S. O'Hern, Stephen A. Langer, Andrea J. Liu, and Sidney R. Nagel. Random packings of frictionless particles. *Phys. Rev. Lett.*, 88(7):075507–1–4, February 2002, cond-mat/0110644.
- [182] Philip T. Metzger and Carly M. Donahue. Elegance of disordered granular packings: A validation of edward's hypothesis. *Phys. Rev. Lett.*, 94:148001–1–4, April 2005.
- [183] Hernán A. Makse, David L. Johnson, and Lawrence M. Schwartz. Packing of compressible granular materials. *Phys. Rev. Lett.*, 84(18):4160–4163, May 2000.
- [184] Andrea J. Liu and Sidney R. Nagel. Jamming is not just cool any more. *Nature*, 396:21–22, 1998.
- [185] Corey S. O'Hern, Leonardo E. Silbert, Andrea J. Liu, and Sidney R. Nagel. Jamming at zero temperature and zero applied stress: the epitome of disorder. *Phys. Rev. E*, 68(1):011306–1–19, July 2003.
- [186] J. Brujić, G. Marty, C. Song, C. Briscoe, and Hernán A. Makse. Fluorescent contacts measure the coordination number and entropy of a 3D jammed emulsion packing. Preprint, May 2006, cond-mat/0605752.
- [187] Wouter G. Ellenbroek, Ellák Somfai, Martin van Hecke, and Wim van Saarloos. Critical scaling in linear response of frictionless granular packings near jamming. Preprint, April 2006, cond-mat/0604157.
- [188] Matthieu Wyart. On the rigidity of amorphous solids. Preprint, November 2005, cond-mat/0512155.
- [189] Matthieu Wyart. *Sur la rigidité des solides amorphes. Fluctuation des prix, conventions et microstructure des marchés financiers*. PhD thesis, École polytechnique, November 2005.
- [190] Edmund R. Nowak, James B. Knight, Eli Ben-Naim, Heinrich M. Jaeger, and Sidney R. Nagel. Density fluctuations in vibrated granular materials. *Phys. Rev. E*, 57(2):1971–1982, February 1998.
- [191] Maxime Nicolas, P. Duru, and Olivier Pouliquen. Compaction of a granular material under cyclic shear. *Eur. Phys. J. E*, 3:309–314, 2000.
- [192] Daniel C. Hong, Paul V. Quinn, and Stefan Luding. Reverse brazil nut problem: Competition between percolation and condensation. *Phys. Rev. Lett.*, 86(15):3423–3426, April 2001.
- [193] Yoël Forterre and Olivier Pouliquen. Longitudinal vortices in granular flows. *Phys. Rev. Lett.*, 86(26):5886–5889, June 2001.
- [194] Teruhisa S. Komatsu, Shio Inagaki, Naoko Nakagawa, and Satoru Nasuno. Creep motion in a granular pile exhibiting steady surface flow. *Phys. Rev. Lett.*, 86(9):1757–1760, February 2001.
- [195] Yuhong Wang, Kapilanjani Krishan, and Michael Dennin. Role of athermal fluctuations in shear flows. Preprint, May 2006, cond-mat/0605633.
- [196] Deepak Dhar. Studying self-organized criticality with exactly solved models. Lecture notes, 1999, cond-mat/9909009.

- [197] Deepak Dhar. Exactly solved models of self-organized criticality. Lecture notes available at <http://theory.tifr.res.in/~ddhar/leuven.ps>, 2005.
- [198] Robin C. Ball and Raphael Blumenfeld. Stress field in granular systems: Loop forces and potential formulation. *Phys. Rev. Lett.*, 88:115505–1–4, 2002, cond-mat/0008127.
- [199] Leonardo E. Silbert, Deniz Erta, Gary S. Grest, Thomas C. Halsey, , and Dov Levine. Geometry of frictionless and frictional sphere packings. *Phys. Rev. E*, 65:031304–1–6, 2002.
- [200] Jean-Noël Roux. Geometric origin of mechanical properties of granular materials. *Phys. Rev. E*, 61(6):6802–6836, June 2000.
- [201] Pierre-Gilles de Gennes. Granular matter: a tentative view. *Rev. Mod. Phys.*, 71(2):S374–S382, March 1999.
- [202] C. Goldenberg and I. Goldhirsch. Force chains, microelasticity, and macroelasticity. *Phys. Rev. Lett.*, 89(8):084302–1–4, 2002.
- [203] Nathan W. Mueggenburg, Heinrich M. Jaeger, and Sidney R. Nagel. Stress transmission through three-dimensional ordered granular arrays. *Phys. Rev. E*, 66:031304–1–9, 2002.
- [204] J. E. S. Socolar, D. G. Schaeffer, and Philippe Claudin. Directed force chain networks and stress response in static granular materials. *Eur. Phys. J. E*, 7:353–370, 2002, cond-mat/0201242.
- [205] J. E. S. Socolar, D. G. Schaeffer, and Philippe Claudin. *Erratum* - directed force chain networks and stress response in static granular materials. *Eur. Phys. J. E*, 8:453–453, 2002.
- [206] Matthias Otto, Jean-Philippe Bouchaud, Philippe Claudin, and Joshua E. S. Socolar. Anisotropy in granular media: Classical elasticity and directed-force chain network. *Phys. Rev. E*, 67(3):031302–1–24, March 2003, cond-mat/0211015.
- [207] S. N. Coppersmith, C.-H. Liu, Satya Majumdar, Onuttom Narayan, and T. A. Witten. Model for force fluctuations in bead packs. *Phys. Rev. E*, 53(5):4673–4685, May 1996.
- [208] Lev D. Landau and E. M. Lifschitz. *Physique théorique — théorie de l'élasticité*. Éd. Mir, Moscou, 1986.
- [209] Sdrjan Ostojic and Debabrata Panja. Response of a hexagonal granular packing under a localized external force: exact results. *J. Stat. Mech.*, 1(1):P01011–1–34, January 2005, cond-mat/0409160.
- [210] Jean-Noël Roux. Contact disorder and force distribution in granular materials. Saint-Venant Symposium, Paris, 1997.
- [211] S. Ouaguenouni and Jean-Noël Roux. Force distribution in frictionless granular packings at rigidity threshold. *Europhys. Lett.*, 39(2):117–122, July 1997.
- [212] Jacobus Hendrikus Snoeijer. *Statistics of force networks in granular media*. PhD thesis, Universiteit Leiden, September 2003.
- [213] Jacco H. Snoeijer, Martin van Hecke, Ellák Somfai, and Wim van Saarloos. Force and weight distributions in granular media: Effects of contact geometry. *Phys. Rev. E*, 67(3):030302(R)–1–4, March 2003.
- [214] Jacco H. Snoeijer, Martin van Hecke, Ellák Somfai, and Wim van Saarloos. Packing geometry and statistics of force networks in granular media. *Phys. Rev. E*, 70(1):011301–1–15, July 2004.

- [215] Jacco H. Snoeijer and J. M. J. van Leeuwen. Force correlations in the q -model for general q -distributions. *Phys. Rev. E*, 65(5):051306–1–12, May 2002.
- [216] Jacco H. Snoeijer and J. M. J. van Leeuwen. Force relaxation in the q -model for granular media. *J. Stat. Phys.*, 109(3-4):449–469, November 2002.
- [217] Philippe Claudin, Jean-Philippe Bouchaud, M. E. Cates, and J. P. Wittmer. Models of stress fluctuations in granular media. *Phys. Rev. E*, 57(4):4441–4457, April 1998.
- [218] M. L. Nguyen and S. N. Coppersmith. Properties of layer-by-layer vector stochastic models of force fluctuations in granular materials. *Phys. Rev. E*, 549(5):5870–5880, May 1999.
- [219] Joshua E. S. Socolar. Average stresses and force fluctuations in noncohesive granular materials. *Phys. Rev. E*, 57(3):3204–3215, March 1998, cond-mat/9710089.
- [220] Christophe Eloy and Éric Clément. Stochastic aspects of the force network in a regular granular piling. *J. Phys. I*, 7(12):1541–1558, December 1997.
- [221] L. Breton, Philippe Claudin, Éric Clément, and J.-D. Zucker. Stress response function of a two-dimensional ordered packing of frictional beads. *Europhys. Lett.*, 60(6):813–819, December 2002.
- [222] Jean-Philippe Bouchaud. Granular media: some ideas from statistical physics. In Jean-Louis Barrat *et al.*, editor, *Les Houches Summer School, Session LXXVII*. Springer-EDP Sciences, 2003, cond-mat/0211196.
- [223] Raphael Blumenfeld. Stresses in isostatic granular systems and emergence of force chains. *Phys. Rev. Lett.*, 93(10):108301–1–4, September 2004.
- [224] Sam F. Edwards and R. B. S. Oakeshott. Theory of powders. *Physica A*, 157(3):1080–1090, June 1989.
- [225] Sam F. Edwards and D. V. Grinev. Transmission of stress in granular materials as a problem of statistical mechanics. *Physica A*, 302(1–4):162–186, December 2001.
- [226] Frédéric Lechenault, Olivier Dauchot, and Éric Bertin. Void statistics and compactivity measurement in an experimental granular pile. Preprint, December 2005, cond-mat/0512608.
- [227] V. I. Arnold and A. Avez. *Problèmes ergodiques de la mécanique classique*. Gauthier-Villars (Paris), 1967.
- [228] David S. Dean and Alexandre Lefèvre. Tapping spin glasses and ferromagnets on random graphs. *Phys. Rev. Lett.*, 86(25):5639–5642, June 2001, cond-mat/0101166.
- [229] David S. Dean and Alexandre Lefèvre. Possible test of the thermodynamic approach to granular media. *Phys. Rev. Lett.*, 90(19):198301–1–4, May 2003, cond-mat/0212297.
- [230] Alexandre Lefèvre and David S. Dean. Tapping thermodynamics of the one dimensional ising model. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 34(14):L213–L220, April 2001, cond-mat/0102204.
- [231] Guillaume De Smedt, Claude Godrèche, and Jean-Marc Luck. Jamming, freezing and metastability in one-dimensional spin systems. *Eur. Phys. J. B*, 27:363–380, June 2002.
- [232] Alain Barrat, Jorge Kurchan, Vittorio Loreto, and Mauro Sellitto. Edwards’ measures: A thermodynamic construction for dense granular media and glasses. *Phys. Rev. E*, 63(5):051301–1–14, May 2001.

- [233] Johannes Berg, Silvio Franz, and Mauro Sellito. Testing the edwards hypothesis in spin systems under tapping dynamics. *Eur. Phys. J. B*, 26(3):349–356, April 2002.
- [234] Satya N. Majumdar and David S. Dean. Slow relaxation in a constrained ising spin chain: Toy model for granular compaction. *Phys. Rev. E*, 66(5):056114–1–9, November 2002, cond-mat/0211688.
- [235] Jacco H. Snoeijer, Thijs J. H. Vlugt, Martin van Hecke, and Wim van Saarloos. Force network ensemble: A new approach to static granular matter. *Phys. Rev. Lett.*, 92(5):054302–1–4, February 2004.
- [236] Jacco H. Snoeijer, Thijs J. H. Vlugt, Wouter G. Ellenbroek, Martin van Hecke, and J. M. J. van Leeuwen. Ensemble theory for force networks in hyperstatic granular matter. *Phys. Rev. E*, 70(6):061306–1–16, December 2004.
- [237] Sdrjan Ostojic and Debabrata Panja. Response of a hexagonal granular packing under a localized external force. *Europhys. Lett.*, 71(1):70–76, July 2005, cond-mat/0503752.
- [238] Philip T. Metzger. Granular contact force density of states and entropy in a modified edwards ensemble. *Phys. Rev. E*, 70(5):051303–1–19, November 2004.
- [239] Brian P. Tighe, Joshua E. S. Socolar, David G. Schaeffer, W. Garrett Mitchener, and Mark L. Huber. Force distributions in a triangular lattice of rigid bars. *Phys. Rev. E*, 72(3):031306–1–10, September 2005, cond-mat/0505003.
- [240] Hernán A. Makse and Jorge Kurchan. Testing the thermodynamic approach to granular matter with a numerical model of a decisive experiment. *Nature*, 415(6872):614–617, February 2002.
- [241] Vittoria Colizza, Alain Barrat, and Vittorio Loreto. Definition of temperature in dense granular media. *Phys. Rev. E*, 65(5):050301(R)–1–4, May 2002.
- [242] Guo-Jie Gao, Jerzy Blawdziewicz, and Corey S. O’Hern. Enumeration of distinct mechanically stable disk packings in small systems. Preprint, April 2006, cond-mat/0605009.
- [243] Guo-Jie Gao, Jerzy Blawdziewicz, and Corey S. O’Hern. Understanding the frequency distribution of mechanically stable disk packings. Preprint, June 2006, cond-mat/0606224.
- [244] Rémi Monasson and Olivier Pouliquen. Entropy of particle packings: an illustration on a toy model. *Physica A*, 236:395–410, 1997.
- [245] Raphael Blumenfeld and Sam F. Edwards. Granular entropy: Explicit calculations for planar assemblies. *Phys. Rev. Lett.*, 90(11):114303–1–4, March 2003.
- [246] C. N. Yang and C. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. I. proof of bethe’s hypothesis for ground state in a finite system. *Phys. Rev.*, 150(1):321–327, 1966.
- [247] C. N. Yang and C. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. II. properties of the ground-state energy per lattice site for an infinite system. *Phys. Rev.*, 150(1):327–339, 1966.
- [248] C. N. Yang and C. P. Yang. One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. III. applications. *Phys. Rev.*, 151(1):258–264, 1966.
- [249] Elliott H. Lieb. Residual entropy of square ice. *Phys. Rev.*, 162(1):162–172, 1967.

- [250] Elliott H. Lieb. Exact solution of the f model of an antiferroelectric. *Phys. Rev. Lett.*, 18(24):1046–1048, 1967.
- [251] Elliott H. Lieb. Exact solution of the two-dimensional slater kdp model of a ferroelectric. *Phys. Rev. Lett.*, 19(3):108–110, 1967.
- [252] H. Y. Huang, V. Popkov, and Fa-Yueh Wu. Exact solution of a three-dimensional dimer system. *Phys. Rev. Lett.*, 78(3), january 1997.
- [253] Alain Chenciner and Richard Montgomery. A remarkable periodic solution of the three body problem in the case of equal masses. *Annals of Mathematics*, 152:881–901, 2000.
- [254] Cristopher Moore. Unpredictability and undecidability in dynamical systems. *Phys. Rev. Lett.*, 64(20):2354–2357, May 1990.
- [255] Peter Jung, Rolf W. Helmes, and Achim Rosch. Transport in almost integrable models: Perturbed Heisenberg chains. *Phys. Rev. Lett.*, 96(6):067201–1–4, February 2006, cond-mat/0509615.
- [256] Daniel Pfenniger. Virial statistical description of non-extensive hierarchical systems. Preprint; based on the talk given at the Meeting on ‘Statistical Mechanics of Non-Extensive Systems’, 24-25 Oct 05, Paris. To be published in a Special Issue of Les Comptes rendus de l’Académie des Sciences., May 2006, cond-mat/0605665.
- [257] Lars Onsager. Crystal statistics. I. a two-dimensional model with an order-disorder transition. *Phys. Rev.*, 65(3–4):117–149, February 1944.
- [258] Rodney J. Baxter. *Exactly solved models in statistical mechanics*. Academic Press, 1982. 486 p.
- [259] Barry M. McCoy and Tai Tsun Wu. *The Two-Dimensional Ising Model*. Harvard University Press, Cambridge, Massachusetts, USA, 1973.
- [260] Elliott W. Montroll, Renfrey B. Potts, and John C. Ward. Correlations and spontaneous magnetization of the two-dimensional ising model. *J. Math. Phys.*, 4(2), February 1963.
- [261] C. A. Hurst and H. S. Green. New solution of the ising problem for a rectangular lattice. *The Journal of Chemical Physics*, 33(4), October 1960.
- [262] P. W. Kasteleyn. The statistics of dimers on a lattice. I. the number of dimer arrangements on a quadratic lattice. *Physica*, 27:1209–1225, 1961.
- [263] H. N. V. Temperley and M. E. Fisher. The dimer problem in statistical physics — an exact result. *Phil. Mag.*, 6:1061–1063, 1961.
- [264] P. W. Kasteleyn. Graph theory and crystal physics. In F. Harary, editor, *Graph Theory and Theoretical Physics*. Academic Press, 1967.
- [265] C. N. Yang. Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction. *Phys. Rev. Lett.*, 19(23):1312–1315, December 1967.
- [266] Bill Sutherland. Further results for the many-body problem in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 20(3):98–100, January 1968.
- [267] Jan de Gier and Bernard Nienhuis. Integrability of the square-triangle random tiling model. *Physical Review E*, 55:3926–3933, 1997.
- [268] A. A. Belavin and V. G. Drinfel’d. Solutions of the classical yang-baxter equation for simple lie algebras. *Funct. Anal. Appl.*, 16:159, 1982.

- [269] V. V. Bazhanov. Integrable quantum systems and classical lie algebras. *Commun. Math. Phys.*, 113:471–503, 1987.
- [270] J. Fuchs and Christoph Schweigert. *Symmetries, Lie algebras and representations: A graduate course for physicists*. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 1997. 438 p.
- [271] V. V. Bazhanov. Trigonometric solutions of triangle equations and classical lie algebras. *Phys. Lett.*, 159B(4–6):321–324, 1985.
- [272] Michio Jimbo. Quantum R matrix for the generalized toda system. *Commun. Math. Phys.*, 102:537–547, 1986.
- [273] Michio Jimbo, Tetsuji Miwa, and Masato Okado. Solvable lattice models related to vector representation of classical simple lie algebras. *Commun. Math. Phys.*, 116:507–525, 1988.
- [274] H. J. de Vega and E. Lopes. Exact solution of the perk-schultz model. *Phys. Rev. Lett.*, 67(4):489–492, July 1991.
- [275] Gustav W. Delius, Mark D. Gould, and Yao-Zhong Zhang. On the construction of trigonometric solutions of the yang-baxter equation. *Nucl. Phys. B*, 432(1–2):377–403, December 1994.
- [276] Bernard Derrida, M. R. Evans, Vincent Hakim, and Vincent Pasquier. Exact solution of a 1d asymmetric exclusion model using a matrix formulation. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 26(7):1493–1517, April 1993.
- [277] Deepak Dhar. An exactly solved model for interfacial growth. *Phase transitions*, 9(1):51, 1987.
- [278] Bernard Derrida and Joel L. Lebowitz. Exact large deviation function in the asymmetric exclusion process. *Phys. Rev. Lett.*, 80(2):209–213, January 1998.
- [279] Olivier Golinelli and Kirone Mallick. Derivation of a matrix product representation for the asymmetric exclusion process from algebraic Bethe ansatz. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 39(34):10647–10658, August 2006, cond-mat/0604338.
- [280] Ole Warnaar and Bernard Nienhuis. Solvable lattice models labelled by dynkin diagrams. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 26:2301–236, 1993, hep-th/9301026.
- [281] H. van Beijeren. Exactly solvable model for the roughening transition of a crystal surface. *Phys. Rev. Lett.*, 38(18):993–996, May 1977.
- [282] Jean-Bernard Zuber. On the counting of fully packed loop configurations. some new conjectures. *Elect. J. Combin.*, 11:R13, February 2004, math-ph/0309057.
- [283] C. A. Hurst. New approach to the ising problem. *J. Math. Phys.*, 7(2):305–310, February 1966.
- [284] Chungpeng Fan and Fa Yueh Wu. Ising model with second-neighbor interaction. I. some exact results and an approximate solution. *Phys. Rev.*, 179(2):560–570, March 1969.
- [285] Mehran Kardar. Directed paths in random media. In *Les Houches Summer School on Fluctuating Geometries in Statistical Mechanics and Field Theory*, 1994.
- [286] Michael E. Fisher. On the dimer solution of planar ising models. *J. Math. Phys.*, 7(10):1776–1781, 1966.
- [287] Roderich Mössner and S. L. Sondhi. Ising and dimer models in two and three dimensions. *Phys. Rev. B*, 68(5):054405–1–9, 2003.

- [288] M. Widom. Bethe ansatz solution of the square-triangle random tiling model. *Phys. Rev. Lett.*, 70(14):2094–2097, April 1993.
- [289] P. A. Kalugin. The square-triangle random-tiling model in the thermodynamic limit. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 27(11):3599–3614, June 1994.
- [290] Bernard Nienhuis. Exact solution of random tiling models. *Phys. Rep.*, 301(1–3):271–292, July 1998.
- [291] Knut W. Urban. From tilings to coverings. *Nature*, 396(6706):14–15, November 1998.
- [292] D. V. Chudnovsky and G. V. Chudnovsky. Characterization of completely X -symmetric factorized S -matrices for a special type of interaction — applications to multicomponent field theories. *Phys. Lett.*, 79A(1):36–38, September 1980.
- [293] I. V. Cherednik. On a method of constructing factorized S matrices in elementary functions. *Theor. Math. Phys.*, 43(1):356–358, April 1980.
- [294] Jacques H. H. Perk and Cherie L. Schultz. New families of commuting transfer matrices in q -state vertex models. *Phys. Lett.*, 84A(8):407–410, August 1981.
- [295] N. Y. Reshetikhin. A new exactly solvable case of an $O(n)$ -model on a hexagonal lattice. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 24:2387–2396, 1991.
- [296] N. Oelkers, Murray T. Batchelor, M. Bortz, and X.W. Guan. Bethe ansatz study of one-dimensional bose and fermi gases with periodic and hard wall boundary conditions. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 39:1073–1098, 2006, cond-mat/0511694.
- [297] Jan de Gier and Bernard Nienhuis. Bethe ansatz solution of a decagonal rectangle-triangle random tiling. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 31(9):2141–2154, March 1998, cond-mat/9709338.
- [298] Ivan K. Kostov and Matthias Staudacher. Multicritical phases of the $o(n)$ model on a random lattice. *Nucl. Phys.*, B384:459–483, 1992, hep-th/9203030.
- [299] Niklas Beisert, Matthias Staudacher, Joseph A. Minahan, and Konstantin Zarembo. Stringing spins and spinning strings. *J. High Energy Phys.*, JHEP09:010–1–28, September 2003, hep-th/0306139.
- [300] Cherie L. Schultz. Eigenvectors of the multi-component generalization of the six-vertex model. *Physica A*, 122(1–2):71–88, October–November 1983.
- [301] Jan de Gier and Bernard Nienhuis. Exact solution of an octagonal random tiling model. *Phys. Rev. Lett.*, 76(16):2918–2921, April 1996, solv-int/9602002.
- [302] Jan de Gier and Bernard Nienhuis. The exact solution of an octagonal rectangle triangle random tiling. *J. Stat. Phys.*, 87(1–2):415–437, April 1997, solv-int/9610009.
- [303] Alain Verberkmoes and Bernard Nienhuis. Triangular trimers on the triangular lattice: An exact solution. *Phys. Rev. Lett.*, 83(20):3986–3989, November 1999, cond-mat/9904343.
- [304] Alain Verberkmoes and Bernard Nienhuis. Bethe ansatz solution of triangular trimers on the triangular lattice. *Phys. Rev. E*, 63(6):066122–1–18, May 2001, cond-mat/9909068.
- [305] David Dei Cont and Bernard Nienhuis. The packing of two species of polygons on the square lattice. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 37(9):3085–3100, March 2004, cond-mat/0311244.

- [306] Jesper Lykke Jacobsen and Paul Zinn-Justin. Algebraic bethe ansatz for the FPL² model. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 37(29):7213–7225, July 2004, math-ph/0402008.
- [307] Paul Zinn-Justin. *Quelques applications de l’Ansatz de Bethe*. PhD thesis, Université Paris 6 (Pierre et Marie Curie), July 1998.
- [308] V. V. Bazhanov and Yu. G. Stroganov. Hidden symmetry of the free fermion model. I. triangle equation and symmetric parametrization. *Theor. Math. Phys.*, 62(3):253–260, March 1985.
- [309] W. Galleas and M. J. Martins. Yang-baxter equation for the asymmetric eight-vertex model. *Phys. Rev. E*, 66:047103–1–4, 2002.
- [310] Michael Karbach and Gerhard Müller. Introduction to the bethe ansatz I. *Computers in Physics*, 11:36, 1997, cond-mat/9809162.
- [311] Timo Aspelmeier, R. A. Blythe, Alan J. Bray, and Michael A. Moore. Free energy landscapes, dynamics and the edge of chaos in mean-field models of spin glasses. Preprint, February 2006, cond-mat/0602639.
- [312] Pawel A. Kalugin. Low-lying excitations in the square-triangle random tiling model. *J. Phys. A – Math. Gen.*, 30:7077–7087, 1997.
- [313] Mark Oxborrow and Christopher L. Henley. Random square-triangle tilings: A model for twelfefold-symmetric quasicrystals. *Phys. Rev. B*, 48(10):6966–6998, September 1993.
- [314] Onuttom Narayan and A. Peter Young. Convergence of monte carlo simulations to equilibrium. *Phys. Rev. E*, 64:021104, 2001, cond-mat/0008046.
- [315] Semen A. Trygubenko and David J. Wales. Graph transformation method for calculating waiting times in markov chains. Preprint, March 2006, cond-mat/0603830.
- [316] S. N. Coppersmith, Daniel S. Fisher, B. I. Halperin, P. A. Lee, and W. F. Brinkman. Dislocations and the commensurate-incommensurate transition in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 25(1):349–363, January 1982.
- [317] Raphael Blumenfeld, Sam F. Edwards, and Robin C. Ball. Granular matter and the marginal rigidity state. *J. Phys. Cond. Mat.*, 17(24):S2481–S2487, June 2005, cond-mat/0105348.

Résumé

Cette thèse de doctorat étudie trois problèmes à l'aide des outils de la mécanique statistique. Nous montrons l'existence du phénomène d'universalité critique pour la transition de phases dynamique de certains algorithmes de recherche combinatoire. Nous donnons les valeurs exactes des exposants critiques et une formule analytique pour une fonction d'échelle. Nous développons un formalisme qui nous permet de calculer un développement perturbatif systématique, en grandes dimensions d'espace, de la fonction de grandes déviations de l'état métastable du processus de contact. Il peut resservir entre autres pour d'autres modèles de biologie des populations. Nous introduisons enfin deux modèles bidimensionnels exactement solubles pour la statique des milieux granulaires. Ils reproduisent la transition de jamming et permettent de discuter les différentes échelles de longueurs de ces milieux et de mettre en défaut l'hypothèse d'Edwards dans un cas réaliste.

Mots-clefs : mécanique statistique, systèmes hors d'équilibre, optimisation combinatoire, processus stochastiques, milieux granulaires, systèmes intégrables

Abstract

In this Ph. D. thesis, we study three problems using tools from the statistical mechanics. We show the existence of the phenomenon of critical universality for the dynamical phase transition of some combinatorial search algorithms. We give the exact values of the critical exponents and an analytic formula for a scaling function. We develop a formalism which enables us to compute a systematic perturbative expansion, in high space dimensions, of the large deviations function of the metastable state of the contact process. It can be reused e.g. for other models from the biology of populations. We introduce two exactly solvable 2D models for the statics of granular media. They reproduce the jamming transition and allow to discuss the different length scales of these media and to prove the Edwards hypothesis wrong in a realistic case.

Keywords : statistical mechanics, non-equilibrium systems, combinatorial optimization, stochastic processes, granular media, integrable systems