DEA Algorithmique

Filière Analyse d'algorithmes

Année 1999/2000

Transitions de phases dans les problèmes combinatoires.

Cours d'option
par
Olivier Dubois
et
Rémi Monasson

(Notes de cours sur l'approche de physique statistique)

I. NOTIONS DE PHASE ET DE TRANSITION.

Beaucoup de corps physiques présents dans la nature peuvent se trouver sous des états différents lorsque certains paramètres extérieurs sont modifiés. Voici quelques illustrations classiques issues de la physique de la matière condensée ainsi que deux autres exemples plus inhabituels provenant de la biologie et de l'informatique.

A. Transition gaz-liquide.

Une masse d'eau sous pression constante normale (1 atmosphère) bout à la température $T_c = 100^o$C. Si la température T est inférieure à T_c, toute l'eau est sous forme liquide alors qu'au-dessus de T_c l'eau est entièrement sous forme de vapeur gazeuse. A la température critique T_c, il y a coexistence entre les deux états liquides et gazeux de l'eau: la proportion relative d'une forme par rapport à l'autre est variable et fixée par exemple par le volume occupé. Il y a alors coexistence entre les deux états et, en termes plus mathématiques que nous reverrons par la suite, on dit qu'il s'agit d'une transition de phase du premier ordre.

B. Transition ferromagnétique-paramagnétique.

Il est bien connu qu'un aimant attire un clou en fer: l'aimantation induite par le champ magnétique est à l'origine de cette forte attraction et les matériaux qui se comportent comme le fer sont dits ferromagnétiques. Cependant l'attraction cesse si la température du clou depasse $T_c = 770^o$C: le clou est alors dans l'état paramagnétique, voir [Diu 89] page 444. Il n'y a évidemment pas de coexistence ici entre l'état ferromagnétique et celui paramagnétique: la transition est dite du deuxième ordre.

La température T_c de transition ferromagnétique-paramagnétique dépend beaucoup des corps considérés. Par exemple, elle vaut $T_c = 1115^o$C pour le cobalt, $T_c = 454^o$C pour le nickel ou encore $T_c = 585^o$C pour la magnétite Fe_3O_4. Cependant, certaines grandeurs appelées exposants critiques qui donnent des informations précises sur la transition de phase sont indépendantes du corps étudié! On est alors en présence d'un propriété d'universalité, typique des transitions de phase du deuxième ordre. Cette notion est très importante et nous y reviendrons par la suite.

C. Transition conducteur-supraconducteur.

Les bons conducteurs électriques, comme les métaux opposent a température ambiante une résistance au passage d'un courant électrique. Cette résistance, mesurée en Ohm, diminue lorsque la température baisse car les collisions entre électrons et vibrations du métal se font de moins en moins importantes. En 1911, Kamerling Onnes constate que la résistance d'un échantillon de mercure tombe brutalement à zéro lorsque la température passe sous $T_c \simeq 4.2^o$K [Kit 83]. Une variation extrèmement faible de la température ($< 0.1^o$K) suffit a diviser la résistance par 10.000 au moins!

D. Transition de dénaturation de l'ADN.

Dans les conditions physiologiques normales, l'ADN existe sous la forme d'une double hélice découverte par Watson et Crick en 1953. Les deux brins auxquels sont attachées les bases A,T,G et C sont enchevétrés de telle manière que les bases s'apparient suivant les deux combinaisons possibles: AT et GC. La solidité des paires de bases est due à la présence de liaisons hydrogènes. Lorsque la température augmente, ou lorsque les concentrations ioniques sont modifiées opportunément, il devient possible de dénaturer la molécule et de casser ces liaisons hydrogène. La structure en double hélice cesse d'être stable et les deux brins d'ADN se séparent. Cette transition a un caractère brutal en présence de séquences génétiques répétées: la dénaturation s'opère sur un intervalle de quelques degrés centigrades seulement [Sae 84].

De récentes expériences de micromanipulation d'une seule molécule d'ADN réalisées à l'ENS à Paris ont montré que la dénaturation peut être obtenue par une action mécanique. Lorsque l'on exerce un couple suffisamment élevé sur la molécule et opposé au sens de rotation de la double hélice, cette dernière s'ouvre et une partie de la molécule se dénature. Il y a donc coexistence entre des régions en double hélice et des régions dénaturées le long de la même molécule [Str 98].

E. Transition dans le problème de K-Satisfaisabilité.

Comme nous l'avons déjà vu dans ce cours, le problème de la K-Satisfaisabilité (ou K-Satisfiabilité) aléatoire exhibe un comportement de transition de phase lorsque le rapport c du nombre de clauses M divisé par le nombre de variables boolénnes N traverse un seuil dépendant du nombre K de littérales par clause. Lorsque c est inférieur au seuil, une formule est satisfiable presque sûrement alors qu'au-delà du seuil elle ne l'est presque jamais lorsque $N \to \infty$.

Pour $K = 2$, le seuil se situe en $c = 1$. Pour $K \geq 3$, il n'y a pas de preuve rigoureuse de l'existence d'unte transition cependant les simulations numériques ne laissent pas de doute. Expérimentalement, le seuil de la 3-SAT se trouve en $c \simeq 4.25$.

F. Descriptions macroscopique et microscopiques.

Résumons brièvement les enseignements à tirer des exemples précédents.

Tout d'abord, un même corps, ou plus généralement un même système peut exister sous des états, encore appelés phases, très différents alors que sa composition intrinsèque n'a pas changé: l'eau est faite des mêmes molécules à 99^oC qu'à 101^oC! Pourtant les propriétés physiques, électriques, mécaniques, magnétiques, biologiques, informatiques, ... de ce système sont entièrement différentes d'une phase à l'autre.

Ensuite, le changement de phase a lieu lorsque des paramètres de contrôle sont modifiés. Il s'agit généralement de la température mais pas nécessairement comme nous l'avons vu plus haut. Ce changement, qui advient de manière très brutale lorsque l'on change très peu la valeur des paramètres de contrôle est appelé transition de phase.

Ainsi, naî t le besoin de comprendre pourquoi un système peut changer de phase, c'est-à-dire de propriétés macroscopiques (à notre échelle) très rapidement et notamment comment ces modifications sont reliées à la structure microscopique du système étudié. C'est l'objet de la physique statistique.

II. RUDIMENTS DE PHYSIQUE STATISTIQUE.

A. Pourquoi une approche statistique?

Le but de la physique statistique est de déduire les propriétés des phases (macroscopiques) des corps à partir de ses constituants microscopiques (à l'échelle de l'atome, c'est-à-dire environ 10^{-10}m) et des interactions entre ceux-ci. Que veut-on dire par interactions? Imaginons de représenter les atomes par des petites sphères situées à des positions $\vec{r}_i$ dans l'espace où i est le numéro de l'atome allant de 1 au nombre total N. L'atome numéro i est soumis à des forces résultant de la présence d'autres atomes $j(\neq i)$ dans son voisinage. Notons $\vec{f}_i(\{\vec{r}_j\})$ cette force. Pour connaître les positions des atomes à chaque instant, nous devons à partir des positions initiales résoudre les équations du mouvements, qui sont données par la loi fondamentale de la mécanique due à Newton,

$$\frac{d^2\vec{r}_i}{dt^2} = \vec{f}_i(\{\vec{r}_j\}) \ , \qquad (i = 1, \ldots, \mathcal{N}). \tag{1}$$

Résoudre ces équations est impossible dans la pratique. En effet, les forces $\vec{f}_i$ sont des fonctions très compliquées, c'est-à-dire hautement non linéaires des positions $\vec{r}_j$ des atomes. Deux atomes proches se repoussent à cause des effets électrostatiques alors qu'éloignés l'un de l'autre, ils subissent une attraction, dite de Van der Waals. Ainsi nous nous retrouvons avec des équations différentielles couplées compliquées à résoudre dont le nombre N, de l'ordre de la mole $\sim 10^{23}$, est gigantesque!

Cette impossibilité, liée au sentiment intuitif que l'état macroscopique ne peut pas dépendre de la trajectoire d'une seule particule a poussé à entreprendre une démarche radicalement différente. L'idée fondamentale est de décrire le système de particules d'une manière probabiliste et d'en déduire son comportement statistique.

B. Distribution de probabilité des configurations.

La mise en oeuvre de cette idée est une tâche conceptuellement difficile que nous n'aborderons pas ici. Une excellente introduction peut néanmoins être trouvée dans [Diu 89].

Chaque configuration microscopique $\mathcal{C}$ du système, c'est-à-dire chaque ensemble des N positions $\{\vec{r}_j\}$ des particules a une probabilité $p(\mathcal{C})$ d'être réalisée à un instant donné. En d'autres termes, le système se trouve dans la configuration $\mathcal{C}$ avec probabilité $p(\mathcal{C})$. Cette probabilité, qui dépend bien évidemment de la température vaut

$$p(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z}\ \exp\left(-\frac{1}{T}\ E(\mathcal{C})\right) \quad . \tag{2}$$

Dans l'expression ci-dessus, T est la température, E est une fonction qui associe à chaque configuration une énergie (qui est un nombre réel) et Z est un coefficient (dépendant de la température) qui assure que la probabilité p est correctement normalisée,

$$Z = \sum_{\mathcal{C}} \exp\left(-\frac{1}{T}\ E(\mathcal{C})\right) \quad . \tag{3}$$

Z est appelé fonction de partition du système. Dans l'expression (3), nous avons écrit une somme discrète sur les configurations car c'est le cas que nous rencontrerons par la suite même si pour des particules, les positions $\vec{r}_j$ et donc les configurations $\mathcal{C}$ forment un continuum.

Voyons les conséquences de (2) dans deux cas extrêmes:

- *température infinie* $T = \infty$*:* la probabilité $p(\mathcal{C})$ devient indépendante de la configuration. Toutes les configurations sont donc équiprobables. Le système se trouve dans une phase totalement désordonnée, comme un gaz très chaud.
- *température nulle* $T = 0$*:* la probabilité $p(\mathcal{C})$ est concentrée sur le minimum de $E(\mathcal{C})$. Ce minimum est la configuration où toutes les particules sont en équilibre mécanique, c'est-à-dire dans des positions soigneusement choisies de telle manière que toutes les forces $\vec{f}_i$ sont nulles. Il s'agit d'un cristal parfait comme dans les métaux purs à très basse température.

Entre ces deux limites, la probabilité dépend de la fonction énergie. Nous allons maintenant voir quelques exemples simples.

C. Exemple: cas d'un puis deux "spins".

Nous allons considérer le cas d'une seule "particule" pouvant occuper deux positions différentes. On peut représenter simplement ce système de la manière suivante, inspirée de l'étude du magnétisme. Imaginons d'avoir une petite flèche articulée autour d'un axe et qui peut pointer vers deux directions seulement: le haut ou le bas. Cette flèche est appelée habituellement spin et sa direction est notée par une variable binaire σ valant $+1$ si la flèche est orientée vers le haut, -1 si elle pointe vers le bas.

Il y a donc deux configurations $\sigma = \pm 1$ pour le spin et nous considérons comme fonction énergie $E(\sigma) = -\sigma$. La fonction de partition est facilement calculable à partir de (3) et vaut $Z = 2\cosh\beta$ où $\beta = 1/T$ désigne la température inverse. La probabilité que le spin ait pour valeur σ est donc $p(\sigma) = \exp(\beta\sigma)/Z$. A température infinie ($\beta = 0$), le spin point vers le haut ou le bas indifféremment: $p(+1) = p(-1) = 1/2$. Par contre, à température nulle, seule l'orientation vers le haut est permise: $p(+1) = 1, p(-1) = 0$.

On peut calculer la valeur moyenne de l'orientation du spin, appelée aussi magnétisation ou aimantation,

$$m = \langle \sigma \rangle_T = \sum_{\sigma=\pm 1} \sigma\ p(\sigma) = \tanh(\beta) \quad . \tag{4}$$

Le symbole $\langle \cdot \rangle_T$ désigne la valeur moyenne sur la distribution de probabilité p. Lorsque la température baisse de $T = \infty$ à $T = 0$, l'aimantation augmente continûment de $m = 0$ à $m = 1$. Il n'y a aucun changement brutal, aucune transition de phase.

Exercice: Considérer deux spins σ_1 et σ_2 avec pour fonction énergie

$$E(\sigma_1, \sigma_2) = -\sigma_1 \sigma_2 \quad . \tag{5}$$

Calculer la fonction de partition, l'aimantation moyenne de chaque spin ainsi que la valeur moyenne de l'énergie. Mêmes questions pour

$$E(\sigma_1, \sigma_2) = -\sigma_1 - \sigma_2 \quad . \tag{6}$$

Y a-t-il une différence par rapport au cas d'un seul spin? Pourquoi?

D. Signification combinatoire de la fonction de partition.

La valeur moyenne de l'énergie peut s'obtenir par un calcul direct à partir de sa définition,

$$\langle E\rangle_T = \sum_{\mathcal{C}} p(\mathcal{C})\ E(\mathcal{C}) \quad , \tag{7}$$

ou encore par l'intermédiaire de la fonction de partition Z grâce à l'identité suivante

$$\langle E\rangle_T = -\frac{d}{dT}\ln Z \quad , \tag{8}$$

qui se vérifie aisément à partir de (3). L'identité (8) se généralise aux moments supérieurs de l'énergie. Par exemple, la variance de E s'obtient à partir de la dérivée seconde de la fonction de partition,

$$\langle E^2\rangle_T - \langle E\rangle_T^2 = \frac{d^2}{dT^2}\ln Z \quad . \tag{9}$$

De telles égalités suggèrent que Z est la fonction génératrice des énergies. Pour le montrer, réécrivons (3) de la manière suivante

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{\mathcal{C}} \exp\left(-\beta\ E(\mathcal{C})\right) \\ &= \sum_{E} \mathcal{N}(E)\ \exp\left(-\beta\ E\right) \qquad , \end{aligned} \tag{10}$$

où $\mathcal{N}(E)$ est le logarithme du nombre de configurations $\mathcal{C}$ ayant précisément E pour valeur de leur énergie $E(\mathcal{C})$. Si l'on introduit une variable $x = \exp(-\beta)$, on voit que $Z(x)$ est simplement la fonction génératrice des coefficients $\mathcal{N}(E)$ comme définie en combinatoire.

La quantité $S(E) = \ln \mathcal{N}(E)$ est appelée entropie correspondant à l'énergie E. On peut aussi définir l'entropie moyenne $\langle S\rangle_T$ à une température T comme la contribution à la fonction de partition qui n'est pas d'origine énergétique,

$$\langle S\rangle_T = F(T) - \langle E\rangle_T \quad , \tag{11}$$

où $F(T) = -T\ln Z(T)$ est appelée énergie libre du système. L'entropie est souvent une mesure du désordre. Elle est maximale à température infinie où l'énergie moyenne est fixée par la maximisation de $S(E)$, cf. (10). Elle est minimale à température nulle et correspond au logarithme du nombre de minima de la fonction énergie $E(\mathcal{C})$.

E. Notion de frustration.

Exercice: Considérer trois spins σ_1, σ_2 et σ_3 avec pour fonction énergie

$$E(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3) = -\sigma_1\sigma_2 - \sigma_1\sigma_3 - \sigma_2\sigma_3 \quad . \tag{12}$$

Calculer la fonction de partition, l'aimantation moyenne de chaque spin ainsi que la valeur moyenne de l'énergie. Que valent l'énergie et l'entropie moyennes à temperature nulle?

Mêmes questions pour

$$E(\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3) = -\sigma_1\sigma_2 - \sigma_1\sigma_3 + \sigma_2\sigma_3 \quad . \tag{13}$$

Que constatez-vous?

III. SYSTÈME DE SPINS SUR LE GRAPHE COMPLET.

Jusqu'ici, aucune transition de phase ne survenait dans les exemples simples (portant sur un, deux ou trois spins) que nous avons rencontrés. En effet, une condition necessaire pour l'existence d'une transition est que la taille du système considéré soit infinie. La raison mathématique en est simple: si le nombre de termes dans la somme (3) est fini, alors la fonction de partition Z est une fonction analytique de la température inverse β et donc l'énergie moyenne est elle aussi une fonction analytique qui ne comporte donc aucune singularité à température finie.

Nous allons maintenant étudier un exemple de système de N spins ayant une transition de phase dans la limite $N \to \infty$. Nous considérons pour cela le graphe complet K_N. Les sommets sont indicés par l'entier $i = 1, \ldots, N$ et portent les spins σ_i. La fonction d'énergie correspondant à une configuration $\mathcal{C} = \{\sigma_1, \ldots, \sigma_N\}$ est définie par

$$E(\sigma_1, \ldots, \sigma_N) = -\frac{1}{N} \sum_{i<j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i \qquad . \tag{14}$$

A. Commentaires sur la fonction énergie.

Commentons d'abord le premier terme de (14), appelé terme d'interaction. La somme porte sur toutes les paires de spins, c'est-à-dire sur toutes les arêtes de K_N. Le signe moins assure que le minimum de l'énergie est atteint lorsque tous les spins sont alignés dans la même direction.

Cette direction dépend du deuxième terme de l'énergie, à savoir le terme comportant le champ "magnétique" h. Si le champ est positif, l'énergie est minimale lorsque tous les spins pointent vers le haut; s'il est négatif, la direction optimale est vers le bas.

Lorsqu'il n'y a pas de champ ($h = 0$), nous connaissons les deux configurations du système à température nulle. L'énergie et l'entropie correspondantes valent donc d'après les définitions (14) et (11),

$$\langle E \rangle_{T=0} = -\frac{1}{2}(N-1) \quad , \tag{15}$$

$$\langle S \rangle_{T=0} = \ln 2 \qquad . \tag{16}$$

Remarquons que l'énergie minimale est d'ordre N grâce à la présence du facteur $1/N$ dans (14) alors que l'entropie est d'ordre 1.

Dans le cas opposé de température infinie, toutes les configurations sont équiprobables. La fonction de partition est simplement égale au nombre total de configurations : $Z_{T=\infty} = 2^N$. Nous en déduisons

$$\langle E \rangle_{T=\infty} = 0 \quad , \tag{17}$$

$$\langle S \rangle_{T=\infty} = N \ \ln 2 \qquad . \tag{18}$$

A température finie, il y a une sorte de compromis entre l'énergie qui a tendance à être faible pour augmenter la probabilité des configurations (2) et les effets d'entropie qui s'y opposent afin que le plus possible de configurations contribuent. C'est la température qui régle le niveau d'équilibre entre ces deux "forces" contradictoires. La transition de phase que nous allons étudier ci-dessous va donc séparer deux régimes:

- une phase de haute température où l'entropie domine: les configurations de spins sont désordonnées et les spins n'ont pas de direction privilégiée (pour $h = 0$). L'aimantation moyenne de chaque spin est nulle.
- une phase de basse température où l'énergie domine: les configurations de spins sont ordonnées et ceux-ci ont une direction privilégiée. L'aimantation moyenne de chaque spin est non nulle.

Notons que l'énergie et l'entropie doivent avoir le même ordre de grandeur ($=O(N)$) pour qu'un tel compromis soit possible et donc qu'une transition de phase survienne.

B. Fonction aimantation.

Commençons par définir l'aimation d'une configuration $\mathcal{C} = \{\sigma_1, \ldots, \sigma_N\}$ de la manière suivante

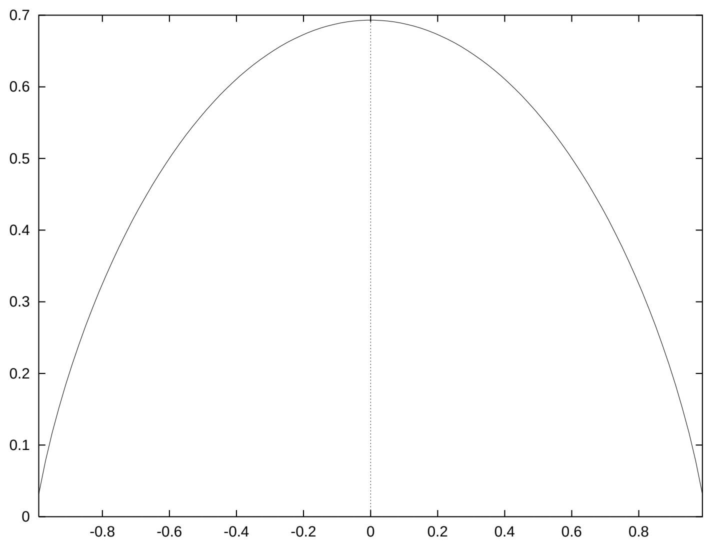

FIG. 1. Entropie $s(m)$ du modèle de spins sur le graphe complet en fonction de l'aimantation m.

$$m(\mathcal{C}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sigma_i \quad . \tag{19}$$

La remarque suivante va s'avérer très précieuse pour calculer la fonction de partition. Un examen de la fonction énergie (14) révèle que celle-ci ne dépend de la configuration $\mathcal{C}$ qu'à travers l'aimantation de cette dernière. Plus précisément,

$$E(\mathcal{C}) = -N \left(\frac{1}{2}\, m(\mathcal{C})^2 + h\, m(\mathcal{C}) \right) + \frac{1}{2} \quad . \tag{20}$$

Dans la suite, nous allons avoir besoin d'une autre quantité reliée à l'aimantation m, à savoir son entropie $s(m)$. Celle-ci est définie à partir de la question: combien y a-t-il de configurations $\mathcal{C}$ ayant une aimantation m donnée? La réponse est simple. Fixer l'aimantation est équivalent à fixer les nombres N_+ et N_- de spins vers le haut et vers le bas selon les relations

$$\begin{aligned} N_+ &= N \left(\frac{1+m}{2} \right) \quad , \\ N_- &= N \left(\frac{1-m}{2} \right) \quad . \end{aligned} \tag{21}$$

Le nombre de configurations ayant m pour aimantation est donc donné par le facteur binomial

$$e^{N\, s(m)} = \frac{N!}{N_+! N_-!} \quad . \tag{22}$$

Dans la limite de N grand, on peut utiliser la formule de Stirling pour trouver l'expression asymptotique de l'entropie à aimantation fixée,

$$s(m) = -\left(\frac{1-m}{2} \right) \ln \left(\frac{1-m}{2} \right) - \left(\frac{1+m}{2} \right) \ln \left(\frac{1+m}{2} \right) \quad , \tag{23}$$

lorsque $N \to \infty$. L'entropie s est tracée sur la figure 1 en fonction de la magnétisation. Elle est évidemment maximale (et égale à $\ln 2$) en $m = 0$ et s'annule aux bords $m = \pm 1$.

C. Calcul de l'énergie libre.

La fonction de partition s'écrit

$$
\begin{aligned}
Z &= \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_N=\pm 1} \exp\left[-\beta\, E(\sigma_1,\ldots,\sigma_N)\right] \\
&= \sum_{m=-1,-1+\frac{2}{N},\ldots,1-\frac{2}{N},1} \exp\left[-N\,\beta\, f(m)\right] \qquad , \qquad (24)
\end{aligned}
$$

où

$$
f(m) = -\frac{1}{2}\, m^2 - h\, m - T\, s(m) \qquad , \qquad (25)
$$

à des termes d'ordre $1/N$ près. Dans la suite de ce paragraphe, nous allons supposer que le champ magnétique h est nul.

On peut alors calculer l'énergie libre dans la limite où le nombre de spins est infini en utilisant la méthode du col (ou méthode de Laplace) qui consiste à chercher l'aimantation m^* (dépendant de la température) qui minimise la fonction d'énergie libre $f(m)$. Cette fonction est tracée pour trois températures différentes sur la figure 2.

On trouve graphiquement que le minimum de f est situé en $m^*=0$ lorsque la température est supérieure à $T_c=1$ alors qu'il existe deux minima en $m=-m^*(T)<0$, $m=m^*(T)>0$ en-dessous de cette température critique. La magnétisation optimale m^* est solution de l'équation d'extrémisation de f,

$$
m^* = \tanh\left(\beta\, m^*\right) \qquad , \qquad (26)
$$

tandis que l'énergie libre f est donnée simplement par

$$
f = \lim_{N\to\infty} -\frac{T}{N}\ln Z = f(m^*) \qquad . \qquad (27)
$$

On en déduit immédiatement l'énergie et l'entropie moyennes par spin, c'est-à-dire divisées par N,

$$
\begin{aligned}
\langle e\rangle_T &= -\frac{1}{2}\,(m^*)^2 \qquad , \qquad (28)\\
\langle s\rangle_T &= s(m^*) \qquad . \qquad (29)
\end{aligned}
$$

D. Transition de phase et brisure de symétrie.

En l'absence de champ magnétique, la fonction d'énergie (14) est paire en les spins : la probabilité de la configuration des N spins $\{\sigma_1,\ldots,\sigma_N\}$ est donc égale à celle de la configuration $\{-\sigma_1,\ldots,-\sigma_N\}$. Par conséquent, la valeur moyenne $\langle\sigma\rangle_T$ de n'importe quel spin est nulle. Ce résultat est valable pour tout N est donc à la limite,

$$
\lim_{N\to\infty}\ \lim_{h\to 0}\ \langle\sigma\rangle_T = 0 \qquad . \qquad (30)
$$

On peut donc s'interroger sur la signification du paramètre m^* calculé auparavant.

Imaginons pour cela de recommencer le calcul du paragraphe précédent en présence d'un champ magnétique $h>0$ petit par rapport à un (qui est l'ordre de grandeur de l'aimantation m^*) mais grand par rapport à $1/N$, c'est-à-dire fini. L'aimantation est maintenant différente de zéro. Cependant, à température supérieure à T_c, cette aimantation décroît lorsque le champ magnétique diminue et s'annule avec celui-ci,

$$
\lim_{h\to 0^+}\ \lim_{N\to\infty}\ \langle\sigma\rangle_T = 0 \qquad (T>T_c) \qquad . \qquad (31)
$$

Ainsi à haute température, l'interversion des limites entre (30) et (31) ne change pas le résultat final.

La situation est toute autre à basse température. A $T<T_c$, la dégénerescence entre les deux minima de f n'existe plus. En effet, l'énergie libre contient maintenant un terme additionnel $-h\ m$ qui favorise le minimum en m^* par rapport à celui en $-m^*$. Ce dernier donne lieu à une contribution à la fonction de partition (24) exponentiellement plus faible que celle provenant du premier minimum par un facteur $\exp(-2N\beta h m^*)$. Ainsi la mesure de probabilité sur les configurations est complètement dominée par le minimum avec aimantation positive et l'on obtient

$$
\lim_{h\to 0^+}\ \lim_{N\to\infty}\ \langle\sigma\rangle_T = m^* \qquad (T<T_c) \qquad . \qquad (32)
$$

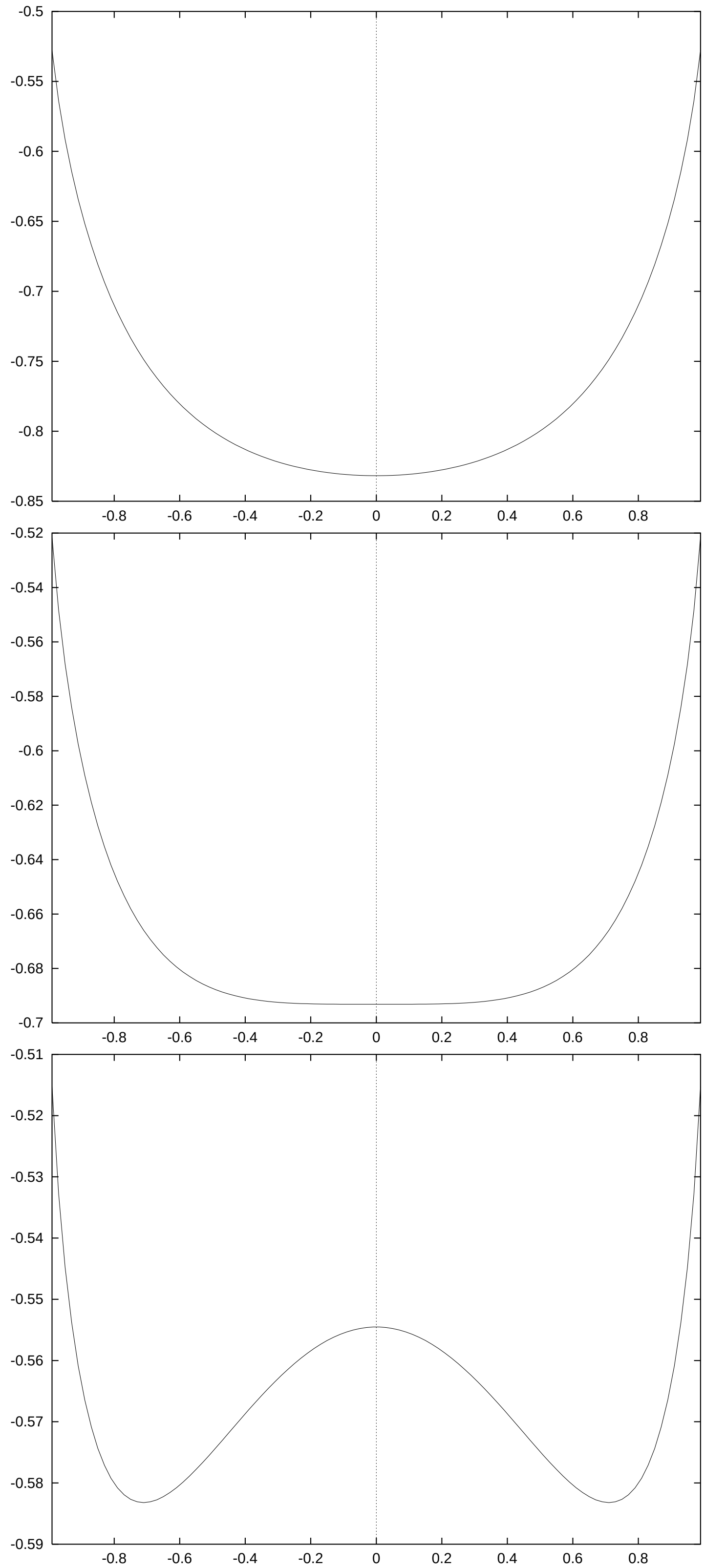

FIG. 2. Energie libre $f(m)$ du modèle de spins sur le graphe complet en fonction de l'aimantation m pour un champ magnétique h nul et trois températures différentes. **a**: haute température $T = 1.2$, **b**: température critique $T = 1$, **c**: basse température $T = 0.8$.

La comparaison entre (30) et (32) nous indique le sens de la transition de phase survenant à la température critique. Au dessus de celle-ci, une petite perturbation du système (qui consiste ici à mettre une petit champ h favorisant l'orientation des spins vers le haut) n'a pas de conséquence importante : lorsque la perturbation disparaît, ses effets disparaissent aussi, cf. (31). En revanche, en-dessous de la température critique l'inverse prévaut: une petite perturbation induit un effet très important, les spins pointent de manière prédominante vers le haut une fois que le champ h a disparu, cf. (32). A basse température, deux phases du système coexistent avec aimantations moyennes m^* et $-m^*$. Le petit champ h a pour rôle de choisir une phase plutôt que l'autre.

Ainsi, la notion de transition de phase est intimement reliée à celle de brisure de symétrie. Dans le cas présent, la distribution de probabilité sur les configurations possède une symétrie de renversement des spins $\sigma \to -\sigma$. A haute température, cette symétrie est respectée et $\langle \sigma \rangle_T = 0$. A basse température, cette symétrie est dite brisée car en présence d'une perturbation évanescente, $\langle \sigma \rangle_T = m^* \neq 0$. La symétrie initiale impose que m^* et $-m^*$ soient les deux états finaux possibles du système.

Bien qu'ici la symétrie initiale soit simple à identifier (et à briser!), il n'en va pas toujours ainsi. Nous verrons dans les cas du graphe aléatoire et de la K-satisfaisabilité des exemples de symétries plus abstraites.

Exercice: Faire explicitement le calcul de l'énergie libre en présence d'un champ et vérifier la véracité des conclusions ci-dessus.

E. Voisinage de la transition et exposants critiques.

Pour achever l'étude du modèle de spins (appelé aussi modèle d'Ising) sur le graphe complet, regardons le comportement su système au voisinage de la température critique $T_c = 1$ et posons $T = 1 + \tau$ où $|\tau| \ll 1$. L'aimantation spontanée solution de l'équation (26) vaut

$$m^*(\tau) = \begin{cases} 0 & \text{si } \tau \geq 0 \quad , \\ \sqrt{-3\tau} & \text{si } \tau \leq 0 \quad . \end{cases} \tag{33}$$

Ainsi, la magnétisation croît comme une puissance de l'écart à la température de transition : $m^*(\tau) \sim (-\tau)^\gamma$ avec $\gamma = 1/2$. γ est appelé exposant critique car il caractérise le comportement critique (proche de la transition) du système. De tels exposants ont une importance considérable car ils sont largement indépendants des détails du système et manisfestent certaines propriétés d'universalité. Nous y reviendrons de manière plus approfondie lors de l'étude de la K-satisfaisabilité.

Un autre exposant très important est celui qui contrôle les effets de taille finie au seuil. Jusqu'ici, nous avons calculé les valeurs moyennes de grandeurs physiques dans la limite $N \to \infty$. Nous avons en particulier démontré que la température critique sépare une phase où la somme des spins est en moyenne nulle (pour $\tau > 0$) d'une phase où la somme des spins est en moyenne d'ordre N (pour $\tau < 0$). Au seuil ($\tau = 0$), nous savons que la somme n'est pas d'ordre N et pouvons supposer qu'elle est d'ordre N^δ avec $\delta < 1$.

Nous pouvons calculer δ à partir de l'expression (24) de la fonction de partition. Développons la fonction $f(m)$ (25) en puissance de m,

$$f(m) - f(0) = \frac{\tau}{2}\, m^2 + \frac{1}{12}\, m^4 + O(m^6, \tau\, m^4) \qquad , \tag{34}$$

où $f(0) = -T \ln 2$. A la tempŕature critique, la fonction de partition s'écrit donc d'après (24),

$$Z \simeq 2^N \int dm\; e^{-N\, m^4/12} \qquad . \tag{35}$$

La valeur moyenne de m est donc nulle comme il se doit et les fluctuations de l'aimantation sont d'ordre $N^{-1/4}$. La somme des spins est donc d'ordre $N^{3/4}$ ce qui donne l'exposant $\delta = 3/4$.

La taille de la région critique est définie comme la valeur maximale τ_{max} de l'écart τ à la température critique qui ne change pas l'ordre de grandeur des fluctuations de m avec N. On introduit ainsi un nouvel exposant critique ν qui contrôle cet écart maximal : $\tau_{max} \sim N^{-1/\nu}$. Exigeant que les deux termes du membre de droite de l'expression (34) soient du même ordre, on trouve $\nu = 2$.

[Diu89] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer, B. Roulet, *Physique Statistique*, Editions Hermann, Paris (1989).
[Kit83] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, page 355, Editions Dunod, Paris (1983).
[Sae84] W. Saenger, *Principles of Nucleic Acid Structure*, Springer-Verlag, New-York (1984).
[Str98] T.R. Strick, J.F. Allemand, D. Bensimon, V. Croquette, *Biophys. Journ.* **74**, 2016 (1998).