

# Transitions de phase en optimisation combinatoire : l'approche de la mécanique statistique

Guilhem Semerjian

LPT-ENS

19.01.10 / Présentation FRIF

- 1 Transitions de phase en mécanique statistique
- 2 Systèmes désordonnés
- 3 Application aux problèmes d'optimisation

1 Transitions de phase en mécanique statistique

2 Systèmes désordonnés

3 Application aux problèmes d'optimisation

# Transitions de phase

« définition » : changement qualitatif du comportement d'un système quand un paramètre extérieur est modifié

exemples :

- corps pur : solide  $\leftrightarrow$  liquide  $\leftrightarrow$  gazeux
- aimants : ferromagnétique  $\leftrightarrow$  paramagnétique

transitions de phases se produisent dans la « limite thermodynamique » (grands systèmes), objet d'étude de la mécanique statistique

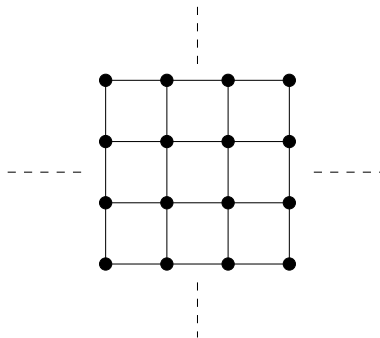
# Transitions de phase

## modèle d'Ising du ferromagnétisme

- configurations :  $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ ,  $\sigma_i = \pm 1$
- énergie d'une configuration :  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\sum_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j$
- ferromagnétique :  $J_{i,j} \geq 0$

exemple en deux dimensions :

$$J_{i,j} = J > 0 \quad \text{si } i \text{ et } j \text{ voisins}$$
$$J_{i,j} = 0 \quad \text{sinon}$$



# Transitions de phase

minimisation énergie libre  $F = E - TS \Rightarrow$  compétition entre

- l'énergie, cherche à avoir  $\sigma_1 = \dots = \sigma_N$
- l'entropie, préfère avoir autant de + que de -

à basse température effet énergétique domine

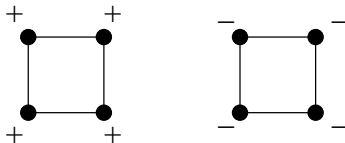
Dans l'ensemble canonique,

- fonction de partition :  $Z(\beta) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)}$   $\beta = \frac{1}{T}$
- densité d'énergie libre :  $f(\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln Z(\beta)$

deux aspects de la transition à  $\beta_c$  :

- $f(\beta)$  est non-analytique à  $\beta_c$  (seulement pour  $N \rightarrow \infty$ )
- $\langle \sigma_i \rangle \neq 0$  pour  $\beta > \beta_c$ , aimantation spontanée, paramètre d'ordre

Remarque sur les états de plus basse énergie (fondamentaux) :



ils sont faciles à trouver localement

# Transitions de phase

pas de solution exacte en dimension finie (pour  $d \geq 3$ )

différentes approches au problème (renormalisation...), entre autres :  
approximations « de champ moyen »

où l'on se débarrasse de la géométrie du problème

modèle de Curie-Weiss :  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\frac{1}{2N} \sum_{ij} \sigma_i \sigma_j$

plus d'espace, chaque site est « voisin » de tous les autres

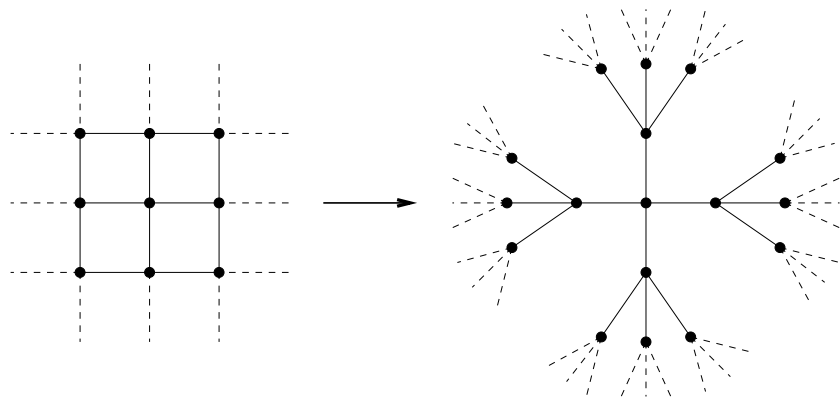
$$Z(\beta) = \sum_{m=-1, -1+\frac{2}{N}, \dots, 1} \binom{N}{\frac{N(1+m)}{2}} e^{\frac{1}{2} N \beta m^2} \quad m = \frac{1}{N} \sum_i \sigma_i$$

on peut calculer exactement  $f(\beta)$  et  $\langle \sigma_i \rangle$ , transition à  $\beta_c = 1$



# Transitions de phase

autres approximations de champ moyen, conservent connectivité finie :



on parle d'approximations de Bethe

1 Transitions de phase en mécanique statistique

2 Systèmes désordonnés

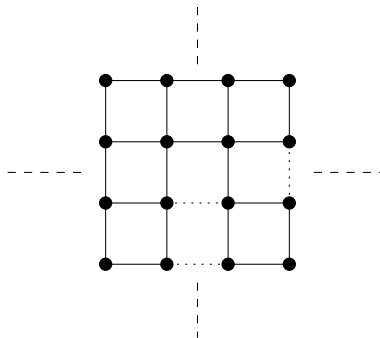
3 Application aux problèmes d'optimisation

# Systèmes désordonnés

les systèmes réels sont toujours plus ou moins désordonnés  
impuretés, vibrations du réseau,...

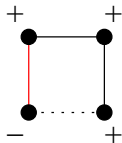
modèle d'Ising avec couplages arbitraires  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = -\sum_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j$

- si tous les couplages sont ferromagnétiques, pas de changement qualitatif majeur
- « verre de spins » si  $J_{i,j}$  peut être  $> 0$  et  $< 0$



# Systèmes désordonnés

frustration : impossible de trouver les fondamentaux localement



en dimension finie encore plus difficile que le cas ferromagnétique  
approximation de champ moyen (équivalent de Curie-Weiss) :  
modèle de Sherrington-Kirkpatrick, résolu par Parisi

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N; \mathbf{J}) = -\sum_{i,j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j$$

où les  $J_{i,j}$  sont des variables aléatoires (par ex. gaussiennes),  
indépendantes, de même distribution

$$Z(\beta; \mathbf{J}) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N; \mathbf{J})}$$

# Systèmes désordonnés

pour chaque valeur des couplages  $\mathbf{J}$  on a une énergie libre

$$F(\beta; \mathbf{J}) = -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta; \mathbf{J})$$

mais dans la limite thermodynamique les détails microscopiques ne nous intéressent pas  $\Rightarrow$  on prend la moyenne  $\overline{\dots}$  sur  $\mathbf{J}$

$$f(\beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\log(Z(\beta; \mathbf{J}))}$$

on sait calculer  $f(\beta)$  pour le modèle de Sherrington-Kirkpatrick  
(techniques pour faire la moyenne)

singularité de  $f(\beta)$  : transition de phase

mais paramètre d'ordre pas apparent (pas d'aimantation spontanée)

autres exemples de systèmes désordonnés :

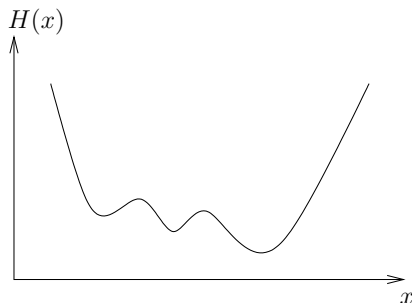
verres structuraux, vortex dans supraconducteurs

- 1 Transitions de phase en mécanique statistique
- 2 Systèmes désordonnés
- 3 Application aux problèmes d'optimisation

qu'appelle-t'on optimisation combinatoire ?

- « optimisation » :

trouver le minimum  
d'une fonction  $H(x)$



- « combinatoire » :

$x$  continu  $\rightarrow (\sigma_1, \dots, \sigma_N)$  discret

par exemple chaque  $\sigma_i$  peut prendre  $q$  valeurs ( $q = 2$  pour Ising)

# Problèmes d'optimisation combinatoire

Etant donné une fonction  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$ , différentes variantes :

- optimisation : valeur du minimum de  $H$  ?
- décision : existe-t'il  $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$  avec  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = C$  ?
- comptage : combien de configurations avec  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N) = C$  ?

$q$  valeurs pour chaque  $\sigma_i \rightarrow q^N$  configurations

on peut répondre à toutes les questions en regardant les  $q^N$  configurations

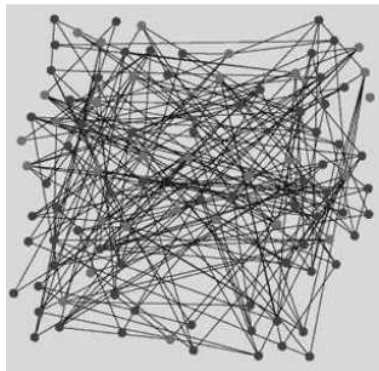
peut-on faire mieux ? i.e. en  $O(N^a)$  plutôt que  $O(\exp[bN])$  ?

cela dépend du problème (de la forme de la fonction  $H$ ),  
classification systématique en informatique théorique



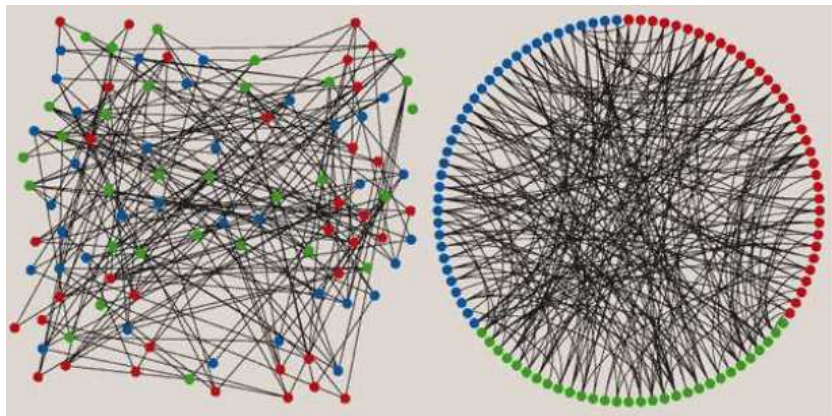
## Exemple du coloriage de graphe

graphe  $G = (S, L)$ , défini par ses Sommets et ses Liens



graphe coloriable avec trois couleurs sans lien monochromatique ?  
(problème NP-complet)

oui :



Lien avec la physique des systèmes désordonnés :

$$H(\sigma_1, \dots, \sigma_N; \mathbf{G}) = \sum_{(i,j) \in L} \delta_{\sigma_i, \sigma_j} \quad \sigma_i = 1, 2, 3 \quad i \in S$$

compte le nombre de liens monochromatiques

matrice des couplages  $\mathbf{J} \leftrightarrow$  graphe  $G$

c'est le modèle de Potts antiferromagnétique ( $J_{i,j} < 0$ )

- coloriable si  $H_{\min}(G) = 0$
- non-coloriable si  $H_{\min}(G) > 0$

c'est donc le problème de décision :

existe-t'il  $(\sigma_1, \dots, \sigma_N)$  avec  $H(\sigma_1, \dots, \sigma_N; \mathbf{G}) = 0$  ?

la minimisation correspond à étudier la limite de température nulle de la fonction de partition :

$$Z(\beta) = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_N} e^{-\beta H(\sigma_1, \dots, \sigma_N)} \underset{\beta \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\beta H_{\min}}$$

autrement dit  $\lim_{\beta \rightarrow \infty} -\frac{1}{\beta} \log Z(\beta) = H_{\min}$

Transitions de phase dans ce modèle ?

A température nulle il faut un autre paramètre de contrôle, qui mesure l'intensité du désordre (i.e.  $G$  ou  $J$ )

# Problèmes d'optimisation combinatoire

Ensemble de graphes aléatoires :

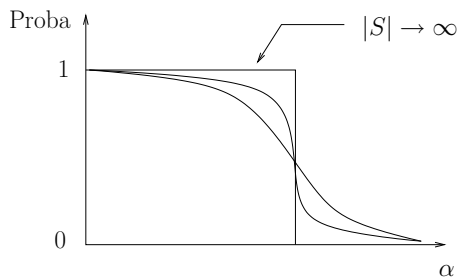
on fixe le nombre de sommets  $|S|$ , le nombre de liens  $|L|$ , et on tire au hasard un graphe avec ces deux contraintes

champ moyen car pas de structure de dimension finie (approx. Bethe)

paramètre de contrôle  $\alpha = \frac{|L|}{|S|}$

Probabilité qu'un tel graphe soit coloriable avec 3 couleurs :

Transition de phase à  $\alpha_c$



Méthodes de la mécanique statistique des systèmes désordonnés ont permis le calcul de  $\alpha_c$

$$\text{il faut calculer } f(\alpha, \beta) = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \overline{\log(Z(\beta; \mathbf{G}))}$$

comme en général dans les systèmes désordonnés

$$\text{puis } \lim_{\beta \rightarrow \infty} f(\alpha, \beta) = \begin{cases} 0 & \text{si } \alpha < \alpha_c \\ e_{\min} > 0 & \text{si } \alpha > \alpha_c \end{cases}$$

calcul faisable, débouche sur une équation fonctionnelle que l'on peut résoudre numériquement avec une bonne précision

Au croisement entre probabilités, graphes aléatoires, informatique théorique et mécanique statistique

au delà du calcul du seuil, la mécanique statistique a permis une meilleure compréhension qualitative de la phase  $\alpha < \alpha_c$

dans ce cas il y a beaucoup de solutions (de fondamentaux dégénérés)

leur organisation n'est pas la même pour  $\alpha \approx 0$  et  $\alpha \approx \alpha_c$  : autre(s) transition(s) de phase structurelle(s)

ressemble aux propriétés des verres

Leticia Cugliandolo, Marco Picco, Vladimir Dotsenko

Rémi Monasson, Guilhem Semerjian, Francesco Zamponi

Jesper Jacobsen, Pierre Le Doussal, Kay Wiese