

# Algorithmique et physique statistique

1. Modèle d'Ising
2. Un problème NP-complet
3. Fonction de partition, polynôme de Tutte
4. Verre de spin
5. Cas planaire
6. Recuit simulé

# MODELE D'ISING

## Données

- Un *graphe*  $G = (X, E)$
- Une application  $J$  de  $E$  dans l'ensemble des réels,  $J(e)$  est une énergie d'interaction.

## Définitions

Une *configuration*  $\sigma$  du graphe est une application de  $X$  dans  $\{-1, 1\}$

L'*énergie de la configuration* (hamiltonien)

$$H(\sigma) = \sum_{e=\{x,y\} \in E} -J(e)\sigma(x)\sigma(y) - M \sum_{x \in X} \sigma(x)$$

où  $M$  est l'énergie due à un champ magnétique extérieur.

## Coupes (ou coupures)

Une coupe est un sous-ensemble  $F$  de l'ensemble des arêtes tel qu'il existe un partition de  $X$  en deux sous-ensembles  $X_1$  et  $X_2$  tels que :

$$X = X_1 \cup X_2, \quad X_1 \cap X_2 = \emptyset$$

$$F = C(X_1, X_2)$$

arêtes qui ont une extrémité dans  $X_1$  et l'autre dans  $X_2$ .

## Cas où $M = 0$ , $J(e) = J$ constant

On a alors

$$H(\sigma) = \sum_{\{x,y\} \in E} -J\sigma(x)\sigma(y)$$

Décomposons  $X$  en les sommets à  $\sigma$  négatifs et ceux à  $\sigma$  positifs,  $X = X_1 \cup X_2$ , on a:

$$H(\sigma) = \sum_{\{x,y\} \subset X_1} -J\sigma(x)\sigma(y) + \sum_{\{x,y\} \subset X_2} -J\sigma(x)\sigma(y) + \sum_{x \in X_1, y \in X_2} -J\sigma(x)\sigma(y)$$

$$H(\sigma) = \sum_{\{x,y\} \subset X_1} -J + \sum_{\{x,y\} \subset X_2} -J + \sum_{x \in X_1, y \in X_2} J = -mJ + 2J|C(X_1, X_2)|$$

## Recherche de la configuration d'énergie minimale

Si  $J > 0$  (ferro-magnétique) c'est facile.

Si  $J < 0$  (anti ferro-magnétique) le problème se ramène à trouver une coupe de taille maximale (appelé *MAXCUT*).

## 3SAT se réduit à 3NAESAT

**3NAESAT:** On se donne un ensemble de clauses chacune composée de 3 variables, il s'agit de trouver une affectation telle que chacune des clauses contienne au moins une variable égale à V et une autre à F, on appelle ceci une bi-affectation.

Une instance de 3SAT est donnée par  $m$  clauses  $C_i = x_i^1 \vee x_i^2 \vee x_i^3$ , on ajoute une nouvelle variable  $z$  et  $m$  nouvelles variables  $y_i$  pour former  $2m$  clauses  $C'_i, C''_i$ :  
 $C'_i = x_i^1 \vee x_i^2 \vee y_i, C''_i = x_i^3 \vee \overline{y_i} \vee z$  pour lesquelles on cherche une bi-affectation.

Si on a une affectation de valeurs aux  $x_i^j$  qui donnent une valeur  $V$  à toutes les  $C_i$  alors on complète cette affectation par  $z = F$  et  $y_i = F$  si l'un de  $x_i^1$  ou  $x_i^2$  est égal à  $V$  et par  $y_i = V$  si  $x_i^1$  et  $x_i^2$  sont égaux à  $V$  ( $x_i^3$  prend alors la valeur  $V$ ). On obtient alors une bi-affectation de  $C'_i, C''_i$ .

Réciproquement si on a une bi-affectation de  $C'_i, C''_i$  alors si  $z = V \dots$

## **3NAESAT se réduit à MAXCUT**

Soit une instance de 3NAESAT donnée par  $m$  clauses sur  $n$  variables:

$$C_i = x_i^1 \vee x_i^2 \vee x_i^3.$$

On construit un graphe ayant  $2n$  sommets (un pour chaque variable et son complémentaire). On relie par 3 arêtes les sommets correspondants à une clause et on relie aussi entre eux les sommets correspondants à  $x_k$  et  $\overline{x_k}$ , cela donne un total de  $3m + n$  arêtes.

On vérifie sans difficulté que les clauses sont bi-satisfaites si et seulement si le graphe construit admet une coupe de taille  $2m + n$ .



**Théorème** La recherche de la configuration d'énergie minimale dans le cas  $J < 0$  est un problème  $NP$  complet

**Preuve:** Est équivalent à  $MAXCUT$  auquel se réduit  $3SAT$  par transitivité de la réduction.

## La fonction de partition: calcul

$$Z = \sum_{\sigma} e^{-\beta H(\sigma)}$$

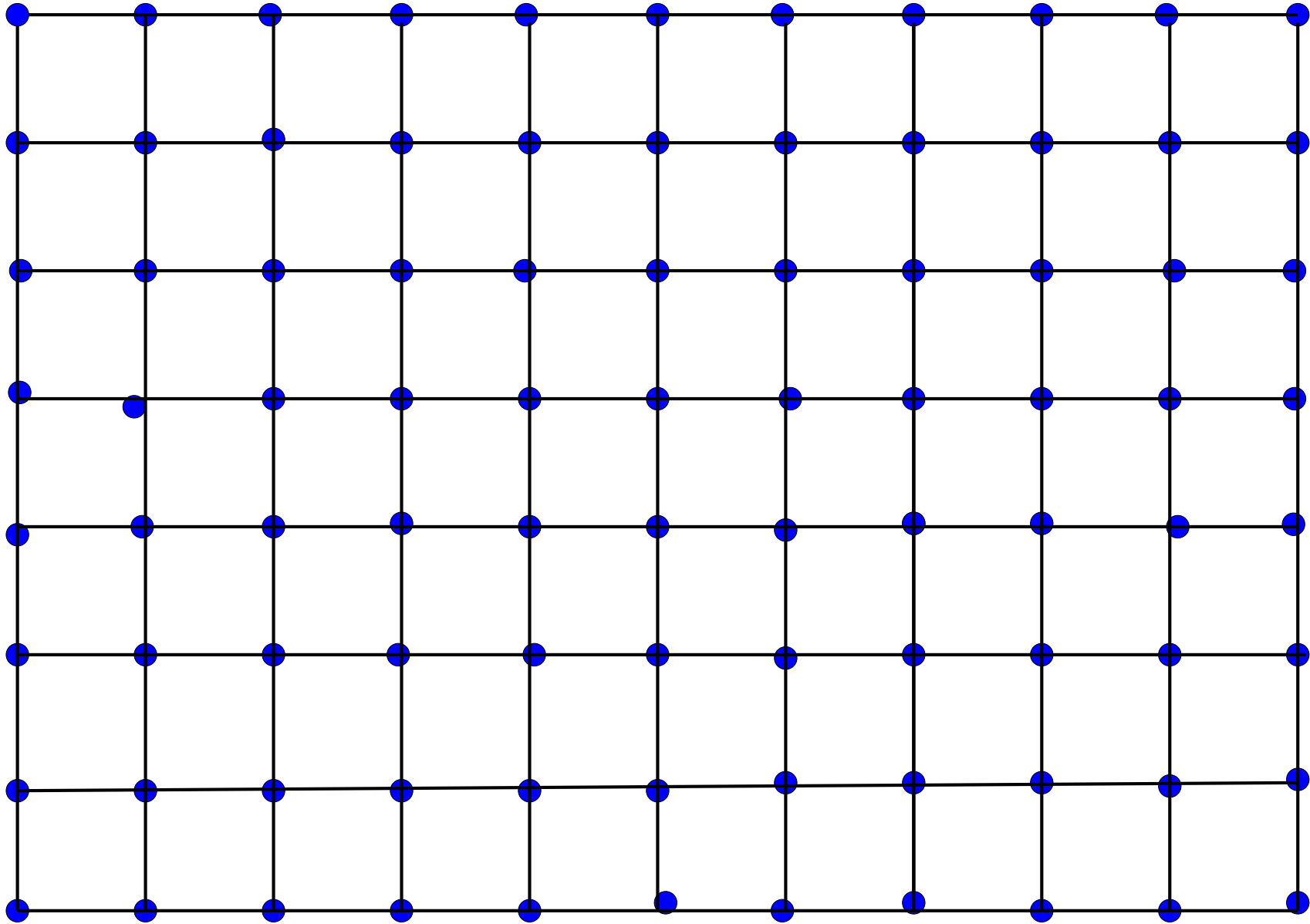
$$\beta = \frac{1}{kT}$$

$T$  température absolue

$k$  constante de Boltzmann

Probabilité de rencontrer une configuration  $\sigma$  donnée est égale à

$$P(\sigma) = \frac{e^{-\beta H(\sigma)}}{Z}$$



## Polynôme des coupes (ou coupures)

Une coupe est un sous-ensemble  $F$  de l'ensemble des arêtes tel qu'il existe une partition de  $X$  en deux sous-ensembles  $X_1$  et  $X_2$  tels que :

$$X = X_1 \cup X_2, \quad X_1 \cap X_2 = \emptyset$$

$$F = C(X_1, X_2)$$

arêtes qui ont une extrémité dans  $X_1$  et l'autre dans  $X_2$ .

Pour  $j = 1, \dots, m$  on note  $b_j$  le nombre de coupes constituées de  $j$  arêtes.

Soit  $B(u)$  le polynôme énumérateur des coupes:

$$B(u) = \sum_{j=0}^m b_j u^j$$

**Théorème** Dans un graphe  $G$  à  $m$  arêtes où l'énergie d'interaction est une constante  $J$  sur chacune des arêtes et où le champ magnétique  $M$  est nul, la fonction de partition et le polynôme des coupes sont reliés par (où  $\theta = e^{-\beta J}$ ):

$$Z = \frac{2}{\theta^m} B(\theta^2)$$

*Preuve:*

$$X_1 = \{x | \sigma(x) = 1\} \quad X_2 = \{x | \sigma(x) = -1\}$$

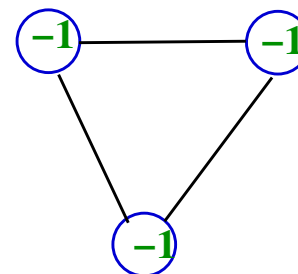
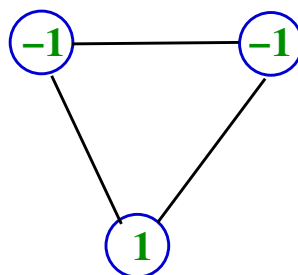
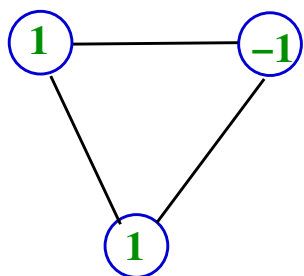
$$H(\sigma) = -mJ + 2Jc(X_1, X_2)$$

$$Z = \sum_{\sigma} e^{\beta m J} e^{-2\beta |C(X_1, X_2)|} = 2e^{\beta m J} \sum_{j=0}^m b_j e^{2j\beta J}$$

En posant  $\theta = e^{-\beta J}$  on a :  $Z = \frac{2}{\theta^m} \sum_{j=0}^m b_j \theta^{2j}$  d'où le résultat. □

**Corollaire** *Le calcul de la fonction de partition est de complexité équivalente à la détermination du polynôme des coupes  $B_G$  du graphe  $G$ .*

## Exemple



|    | $\sigma$ |    | $H(\sigma)$ |
|----|----------|----|-------------|
| 1  | 1        | 1  | $-3J$       |
| 1  | 1        | -1 | $J$         |
| 1  | -1       | 1  | $J$         |
| 1  | -1       | -1 | $J$         |
| -1 | 1        | 1  | $J$         |
| -1 | 1        | -1 | $J$         |
| -1 | -1       | 1  | $J$         |
| -1 | -1       | -1 | $-3J$       |

$$Z_G = 2e^{3J\beta} + 6e^{-J\beta} = \frac{2}{\theta^m} B_G(\theta^2) \quad B_G(u) = 1 + 3u^2$$

## Récurrance sur le polynôme des coupes

**Théorème** *Si l'arête  $e$  n'est ni isthme ni une boucle*

$$B_G(u) = uB_{G'}(u) + (1 - u)B_{G''}(u)$$

*où  $G'$  est obtenu à partir de  $G$  par suppression de  $e$ , et  $G''$  par contraction de  $e$ .*

**Preuve:**

$$b_k = b'_{k-1} + b''_k - b''_{k-1}$$

On note  $e = \{a, b\}$ :

$$b_k = b_k^1 + b_k^2$$

$b_k^1$  nombre de coupes de  $G$  de taille  $k$  contenant  $e$ ,  $b_k^2$  nombre de coupes de  $G$  de taille  $k$  ne contenant pas  $e$ .



## Récurrance sur le polynôme des coupes (suite)

$b_k^1$  nombre de coupes de  $G$  de taille  $k$  contenant  $e$  = nombre coupes de  $G'$  de taille  $k - 1$  dans lesquelles  $a$  et  $b$  sont dans des composantes distinctes.

$b_k^2$  nombre de coupes de  $G$  de taille  $k$  ne contenant pas  $e$  = nombre de coupes de  $G''$  de taille  $k$  (=  $b_k''$ )

$b_{k-1}''$  nombre de coupes de  $G''$  de taille  $k - 1$  = nombre coupes de  $G'$  de taille  $k - 1$  dans lesquelles  $a$  et  $b$  sont dans la même composante, donc  $b_k^1 = b_{k-1}' - b_{k-1}''$ .

## Récurrance sur le polynôme des coupes (suite)

**Théorème** *Si l'arête  $e$  est un isthme*

$$B_G(u) = (1 + u)B_{G''}(u)$$

*Si l'arête  $e$  est une boucle:*

$$B_G(u) = B_{G'}(u)$$

*où  $G'$  est obtenu à partir de  $G$  par suppression de  $e$ , et  $G''$  par contraction de  $e$ .*

## Polynôme de Tutte

### Définition

$$T(x, y) = 1$$

*Si l'arête  $e$  est un isthme :*

$$T_G(x, y) = xT_{G''}(x, y)$$

*Si l'arête  $e$  est une boucle:*

$$T_G(x, y) = yT_{G'}(x, y)$$

*Si l'arête  $e$  n'est ni isthme ni une boucle:*

$$T_G(x, y) = T_{G'}(x, y) + T_{G''}(x, y)$$

où  $G'$  est obtenu à partir de  $G$  par suppression de  $e$ , et  $G''$  par contraction de  $e$ .

## Conséquences

$$B_G(u) = u^{m-n+1}(1-u)^{n-1}T_G\left(\frac{1+u}{1-u}, \frac{1}{u}\right)$$

$$Z_G = 2\theta^{m/2-n+1}(1-\theta)^{n-1}T_G\left(\frac{1+\theta}{1-\theta}, \frac{1}{\theta}\right)$$

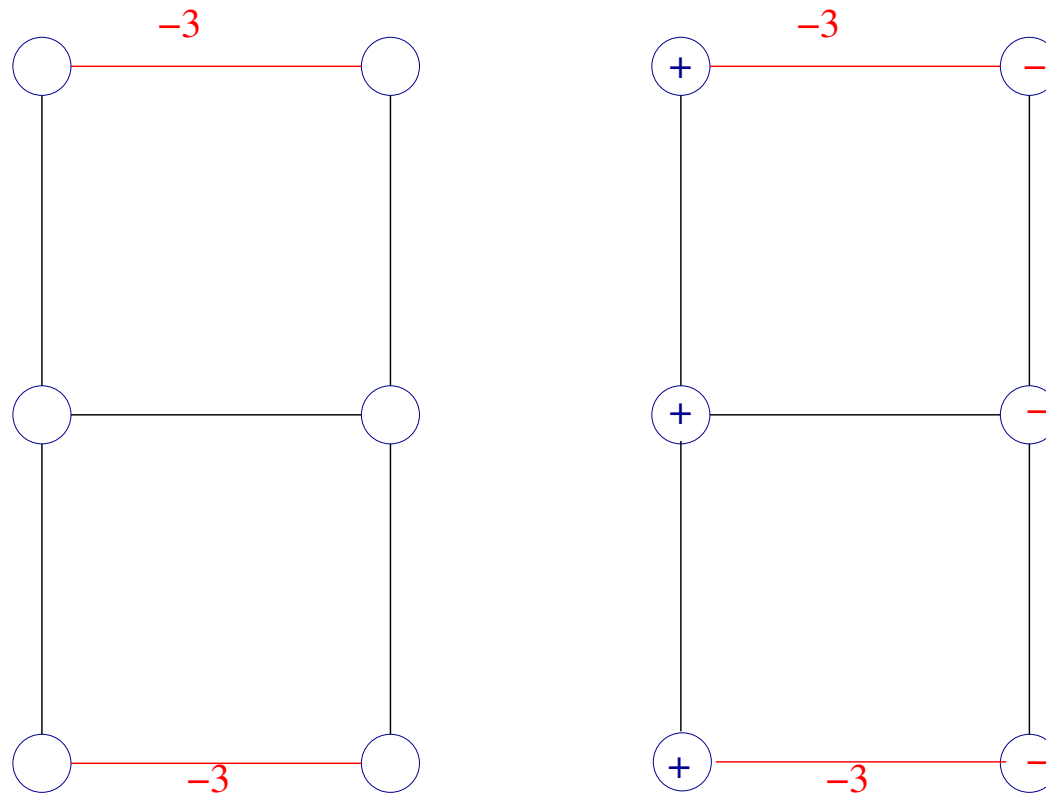
où

$$\theta = e^{-2\beta J}$$

## Modèle verre de spin

Les valeurs de  $J$  sont pour la plupart positives, certaines sont négatives, ici  $M = 0$

Il s'agit de trouver la configuration pour laquelle  $H(\sigma)$  est minimale.



Une configuration d'énergie minimale

*Dans le cas général le problème de la recherche de l'énergie minimale est NP-complet.*

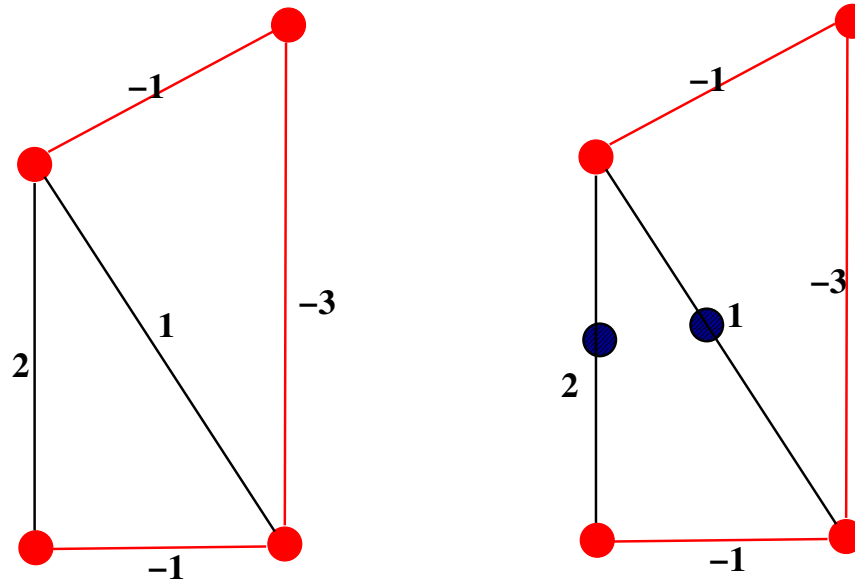
**On examine dans la suite le cas où le graphe est planaire**

## Cas équivalent au modèle ferro-magnétique ( $\forall e \ J(e) \geq 0$ ).

Une arête est dite négative si  $J(e) < 0$

**Proposition** *Le graphe valué  $G = (X, E, J)$  admet une solution optimale telle que  $H(\sigma) = -\sum_{e \in E} |J(e)|$  si et seulement si tout cycle de  $G$  contient un nombre pair d'arêtes négatives.*

Il faut colorier en deux couleurs le graphe obtenu en ajoutant un nouveau sommet sur chaque arête positive.



Un graphe valué et le graphe à bicolorier associé

## Algorithme

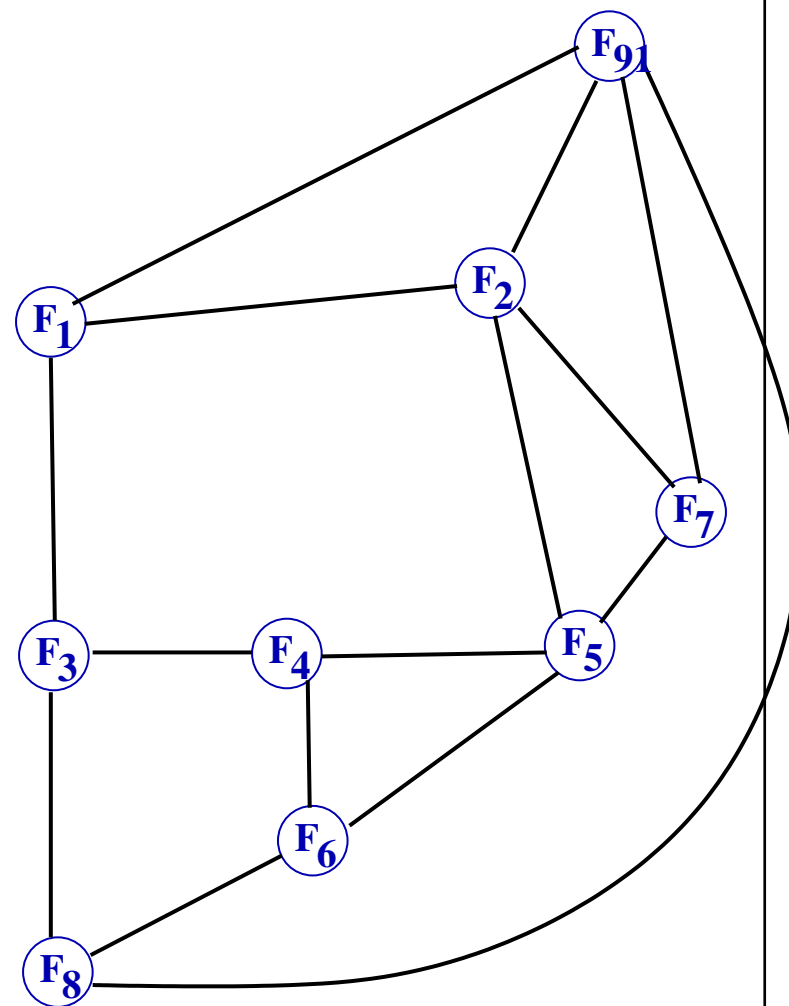
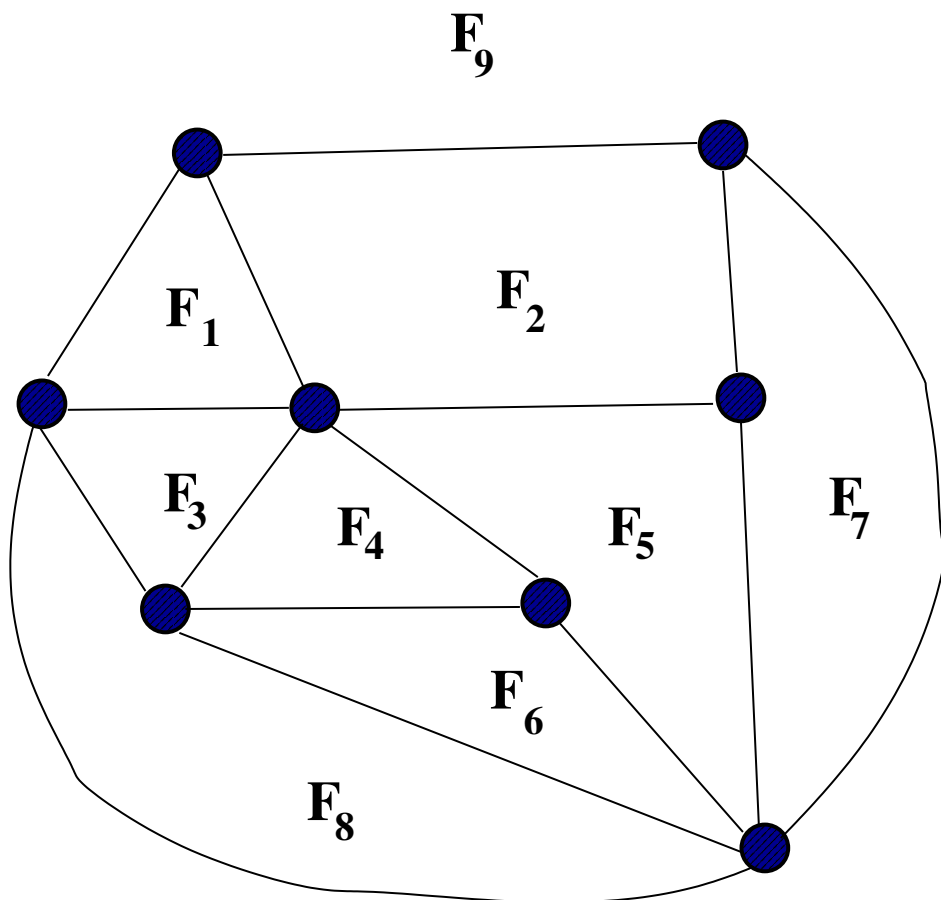
- On attribue la valeur  $\sigma(x_0) = +1$  à l'un quelconque des sommets  $x_0$
- on calcule de proche en proche la valeur des  $\sigma(x)$ , en utilisant la règle :  
*Si une arête  $e = \{x, y\}$  telle que  $\sigma(y)$  est connu alors que  $\sigma(x)$  ne l'est pas alors on choisit  $\sigma(x)$  de façon telle que :*

$$\sigma(x)\sigma(y)J(e) \geq 0$$

- Une fois que l'on a déterminé les valeurs de  $\sigma(x)$  pour tous les sommets du graphe on vérifie que la condition  $\sigma(x)\sigma(y)J(e) \geq 0$  est satisfaite pour toutes les arêtes.



## Algorithme dans le cas planaire



Les arêtes d'un graphe planaire connexe délimitent des domaines simplement connexes : *les faces*.

**Proposition** *Les faces constituent une base pour l'espace des cycles*

**Proposition** *Un graphe valué  $G = (X, E, J)$  planaire est équivalent au modèle ferro-magnétique si et seulement si toute face de  $G$  contient un nombre pair d'arêtes négatives.*

## Cas général

Une face qui contient un nombre impair d'arêtes négatives est dite *frustrée*.

Pour toute configuration  $\sigma$ , une arête  $e = \{x, y\}$  est dite *contrariée* si  $J(e)\sigma(x)\sigma(y) < 0$ .

**Proposition** Soit  $G = (X, E, J)$  un graphe valué planaire et  $U$  un sous-ensemble d'arêtes de  $E$ , il existe une configuration  $\sigma$  telle que  $U$  forme un ensemble d'arêtes contrariées  $\sigma$  si et seulement si :

1. Toute face frustrée contient un nombre impair d'arêtes dans  $U$ .
2. Toute face non frustrée contient un nombre pair d'arêtes dans  $U$ .

## Dualité

On associe à un graphe planaire son graphe dual  $G^*$  construit de la façon suivante : les sommets de  $G^*$  sont les faces de  $G$ , (noter que la face infinie fait partie des faces de  $G$ ). Deux sommets sont reliés dans  $G^*$  par une arête si et seulement si ils correspondent à deux faces de  $G$  adjacentes.

Les arêtes du graphe dual  $G^*$  de  $G$  correspondent aux arêtes de  $G$ , les faces frustrées dans  $G$  donnent lieu à des sommets frustrés dans  $G^*$ .

**Proposition** *Un ensemble  $U$  d'arêtes forme un ensemble d'arêtes contrariées pour le graphe valué planaire  $G = (X, E, J)$  si et seulement si :*

- 1. Tout sommet frustré de  $G^*$  est incident à un nombre impair d'arêtes de  $U$ .*
- 2. Tout sommet non frustré de  $G^*$  est incident à un nombre pair d'arêtes de  $U$ .*

**Proposition** *Si  $\sigma$  est une configuration d'énergie minimale alors l'ensemble des arêtes contrariées forme un sous graphe sans cycle de  $G^*$ .*

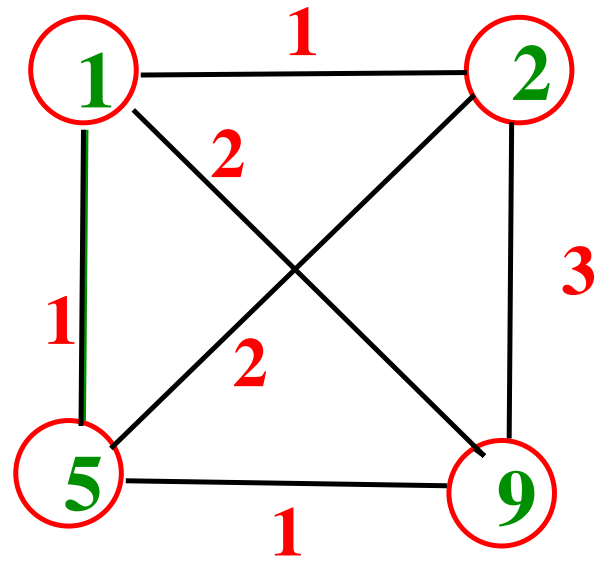
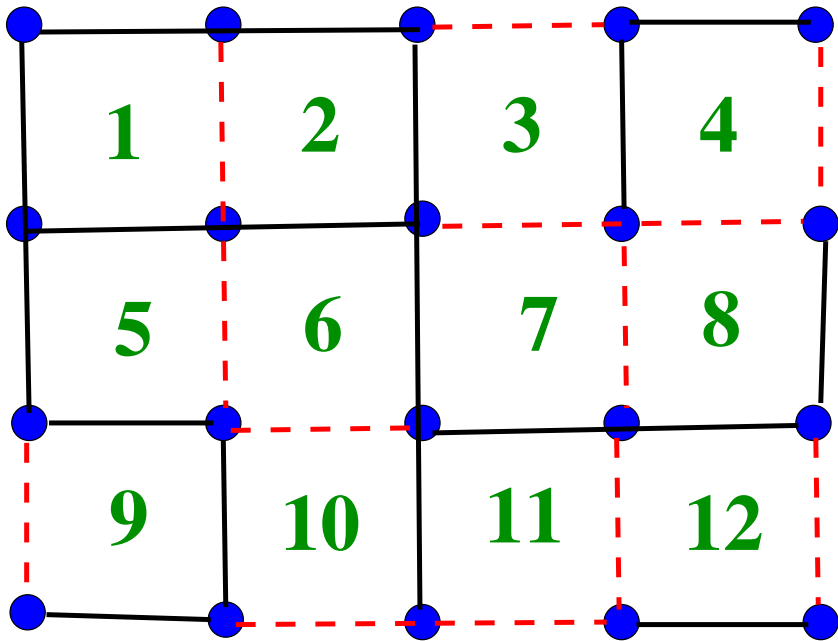
## Algorithme

Au graphe  $G$  on associe le graphe  $\hat{G}$  construit de la façon suivante :

- L'ensemble des sommets de  $\hat{G}$  est constitué des sommets frustrés de  $G^*$
- L'ensemble des arêtes de  $\hat{G}$  est constitué de toutes les paires  $\{x, y\}$  de sommets de  $\hat{G}$ .
- Chaque arête  $\{x, y\}$  est évaluée par la longueur du plus court chemin qui joint  $x$  à  $y$  dans  $G^*$ , où la longueur d'un chemin est la somme des valeurs absolues  $|J(e_i)|$  des arêtes  $e_i$  qui en font partie.

**Théorème** *Un couplage parfait  $C$  de valuation minimale dans  $\hat{G}$  détermine un ensemble d'arêtes  $U_C$  qui forme un ensemble d'arêtes contrariées pour une configuration  $\sigma$  de  $G$ , cette configuration est d'énergie minimale.*

**Conséquence** Déterminer une configuration d'énergie minimale revient à déterminer un couplage minimal dans le graphe  $\hat{G}$  il existe des algorithmes permettant d'effectuer ceci en temps polynomial. Ils ont été évoqués dans le chapitre 3 (Flots et Couplages), toutefois ils sont assez difficiles à mettre en œuvre et leur complexité bien que polynomiale est assez élevée.





## Recuit Simulé

Pour résoudre certains problèmes d'optimisation combinatoire, on procède par améliorations successives d'une configuration. Dans le contexte considéré ici cela se traduit par partir d'une configuration quelconque et tenter de l'améliorer en modifiant l'une de ses composantes.

On obtient, en répétant ce procédé une configuration qui est meilleure que toutes ses "voisines", on dit que l'on a atteint un *optimum local*. Rien ne dit que cet optimum local soit l'optimum général ou même qu'il en soit proche. Et c'est là l'inconvénient de cette méthode.

Pour tenter de pallier cet inconvénient, on modifie l'algorithme en faisant intervenir une part de hasard. On part d'une configuration quelconque  $\sigma$ , on cherche une configuration voisine  $\sigma'$  si celle-ci est telle que  $H(\sigma') < H(\sigma)$  on remplace  $\sigma$  par  $\sigma'$  et on recommence le procédé. Si  $H(\sigma') > H(\sigma)$ , on tire au hasard un nombre  $\lambda$ , compris entre des valeurs à déterminer, et on remplace  $\sigma$  par  $\sigma'$  si  $H(\sigma') > H(\sigma) - \lambda$  puis on répète le procédé. Tout l'art réside dans la détermination du  $\lambda$ , celui-ci peut d'ailleurs varier au cours de l'exécution de l'algorithme.

L'algorithme se termine quand on est resté suffisamment longtemps sur la même configuration. Cette façon de procéder s'appelle la méthode du recuit simulé, elle est utilisée dans certains cas pour résoudre de façon approchée des problèmes d'optimisation combinatoire NP complets.